

Skript zur Vorlesung Quantenmechanik im WS 95/96,
Prof. Dr. Eberhard R. Hilf, Universität Oldenburg

Sven Herrmann
Nadorster Strae 170
26123 Oldenburg
herrmann@uni-oldenburg.de

Jens Harting
Martin-Luther-Straße 42
26129 Oldenburg
harting@uni-oldenburg.de

Gerold Brink-Spalink
Nadorster Strae 170
26123 Oldenburg
sputnik@uni-oldenburg.de

22. April 1996

Inhaltsverzeichnis

1	“Hello, World” oder ein ganz normales Vorwort	6
2	Hinführungen	7
3	Meßprozess	12
3.1	Übungen, die Erste	17
3.1.1	Übung I	17
3.1.2	Übung II	17
3.1.3	Übung III	17
3.2	Was bedeutet der Meßprozess ?	17
3.3	Die Hintereinander-Anwendung, bra-ket Schreibweise	19
3.4	Konstruktion einer Basis	20
3.5	Wiederholung:	21
3.6	Apperaturen	22
3.6.1	Hintereinanderausführen von Messungen	22
3.6.2	Paralleles Ausführen von Messungen	22
4	Dynamik und Ortszustände	26
4.1	Dynamische Gleichung	29
5	Schrödinger - Gleichung	30
5.1	Beispiele	31
5.1.1	Beispiel 1	31
5.1.2	Beispiel 2	32
5.1.3	Beispiel 3	33
5.1.4	Eigenschaften der δ - Distribution	34
5.2	Wiederholung	35
6	Darstellung algebraischer Objekte	35
7	Ort und Impuls	36
8	Einfache Systeme	39
8.1	Harmonischer Oszillator	40
8.2	Wiederholung des harmonischen Oszillators	43
9	Zusammenhang zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik	45
10	Eichtransformationen	47
11	Pfadintegral	48
11.1	Die BAKER-CAMPBELL-HAUSDORFF-Formel	49
12	Heisenberg-Bild \leftrightarrow Schrödinger-Bild	51

13 Pragmatische Lösungsverfahren für einfache Systeme im Ortsraum	52
13.1 Raten, Wissen, Nachschlagen	53
13.2 Graphisch numerisches Verfahren	53
14 Störungstheorie	54
14.1 Einleitung	54
14.2 Störungsverfahren	55
14.2.1 Störungstheorie 1. Ordnung	55
14.2.2 Störungstheorie 2. Ordnung (1. Ordnung sei bereits ausgeführt)	57
14.3 Variationsverfahren	57
14.4 JWKB-Verfahren (Jordan-Wenzel-Kramers-Brillouin-Verfahren) .	59
15 Quantenmechanik nichträumlicher Variablen: Drehimpuls und Spin	63
15.1 Drehimpuls	63
15.1.1 Literatur	63
15.1.2 Exkurs	63
15.1.3 Drehimpulsalgebra in der Quantenmechanik	65
15.2 Drehimpuls im \mathcal{R}_3 :	68
15.3 Spin	69
16 Wiederholung der Zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung	70
17 Addition von Drehimpulsen	72
17.1 Wiederholung: Verschiedene Drehimpulse	72
17.2 Drehimpuls-Addition	72
18 Mehrteilchen Systeme	74
18.1 Mehrteilchen-Systeme, 1. Teil	74
18.2 Vertauschbare Operatoren	75
18.3 Operatoren, die mit \hat{H} vertauschen	75
18.4 Konstruktion einfacher Mehrteilchen-Zustände	77
18.5 N-Teilchen	77
18.6 Einfache Streuprobleme	78
18.7 Ein Teilchen, nichtrelativistisch	78
18.8 N-Teilchen, nichtrelativistisch	78
18.9 Konstruktion von Mehrteilchenzuständen	79
18.10 Zwei-Teilchen-Systeme	82
18.11 N-Teilchensysteme	83
18.12 Zwei-Elektronen-System	84
19 Der Rest der Mehrteilchen . . .	86
20 Young-Tableaux	88
21 Das H-Atom	90

22 Streutheorie	92
22.1 Vorbemerkungen	92
22.1.1 Einfachster Fall	92
22.1.2 Gebundene Zustände	92
22.1.3 Freie, ungebundene Zustände	92
22.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung	93
22.2.1 Darstellung im Ortsraum	94
22.2.2 Darstellung im Impulsraum	94
22.3 Optisches Theorem (fehlt noch)	97
22.4 Eikonal-Näherung	97

Literatur

- [1] U.Reinhardt. **Quantenmechanik.**
<http://elfikom.physik.uni-oldenburg.de/rxp>. <http://www.physik.uni-oldenburg.de/docs/home/teaching/skript.ps>
- [2] G. Grawert. **Quantenmechanik.** Akademischer Verlag
- [3] H. Mitter. **Quantentheorie.** Bibliographisches Institut
- [4] W. R. Theis. **Grundzüge der Quantentheorie.**
- [5] M. Schubert, G. Weber. **Quantentheorie.** Spektrum
- [6] E. Fermi. **notes on quantum mechanics.** Phoenix
- [7] A. Messiah. **Quantenmechanik I/II.** de Gruyter
- [8] J. J. Sakurai. **Quantenmechanik.**
- [9] H. J. Lipkin. **Anwendung der Lie-Gruppen in der QM.**
- [10] U. Mosel. **Fields, Symmetries and Quarks.**
- [11] J. M. Feagin. **quantum mechanics with mathematica.** Springer. Telos
- [12] S. Ludwig. **Wellenmechanik für Lehramt.**

1 “Hello, World” oder ein ganz normales Vorwort

Es fing ganz harmlos an: Aus dem Versuch, die mitunter recht chaotisch strukturierte Vorlesung nachzuarbeiten und das ganze auch noch mit etwas Praktischem zu verbinden, wurde die Tortur des Semesters. Eigentlich wollten wir nur TeX lernen, aber neben verspannten Nacken (Es lebe der TeX'sche Backslash, prima Zungenbrecher) und eckigen Augen, produzierten wir eine groe Menge Altpapier. Ganz nebenbei entstand dann auch eine wohlgeordnete und ansehnliche Zusammenstellung der 26 Vorlesungen Quantenmechanik I des 5. Semesters. Hierbei liegt die Betonung auf dem Wort “Zusammenstellung”, denn wir wollten/konnten der Welt keineswegs ein weiteres Quantenmechanik-Werk beschenken. Vielmehr soll mit dieser Ansammlung von Vorlesungen eine Prüfungsvorbereitung erleichtert und ein Einstieg anderer Studenten in die Materie ermöglicht werden.

Diese nun vorliegende Fassung ist leider noch voll von Fehlern. Eine heiße Korrekturphase ist bereits eingeleitet und schon an dieser Stelle möchten wir betonen, wie gut die Zusammenarbeit mit Ebs funktioniert. Es ist so auch eine inhaltliche Überarbeitung möglich.

Trotzdem sind wir auf die Mitarbeit der Leser, insbesondere der Besucher der Vorlesung im WS 95/96, angewiesen. Wir möchten daher alle aufrufen, uns Verbesserungsvorschläge und Korrekturen zukommen zu lassen.

Oldenburg, im April 1996

Jens, Gerold und Sven

2 Hinführungen

VL 16.10.95

gesucht: Mechanik

Mechanik := Dynamik von physikalischen Systemen in der Zeit

Forderungen:

1. Kausale Theorie:

System: $\Sigma(t)$: Informationen zur Berechnung von $\Sigma(t')$ sollten nur aus $t < t'$ stammen.

Newtons Mechanik: $m \ddot{x} = K(x, \dot{x}, t)$ $x(t')$ gesucht

$x(t_0)$ $\dot{x}(t_0)$ Anfangsbedingungen

$\Rightarrow x(t)_{t > t_0}$

$\dot{x}(t_0) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t_0 + \Delta t) - x(t_0)}{\Delta t}$

Newton-Mechanik ist infinitesimal (embryonal), nicht kausal.

2. Die richtigen Ergebnisse der Newton-Mechanik sollen erhalten sein:

Quantenmechanik \longrightarrow Newton-Mechanik Beispiel: $\{x(t)\}$ Bahn eines Teilchens.

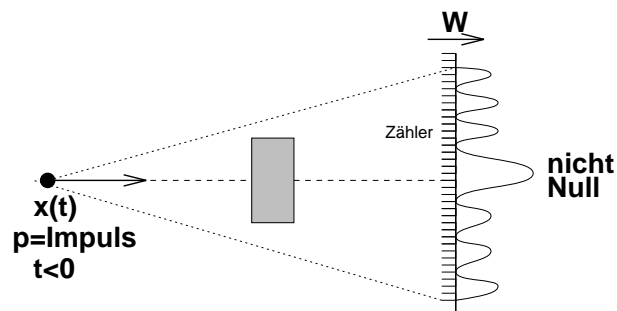
3. Deterministische Theorie

Ist $\Sigma(t)$ vollständige Information zur Zeit t

\Rightarrow für alle Zeiten $t' > t$ soll die vollständige mechanische Information berechenbar sein

1. Versuch:

Die Newton-Mechanik beschreibt *nicht* die vollständige mechanische In-



formation über das System.

Newton-Mechanik ist *nicht* deterministisch, $x(t)$ ist keine vollständige mechanische Information

vollst. Information $\xrightarrow{\text{Projektion, Faltung, etc.}}$ Teilinformation (z. B. $x_{\text{Newton}}(t)$ Bahn)

4. (a) Statistische Verteilung von Meßergebnissen, bei Wiederholung des selben Experiments zugelassen.
 (b) mechanische Teilchen bleiben intakt

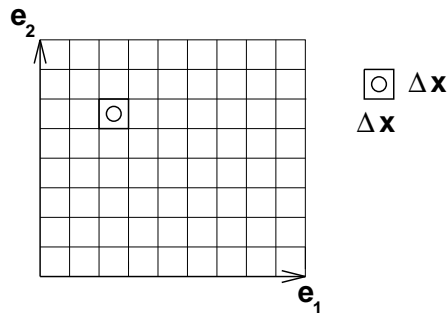
- (a) Interferenz-Muster: Wahrscheinlichkeits-Amplituden-Dichte-Feld $\psi(x, t)$ zur Zeit t : $|\psi(x, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit das Teilchen am Orte x zu finden $\forall x$, Gesamtwahrscheinlichkeit = Gewißheit, $\int dx^3 |\psi|^2 = 1$

Versuch: $\psi(x, t)$ ist Träger der vollständigen mech. Information
Ansatz: $\psi(x, t)$ skalares Feld

- (b) Körnung:
 Zähler sagt: Ja, das ganze Element ist eingetroffen
 oder: Nein, das ganze Element ist nicht eingetroffen
 \Rightarrow „störungsfreie“ Messung gibt es nicht!
 Teilchen zur Zeit t am Ort x : zur “Klickzeit” ist Teilchen mit Gewißheit im Zähler $(x_i, \Delta x)$

$$\psi(x_i, \Delta x) = \int_{\square} dx \psi(x) \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}$$

Die Pflasterung mit Zählern ist endlich.



Versuch: $\Delta x \rightarrow 0$ *Aufwand* $\rightarrow \infty$

In der Quantenmechanik darf der limes $\Delta x \rightarrow 0$ unphysikalisch sein, weil er nicht realisierbar ist.

Körnung:

kleinste mechanische Teilchen mit $m \neq 0$, m_e endlich

kleinste Ladung: Elementarladung

Beispiel: Batterie, leer oder kleinste Ladung vorhanden.

\exists Experiment zur Wirkungseinheit: Ein Drehkreuz zur Personenzählung ist vorhanden oder aber nicht. Wre klassisch im Limes der Wirkung nicht zu unterscheiden, jedoch zeigt das Experiment, es gibt eine kleinste Wirkungseinheit \hbar

Beispiele: Schwarzkörperstrahlung:
Wien ~ 1892

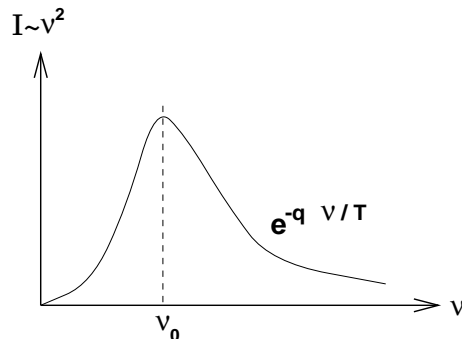


Abbildung 1: Kurvenform: $2 \cdot e^x - 2 - \frac{T}{k} \cdot x \cdot e^{-x} = 0$

Exponent $q\nu/T$ T in K oder in eV

1 eV	$\hat{=}$	$10^4 K$	Plasma
0,1 eV	$\hat{=}$	$10^3 K$	C,O,... einzelne Elemente
0,01 eV	$\hat{=}$	$100 K$	Siedepkt.

ν : Frequenz q: $1,054449 \cdot 10^{-27}$ erg sec

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ mit h Planck-Konstante

Wirkungskonstante $\hbar \simeq 2/3 \cdot 10^{-15}$ eV s

Licht: 1 eV $\hat{=}$ $\lambda \simeq 120 \mu m$ $E = \hbar\omega = h\nu$

Maximum:

$$I(\nu) \simeq \frac{\nu^2}{e^{h\nu/T} - 1}; I'(\nu) \simeq \frac{2\nu(e^{h\nu/T} - 1) - \nu^2 \cdot e^{-h\nu/T}}{(e^{h\nu/T} - 1)^2} \stackrel{!}{=} 0, \text{ mit } \gamma = \frac{h\nu}{T}$$

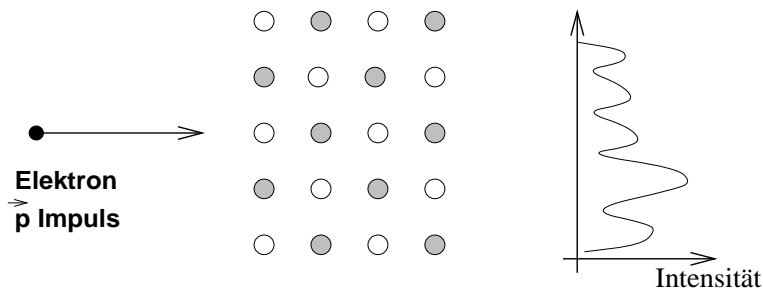
$$2 - 2 \cdot e^{-x} - x = 0 \quad x = 2 \cdot (1 - e^{-x}), \text{ erster Fixpunkt}$$

$$x_1 = 1 : \rightarrow x_2 = 1,26 \quad \dots \quad x_n = 1,59 \quad \text{Iteratives Verfahren}$$

$$x = \frac{h}{T} \cdot e^{2x} \cdot 2(1 - e^x)$$

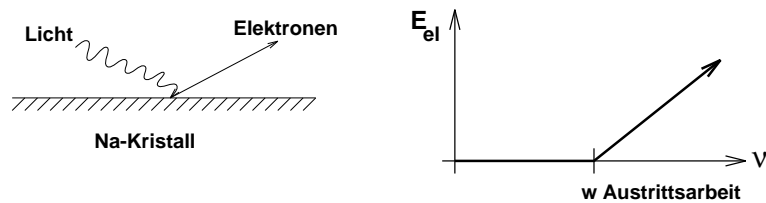
VL 18.10.95

- Warum sind in der Physik stets alle Meßwerte reell? (Einschränkung der möglichen Theorien)
- Warum sind Festkörper fest? Obgleich die gesamte Materie in *allen* ihren Formen ausschließlich aus “punktförmigen” Teilchen besteht (Elektronen, Quarks)



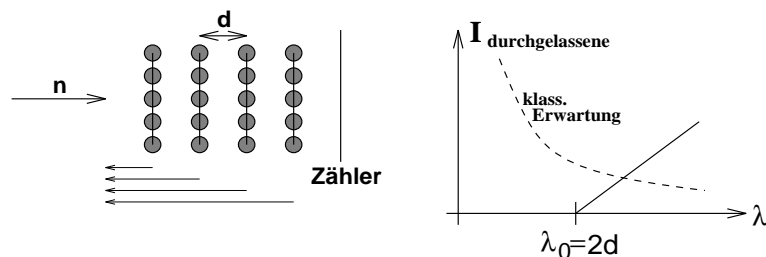
- Welche Wellenlänge zeigt sich bei Beugung von Elektronen auf ein Festkörpergitter
 $\vec{p} = \underline{p} = m\dot{\underline{x}} \rightarrow \underline{p} = \hbar \underline{k} \leftarrow$ Wellenzahl: $k := \frac{2\pi}{\lambda}$
 Dimensionsanalyse: [p] Wirkung/Länge
 mech. Teilchen := {Bündel von endlich vielen Aussagen}
 Elektron: $= \{m_e, e_-, s, s_3; \text{wo ist es}\}$ s_3 -Komponente: Spin-Ausrichtung
Anmerkung: Der "Welle-Teilchen-Dualismus" ist *kein* Dualismus:
 - auf jede Frage eine entsprechende Antwort aus dem Bündel von Aussagen
 - verschiedene Fragen an dasselbe Objekt

- Photo-Effekt



$$E_{Ph} = h\nu = \hbar\omega$$

- Licht gekörnt: $E_{el} = h\nu - W$
- Reflexion von Neutronen an Kristall Ebenen



- Compton-Effekt: Streuung von Licht an Elektronen

$$\begin{aligned} \text{Impulssatz: } \underline{p}_\lambda + \underline{p}_e &= \underline{p}_{\lambda'} + \underline{p}_{e'} \\ \text{Energiesatz: } E_\lambda + E_e &= E_{\lambda'} + E_{e'} \end{aligned}$$

Experimente sind quantitativ erklärbar:

$$p_e = m\dot{x} \qquad m_\lambda = 0$$

$$E_e = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \qquad E = h\nu = \hbar\omega$$

relativistisch: $p = \frac{h\nu}{c}$ $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$
 falls: $m = 0 \iff E = pc = \hbar kc = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} c = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} \cdot \nu \lambda = \hbar\omega = h\nu$
 mit: $c = \nu\lambda$

Zusammenfassung 1:

- experimentelle Vorerfahrungen
- Dynamik für phys. Systeme (zeitliche Entwicklung)
 - kausal
 - deterministisch [Prüfungsfragen: ... was bedeutet das ?]
- Frage: „Wo ist es ?“
 - Körnung der Materie
 - statistische Aussagen

Beispiel: \mathcal{R}_3 -Teil der experimentell zugänglich ist, endliche Pflasterung mit Zählern. Wahrscheinlichkeitsamplitude ψ , Wahrscheinlichkeit zu zählen $\omega = |\psi|^2$, Phase wird wegen der Wiederkehr der Wellenfunktion erlaubt.

1	2	3	4	5
6	.	.	.	

$\Delta \mathbf{x}$

$x_i, Z(x_i, \Delta x)$
 $w(x_i, \Delta x) \sim \Delta x^2 =$ Volumen des Zählers
 reelle Zahlen \rightarrow rationale Zahlen
 Zähler sind techn. notwendig endlich klein,
 die Lage ist durch rationale Zahlen,
 hier die Koordinaten, beschreibbar. Reelle
 Zahlen werden in der Dynamik nur aus
 Bequemlichkeit verwendet, jedoch nicht
 benötigt.

Je kleiner der Zähler, je seltener mißt er! $w(\tilde{x}_i, \frac{\Delta x}{2}) \sim \frac{\Delta x^2}{4}$

$$w(x_i, \Delta x) \Rightarrow \frac{w(x_i, \Delta x)}{\Delta x^2} =: q(x_i, \Delta x)$$

$$\lim w(x_i, \Delta x) = q(x_i)$$

$$\Delta x \rightarrow 0$$

$q =$ Dichte der Wahrscheinlichkeit

Wahrscheinlichkeitsamplitudendichte:

Feld. $\forall x : q(x, t)$

falls q genügend stetig, dann kann man sich eine allzu feine Pflasterung sparen.

Hoffnung:

$$x_{Newton}(t) = \int_{\mathcal{R}_3} dx^n x' q(x', t) \cong \sum_{x_i} x_i \omega_{x_i}$$

3 Meßprozess

phys. Objekt	math. Symbol	Darstellungen
phys. System	Σ	Bauvorschrift, Handbuch <i>aller</i> Eigenschaften, ...
Zustand eines phys. Systems	$ \psi\rangle$	Tabelle, Zeichnung, math. Funktion $(\psi(x,t))$
Apparate zum Messen	\hat{A}	siehe phys. System

memento 1: Zu jedem \hat{A} gehört ein Bereich von Zuständen von den mittels \hat{A} meßbaren Systemen (d.h. Der Zustand muß im Definitionsbereich (\mathcal{H}_Σ) von \hat{A} liegen)

memento 2: Jeder Apparat definiert einen physikalischen Begriff

Normale Messung: $\hat{A} \cdot |\psi\rangle = |\psi'\rangle$ macht aus einen Zustand einen neuen

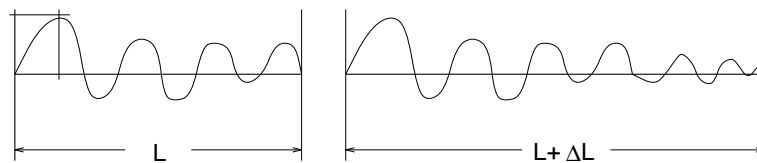


Abbildung 2:

Zustand. Als Beispiele dienen verschiedene physikalische Systeme

$$|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \{\mathcal{H}_\Sigma\}$$

$\mathcal{H}_\Sigma :=$ Menge aller denkbaren Zustände von Σ , Hilbert-Menge

Sonderfall: $\hat{A} \cdot |\psi\rangle = \text{const} \cdot |\psi\rangle$

falls: $\hat{A} \cdot |\varphi_i\rangle = \text{const}_i \cdot |\varphi_i\rangle \quad i=1,2,\dots$

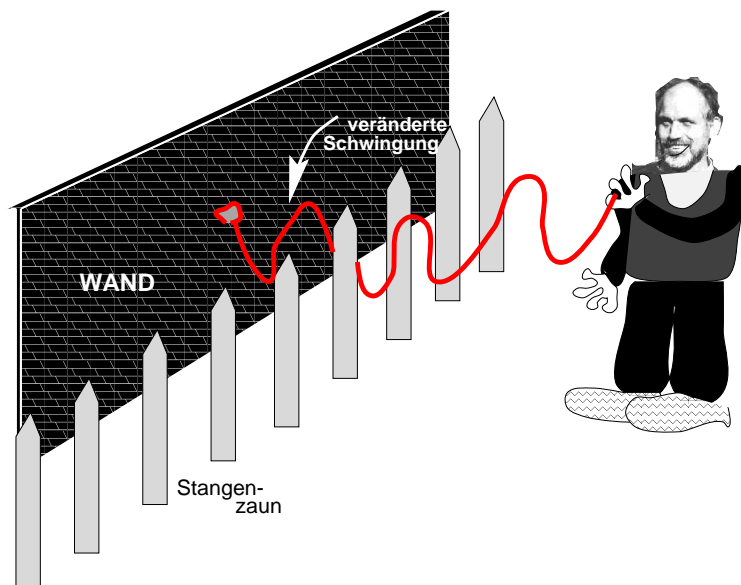


Abbildung 3: Anschauung eines Polfilters, Seil: Σ , Zaun: \hat{A}

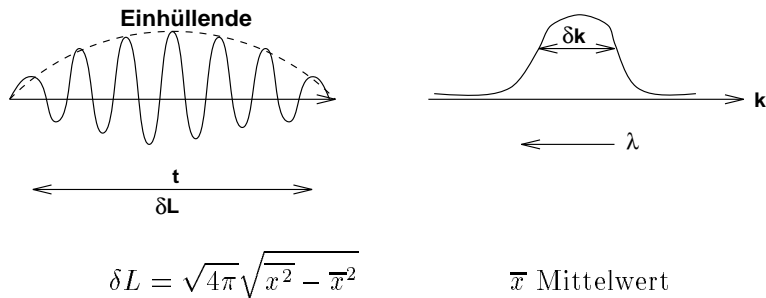
$$\varphi_i \in \mathcal{H}_\Sigma$$

$|\varphi_i\rangle$ Eigenzustand zu \hat{A} von Σ (Zustand auf den \hat{A} nicht anspringt), c_i Eigenwerte

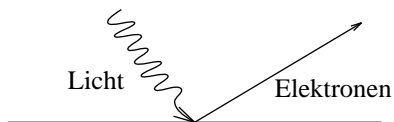
Übung: Σ schwingbares System in 1 Dimension

$|\psi\rangle \rightarrow \psi(x, t)$ = „Amplitude“

\hat{A} := bilde die Fourier-Transformation



VL 23.10.95



erinnern an Photoeffekt: *Licht*: N Photonen jedes Photon definiert durch $\{\nu; \vec{p} = \hbar \vec{k} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}\}$; Richtung d. E-Vektors; Wahrscheinlichkeitsaussage über Ort} Apparate betrachten: - die auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit wirken.

$$\left. \begin{array}{l} \text{Licht: } \nu, \vec{p} \text{ in } x\text{-Richtung} \\ \vec{E} \cdot \vec{k} = 0; \vec{B} \cdot \vec{k} = 0 \\ \vec{E}, \vec{B} \text{ gehorchen Maxwell-Gl.} \end{array} \right\} \hat{=} \Sigma \hat{=} \text{phys. System}$$

Zustand $\hat{=} |\nearrow\rangle$ $\nearrow \vec{E}$; \vec{p} ragt aus Blattebene raus

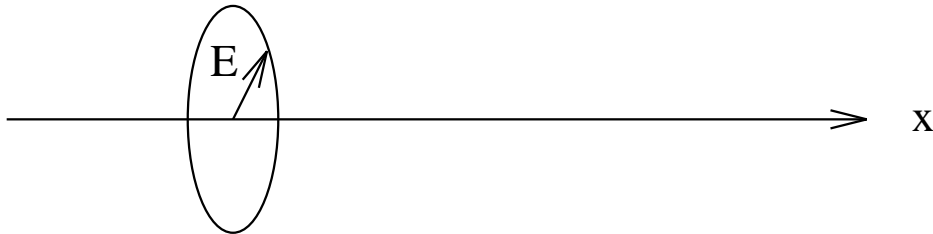
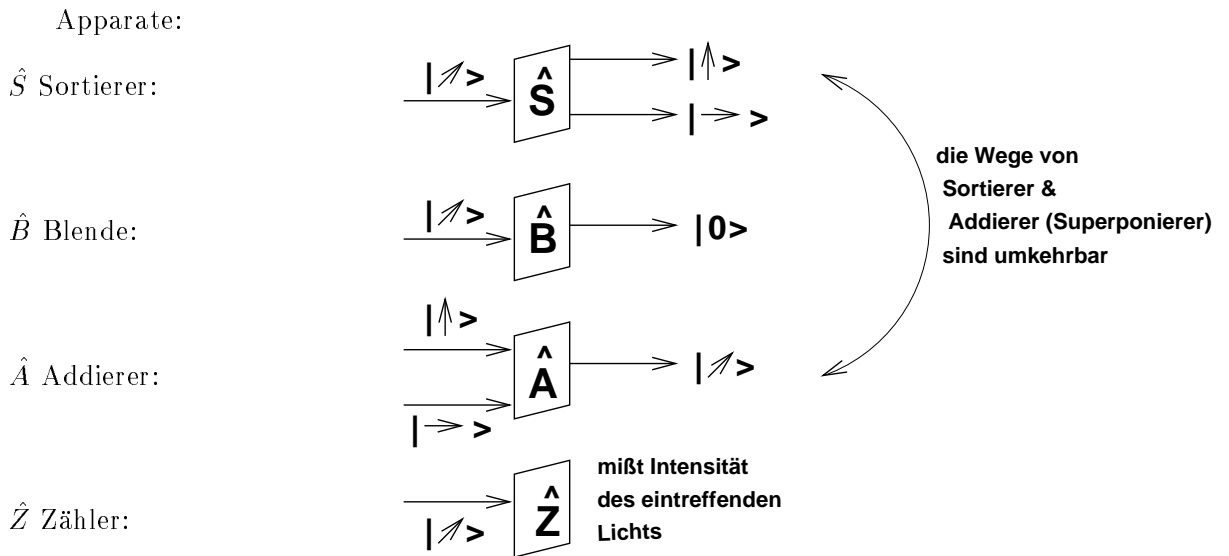


Abbildung 4: polarisiertes Licht: transversale Welle

Menge aller Zustände: 2-dimensional \mathcal{H}_Σ .

\hat{A} (Meß-)Apparatur



Die Wege von Sortierer und Addierer sind umkehrbar und gehen bei einer

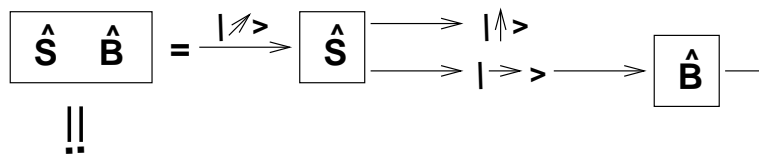


Abbildung 5:

Umkehrung in den jeweiligen anderen Apparat über. \hat{P} Projektor: $\hat{P}_\uparrow |\nearrow\rangle \sim |\uparrow\rangle$
 $\hat{P}_\uparrow \hat{P}_\uparrow$ was macht der ? (man lese die Gleichung von rechts nach links, operativ)
 $|\uparrow\rangle \sim \hat{P}_\uparrow |\uparrow\rangle \simeq \hat{P}_\uparrow (\hat{P}_\uparrow |\uparrow\rangle)$

$$\boxed{\hat{P}_\uparrow \hat{P}_\uparrow = \hat{P}_\uparrow} \quad \text{Idempotenz von Projektoren}$$

$$\hat{P}_\uparrow \hat{P}_\rightarrow |\nearrow\rangle \simeq \hat{P}_\uparrow \cdot |\rightarrow\rangle = 0$$

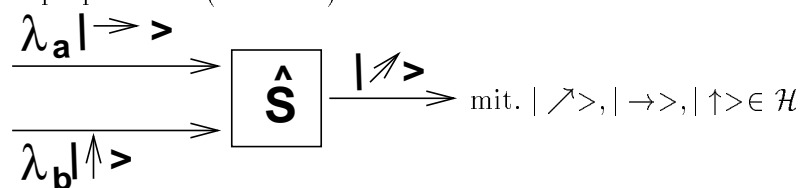
$$\boxed{\hat{P}_\uparrow \hat{P}_\rightarrow = 0} \quad \text{Orthogonalität}$$

Superposition + Interferenz

Amplituden: λ_i Intensitäten: $|\lambda_i|^2$

Wird $\lambda_2 |\uparrow\rangle$ durch eine Blende \hat{B} ausgeblendet, so wird aus $\lambda_4 = 0$ mit dieser Blende $\lambda_4 \neq 0$

Superponierer: (Addierer)



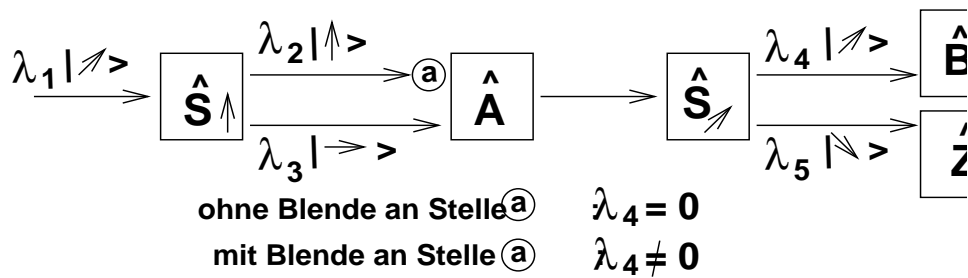


Abbildung 6: Amplituden-Betragsquadrat $\hat{=}$ Intensität $|\lambda_4|^2 = 0$

$\hat{S}(\hat{P}_\rightarrow|\nearrow\rangle; \hat{P}_\uparrow|\nearrow\rangle) = \hat{S}|\nearrow\rangle = |\sim\rangle \in \mathcal{H}$ Ergebnis ist wieder ein Lichtstrahl

\hat{S} Verknüpfung zweier Zustände $\in \mathcal{H}$ zu einem neuen Zustand $\in \mathcal{H}$

$(|\text{Zustand 1}\rangle + |\text{Zustand 2}\rangle) = |\text{Zustand}\rangle \in \mathcal{H}$ + Verknüpfungssymbol in \mathcal{H} für Apparat \hat{S}

Versuch/Idee: $\hat{P}_\uparrow + \hat{P}_\rightarrow = ?$

$$(\hat{P}_\uparrow + \hat{P}_\rightarrow)|\nearrow\rangle = \hat{P}_\uparrow|\nearrow\rangle + \hat{P}_\rightarrow|\nearrow\rangle = \lambda_\uparrow|\uparrow\rangle + \lambda_\rightarrow|\rightarrow\rangle = |\nearrow\rangle$$

$$\boxed{\hat{P}_\uparrow + \hat{P}_\rightarrow = 1}$$

$$|\nearrow\rangle = \hat{P}_\uparrow|\nearrow\rangle + \hat{P}_\rightarrow|\nearrow\rangle \text{ mit } |\nearrow\rangle \text{ beliebiger Zustand}$$

$$|\nearrow\rangle = \lambda_\uparrow|\uparrow\rangle + \lambda_\rightarrow|\rightarrow\rangle$$

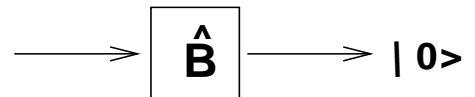
Verknüpfung “+”: (Eigenschaften experimentell prüfen!)

$$|a\rangle + |b\rangle \stackrel{?}{=} |b\rangle + |a\rangle \text{ kommutativ JA!}$$

$$|a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) = (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle \text{ assoziativ}$$

$$|a\rangle = |a\rangle \text{ reflexiv}$$

$$\exists \text{ Null: } |a\rangle + |0\rangle = |a\rangle \quad |0\rangle \text{ als Zustand}$$



$$\exists \text{ Inverses: } |a\rangle + |a^{-1}\rangle = |0\rangle$$

\Rightarrow die um π Phasen-Verschobenen mitnehmen

“+” bezüglich \mathcal{H}_\pm definiert $\{|\psi\rangle\}$, als eine Gruppe bezüglich “+” (kommutative, Abel’sche Gruppe). “+” addiert Wahrscheinlichkeitsamplituden. \mathcal{H} linearer Vektorraum der physikalischen Zustände.

anderes System: jeder Zähler x_i mit Breite Δx $|p\rangle$

$$\hat{P}(x_i, \Delta x)|p\rangle = \lambda_i(p)|x_i, \Delta x\rangle$$

FOLGERUNGEN:

Irgendwo ist das Elektron immer (Gewißheit: $w = \int dx^3 |\varphi|^2 = 1$), gleiche Aussagen:

- $w(|p\rangle) = 1$ - vor der Messung ($|p\rangle$)
- $\sum w(|p\rangle; |x_i, \Delta x\rangle) = 1$ - nach der Messung (in $|x_i, \Delta x\rangle$)

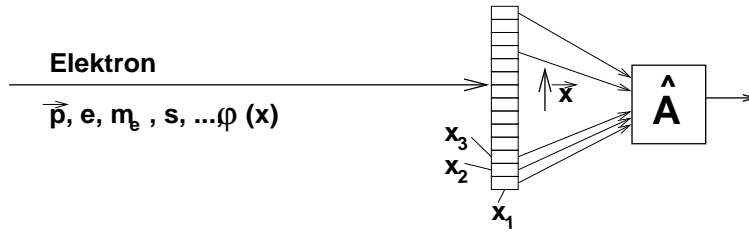


Abbildung 7: Schirm: Pflasterung mit Zählern Δx

$$\bullet \sum_{i=1}^n \hat{P}_i(x_i, \Delta x) = 1; \quad |p\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i(p) |x_i, \Delta x\rangle$$

Hintereinander filtern:

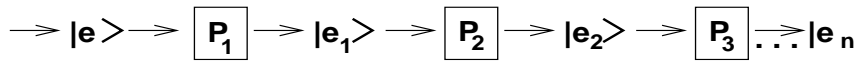


Abbildung 8: Filterung mit $|e\rangle$ einfallend & $|a\rangle$ ausfallend

$$w_a = \frac{I_1}{I_e} \cdot \frac{I_2}{I_1} \cdot \frac{I_3}{I_2} \cdots \frac{I_n}{I_{n-1}} \equiv \frac{I_n}{I_e}$$

Produkt der Wahrscheinlichkeiten

$w(\underbrace{|e\rangle, |a\rangle})$ reelle Zahl abhängig von Amplituden A_e, A_a

2 Objekte aus \mathcal{H}_{\pm}

Erinnerung an \mathcal{R}_3 : $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \dots \in \mathcal{R}_3$

1. Verknüpfung "+": $\vec{a} + \vec{b} = \vec{c} \in \mathcal{R}_3$

$$\vec{a} := (a_1, a_2, a_3)$$

$$\vec{b} := (b_1, b_2, b_3)$$

$$\vec{c} := (c_1, c_2, c_3)$$

$$c_i = a_i + b_i \quad i = 1, 2, 3$$

2. Verknüpfung ".": $\vec{a} \cdot \vec{b} = \text{reelle Zahl}$

$$(\vec{a}, \vec{b}) \rightarrow \lambda \in \text{Zahlenkörper (reelle Zahlen)}$$

Forderung: bei Transf. des \mathcal{R}_3 soll λ invariant bleiben

$$\vec{a} \in \mathcal{R}_3 \rightarrow (a_1, a_2, a_3)$$

$$\vec{b} \in \mathcal{R}_3 \rightarrow \dots$$

$$\lambda := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i \cdot b_j \cdot \underline{\underline{g^{ij}}}$$

\mathcal{R}_3 : linearer Vektorraum mit Metrik g^{ij}

$$\vec{a} \cdot \vec{b} := \sum_{ij} a_i b_j g^{ij} = \underline{\underline{a}} \cdot \underline{\underline{b}} \cdot \underline{\underline{g}}$$

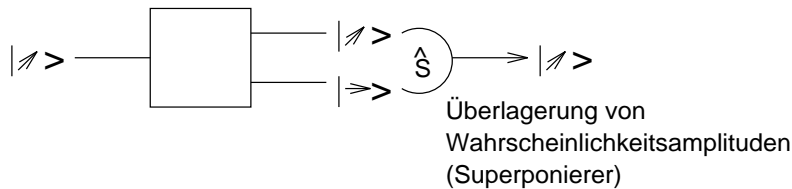
Für euklidische VR gilt die spezielle, weil diagonale, Metrik:

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{Metrik} \quad b_i \rightarrow \sum_j^3 g^{ij} \cdot b_j, \text{ also dann } \vec{a} \cdot \vec{b} = \sum a_i b_i$$

3.1 Übungen, die Erste

VL 25.10.95

3.1.1 Übung I



Frage: umkehrbar ?

3.1.2 Übung II

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i$$

$$\hat{P}_i^n = \hat{P}_i \cdot \hat{P}_i \cdot \dots \cdot \hat{P}_i$$

$$\hat{P}_i \cdot \hat{P}_j = 0; i \neq j$$

betrachten mit Hilfe einer Basis : $\{|i\rangle\}$: alle $|i\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$

$$\text{mit } \langle i | j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} i = j & : 1 \\ i \neq j & : 0 \end{cases} \text{ orthogonal}$$

und vollständig : $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$ beliebiger Zustand des Systems

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |i\rangle$$

3.1.3 Übung III

Ein Experimentator hat sich 10 Zähler gekauft zur Messung eines Elektrons: $x \in [0, 1]$. Der zweite Experimentator kauft sich 20 Zähler, der dritte Experimentator 30 ... der n-te kauft $n \cdot 10$ Zähler

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit w das Elektron in einem dieser Zähler zu finden. Was ist ein vernünftiger limes in diesem Falle ?

3.2 Was bedeutet der Meßprozess ?

Σ $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$ Wahrscheinlichkeitsamplituden

man präpariert $|\psi\rangle$ durch einen Apparat (Gewißheit, daß $|\psi\rangle$ vorliegt)

Zwischenzeit

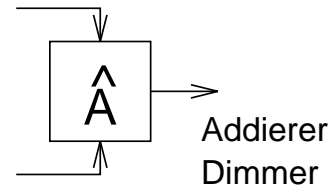
DYNAMIK

beschreibt die zeitliche Entwicklung solange nicht gemessen wird

Messung: Meßapparat präpariert einen neuen Zustand spezifisch

$f \hat{A}$ mißt die Wahrscheinlichkeit des Vorliegens

"+" Überlagerung von Wahrscheinlichkeitsausagen



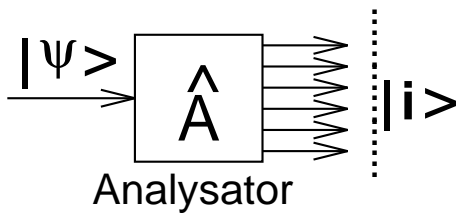
"λ·" Multiplikation mit Zahl

$$+ : |a\rangle + |b\rangle = |c\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$$

kommutativ, assoziativ $\exists |0\rangle : |0\rangle + |a\rangle = |a\rangle$
 $\exists |a^{-1}\rangle : |a^{-1}\rangle + |a\rangle = |0\rangle$
 Gruppe bzgl. der Addition, \mathcal{H}_Σ linearer Vektorraum

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i \cdot |i\rangle$$

beliebig aus \mathcal{H}_Σ darstellen mit Basis $\{|i\rangle, i = 1, \dots, n = \dim \mathcal{H}_\Sigma$



bei Umkehrung braucht man Dimmer

Wahrscheinlichkeit $w(|a\rangle, |e\rangle)$ reelle Zahl $0 \leq w \leq 1$

Folge: Wahrscheinlichkeiten multiplizieren

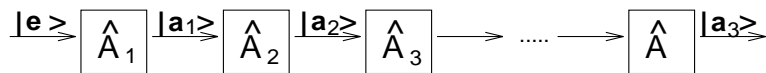
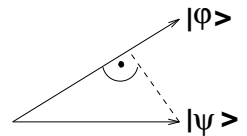


Abbildung 9: Hintereinander Ausführung/Anwendung

$$w(|a\rangle, |a_{n-1}\rangle) \cdot \dots \cdot w(|a_2\rangle, |a_1\rangle) \cdot w(|a_1\rangle, |e\rangle)$$

$|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$ Skalarprodukt: $s(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$



$$\left[\begin{array}{l} \text{Vgl.: } \vec{a}, \vec{b} \in \mathcal{R}_2 \text{ Skalar invariant} \\ \rightsquigarrow \text{Transformation: } \vec{a}_D \in \mathcal{R}_2^D \Rightarrow \vec{a}_D \cdot \vec{b} = c \end{array} \right] |\varphi\rangle_{\text{ket}} \in \mathcal{H}_\Sigma \iff \mathcal{H}_\Sigma^D \ni \langle \varphi|_{\text{bra}}$$

Skalarprodukt: $\langle \varphi | \psi \rangle = c$ (Zahl) $\langle \varphi | \quad | \psi \rangle$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Zum Vergleich:} \\ (\vec{a} | \vec{b}) \\ (\vec{a} \in \mathcal{R}_2^D, \vec{b} \in \mathcal{R}_2) \\ a^i \quad b_i \end{array} \quad \begin{array}{l} a^i = \sum_j \underline{g}^{ij} a_j \\ \vec{a} \in \mathcal{R}_3 a_1, a_2, a_3 \\ \text{Euklid: } \underline{g}^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow a^i = a_i \end{array} \right]$$

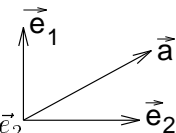
3.3 Die Hintereinander-Anwendung, bra-ket Schreibweise

$\langle a_1 | \rangle$ $\langle a_1 | e \rangle$
 Richtung Projektion von $|e\rangle$ auf $|a-1\rangle := \text{Zahl}$

Hinweis: Formeln von rechts nach links lesen !

$$\begin{aligned} |a\rangle \langle a| \dots \dots |a_3\rangle \langle a_3| a_2\rangle \langle a_2| a_1\rangle \langle a_1| e\rangle \\ |a\rangle = \hat{A}_n \cdot \dots \cdot \hat{A}_3 \cdot \hat{A}_2 \cdot \hat{A}_1 \cdot |e\rangle \\ \langle a| a\rangle = 1 = \hat{A}_n^2 \cdot \dots \cdot \hat{A}_3^2 \cdot \hat{A}_2^2 \cdot \hat{A}_1^2 \cdot \underbrace{\langle e| e\rangle}_{=1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} w(|a\rangle, |e\rangle) &= \left| \hat{A}_{a-e} |e\rangle \right|^2 = \left| \underbrace{\langle a|n\rangle}_{\text{Zahl}} \underbrace{\langle n|n-1\rangle}_{\text{Zahl}} \cdot \dots \cdot |3\rangle \langle 3|2\rangle \langle 2|1\rangle \langle 1|e\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle a|n\rangle \right|^2 \cdot \left| \langle n|n-1\rangle \right|^2 \cdot \dots \cdot \left| \langle 2|1\rangle \right|^2 \left| \langle 1|e\rangle \right|^2 \\ &= w(|a\rangle, |n\rangle) \cdot w(|n\rangle, |n-1\rangle) \cdot \dots \cdot w(|1\rangle, |e\rangle) \\ &\quad \left| \langle a|b\rangle \right|^2 = w(|a\rangle, |b\rangle) \\ &\quad \hat{P}_i = |i\rangle \langle i| \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} a_1 &= (\vec{a} \cdot \vec{e}_1) \quad \vec{a} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 \\ \vec{a} &= (\vec{a} \cdot \vec{e}_1) \vec{e}_1 + (\vec{a} \cdot \vec{e}_2) \vec{e}_2 \\ &= \vec{e}_1 (\vec{e}_1 \cdot \vec{a}) + \vec{e}_2 (\vec{e}_2 \cdot \vec{a}) \\ &= \underbrace{|e_1\rangle \langle e_1|}_{=\hat{P}_1} |a\rangle \\ \vec{a} &= \hat{P}_1 |a\rangle + \hat{P}_2 |a\rangle \\ \hat{P}_1 + \hat{P}_2 &= 1 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeiten sind reell:

$$\begin{aligned} w(|e\rangle, |a\rangle) &= \left| \langle a|e\rangle \right|^2 = \langle e|a\rangle \langle a|e\rangle^* \\ &\quad \Updownarrow \\ w(|a\rangle, |e\rangle) &= \left| \langle e|a\rangle \right|^2 = \langle e|a\rangle \langle e|a\rangle^* \\ &\quad \implies \langle a|e\rangle = \langle e|a\rangle^* \end{aligned}$$

3.4 Konstruktion einer Basis

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |i\rangle \quad d \text{ endlich oder abzählbar unendlich}$$

Wie kann man eine Basis erhalten ?

Schmidt'sches Verfahren liefert:

$$|1\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma \quad |2\rangle: \begin{array}{l} \langle 1|2\rangle = 0 \\ \langle 2|2\rangle = 1 \end{array} \quad |3\rangle: \begin{array}{l} \langle 1|3\rangle = 0 \\ \langle 2|3\rangle = 0 \\ \langle 3|3\rangle = 1 \end{array}$$

$$\sum_{i=1}^d \hat{P}_i = 1 \quad ; \quad \hat{P}_i = |i\rangle\langle i|$$

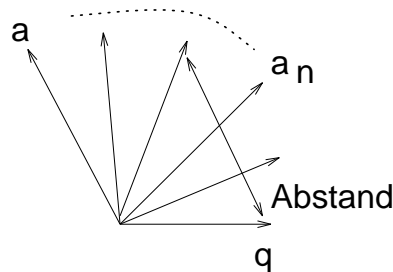
$$|a\rangle = 1 \cdot |a\rangle = \sum_{i=1}^d \hat{P}_i |a\rangle = \sum_{i=1}^d |i\rangle \cdot \langle i|a\rangle$$

\mathcal{H}_Σ Wir suchen eine Folge von $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots \in \mathcal{H}_\Sigma$ mit Laufindex $\mu = 1, 2, \dots$ es soll gelten:

$$|q\rangle = \lim_{\mu \rightarrow \infty} |a_\mu\rangle \quad \|q_\mu - q_{\mu'}\| < \epsilon \quad \mu, \mu' \geq N \text{ : Vollständigkeit !}$$

In endlich dimensionalen Räumen ist dies einfach:

Komponentenweise Konvergenz $\lim_{\mu \rightarrow \infty} \langle i|a_\mu\rangle \rightarrow \langle i|q\rangle \quad \sum_i \left| \langle i|a_\mu\rangle \right|^2$



Die oben geforderte Folge ist separabel, falls zu jedem $|q\rangle \quad \exists \quad |q_\mu\rangle \rightarrow |q\rangle$

Abstände $\rightarrow 0$: starke Konvergenz

Komponentenweise $\rightarrow 0$: schwache Konvergenz

gefordert: Meßwerte in der Physik sind stets reell

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |a_i\rangle \quad \langle \psi| = \sum_{j=1}^d c_j^* \langle a_j|$$

$\hat{A}|\psi\rangle$ Apperatur präpariert Zustand

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{ij} \langle a_j | c_j^* c_i \hat{A} | a_i \rangle$$

man wähle Basisvektoren derart, daß sie Eigenvektoren zu \hat{A} sind

$$\hat{A} : \hat{A} | a_i \rangle = \lambda_i | a_i \rangle \quad \hat{A} \text{ reproduziere } | a_i \rangle \text{ bis auf eine Zahl}$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \sum_{ij} c_j^* c_i \langle a_j | \hat{A} | a_i \rangle \\ &= \sum_{ij} c_j^* c_i \underbrace{\langle a_j | a_i \rangle}_{\substack{\text{orthogonale} \\ \text{normierte Basis}}} \cdot \lambda_i \\ &= \sum_i |c_i|^2 \cdot \lambda_i \end{aligned}$$

λ_i müssen reell sein, damit "Meßwert" $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ reell wird.

Es gibt also in der Physik nur Apperaturen mit $\hat{A}_i | a_i \rangle = \lambda_i | a_i \rangle$, λ_i reell
 \hat{A}_i heißen HERMITE'sche Operatoren

3.5 Wiederholung:

VL 30.10.95

$\sum |\psi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$ \mathcal{H}_Σ linearer Vektorraum

$|\varphi\rangle + |\psi\rangle = |c\rangle$ $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, |c\rangle \in \mathcal{H}$

(Superponieren von Zuständen
 Superponieren von Wahrscheinlichkeitsamplituden)

\exists Assoziativität, Kommutativität, $\exists |0\rangle, |a\rangle: \exists |a^{-1}\rangle$

\iff Beugung von Elektronen

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |\rightarrow\rangle \quad \text{Beispiel: zirkular polarisiertes Licht}$$

\exists Basis:

$$\{|i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d} \in \mathcal{H}_\Sigma \quad |\psi\rangle = \sum_{i=1}^d \psi_i |i\rangle$$

\exists Metrik, Norm:

$|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma \rightarrow$ Zahl, unabh. von Basis-Transform.

$$\begin{array}{c} |\psi\rangle \\ \text{ket} \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \langle \psi | \\ \text{bra} \end{array} \in \mathcal{H}_\Sigma^D$$

$\langle \psi | \varphi \rangle \hat{=}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{wenn } |\varphi\rangle \text{ vorlag, wie ist dann die} \\ \text{Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß} \\ \text{bei einer Messung von } |\psi\rangle, |\psi\rangle \\ \text{vorliegt.} \end{array} \right.$

[Transformation in $\mathcal{H}_\Sigma \implies$ kontragrediente Transformation in \mathcal{H}_Σ^D]

$$\underbrace{\hat{P}_{|\psi\rangle}}_{:=|\psi\rangle\langle\psi|} |\varphi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\varphi\rangle}_{\text{Zahl}}$$

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ Gewißheit, normierter \mathcal{H}

Basis $\rightarrow \{|\alpha\rangle\}_{\alpha=1,2,\dots,d} \in \mathcal{H}$ $\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{ij}$ orthonormierte Basis

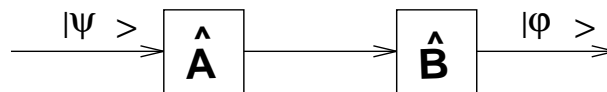
\mathcal{H}_Σ : Folgen von $|a_i\rangle \quad i = 1, 2, \dots$ im Hilbert-Raum

$$n, m > N : \quad \epsilon > \left| |a_n\rangle - |a_m\rangle \right|^2 \quad \left| \langle a_n | a_m \rangle \right|^2 \rightarrow 1$$

Die Folge hat einen Grenzvektor $|a\rangle \in \mathcal{H}$, \mathcal{H} ist vollständig, $\forall |b\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists$ Folge separabel

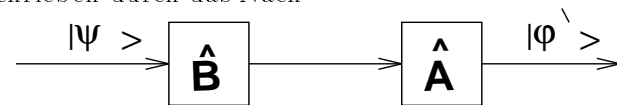
3.6 Apparaturen

3.6.1 Hintereinanderausführen von Messungen



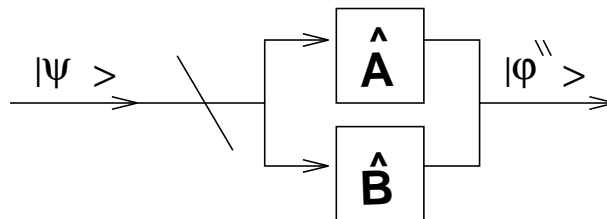
Das nacheinander Ausführen von Messungen, wird beschrieben durch das Nach-

einanderanwenden der Operatoren: $\hat{B} \cdot \hat{A}$



$$\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = [\hat{B}, \hat{A}] = \text{Kommutator}$$

3.6.2 Paralleles Ausführen von Messungen



$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A} \quad (\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = (\hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle)$$

Eigenwertgleichung:

\hat{A} : gesucht $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad \hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma$

$|a_i\rangle \quad i = 1, 2, \dots \quad a_i = a_j \text{ oder } a_i \neq a_j$

Beispiele:

- Elektron: Impuls p , \hat{P} , $|p\rangle$ schreiben als: $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$

- $\hat{A}|a_i\rangle = \lambda_i|a_i\rangle$

Lösungen der Eigenwertgleichung:

$\hat{A}|a_i\rangle = \lambda_i|a_i\rangle$ $\{|a_i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d}$ bilden vollständige Basis

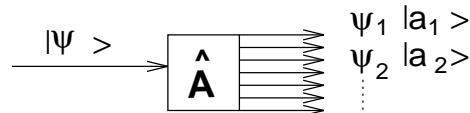
$\hat{A}=?$ darstellen mit Hilfe seiner Eigenzustände

$$|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\psi_i}_{\text{Komponenten}} \cdot |a_i\rangle$$

von links mit $\langle a_j|$ multiplizieren liefert:

$$\langle a_j|\psi\rangle = \sum_i \psi_i \langle a_j|a_i\rangle \xrightarrow{\text{falls orthonorm. Basis}} \psi_j$$

$$|a_1\rangle\langle a_1| + |a_2\rangle\langle a_2| + \dots + |a_d\rangle\langle a_d|$$



$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle \quad \hat{A} := |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \quad \hat{A}^2 = \hat{A} \cdot \hat{A}$$

$$\hat{A}|\uparrow\rangle = \underbrace{|\uparrow\rangle\langle\uparrow|}_{\hat{A}}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \underbrace{\langle\uparrow|\uparrow\rangle}_1 = 1 \cdot |\uparrow\rangle$$

$$\hat{A}|\rightarrow\rangle = |\uparrow\rangle \underbrace{\langle\uparrow|\rightarrow\rangle}_{\text{Null}} = 0 \cdot |\uparrow\rangle$$

Eigenwertspektrum

Physikalische Meßwerte sind stets reell $\Rightarrow a_i$ Eigenwerte müssen reell sein.

$$|b\rangle: \hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad \langle a_i|b\rangle = \underbrace{\langle a_i|a_i\rangle}_1 \cdot a_i = a_i$$

$$\langle b|a_i\rangle = \langle a_i|\hat{A}^+ = \langle a_i|\hat{A}|a_i\rangle = \langle a_i|b\rangle = a_i$$

\hat{A}^+ adjugiert zu \hat{A} wirkt in \mathcal{H}_Σ^D

Wenn ein Operator $\langle a|\hat{A}|b\rangle = \langle b|\hat{A}^+|a\rangle$ dann nennt man ihn hermitesch:

$\hat{A}^+ = \hat{A}$ selbstadjungiert. \hat{A} hat reelle Eigenwerte: \hat{A} ist hermitesch. Hermite-

sche Operatoren haben als Eigenzustände eine vollständige Basis.

Operator \hat{A} darstellen mittels (Apperatur-Aufbau) eines Satzes von Zahlen.

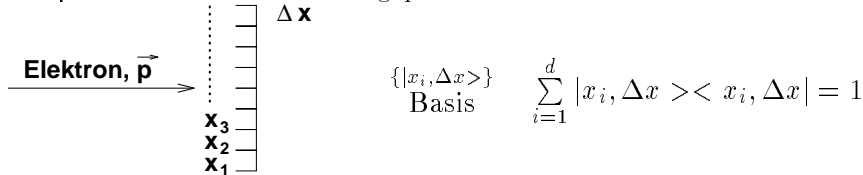
$$\{|i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d} \in \mathcal{H} \text{ Basis} \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad \sum_{i=1}^d |i\rangle\langle i| = 1$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = |q\rangle \in \mathcal{H}_\Sigma \quad \left[\begin{array}{l} \text{wende } \hat{A} \text{ auf } |i\rangle \text{ an und proje-} \\ \text{ziere auf } \langle i|. \text{ Skalarprodukt.} \end{array} \right]$$

$$\hat{A} \cdot 1|\psi\rangle = \hat{A} \cdot 1 \cdot \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_{ji} |j\rangle \underbrace{\langle j|\hat{A}|i\rangle}_{=: A_{ij}} \underbrace{\langle i|\psi\rangle}_{\psi_i}$$

$$\hat{A} \xrightarrow{\rightarrow} \{ |i\rangle \} \quad A_{ij} = \text{Matrix bzgl. } \{ |i\rangle \}$$

Beispiel: Schirm mit Zählern gepflastert zum Zählen von Elektronen



$\hat{A}|\psi\rangle =$ berechenbar Sei nun speziell \hat{A} einer dieser Zähler
 $\hat{A} = |x_i, \Delta x\rangle \langle x_i, \Delta x|$ Projektions-Operator Δx weglassen ...

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{ij} |x_j\rangle \underbrace{\langle x_j|x_i\rangle}_{\delta_{ij}} \underbrace{\langle x_i|x_i\rangle}_1 \langle x_i|\psi\rangle$$

$$A_{ij} = \langle x_i|\hat{A}|x_j\rangle = \langle x_i|\underbrace{|x_k\rangle \langle x_k|}_{\hat{A}}|x_j\rangle = A_{ij} \cdot \delta_{ij} =$$

$$= \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & \dots \\ 0 & A_{22} & \dots \\ 0 & \dots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = 1 \cdot \delta_{ij} \quad \text{mit: } \langle x_i|x_k\rangle = \delta_{ik} \text{ und } \langle x_k|x_j\rangle = \delta_{kj}$$

Oft wird $A_{ij} = A(i) = A(x_i)$ als Notation verwendet, da mit $i = j \Rightarrow$ Abbildung auf diskrete gewöhnliche Funktion

Sei nun ein Basiswechsel durch den bergang von lateinischen auf griechische Buchstaben angezeigt:

$$\begin{array}{ccc} \{ |i\rangle \} & \text{Basiswechsel} & \{ |\alpha\rangle \} \\ i = 1, 2, \dots, d & \longrightarrow & \alpha = 1, 2, \dots, d \end{array}$$

Es ergeben sich zwei äquivalente Darstellungen für $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{|i\rangle \langle i|}_{P} |\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|\psi\rangle = \sum_\alpha \psi_\alpha |\alpha\rangle$$

Multipliziert man die obere Gleichung von links mit $\langle \alpha|$ erhält man:

$$\langle \alpha|\psi\rangle = \psi_\alpha = \sum_i \langle \alpha|i\rangle \cdot \psi_i \quad \langle \alpha|i\rangle =: U_{\alpha i}$$

ψ_α Koeffizienten in der neuen Basis \longleftrightarrow ψ_i Koeffizienten in der alten Basis

$$\psi_\alpha = \sum_i U_{\alpha i} \psi_i$$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \sum_i |i\rangle \langle i| \psi \rangle = \sum_i \langle \varphi | i \rangle \langle i | \psi \rangle = \sum_i \varphi^*(i) \cdot \psi(i) \stackrel{!}{=} \sum_\alpha \varphi^*(\alpha) \cdot \psi(\alpha) \\
&= \sum_\alpha \langle \varphi | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi \rangle = \sum_{\alpha ij} \langle \varphi | i \rangle \underbrace{\langle i | \alpha \rangle}_{U_{\alpha i}^*} \underbrace{\langle \alpha | j \rangle}_{U_{\alpha j}} \langle j | \psi \rangle \\
&= \sum_{\alpha ij} \varphi^*(i) \psi(j) \underbrace{U_{\alpha i}^* U_{\alpha j}}_{\delta_{ij, \text{mit } \sum_\alpha}} \implies \sum_\alpha U_{\alpha i}^* U_{\alpha j} = \delta_{ij}
\end{aligned}$$

Die letzte Folgerung ist notwendig, damit das Skalarprodukt wirklich skalar ist!
 $U_{\alpha j} = \text{Matrix} \rightarrow \hat{U}$ Operator:

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

unitre Operatoren \hat{U} Basistransformationen
 VL 01.11.95

Abstraktes Objekt	Basis \rightarrow	Darstellung	Beispiele
$\hat{Z} i\rangle$	$\{ i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d} \in \mathcal{H}_\Sigma$	$ i\rangle \langle i $	$ x_i\rangle \langle x_i $
$ \psi\rangle$	$\sum_i i\rangle \langle i = \hat{1}$ vollständig $\langle i j\rangle = \delta_{ij}$ orthonormiert	$ \psi\rangle = \sum_i i\rangle \langle i \psi\rangle$ $i \psi\rangle = \sum_i i\rangle \psi(i)$	$\psi(x_i)$
\hat{A}	$\forall_{ij} \langle i \hat{A} j\rangle$ $\underline{\underline{A}} \hat{=} (A_{ij})$		$\hat{A}(x_i, x_j)$
$\hat{J} i\rangle = \lambda_i i\rangle$	$J_{ij} = \langle i \hat{J} j\rangle = \lambda_j \langle i j\rangle = \lambda_j \delta_{ij}$		$J(x_i, x_j) \cdot \delta_{ij}$ $= \begin{pmatrix} \ddots & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix}$ $= J(x_i) \cdot \delta_{ij}$

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|\psi\rangle \\
&= \sum_i |i\rangle \psi(i) = \sum_\alpha |\alpha\rangle \psi(\alpha)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_{\alpha i} &:= \langle \alpha | i \rangle \quad \forall \alpha, i \text{ Basis } \alpha, \text{ Basis } i \\
U_{\alpha i}^* &= \langle i | \alpha \rangle \quad \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = 1
\end{aligned}$$

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1} \quad ; \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (\text{hermitesche Operatoren } \hat{A}^\dagger = \hat{A})$$

Eigenschaften der \hat{U} : $\sum_{\alpha} U_{i\alpha} U_{\alpha j} \stackrel{!}{=} \delta_{ij}$

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \langle \psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi \rangle$$

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{\alpha} \psi^*(\alpha) \psi(\alpha) \\ &= \sum_{\alpha} \sum_i \sum_j \langle \psi | i \rangle \langle i | \alpha \rangle \langle \alpha | j \rangle \langle j | \psi \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{ij} \psi^*(i) U_{i\alpha} U_{\alpha j} \psi(j) \\ &\stackrel{!}{=} \sum_i \psi^*(i) \psi(i) \rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\sum_{\alpha} U_{i\alpha} U_{\alpha j} = \delta_{ij}}$$

1. $\sum_{\alpha} U_{i\alpha} U_{\alpha j} = \delta_{ij} \quad \hat{U}^\dagger \hat{U} = 1, \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$

2.

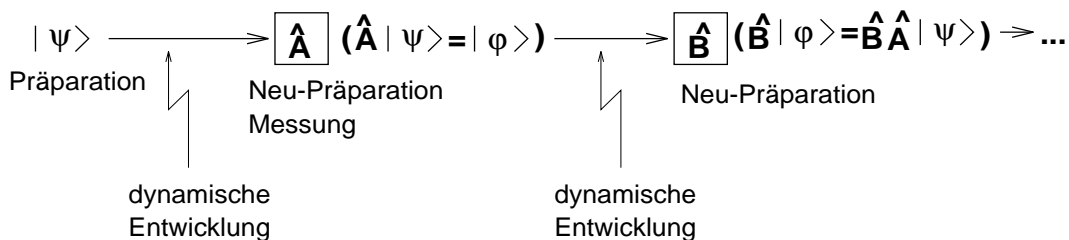
$$\begin{aligned} \hat{A} \rightarrow \langle i | \hat{A} | j \rangle &= A_{ij} = \langle i | \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | \hat{A} \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta | j \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle i | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \langle \beta | j \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} U_{i\alpha} A_{\alpha\beta} U_{\beta j} \\ &= \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha i}^+ A_{\alpha\beta} U_{\beta j} \\ &\hat{=} \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \end{aligned}$$

\hat{A} und $\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$ haben dieselbe physikalische Wirkung.

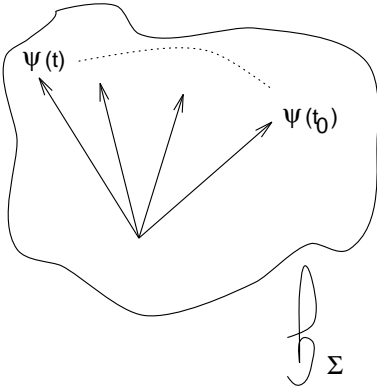
Verkettung: $\{|i\rangle\} \rightarrow \{|\alpha\rangle\} \rightarrow \{|\chi\rangle\} \rightarrow \dots$

$$\sum_{\alpha} U_{\chi\alpha} U_{\alpha i} = U_{\chi i}$$

4 Dynamik und Ortszustände



Zeitliches Nacheinander, Zeit als gewöhnlicher Parameter.
 Basistransformation: $|\psi(t)\rangle$ aus $|\psi(t_0)\rangle$, $t > t_0$ berechnen



$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &=: \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\
 1 &= \langle \psi(t)|\psi(t)\rangle \\
 &= \langle \psi(t_0)| \underbrace{U^+(t, t_0)U(t, t_0)}_{\substack{\rightarrow U^+(t, t_0) = \\ U^{-1}(t, t_0) \\ \text{unitäre Opera-} \\ \text{tion}}} |\psi(t_0)\rangle \\
 &\stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{U}(t_0, t)\hat{U}(t, t_0) &= \hat{1} \\
 \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) &= \hat{U}(t_3, t_0) \\
 \hat{U}(t, t) &= 1
 \end{aligned}$$

Zeittransformation, eine Eigenschaft des physikalischen Zustandes !

explizite Konstruktion: $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(\underbrace{-\frac{i}{\hbar}}_{\text{Konventionen}} \cdot \overbrace{(t-t_0)}^{\text{lin. Ansatz}} \cdot \underbrace{\hat{H}}_{\text{noch unbekannter Operator}} \right)$

$$U(t, t) = e^0 = 1$$

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

statt nach \hat{U} , suche nach \hat{H}

$$U^+ \stackrel{!}{=} U^{-1} \quad (e^{\hat{A}})^+ = e^{\hat{A}^+}$$

$$e^{(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H})^+} = e^{(+\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H})}$$

$$= e^{+\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}^+} \stackrel{!}{\rightarrow} \hat{H}^+ = \hat{H}$$

Das gesuchte \hat{H} ist jedenfalls hermitesch, es ist also zu zeigen, daß ein physikalischer Apparat existiert, der \hat{H} mißt.

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}\hat{A} + \dots \quad (\text{Taylor})$$

$$\begin{aligned}
 \hat{U}(t, t_0) &= \hat{U}(t_0, t_0) + \partial_t \hat{U}(t, t_0)(t-t_0) \\
 &+ \frac{1}{2!} \partial_{tt} \hat{U}(t, t_0)(t-t_0)^2 + \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \hat{1} + \partial_t U(t, t_0)(t - t_0) + \dots \\
&= \hat{1} + (t - t_0) \cdot \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\right)}_1 \cdot \hat{U}(t, t_0) \\
&= \hat{H} + (t - t_0) \cdot \hat{H} + \dots \text{ für kleine } (t - t_0) = \delta t \\
\hat{U}(t + \delta t, t) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \delta t \cdot \hat{H} \quad \delta t \text{ klein !} \\
|\psi(t + \delta t)\rangle &= U(t + \delta t, t)|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}\right)|\psi(t)\rangle \\
\frac{|\psi(t + \delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\delta t} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H}|\psi(t)\rangle \\
i\hbar \cdot \partial_t |\psi(t)\rangle &= \hat{H}|\psi(t)\rangle
\end{aligned}$$

\hat{H} ist die Erzeugende einer Zeittransformation

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \partial_x \quad \hat{E} = i\hbar \partial_t$$

Analogien zur Suche nach Bedeutung von \hat{H} :

- klassische Mechanik:
z. B.: Ortstranslation: $x \rightarrow x + a$ (Verschiebung)

$$\begin{aligned}
\hat{U}(a) &= e^{a \partial_x} \\
\hat{U}(a)x &= \left(1 + a \cdot \partial_x + \frac{a^2}{2} \partial_{xx} + \dots\right) \cdot x \\
&= x + a + \dots
\end{aligned}$$

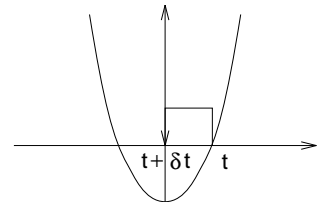
∂_x ist nicht hermitesch, aber $\frac{1}{i} \partial_x$ ist hermitesch

$$U = e^{ia(\frac{1}{i} \partial_x)} \quad \varphi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{1}{i} \partial_x \varphi = k \varphi(x, t) \quad \varphi \text{ ist Eigenzustand zu } \frac{1}{i} \partial_x$$

$$-\frac{1}{i} \partial_t \varphi = \omega \varphi \quad \varphi \text{ ist Eigenzustand zu } \frac{1}{i} \partial_t$$

$$\begin{aligned}
p \hat{=} \hbar k \text{ Impuls} & \quad E = \hbar \omega \text{ Energie} \\
p \rightarrow \hat{P}; \quad E \rightarrow \hat{E}
\end{aligned}$$



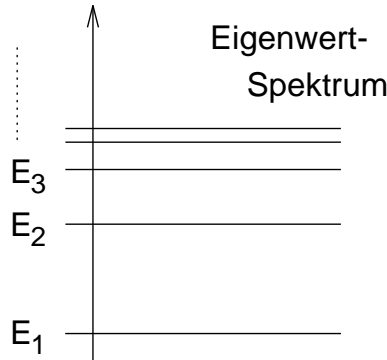


Abbildung 10: Das Eigenwert-Spektrum

4.1 Dynamische Gleichung

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

mit \hat{H} Hamilton-Operator (dynamischer Operator)

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad \varphi_n \text{ Eigenzustände, } n = 1, 2, \dots, d$$

$$\langle\varphi_n|\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle$$

falls $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$, dann

$$\langle\varphi_n|\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n, \text{ reell}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}|\varphi_n(t)\rangle &= i\hbar\partial_t|\varphi_n(t)\rangle & U &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\cdot\hat{H}} \\ \hat{H}\hat{U}(t,t_0)|\varphi_n(t_0)\rangle &= i\hbar\partial_t U(t,t_0)|\varphi_n(t_0)\rangle \\ &= i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}\right)|\varphi_n(t_0)\rangle \\ &= \hat{H}\hat{U}|\varphi_n(t_0)\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{U}(\hat{H})\hat{H} = \hat{H}\hat{U}(\hat{H})$$

$$\hat{U} \left| \hat{H}|\varphi_n(t_0)\rangle = \hat{H}|\varphi_n(t_0)\rangle \right.$$

$$\boxed{\hat{H}|\varphi_n(t_0)\rangle = E_n|\varphi_n(t_0)\rangle}$$

Eigenwertgleichung

$$|\psi\rangle = \sum_n^d |\varphi_n(t_0)\rangle \langle\varphi_n(t_0)|\psi\rangle$$

Meßwert von \hat{H} bezüglich beliebiger $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle} = \langle\psi(t_0)| \underbrace{U^+ H U}_{U^+ U = 1} |\psi(t_0)\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \psi(t_0) | \hat{H} | \psi(t_0) \rangle = \sum_{nm} \langle \psi(t_0) | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \psi(t_0) \rangle \\
&= \sum_{nm} H_{nm} \cdot \psi^*(n) \psi(m) \quad \psi(m) := \langle \varphi_m | \psi \rangle
\end{aligned}$$

wenn $|\varphi_n\rangle$ Eigenzustände zu \hat{H} :

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{nm} \psi^*(n) \cdot E_m \cdot \delta_{nm} \cdot \psi(m) \\
&= \sum_n E_n |\psi(n)|^2 = \bar{E} \quad \text{Erwartungswert der Energie}
\end{aligned}$$

nur bei Eigenbasis: $\bar{E} = \sum_n E_n |\psi(n)|^2$

ein Teilchen: $\hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$ kinetische & potentielle Energie

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \partial_x \text{ als Basis } |x_i\rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{nm} H_{nm} \psi^*(x_n) \psi(x_m) \\
&= \sum_{nm} \langle x_m | (-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} + \hat{V}) | x_m \rangle \psi_n^* \psi_m
\end{aligned}$$

5 Schrödinger - Gleichung

Vorlesung vom 06.11.95

$$i\hbar \partial_t | \psi \rangle = \hat{H} | \psi \rangle$$

\hat{H} : Energie-Operator

$$\hat{H} | \psi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle$$

$$1 := \sum_n | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n |$$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \psi \rangle = \sum_{n,m} \psi^*(n) H_{n,m} \psi(m)$$

Einsetzen:

$$\sum_{n,m} \psi^*(n) E_n \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle \psi(m)$$

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$$

falls

$$\{ | \varphi_n \rangle \}_{n=1 \dots d} : \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad 1 = \sum_n | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n |$$

$$\underbrace{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}_{\text{Erwartungswert von } \hat{H} \text{ in } |\psi\rangle} = \sum_n E_n \cdot \underbrace{\langle \psi(n) |^2}_{\substack{\text{Wahrscheinlichkeit, da\ss } |\psi\rangle \text{ in } |\varphi_n\rangle \text{ vorliegt} \\ \text{Mittelwert}}}$$

Erwartungswert
der Energie

$$\hat{H} | \varphi(t) \rangle = E_n | \varphi_n(t) \rangle$$

$$| \varphi_n(t) \rangle = U(t, t_0) | \varphi_n(t_0) \rangle = e^{(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n)} | \varphi_n(t_0) \rangle$$

Denn:

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

$$f(\hat{H}) | \varphi_n \rangle = f(E_n) | \varphi_n \rangle, \text{ weil } \hat{H} \hat{H} | \varphi_n \rangle = E_n^2 | \varphi_n \rangle, \dots$$

Jeder beliebige Zustand:

$$| \psi \rangle = \sum_n \psi(n) | \varphi_n \rangle \quad \text{mit } \psi(n) := \langle \varphi_n | \psi \rangle \quad \forall_n$$

$$\langle \varphi_n(t) | \varphi_n(t) \rangle = \langle \varphi_n(t_0) | \underbrace{U^\dagger U}_1 | \varphi_n(t_0) \rangle$$

$\Rightarrow \langle \varphi_n(t) | \varphi_n(t) \rangle$ zeitunabhängig

$$\langle \varphi_n | i\hbar \partial_t | \psi \rangle = \langle \varphi_n | \hat{H} | \psi \rangle \simeq i\hbar \partial_t \psi(n) = \sum_m H(n, m) \psi(m)$$

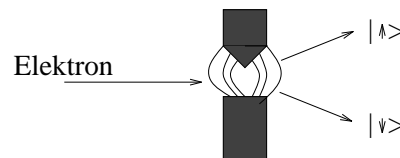
Für jede beliebige Basis $\{ | \varphi_n \rangle \}_{n=1,2,\dots,d}$

5.1 Beispiele

5.1.1 Beispiel 1

\mathcal{H} mit $\dim=2$. Experimentelles Phänomen (Stern-Gerlach-Versuch):

Vollständige Basis: $\{ | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \}$



$$\{ | i \rangle \}_{i=1,2}; \quad | 1 \rangle = | \uparrow \rangle; \quad | 2 \rangle = | \downarrow \rangle$$

Diese Aufspaltungen im inhomogenen Magnetfeld zeigen *alle* punktförmigen (echt elementaren) Teilchen, zum Beispiel Elektronen, Quarks, Muonen, Tauonen, ...

$$\text{Spin; } | \psi \rangle = \psi_1 | 1 \rangle + \psi_2 | 2 \rangle$$

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad \sum_{i=1}^2 |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$$

\hat{A} in \mathcal{H}_2 :

$$\langle i | \hat{A} | j \rangle = A_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \text{2x2-Matrix}$$

Jede noch so allgemeine Apparatur läßt sich mit vier Zahlen beschreiben !
Gesucht: Besonders zweckmäßige vier Matrizen als 'Basis' zur Formulierung der Matrix:

$$A_{ij} = a_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + a_1 \underline{\underline{\sigma}}_1 + a_2 \underline{\underline{\sigma}}_2 + a_3 \underline{\underline{\sigma}}_3. \quad \underline{\underline{\sigma}}_1, \underline{\underline{\sigma}}_2, \underline{\underline{\sigma}}_3 \text{ linear unabhängig}$$

\Rightarrow unendlich viele Möglichkeiten.

Die Pauli-Matrizen sind eine besonders einfache Möglichkeit: Die Spur der $\underline{\underline{\sigma}}_i$ sei jeweils Null.

$$\underline{\underline{\sigma}}_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{\sigma}}_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{\sigma}}_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_i^2 = \mathbb{1} \quad \text{"Norm"}$$

$|\psi\rangle$:

$$\langle 1 | \psi \rangle = \psi(1) = \psi_1$$

$$\langle 2 | \psi \rangle = \psi(2) = \psi_2$$

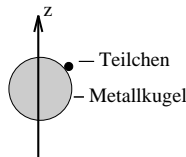
$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} : \underline{\underline{\sigma}}_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{direkt polarisiert}$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_1 |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\underline{\underline{\sigma}}_1$ entspricht einem Apparat, der in drei Richtungen den Spin umkehrt, d.h. den Zustand $|1\rangle$ in den Zustand $|2\rangle$ überführt.

5.1.2 Beispiel 2

$|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ "koppeln" mit räumlichen Drehungen

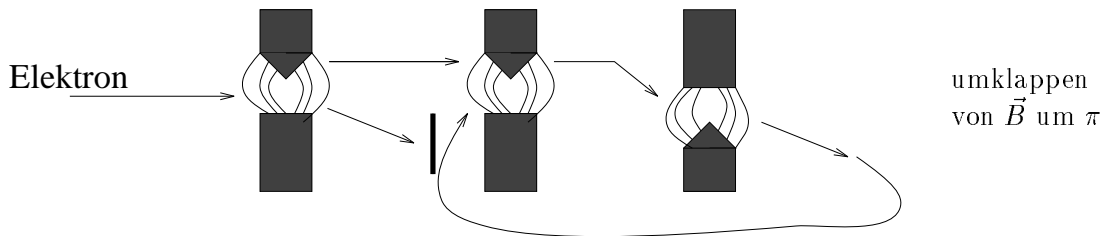


Wir drehen eine Metallkugel, auf der sich ein punktförmiges Teilchen befindet, das mit $|1\rangle$ präpariert ist.

Drehimpuls: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, $L_{i,j} = r_i p_j - r_j p_i$

Wende $\underline{\sigma}_1$ an : $\rightarrow |1\rangle \rightarrow |2\rangle$

Realisierung durch Richardson, de Haas, Einstein: $\underline{\sigma}_1$ - Realisator



Die Rotation des Systems beginnt beim Umklappen des Magnetfeldes. Klappt man den Spin um, so bewirkt das einen räumlichen Drehimpuls des Wirtes.

\rightarrow "Kopplung von Spin und Drehimpuls"

$$\underbrace{\vec{J}}_{\text{Gesamtdrehimpuls}} = \underbrace{\vec{S}}_{\text{Spin}} + \underbrace{\vec{L}}_{\text{Drehimpuls des Wirtes}}$$

Räumlich: Senkrecht stehende räumliche Vektoren um $\frac{\pi}{2}$ drehen

Spin: Senkrecht stehende Spinvektoren im Spinraum um π "räumlich" drehen

Der \mathcal{H}_2 hat die Eigenschaft, daß er nach 4π in sich über geht. Der Spin ist

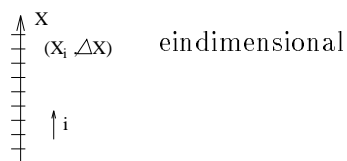
kein "Eigendrehimpuls".

$U = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\hat{l} + \hat{s})\right)$ Drehungen eines ausgedehnten Objekts.

Hier bricht das Beispiel ab, weil die Behandlung des Drehimpulses zu aufwendig werden würde. Fortsetzung: Siehe Drehimpuls

5.1.3 Beispiel 3

Der Ort eines Teilchens



$$|x_i, \Delta x\rangle =: |x_i\rangle$$

$$\{|x_i\rangle\} \langle x_i | \psi \rangle = \psi(x_i) = \psi_{x_i} = \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \vdots \\ \psi(x_d) \end{pmatrix} \quad i=1,2,\dots,d$$

d ist abzählbar unendlich

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d \psi(x_i) |x_i\rangle$$

$$\langle x_i | \hat{A} | x_j \rangle = A(x_i, x_j) = d \times d - \text{Matrix}$$

$$\sum_{i=1}^d |x_i\rangle\langle x_i| = 1 \quad \langle x_i | x_j \rangle = \delta_{i,j}$$

$$\underbrace{\hat{X}}_{\text{Operator}} \underbrace{|x_i\rangle}_{\text{Zustand}} = \underbrace{x_i}_{\text{Koordinatenwert}} |x_i\rangle$$

$$f(\hat{X}) |x_i\rangle = f(x_i) |x_i\rangle$$

$$\delta x \rightarrow 0 : |x\rangle := \left(\frac{1}{\sqrt{\delta x}} |x, \Delta x\rangle \right)$$

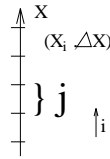
$$\langle x | \psi \rangle =: \underbrace{\psi(x)}_{\text{rell}} \quad \text{Wahrscheinlichkeitsamplitudendichte}$$

$$\langle x | \hat{A} | x' \rangle = A(x, x') \quad \text{Distribution von zwei Variablen}$$

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = \sum_{i=1}^d H(x, x') \psi(x') = \int dx' H(x, x') \psi(x') \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{i,j}$$

$$\langle x | x' \rangle = \frac{1}{\Delta x} \lim \langle x_i | x_j \rangle$$



Im Limes $\Delta x \rightarrow 0$: Zwei Eigenschaften:

1) Die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen an irgendeinem Ort x zu finden ist, geht gegen Null $\langle x | x' \rangle \rightarrow 0$

2) $\int dx \langle x | x' \rangle = 1$

$\langle x | x' \rangle$ ist nur durch seine Eigenschaften erklärbar

$= \delta(x' - x)$ **Dirac-Distribution.**

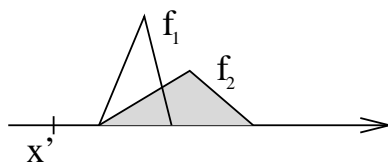
5.1.4 Eigenschaften der δ - Distribution

$\delta(x' - x)$:

1) $\delta \equiv 0 \quad \forall x$

2) $\int dx \delta(x' - x) = 1$

Zum Rechnen setzt man in jede Formel *eine* Folge ein, die aus geeigneten Funktionen besteht:



$$\int dx f_1(x) = 1$$

$\forall \text{WieWas}$

$$\int dx f_1(x') = 1$$

$\forall \text{WieWas}$

...

5.2 Wiederholung

08.11.95

Spin:



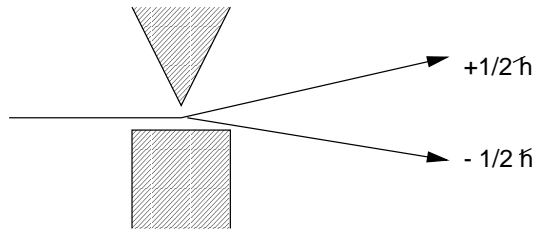
Erst nach π -Drehung

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

$$\hat{U} = e^{-\frac{i\hat{l}\cdot\hat{s}}{\hbar}}$$

$$\sqrt{s^2} = \frac{1}{2}\hbar$$

Die Differenz zwischen \uparrow und \downarrow beträgt $1 \cdot \hbar$. Deshalb wird vermutet, daß sich



der Drehimpuls um mindestens \hbar ändert.

6 Darstellung algebraischer Objekte

Zahl: $a = \lambda e_0$

e_0 : Basiszahl
 λ : Koeffizient

Vektor: $\vec{a} = \underbrace{\lambda_1 \vec{e}_1 + \lambda_2 \vec{e}_2 + \dots}_{d - \text{Summanden}}$

mit Basis $\vec{e}_i \vec{e}_j = \delta_{ij}$

Tensor: $\underline{\underline{a}} = \underbrace{\lambda_0 \underline{\underline{e}}_0 + \lambda_1 \underline{\underline{e}}_1 + \dots}_{d^2 - \text{Summanden}}$

$$\sum_i |\vec{e}_i\rangle \langle \vec{e}_i| = 1 \quad \lambda_i = \langle \vec{e}_i | \vec{a} \rangle$$

Damit können wir die Pauli-Matrizen in zwei Dimensionen zum Beispiel so schreiben:

$$\underline{\underline{1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\sigma}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\sigma}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\sigma}}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Konsequenz:

\hat{A} : Basis in $\mathcal{H} := \{|e_i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d}$
 $\langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle = A_{ij}$ = Tensor zweiter Stufe

$$A_{ij} = \sum_{\mu=1}^{d^2} \lambda_{\mu} (b_{\mu})_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots, d$$

7 Ort und Impuls

Klassisch (x) \longrightarrow Quantenmechanisch (Ortsoperator \hat{X})

$$\underbrace{\hat{X}}_{\text{Ortsoperator}} \underbrace{|x\rangle}_{\text{Zustand am Ort } x} = \underbrace{x}_{\text{Koordinatenzahl}} |x\rangle$$

$$(x|\psi\rangle = \psi(x, t)$$

Komplexe Wellenfunktion

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int dx \langle \psi | x \rangle (x | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \psi(x, t)$$

$$\int dx |\psi(x, t)|^2 = 1$$

Gewißheit

$$|x\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} |x_i, \Delta x\rangle \frac{1}{\Delta x}$$

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\sum_i |x_i\rangle \langle x_i| = 1$$

$$(x|x') = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \langle x_i | x_j \rangle$$

$$\sum_{n=1}^d \langle x_n | x_j \rangle = \sum_{n=1}^d \delta_{nj} = 1$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \delta_{ij} \longrightarrow$$

$$\implies \int dx (x|x') = 1, \quad \int dx |x\rangle \langle x'| = 1, \quad (x|x') = 0, \forall x, x'$$

$(x|x')$ ist durch seine Eigenschaften definiert und entspricht der Dirac-Distribution $\delta(x - x')$.

$$(x|\psi\rangle = \psi(x) \quad (x|\hat{A}|x') = a(x, x')$$

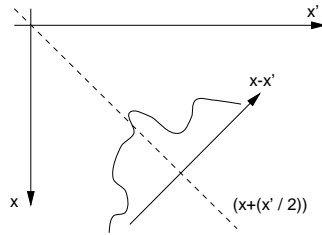
Weiterhin:

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

$$i\hbar \partial_t \psi(x) = \int dx' (x|\hat{H}|x') (x'|\psi\rangle$$

$$i\hbar \dot{\psi}(x) = \int dx' H(x, x') \psi(x')$$

Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung



Beispiel: Ein nichtrelativistisches mechanisches Teilchen.

Klassisch Quantenmechanisch

$$x(t) \quad \hat{x} \quad i\hbar\psi = \int dx' \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx} + V(x, x') \right) \psi(x')$$

$$p(t) \quad \hat{p} \quad (x|\frac{\hat{p}^2}{2m}|x') = ?$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$$

Impulszustände:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\partial_x$$

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

$$\int dp |p\rangle \langle p| = 1$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

Daraus folgt:

$$\int dp \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle = 1$$

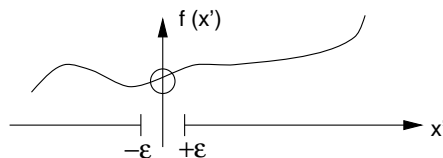
$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x, t) = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp \psi(p, t) \langle x|p\rangle$$

$$\langle x|x'\rangle = \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}$$

Hier wurde die Distribution mit Hilfe eines nicht berechenbaren Integrals über eine Funktion dargestellt. Integraldarstellung:

$$\int dx f(x) \delta(x - x') = f(x')$$

$$\int_{+\varepsilon}^{+\infty} dx \delta(x - x') = 0, \quad \int_{-\varepsilon}^{-\infty} dx \delta(x - x') = 0, \quad \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \delta(x - x') = 1$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f'(x) \delta(x-x') \stackrel{\text{Kettenregel}}{=} [\delta(x-x') f(x)]_{\pm\infty} - \int dx f(x) \underbrace{\partial_x \delta(x-x')}_{\text{Distribution}} = 0$$

Nun folgt die Darstellung mittels $|x\rangle, |p\rangle$:

\hat{x} :

$$\begin{aligned}\hat{x}|\psi\rangle &= \int dx \hat{x}|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int dx x|x\rangle \psi(x) \\ \hat{x}|\psi\rangle &= \int dx x|x\rangle \langle x|\psi\rangle \\ \hat{x} &= \int dx x|x\rangle \langle x| \\ \hat{x} &= \int dx |x\rangle x \langle x|\end{aligned}$$

Analog folgt für \hat{p} :

$$\hat{p} = \int dp |p\rangle p \langle p|$$

Ergebnis-Darstellung:

$$\begin{aligned}\langle x'|\hat{x}|x''\rangle &=: X(x', x'') = \langle x'|\int dx |x\rangle x \langle x|x''\rangle \\ &= \int dx x \langle x'|x\rangle \langle x|x''\rangle = \int dx x \delta(x-x') \delta(x-x'') \\ &= x' \delta(x'-x'') \\ \langle x'|\hat{x}|x''\rangle &= x' \delta(x'-x'') \\ \langle p'|\hat{p}|p''\rangle &= p'' \delta(p''-p')\end{aligned}$$

Aber was ist $\langle x'|\hat{x}|x''\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x'|\hat{x}|x''\rangle &= \int dp \langle x|\hat{p}|p\rangle \langle p|x'\rangle \\ &= \int dp p \langle x|p\rangle \langle p|x' = \int dp p e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} \\ &= \frac{\hbar}{i} \partial_x \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} = \hat{p} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} \\ \implies \langle x|\hat{p}|x'\rangle &= \frac{\hbar}{i} \partial_x \delta(x-x') \\ \langle p'|\hat{x}|p''\rangle &= \frac{\hbar}{i} \partial_p \delta(p-p') \\ \hat{p}|\psi\rangle &= \int dp \hat{p}|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp p|p\rangle \psi(p)\end{aligned}$$

Multiplikation mit $\langle p'|$ von links liefert:

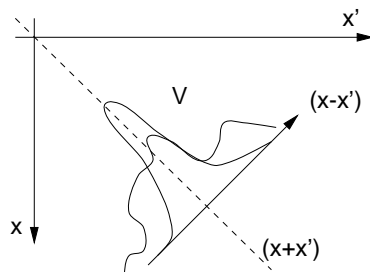
$$\begin{aligned}\langle p'|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dp p \underbrace{\langle p'|p\rangle}_{\delta(p'-p)} \psi(p) \\ \langle p'|\hat{p}|\psi\rangle &= p' \psi(p') \\ i\hbar \partial_t |\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Mit $\langle x|$ multiplizieren ergibt:

$$\begin{aligned}
 i\hbar\dot{\psi} &= \langle x| \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right) |\psi\rangle \\
 &= \int dp \langle x| \frac{\hat{p}^2}{2m} |p\rangle \langle p|\psi\rangle + \int dx' \langle x|\hat{V}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' \\
 &\quad \int dp \frac{p^2}{2m} e^{ipx/\hbar} \psi(p) + \int dx' V(x, x') \psi(x')
 \end{aligned}$$

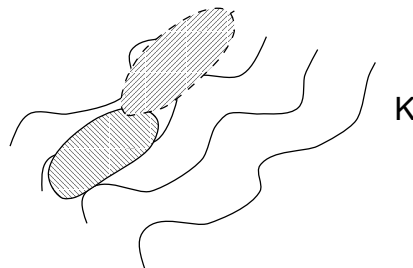
Einfachster Fall:

$$\begin{aligned}
 V(x, x') &= V(x)\delta(x - x') \\
 \int dx' V(x, x') \psi(x') &\implies V(x)\psi(x)
 \end{aligned}$$



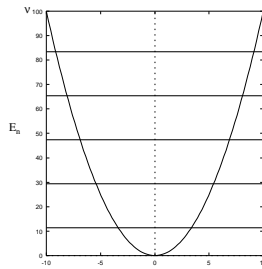
$$i\hbar\dot{\psi}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\psi(x) + \int dx' V(x, x')\psi(x')$$

Über alle Orte des Wellenpaketes wird zur selben Zeit mitintegriert. \implies Kraft auf das Wellenpaket. $\psi(x, t)$ enthält die gesamte Information.



8 Einfache Systeme

13.11.96



8.1 Harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Lösung der klassischen Bewegungsgleichung $\ddot{x} = -\omega^2 x$

Triviale Lösung: $x(t) = x_0 \sin(\omega t)$

Wie sehen die Eigenzustände $|n\rangle$ und die Eigenwerte E_n aus?

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

\hat{p} und \hat{x} sind hermitesche Operatoren!

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad \text{Vernichter}$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad \text{Erzeuger}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2\hbar} (-i[\hat{x}, \hat{p}] + i[\hat{p}, \hat{x}]) = \underline{\underline{1}}$$

Einführung des "Nummer-Operators": $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left(\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} \right) + \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 - \frac{1}{2} \right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

Was wir zeigen wollen

$$\hat{N}|n\rangle = E_n|n\rangle = n|n\rangle$$

"Hilfsrechnungen":

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^+, \hat{a}] \hat{a} = 0 - \hat{a}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^+] = [\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}^+] + [\hat{a}^+, \hat{a}^+] \hat{a} = \hat{a}^+$$

$$\hat{N} \hat{a}^+ |n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^+] + \hat{a}^+ \hat{N}) |n\rangle = \hat{a}^+ |n\rangle + E_n \hat{a}^+ |n\rangle = E_{n+1} (\hat{a}^+ |n\rangle)$$

$$\hat{N} (\hat{a} |n\rangle) = ([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a} \hat{N}) |n\rangle = E_{n-1} (\hat{a} |n\rangle)$$

$\Rightarrow (\hat{a}^+ |n\rangle)$ und $(\hat{a} |n\rangle)$ sind ebenfalls Eigenzustände des Operators \hat{N} mit den Eigenwerten E_{n+1} und E_{n-1} . Das heißt: $\hat{a} |n\rangle = c_{n-1} |n-1\rangle$. c kann über die Bedingung $\langle n | n \rangle = \langle n+1 | n+1 \rangle = 1$, $\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}$ bestimmt werden.

$|0\rangle$:

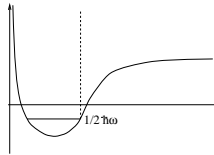
Die Norm des Eigenzustandes muß positiv sein: $|c|^2 > 0$.

Nun gilt:

$$\langle n | \hat{a}^{+k} \hat{N} \hat{a}^k | n \rangle = \left(\prod_{i=1}^k |c_{n-i}|^2 \right) \langle n-k | E_n - k | n-k \rangle \Rightarrow E_n = n$$

Grund: Wäre $E_n \neq n$, gäbe es unendlich viele und nach unten unbegrenzte Eigenzustände.

Wir haben also: $\hat{H} | n \rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) | n \rangle$



Nun sollen die c 's berechnet werden:

$$\hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle$$

$$\hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \quad (\text{siehe Übungsblatt 6})$$

Explizite Form der Eigenzustände: $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$

Wir wissen:

$$|1\rangle = \hat{a}^+ |0\rangle$$

$$|2\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{2}} |1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2}} |0\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad \psi(x)$$

Wegen $\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}$ gilt $\langle n' | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}$

$$\langle n' | \hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}$$

Außerdem gilt:

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{2m}} (2x) = \hat{x}$$

$$i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\hat{a} + \hat{a}^+) = \hat{p}$$

$$\Rightarrow \langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n-1})$$

$$\langle n' | \hat{p} | n \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1})$$

\hat{x}, \hat{p} sind *nicht* diagonal in der Darstellung mit Eigenzuständen von \hat{H} beziehungsweise \hat{N}

Nun gilt: $\hat{a} | 0 \rangle = 0$

In Ortsdarstellung:

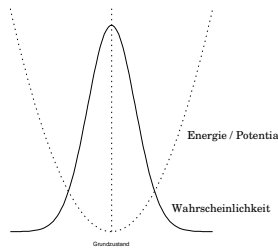
$$\langle x' | \hat{a} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x' | \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{m\omega} | 0 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow (x' + x_0^2 \frac{d}{dx'}) \underbrace{\langle x'|0 \rangle}_{\psi_0(x')} = 0$$

$$\left(x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)$$

$$\langle x'|0 \rangle = \psi_0(x') = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2}$$

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$$



Für die angeregten Zustände:

$$\langle a'|1 \rangle = \langle x' \hat{a}^+ | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2} x_0} \right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x'|0 \rangle$$

⋮

$$\langle x'|n \rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!} x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2}$$

$$\hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\left(-\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

$$\int \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) dx = \delta_{n,n'}$$

Die Eigenzustände lassen sich mit Hilfe von Hermite-Polynomen schreiben:

$$\zeta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \psi_n(x) = (2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} H_n(\zeta)$$

$$H_n(\zeta) = (-1)^n e^{-\zeta^2} \frac{\partial^n}{\partial \zeta^n} e^{-\zeta^2} \text{ Hermite-Polynom}$$

Die Hermite-Polynome sind orthogonale Polynome.

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\zeta) e^{-\zeta^2} d\zeta = \pi^{\frac{1}{4}} 2^n n! \delta_{n,n'}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} H_n - 2\zeta \frac{\partial H_n}{\partial \zeta} + 2n H_n = 0$$

$$\begin{aligned} H_0(\zeta) &= 1 \\ H_1(\zeta) &= 2\zeta \\ H_2(\zeta) &= 4\zeta^2 - 2 \\ H_3(\zeta) &= 8\zeta^3 - 12\zeta \\ H_4(\zeta) &= 16\zeta^4 - 4\zeta^2 + 12 \end{aligned}$$

Bemerkung: Die Eigenwerte nicht hermitescher Operatoren \hat{a} und \hat{a}^+ sind komplex. Die Eigenzustände werden als kohärente Zustände bezeichnet.
 $\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

8.2 Wiederholung des harmonischen Oszillators

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \int dx' H(x,x')\psi(x',t) \quad \text{Ortsdarstellung}$$

Zum Beispiel speziell für ein Teilchen:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x, x')$$

$$p = \frac{\hbar}{i}\partial_x \quad \text{einsetzen:}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}$$

speziell:

$$V(x, x') = \delta(x - x')V(x)$$

Dann folgt:

$$i\hbar\dot{\psi}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

Harmonischer Oszillator:

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

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

Eigenwertgleichung:

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

$$\psi_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} h_n(q) e^{-\frac{q^2}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

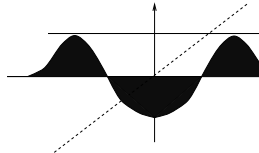
$$q := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$h_n : h_0 = 1; \quad h_1 = 2q; \quad h_2 = 4q^2 - 2 \dots$$

$|\psi_n|^2 =$ zeitunabhängig - stationärer Zustand

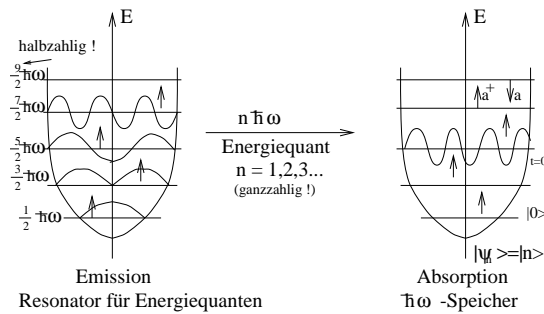
$$\int_{-\infty}^{\infty} h_i h_j e^{-q^2} dq = \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$$

prüfen:



$i, j = 0, 1$ oder $i, j = 0, 2$: Schraffierte Flächen heben sich auf \Rightarrow unabhängige Basiszustände stehen senkrecht aufeinander.

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \text{ Ruheenergie}$$



Realisierungen:

- Elektrisch geladenes Teilchen \rightarrow Photon
- Stern \rightarrow Graviton
- Quark \rightarrow Gluon
- Quark mit Flavour \rightarrow Bosonen

Teilchen: $|\psi_n\rangle \hat{=} |n\rangle$

$$|n\rangle = \underbrace{\hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a}^+}_n \underbrace{|0\rangle}_{\text{Grundzustand}}$$

Strahlungsfeld:

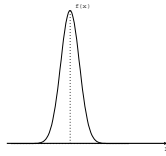
$$|s\rangle = |n\rangle$$

$$|n\rangle = \underbrace{\hat{b}^+ \hat{b}^+ \hat{b}^+}_n \underbrace{|0\rangle}_{\text{"Vakuum"}}$$

Zeitabhängige, beobachtbare Zustände bekommt man nur, wenn man mehrere Zustände überlagert:

$$\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle = |\psi\rangle$$

$$\begin{aligned}
|\psi|^2 &= |\lambda|^2 \langle \psi_1 | \psi_n \rangle \dots \\
&= |\lambda_1|^2 |h_1|^2 + |\lambda_2|^2 |h_2|^2 \\
&\quad + \underbrace{\lambda_1^* \lambda_2 h_1 h_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} + \lambda_1 \lambda_2^* h_1 h_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t}}_{= f(x) \cos\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right)} \\
\tau &= \frac{2\pi \hbar}{E_1 - E_2}
\end{aligned}$$



9 Zusammenhang zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik

$$\hat{x}, |\psi\rangle \longleftrightarrow x(t)$$

Erwartungswert bilden:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle &= \int dx \langle \psi | \hat{x} \rangle (x | \psi \rangle \\
&= \int dx x |\psi(x, t)|^2 = \bar{x} = \bar{x} = \text{Mittelwert, Erwartungswert, Zahl}
\end{aligned}$$

Basis des Ortsoperators: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$

Dieses Schema ist völlig unempfindlich gegen höhere Potenzen.

$$\langle \psi | \hat{x}^\nu | \psi \rangle = \int dx x^\nu |\psi(x)|^2$$

Wenn 1 nicht die Eigenbasis ist:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle &= \int dp \langle \psi | \int dp' | \underbrace{p}_{\text{Impulsbasis}} \rangle \langle p | \hat{x} | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \\
&= \int dp \int dp' \psi^*(p) \psi(p') X(p, p')
\end{aligned}$$

$$\bar{p} = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int dx \int dx' \psi^*(x) P(x, x') \psi(x')$$

$$P(x, x') = \langle x | \hat{p} | x' \rangle = \int dp \langle x | \hat{p} | p \rangle \langle p | x' \rangle$$

$$= \int dp p e^{ip(x-x')/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \partial_x \delta(x-x')$$

Also folgt:

$$\begin{aligned} \overline{\hat{p}} &= \int dx \int dx' \psi^*(x) \partial_x \delta(x-x') \psi(x') \\ &= \int dx \int dx' \delta(x-x') \psi^*(x) \psi'(x') \end{aligned}$$

Die Ortsableitung wurde auf das gesamte Integral umgewälzt.

$$\hat{p} := \frac{\hbar}{i} \partial_x$$

$$\begin{aligned} \overline{\hat{H}} &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} | \psi \rangle \\ &= \int dx \int dx' \psi^*(x) H(x, x') \psi(x) \end{aligned}$$

$$H(x, x') = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta(x-x') \partial_{xx} + V(x, x') \quad \text{und falls lokales Potential: } V(x, x') = V(x) \delta(x-x')$$

$$\overline{\hat{H}} = \int dx \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} + V(x) \right) \psi(x)$$

$$\overline{\hat{x}} := \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle \quad \longrightarrow \quad x(t)$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\hat{x}} := \langle \dot{\psi} | \hat{x} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{x} | \dot{\psi} \rangle \quad \longrightarrow \quad \dot{x}(t) = v(t)$$

Der Operator \hat{x} ist explizit zeitunabhängig

Wir wissen:

$$\begin{aligned} i\hbar |\dot{\psi}\rangle &= \hat{H} |\psi\rangle \\ -i\hbar \langle \dot{\psi} | &= \langle \psi | \hat{H}^\dagger = \langle \psi | \hat{H} \\ \rightarrow \frac{d}{dt} \overline{\hat{x}} &= \frac{i}{\hbar} \overline{(\hat{H} \hat{x} - \hat{x} \hat{H})} = \frac{i}{\hbar} \overline{[\hat{H}, \hat{x}]} \\ \frac{d}{dt} \overline{\hat{A}} &= \frac{i}{\hbar} \overline{[\hat{H}, \hat{A}]} + \overline{\partial_t \hat{A}} \end{aligned}$$

explizite Zeitabhängigkeit im letzten Term

$$\begin{aligned} \overline{[\hat{H}, \hat{x}]} &= \overline{\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \hat{x} - \hat{x} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right)} \\ &= \frac{1}{2m} \overline{(\hat{p} \hat{p} \hat{x} - \hat{x} \hat{p} \hat{p})} \\ &= \frac{1}{2m} \overline{(\hat{p} [\hat{p}, \hat{x}] + \hat{p} \hat{x} \hat{p} - [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p} - \hat{p} \hat{x} \hat{p})} \end{aligned}$$

Was ist $[\hat{p}, \hat{x}]$?

$$\begin{aligned}
 \overline{[\hat{p}, \hat{x}]} &= \langle \psi | \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} | \psi \rangle \\
 &= \int dx \int dx' \psi^*(x) (x \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} x') \psi(x') \\
 \langle \psi | \hat{p}\hat{x} | \psi \rangle &= \int dx \int dx' \psi^*(x) (x | \frac{\hbar}{i} \partial_x \hat{x} | x') \psi(x) \\
 \overline{[\hat{p}, \hat{x}]} &= \frac{\hbar}{i} \\
 [\hat{H}, \hat{x}] &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \hat{p} - \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \hat{p} \right) \\
 &= \frac{1}{2m} \hat{p} \frac{\hbar}{i} 2 = \frac{\hbar}{im} \hat{p} \\
 \frac{d}{dt} \hat{x} &= \frac{\hat{p}}{m} \\
 m \frac{d}{dt} \hat{x} = \hat{p} &\iff m\dot{x} = p
 \end{aligned}$$

10 Eichtransformationen

VL 20.11.95

klassisch: $m\ddot{x} = -\nabla V \rightarrow$ die Dynamik ändert sich nicht, wenn zu $V(x)$ ein konstantes Potential hinzuaddiert wird. Gilt das auch in der QM?

Es sei: $i\hbar\partial_t |\alpha, t, t_0\rangle = (\frac{P^2}{2m} + V(x)) |\alpha, t, t_0\rangle$

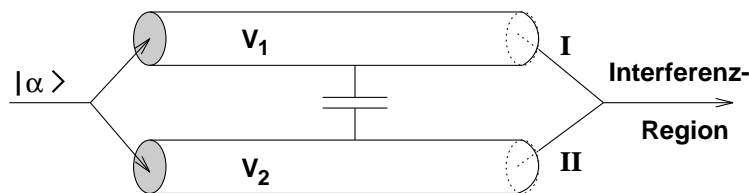
Man erhält für das Potential $\tilde{V} = V(x) + V_0$ in einfacher Weise den

ZustandsKET $|\alpha, t, t_0\rangle$, da $|\alpha, t, t_0\rangle = U(t, t_0) |\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{P^2}{2m} + V(x))} |\alpha\rangle$

denn es folgt: $|\alpha, t, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{P^2}{2m} + V(x) + V_0)} |\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)V_0} |\alpha, t, t_0\rangle$

$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle$ und $|\alpha, t, t_0\rangle$ unterscheiden sich nur durch einen Phasenfaktor. Die Berechnung von Erwartungswerten wie z. B. $\langle x(t) \rangle$ ändert sich nicht
 $E \rightarrow E + V_0$

Wir betrachten folgendes Experiment: V_1, V_2 sind unterschiedliche



Spannungen! In den Röhren wirken keine Kräfte auf die Elektronen.

$$I : |\alpha, t, t_0 \rangle \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \frac{V_1(t')}{\hbar}} |\alpha, t, t_0 \rangle$$

$$II : |\alpha, t, t_0 \rangle \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \frac{V_2(t')}{\hbar}} |\alpha, t, t_0 \rangle$$

$$\text{Phasendifferenz: } \Delta\Phi = \Phi_2 - \Phi_1 = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt [V_2(t) - V_1(t)]$$

Die Phasendifferenz kann man als Interferenz beobachten. Das obwohl keine klassischen Kräfte ausgeübt werden. Für $\hbar \rightarrow 0$ folgt, daß $\Delta\Phi$ unendlich schnell oszilliert (d. h. $\Delta\Phi$ wird Null).

11 Pfadintegral

Eine alternative Formulierung, die 1942 von R. P. Feynman entwickelt wurde.

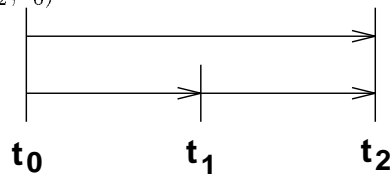
Dirac: Die Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude zwischen zwei lokalisierten Zuständen

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle$$

hängt "irgendwie" mit der klassischen Wirkung zusammen.

Erinnerung:

- Der Zeitentwicklungsoperator $U(t_2, t_1) = \exp(-\frac{i}{\hbar}(t_2 - t_1)\hat{H})$ ist unitär:
 $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$
- Der Zeitentwicklungsoperator läßt sich zerlegen
 $U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$



Wir zerlegen $U(t_b, t_a)$ in eine **große** Anzahl $N + 1$ von Faktoren mit infinitesimalen Zeitabschnitten:

$$\varepsilon = t_n - t_{n-1} = \frac{t_b - t_a}{(N + 1)}$$

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \langle x_b | U(t_b, t_N) U(t_N, t_{N-1}) \dots U(t_1, t_a) | x_a \rangle$$

Gitterung der Zeitachse

$$\text{Einfügen von 1'en:} \quad 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n|$$

$$\Rightarrow \langle x_b, t_n | x_a, t_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n=1}^N dx_n \right] \cdot \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$$

$$\text{mit } x_b = x_{N+1}, x_a = x_0, \quad t_b = t_{N+1}, t_a = t_0$$

$$\begin{aligned} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle &= \langle x_n | e^{-i\varepsilon \hat{H}(t_n)/\hbar} | x_{n-1} \rangle \\ &= \langle x_n | e^{-i\varepsilon(T+V)/\hbar} | x_{n-1} \rangle \end{aligned}$$

11.1 Die BAKER-CAMPBELL-HAUSDORFF-Formel

$$e^{-i\varepsilon(T+V)/\hbar} = e^{-i\varepsilon V/\hbar} e^{-i\varepsilon T/\hbar} e^{-i\varepsilon^2 X^2/\hbar^2} \quad (\text{BCH-Formel})$$

$$\Rightarrow \langle x_N | e^{-i\varepsilon H/\hbar} | x_{n-1} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_N | e^{-i\varepsilon V/\hbar} | x \rangle \langle x | e^{-i\varepsilon \frac{P^2}{2m}/\hbar} | x_{n-1} \rangle =$$

$$\left[\langle x | P \rangle = e^{iPx/\hbar} \quad e^{P^2} | P_n \rangle = e^{P_n^2} | P_n \rangle \right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\varepsilon V/\hbar} | x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} \langle x | e^{-i\varepsilon \frac{P_n^2}{2m}/\hbar} \rangle \langle P_n | x_{n-1} \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\varepsilon V/\hbar} | x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} \langle x | P_n \rangle e^{-i\varepsilon \frac{P_n^2}{2m}/\hbar} \langle P_n | x_{n-1} \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x_n | e^{-i\varepsilon V/\hbar} | x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} e^{-i\varepsilon \frac{P_n^2}{2m}/\hbar} \cdot e^{iP_n(x-x_{n-1})/\hbar}$$

$$\left[\langle x_n | e^{-i\varepsilon \hat{V}(x)/\hbar} | x \rangle = \delta(x_n - x) e^{-i\varepsilon \hat{V}(x)/\hbar} \right]$$

$$\langle x_n | e^{i\varepsilon H/\hbar} | x_{n-1} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} e^{iP_n(x-x_{n-1})/\hbar - i\varepsilon[T+V]/\hbar}$$

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n=1}^N dx_n \right] \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n=1}^{N+1} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} A_n}$$

$$A_n = \sum_{n=1}^{N+1} P_n(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon H(x_n, P_n, t_n)$$

$$N \rightarrow \infty \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

$$A[P, x] = \int_{t_a}^{t_b} dt [P(t) \dot{x}(t) - H(P, x, t)]$$

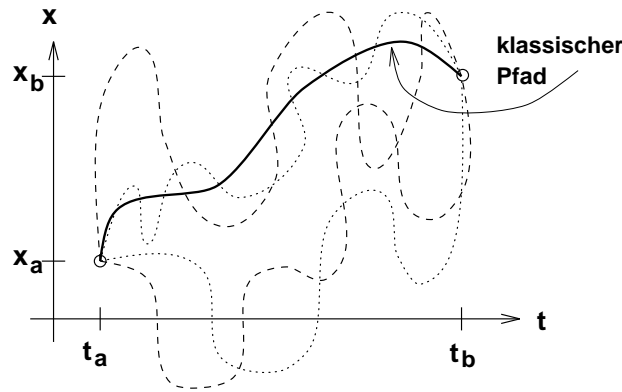


Abbildung 11: Die Wahrscheinlichkeit ist auf dem klassischen Pfad am größten

$A_n = 0 \Rightarrow e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}A_n} = 1$ Beitrag $A_N \neq 0 \Rightarrow$ Oszillation, kaum Beitrag wg. Auslöschung
üblicherweise verwendet man folgende Schreibweise:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n=1}^N dx_n \right] \left[\prod_{n=1}^{N+1} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} \right] = \int_{x_a, t_a}^{x_b, t_b} \mathcal{D}[x(t)] \int_{x_a, t_a}^{x_b, t_b} \mathcal{D}[P(t)]$$

Das Pfadintegral läßt sich noch vereinfachen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\frac{P_n}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\epsilon}{2m} (P_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon})^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon / m}} \text{ (Ü-Aufg.)}$$

$$\Rightarrow \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon / m}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n=1}^N \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon / m}} e^{-\frac{i}{\hbar} A^N} \right]$$

mit $A^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V \right)$ und $A = \int dt L(x, \dot{x}, t)$

$$\text{d. h. } \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int \mathcal{D}[x(t)] e^{-iA/\hbar}$$

$$\int \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \epsilon / m}}$$

Hinweis: In der Literatur auf verschiedene Darstellungen achten, für Phasenraum, ...

Der FEYNMAN-Formalismus bietet eine kompakte, anschauliche, aber leider kaum berechenbare Formulierung der Quantenmechanik!

$$\psi(x'', t'') = \int dx' \langle x'', t'' | x', t' \rangle \psi(x', t')$$

$$\langle x'', t'', \psi \rangle = \int dx' \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \langle x'' | U(t'', t') | \psi \rangle$$

mit Transformation $it \rightarrow \beta = \frac{1}{T}$ T Temperatur \Rightarrow Thermodynamik; t, T bilden imaginäre Ebene

In der statistischen Physik ist das Pfadintegral von großer Bedeutung!

12 Heisenberg-Bild \leftrightarrow Schrödinger-Bild

27.11.1995

Um aus dem Zustand zum Zeitpunkt t_0 den Zustand zum Zeitpunkt t zu berechnen, wendet man den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ an:

$$| \psi(t) \rangle = \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ wird berechnet durch:

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

Dabei erzeugt der Energie-Messapparat \hat{H} die Zeitdynamik und ist im allgemeinen zeitunabhängig. Der Erwartungswert $\overline{\hat{A}}$ kann also umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \overline{\hat{A}}(t) &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | U^\dagger \hat{A} U | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{A}_H | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Der Operator \hat{A}_H ist im Gegensatz zu \hat{A} zeitabhängig. Durch diese Umformulierung kommt man zum Heisenberg-Bild, in dem die Zustände zeitunabhängig und die Operatoren zeitabhängig sind. Das bereits bekannte Bild, in dem die Zustände zeitabhängig und die Operatoren zeitunabhängig sind, nennt man Schrödinger-Bild. Wir wollen nun ein Beispiel in jedem Bild einmal durchrechnen:

Schrödinger-Bild:

$$\begin{aligned} m \partial_t \overline{\hat{X}} &= m \partial_t \langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle \\ &= m \left[\langle \dot{\psi}(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \dot{\hat{X}} | \psi(t) \rangle \right] \\ &= m \left[\langle \psi(t) | \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{X} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{X} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) | \psi(t) \rangle \right] \\ &= m \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} \hat{X} - \hat{X} \hat{H} | \psi(t) \rangle \\ &= m \frac{i}{\hbar} \overline{[\hat{H}, \hat{X}]} \\ &= \overline{\hat{P}} \end{aligned}$$

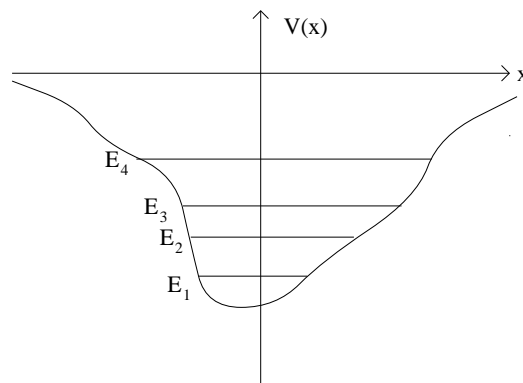
Heisenberg-Bild:

$$\begin{aligned}
 m\overline{\partial_t \hat{X}} &= m\partial_t \langle \psi(t_0) | \hat{X}_H(t) | \psi(t_0) \rangle \\
 &= m \langle \psi(t_0) | \partial_t \hat{X}_H(t) | \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \psi(t_0) | \hat{P}_H(t) | \psi(t_0) \rangle \\
 &= \langle \psi(t) | \hat{P} | \psi(t) \rangle \\
 &= \overline{\hat{P}}
 \end{aligned}$$

13 Pragmatische Lösungsverfahren für einfache Systeme im Ortsraum

Es liege ein System von einem Teilchen in einer Dimension vor, das einer dynamischen Zeitabhängigkeit unterliegt:

$$\begin{aligned}
 | \psi(t) \rangle &= \sum \psi_n | \varphi_n(t) \rangle \\
 \hat{H} | \varphi_n(t) \rangle &= E_n | \varphi_n(t) \rangle
 \end{aligned}$$



Konditionierung der DGL:

$$| \varphi_n(t) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} | \varphi_n(t_0) \rangle$$

Jetzt sind $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n(t_0) \rangle$ und E_n gesucht.

$$\begin{aligned}
 \hat{H} \varphi_n(x) &= E_n \varphi_n(x) \\
 \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} + V(x) \right) \varphi_n(x) &= E_n \varphi_n(x) \\
 \Leftrightarrow \partial_{xx} \varphi_n(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \varphi_n(x)
 \end{aligned}$$

Wir führen noch eine Variablentransformation durch (l ist die charakteristische Länge des Systems):

$$x \rightarrow \alpha := \frac{x}{l}$$

$$\partial_x = \frac{\partial \alpha}{\partial x} \partial_\alpha = \frac{1}{l} \partial_\alpha$$

So erhalten wir die DGL:

$$\partial_{\alpha\alpha} \varphi_n(\alpha) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(\alpha)) l^2 \varphi_n(\alpha)$$

Mit der dimensionslosen Wellenzahl $k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x))}l$ kommen wir so zur dimensionslosen Schrödinger-Gleichung:

$$\partial_{\alpha\alpha}\varphi_n(\alpha) = -k_n^2\varphi_n|\alpha\rangle$$

Die Lösung dieser DGL ist bekannt, falls k_n unabhängig von α ist:

$$\varphi_n(\alpha) \sim \sin(k_n\alpha)$$

Sie muß allerdings noch normiert werden:

$$\int |\varphi_n(\alpha)|^2 d\alpha = 1$$

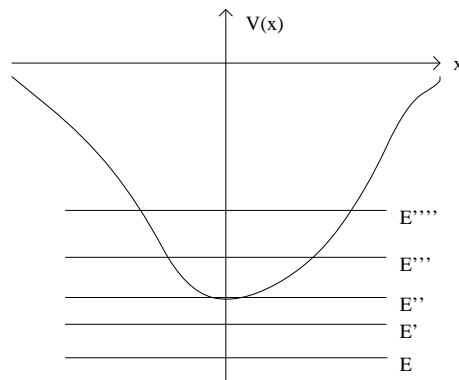
13.1 Raten, Wissen, Nachschlagen

Die Lösungen werden aus anderen Bereichen der Physik übernommen (\rightarrow Literatur); dort gibt es verschiedene orthonormierte Basissysteme.

Bekannte Lösungen sind zum Beispiel vorhanden für folgende Potentiale $V(x)$:

13.2 Graphisch numerisches Verfahren

Man wählt irgend eine Energie E aus und löst die dimensionslose Schrödinger-Gleichung. Gelingt es, die so gewonnene Lösung für $\varphi_{n(\alpha)}$ zu normieren, so handelt es sich bei E um einen Energie-Eigenwert. Dabei



können folgende Fälle auftreten:

- $E = E' < E^*$:
 $k_n = i\kappa$
 $\varphi_{n(\alpha)} \sim e^{\pm\kappa\alpha}$
 Dieses $\varphi_{n(\alpha)}$ ist nicht normierbar, also E keine Lösung.
- $E = E'' = E^*$:
 Auch diese klassische Ruheenergie ist keine Lösung.
- $E = E''' > E^*$:
 Dieser Wert liegt im klassisch erlaubten Bereich. Die Lösungen für $\varphi_{n(\alpha)}$ oszillieren und sind für ganz bestimmte E_n normierbar, weil sie dann für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen Null gehen. Dies ist hier zum Beispiel für
- $E = E'''' = E_1$
 der Fall

- Läßt man E jetzt weiter steigen, wird die Lösung wieder nicht normierbar bis man zum zweiten Energie-Eigenwert kommt, dann hat die Eigenfunktion $\varphi_{2(\alpha)}$ allerdings schon eine Nullstelle (Knotenpunkt)

Man sieht also, daß die Ruheenergie E_1 immer über dem Potential $V(\alpha)$ liegt und der Knotensatz in einer Dimension gilt:

$\varphi_{1(\alpha)}$ hat keinen Nulldurchgang

$\varphi_{2(\alpha)}$ hat einen Nulldurchgang

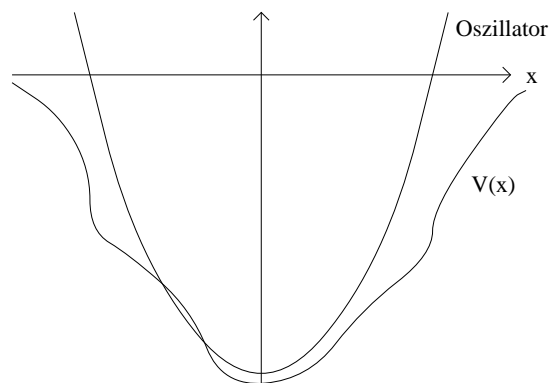
$\varphi_{n(\alpha)}$ hat $(n - 1)$ Nulldurchgänge

Bemerkung: Der Grundzustand ist stets nicht entartet. (Dies gilt in beliebigen Dimensionen.)

14 Störungstheorie

14.1 Einleitung

Zu einem gegebenen Potential $V(x)$ sucht man sich ein benachbartes Problem $V_0(x)$, das bereits gelöst ist. Es sind also die Energie-Eigenwerte E_n^0 und die Eigenfunktionen $\varphi_{n(\alpha)}^0$ bekannt. Es gelten ferner die folgenden Beziehungen:



$$(x | k \rangle = \varphi_k(x)$$

$$(x | \varphi \rangle = \varphi(x)$$

$$(k | \varphi \rangle = \varphi_k$$

$$| \varphi_k \rangle = \sum \varphi_k | k \rangle$$

Taylor-Entwicklung der Eigenfunktionen und Eigenwerte:

$$| \varphi_k \rangle = | k \rangle + \lambda | k^{(1)} \rangle + \lambda^2 | k^{(2)} \rangle + \dots$$

$$E_k = E_k^0 + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots$$

Das λ ist dabei kein spezieller Wert, sondern eine Flagge, die anzeigt, wie klein ein Term ist. Dieser wird auch verwendet, bei der Formulierung des Hamilton-Operators:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}$$

\hat{W} ist das Störpotential, mit dem das bekannte System gestört wird, um zu dem gesuchten System zu kommen. Aus

$$\hat{H} | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle$$

wird also

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W} \right) \left(| \varphi_n^0 \rangle + \lambda | \varphi_n^{(1)} \rangle \right) = \left(E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} \right) \left(| \varphi_n^0 \rangle + \lambda | \varphi_n^{(1)} \rangle \right)$$

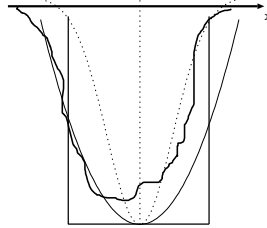
29.11.95

14.2 Störungsverfahren

In diesem Kapitel werden praktische Rechenverfahren für ein Teilchen in einer Dimension behandelt.

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

Ein verwandtes Problem sei bekannt und ψ_n , E_n werden gesucht:



$$X|\psi_k\rangle = \psi_k(x)$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_l |l\rangle \underbrace{\langle l|\psi_k\rangle}_{\psi_k(l)}$$

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle + |\psi_k^{(1)}\rangle + |\psi_k^{(2)}\rangle + \dots$$

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \dots$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

\hat{W} entspricht einer statischen, also zeitunabhängigen Störung. Das Problem wird mit Hilfe der Methode der "flags" gelöst.

$$\langle k'|\hat{W}|k\rangle + (E_{k'}^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k'|\psi_k^{(1)}\rangle = E_k^{(1)} \delta_{k'k} \quad \text{formales Ergebnis}$$

14.2.1 Störungstheorie 1. Ordnung

Behandlung der Diagonalterme ($k'=k$):

$$E_k^{(1)} = W_{kk} = \langle k|\hat{W}|k\rangle$$

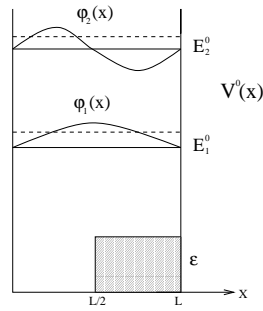
$$\begin{aligned} E_k^{(1)} &= \int_0^L dx \varphi_k(x) W(x) \varphi_k(x) = \int_0^L dx |\varphi_k(x)|^2 W(x) \\ &= \frac{2}{L} \int_{\varepsilon/2}^L dx \sin^2 \frac{2k\pi x}{L} \varepsilon = \frac{\varepsilon}{2} \end{aligned}$$

Die Korrektur ist für alle Niveaus gleich groß:

$$E_k = E_k^0 + \frac{\varepsilon}{2}$$

Behandlung der Nichtdiagonalterme ($k' \neq k$):

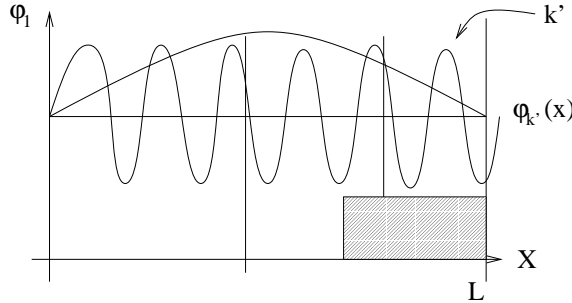
$$W_{k'k} + (E_{k'}^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k'|\psi_k^{(1)}\rangle = 0$$



$$\begin{aligned} \langle k' | \psi_k^{(1)} \rangle &= \frac{W_{k'k}}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} = \frac{W_{k'k}}{\Delta E_{k'k}}; & \Delta E_{k'k} &:= E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)} \\ |\psi_k\rangle &= \sum_{k'} |k'\rangle \langle k' | \psi_k \rangle \\ \langle k' | \cdot |\psi_k\rangle &= |k\rangle + |\psi_k^{(1)}\rangle \\ \langle k' | \psi_k \rangle &= \underbrace{\langle k' | k \rangle}_{\delta_{k'k}=0} + \langle k' | \psi_k^{(1)} \rangle \end{aligned}$$

Beispiel:

$$\psi_1(x) = \sum_{k', k' \neq 1} \varphi_{k'}(x) \frac{W_{k'1}}{\Delta E_{k'1}} + \varphi_1(x)$$



$$\varphi_1(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \sum_{k'} \int dx' \varphi_{k'}(x) \varphi_1(x) \frac{W(x)}{\Delta E_{k'1}^0}$$

Je größer $k-k$ ist, desto kleiner ist $W_{k'k}$.

$$\psi_1(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \varepsilon \int_{L/2}^L dx' \varphi_2(x) \varphi_1(x) + \frac{\varphi_3(x) \varepsilon}{\Delta E_{31}^0} \int_{L/2}^L dx' \varphi_2(x) \varphi_1(x) \dots$$

$$\Delta E_{21}^{(0)} = E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = \frac{2^2 \pi^2}{L^2} - \frac{1^2 \pi^2}{L^2} = \frac{3 \pi^2}{L^2}$$

$$\Delta E_{31}^{(0)} = E_3^{(0)} - E_1^{(0)} = \frac{3^2 \pi^2}{L^2} - \frac{1^2 \pi^2}{L^2} = \frac{8 \pi^2}{L^2}$$

$$\psi_1(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \frac{\varepsilon L^2}{3 \pi^2} \text{Integral}_{31} + \dots$$

$$= \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \alpha \frac{2}{9} + \varphi_3(x) \alpha \left(-\frac{4}{225} \right) + \dots ; \quad \alpha = \frac{\hbar^2}{2m(\pi/L)^2}$$

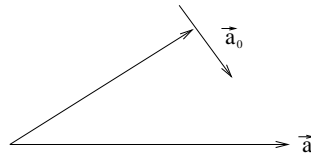
14.2.2 Störungstheorie 2. Ordnung (1. Ordnung sei bereits ausgeführt)

Aus den α^2 -Termen für $k'=k$ und $k' \neq k$ folgt:

$$E_k = E_k^{(0)} + W_{kk} + \sum_{l=1, l \neq k}^{\infty} \frac{W_{lk}^2}{\Delta E_{kl}^{(0)}}$$

$$|\psi_l \rangle = |k \rangle T_k + \sum_{l=1, l \neq k}^{\infty} |l \rangle R_{lk}$$

$$T_k := 1 - \frac{1}{2} \sum_{m=1, m \neq k}^{\infty} \frac{W_{mk}^2}{(\Delta E_{km}^{(0)})^2}$$



$$R_{lk} := \frac{W_{lk}}{\Delta E_{kl}^{(0)}} + \left(\sum_{m=1, m \neq k}^{\infty} \frac{W_{lm} W_{mk}}{\Delta E_{lk}^{(0)} \Delta E_{km}^{(0)}} \right) - \frac{W_{lk} W_{kk}}{(\Delta E_{kl}^{(0)})^2}$$

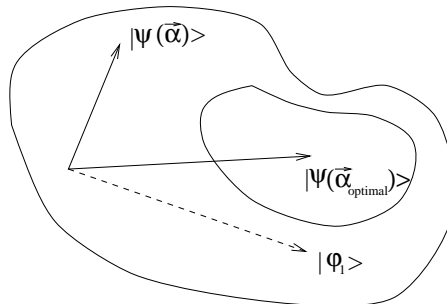
14.3 Variationsverfahren

$$\hat{H} = H_0 + W$$

$$\hat{H}|n \rangle = E_n |n \rangle$$

Gesucht:

$$(x|n \rangle = \varphi_n(x) \quad \text{und} \quad E_n$$



Probiere alle $|\alpha \rangle$ durch, dann ist $|\varphi_1 \rangle$ dabei.

a) Suchkriterium für $|\varphi_1 \rangle$ -Suche

b) Geeignete und insbesondere endliche Untermenge des Hilbert-Raumes \mathcal{H} suchen, die alle Vektoren aus \mathcal{H} enthält.

Dazu sind mehrere Schritte notwendig:

-Definiere eine diskrete Untermenge von Zuständen

-Parameterraum aufspannen: $\underbrace{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}_{\vec{\alpha}}$ (reell)

-Testfunktion $\psi(x, \vec{\alpha})$

Zum Beispiel $x \in [0, L]$:

$$\psi(x, \vec{\alpha}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{\pi x}{L} \alpha_1 + f(\alpha_2) + \dots \right)$$

Gesucht:

$$\langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | \psi(\vec{\alpha}) \rangle = ?$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | n \rangle \langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \langle \psi(\vec{\alpha}) | n \rangle \langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle$$

$$\text{Da } 1 = \sum |n\rangle \langle n| \text{ und } \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$$

$$= E_1 \langle \psi(\vec{\alpha}) | 1 \rangle \langle 1 | \psi(\vec{\alpha}) \rangle + \sum_{n=0, n \neq 1}^{\infty} E_n \langle \psi(\vec{\alpha}) | n \rangle \langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle$$

$$= E_1 \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi(\vec{\alpha}) | n \rangle \langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle + \sum_{n=0, n \neq 1}^{\infty} (E_n - E_1) \langle \psi(\vec{\alpha}) | n \rangle \langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle$$

$$\langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | \psi(\vec{\alpha}) \rangle = E_1 + \underbrace{\sum_{n=0, n \neq 1}^{\infty} \underbrace{(E_n - E_1)}_{\geq 0} \underbrace{|\langle n | \psi(\vec{\alpha}) \rangle|^2}_{\geq 0}}_{\geq 0}$$

$$\underbrace{\langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | \psi(\vec{\alpha}) \rangle}_{\text{Schätzwert von } \vec{\alpha}} \geq E_1$$

Schätzwert von $\vec{\alpha}$

Variation:

$$\delta_{\vec{\alpha}} \langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | \psi(\vec{\alpha}) \rangle = 0 \iff \text{bester Schätzwert } \vec{\alpha} = \vec{\alpha}_{\text{optimal}}$$

Bemerkungen:

- $E_1 - E_1(\vec{\alpha})$ ist unbekannt

- Für $|\psi_1\rangle$ steht $|\psi_1(\vec{\alpha})\rangle$ als Schätzung zur Verfügung. Da $|\psi_2\rangle$ unbekannt ist, ist eine Testfunktion $\psi_2(\vec{\beta})$ nötig.

$$\delta_{\vec{\beta}} \langle \psi_2(\vec{\beta}) | \hat{H} | \psi_2(\vec{\beta}) \rangle = 0, \text{ falls } \langle \psi_2(\vec{\beta}) | \psi_1(\vec{\alpha}_{\text{optimal}}) \rangle = 0$$

Im Prinzip ist es möglich, das gesamte Spektrum und alle Wellenfunktionen zu bestimmen.

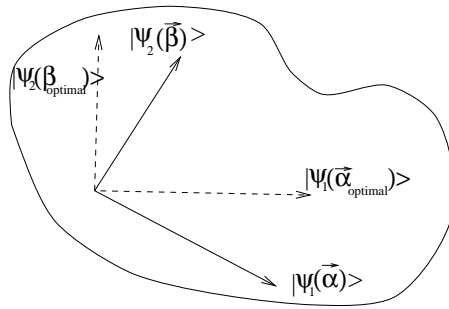
- Die größten durchführbaren Rechnungen gehen bis $n=5$. Schon bei so kleinen Werten hat $\vec{\alpha}$ etwa 100 Parameter.

$$E_1(\vec{\alpha}) = \langle \psi(\vec{\alpha}) | \hat{H} | \psi(\vec{\alpha}) \rangle \geq E_1$$

$$(x | \psi(\vec{\alpha}_{\text{optimal}}) \rangle = \psi_{\vec{\alpha}_{\text{optimal}}}(x), \quad E_1(\vec{\alpha}_{\text{optimal}})$$

$$\delta_{\vec{\beta}} \langle \psi_2(\vec{\beta}) | \hat{H} | \psi_2(\vec{\beta}) \rangle = 0 \implies E_2(\vec{\beta}_{\text{optimal}}) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

Dieses Spiel läßt sich für alle weiteren $|\psi_n\rangle$ fortsetzen. Da die einzelnen $|\psi_n\rangle$ senkrecht aufeinander stehen müssen (Skalarprodukt = 0), ergeben sie eine Basis im Hilbert-Raum.



14.4 JWKB-Verfahren (Jordan-Wenzel-Kramers-Brillouin-Verfahren)

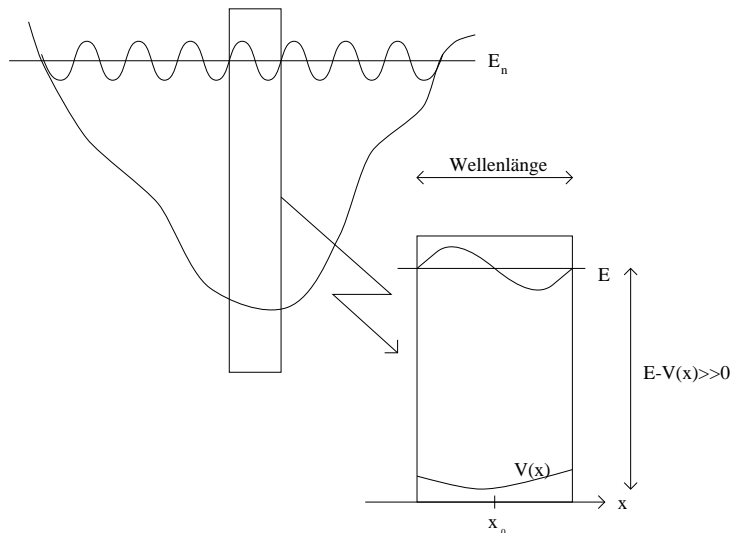
04.12.1995

Bei diesem Verfahren handelt es sich um eine semiklassische Näherung. Zu einem vorgegebenen Potential werden die Energieeigenwerte E_n und die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ gesucht. Es gilt die Schrödinger-Gleichung:

$$(\partial_{xx} + P^2) \psi(x) = 0$$

$$P^2 = 2m(E - V(x))$$

Wir betrachten jetzt einen Zustand mit $n \gg 1$, so daß die Eigenfunktion sehr viele Knotenpunkte hat, und greifen uns einen schmalen Bereich $\lambda(x)$, der nur zwei Knoten umfaßt, heraus: In diesem Bereich ändert sich $V(x)$ nur sehr



wenig, so daß man es linear annähern kann:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0)$$

Man kann sogar sagen:

$$V(x_0) \gg V'(x_0)(x - x_0)$$

Im Bereich $(x - x_0) < \lambda(x)$ gilt also:

$$\frac{V'(x_0)}{V(x_0)} \lambda(x) \ll 1$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{V' 2\pi}{V k} &= \frac{V' 2\pi}{V \frac{P}{\hbar}} = \frac{V'}{V} \frac{2\pi \hbar}{\sqrt{E - V(x)}} \sqrt{2m} \ll 1 \\ &\Rightarrow V' \ll \frac{\sqrt{2m} \sqrt{E - V(x)}}{2\pi \hbar} V \end{aligned}$$

Als Lösung in 0. Näherung nehmen wir den Ansatz:

$$\psi_{\pm}(x) \sim \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' P(x')\right)$$

Die Ableitungen sind:

$$\psi' = \pm \frac{i}{\hbar} P(x) \Psi$$

$$\psi'' = -\frac{1}{\hbar^2} P^2(x) \psi \pm \frac{i}{\hbar} P'(x) \Psi$$

Eingesetzt in die SG:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} P^2 \psi \pm \frac{i}{\hbar} P' \Psi + \frac{1}{\hbar^2} P_0^2 \psi &= 0 \\ \Rightarrow P^2(x) &= P_0^2(x) \pm i\hbar P'(x) \end{aligned}$$

Gesucht ist die Lösung $P(x)$ der nichtlinearen Differentialgleichung für $P(x)$.

Gegeben ist:

$$P_0^2(x) = 2m(E - V(x))$$

Wir werden die Differentialgleichung nur näherungsweise lösen. Wenn $P' = 0$ gilt, so ist die Lösung einfach:

$$P^2(x) = P_0^2(x)$$

Andernfalls nehmen wir an, daß P' sehr klein ist. Dann kann man ansetzen:

$$P_1(x) = P_0(x) + \pi_1$$

$$\Rightarrow P_1^2 = P_0^2 + 2\pi_1 P_0 + \pi_1^2$$

Damit gilt in 1. Näherung (weil π_1^2 sehr klein ist):

$$\begin{aligned} \pi_1 &= \frac{P_1^2 - P_0^2}{2P_0} \\ &= \pm \frac{i}{2\hbar} \frac{P'}{P_0} \\ P_1(x) &= P_0(x) \pm \frac{i}{2\hbar} \frac{d}{dx} \ln P_0 \end{aligned}$$

Als Lösung in 1. Näherung ergibt sich also:

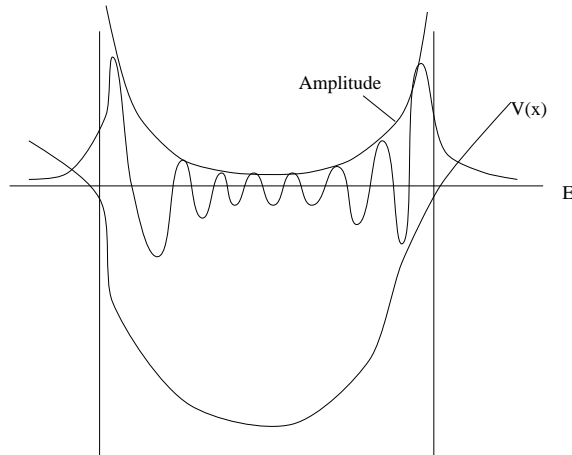
$$\psi_{\pm}(x) \sim \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' P_0(x') - \frac{1}{2} \int^x dx' \frac{P_0'(x')}{P_0(x')}\right)$$

Zur Veranschaulichung formen wir dieses noch etwas um:

$$\begin{aligned} \psi &\sim e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' P_0(x')} \cdot e^{\frac{1}{2} \int^x dx' \frac{d}{dx} \ln P_0} \\ &= e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' P_0(x')} \cdot \frac{1}{\sqrt{P_0(x)}} \end{aligned}$$

Der erste Faktor ist der oszillierende Phasenterm und der zweite Faktor die Amplitude. Das Betragsquadrat der Zustandsfunktion ist umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit:

$$|\psi|^2 \approx \frac{1}{P_0(x)} \sim \frac{1}{mv(x)} \sim \frac{1}{v}$$



Deshalb bricht das JWKB-Verfahren am klassischen Umkehrpunkt zusammen. Um dieses Problem zu umgehen, setzt man die Funktion ins Komplexe fort, so daß man nicht mehr $\int dx$ sondern $\oint dz$ mit $z = x + iy$ berechnet.

An den Nullstellen von $\psi(x)$ kann man die Funktion linearisieren mit der Steigung α :

$$\psi(x \approx x_0) = \alpha(x - x_0)$$

$$\psi' = \alpha$$

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{\alpha}{\alpha(x-x_0)} = \frac{1}{(x-x_0)}$$

$\frac{\psi'}{\psi}$ hat also Pole, wo $\psi(x)$ Nullstellen hat. Deshalb gilt wegen Cauchy:

$$\oint dz \frac{\psi'}{\psi} = 2\pi i n,$$

wobei n die Anzahl der Nullstellen bzw. Polstellen ist. Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \oint dz \frac{\psi'}{\psi} &= \oint dz \frac{d}{dz} \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^z dz' P_0(z') - \frac{1}{2} \int^z dz' \frac{d}{dz'} \ln P_0'(z') \right) \\ &= \pm \frac{i}{\hbar} \oint dz P_0(z) - \frac{1}{2} \oint dz \frac{P_0'}{P_0} \\ \implies \oint dz P_0(z) &= 2\pi \hbar n + \frac{\hbar}{2i} \oint dz \frac{P_0'}{P_0} \end{aligned}$$

Betrachten wir den zweiten Summanden noch etwas genauer. Es gilt:

$$\begin{aligned} P^2 &= 2m(E - V) \\ \implies (P^2)' &= 2PP' \\ &= -2mV' \\ \implies \frac{P'}{P} &= -\frac{mV'}{P^2} \\ &= -\frac{m\alpha}{-\alpha(z - z_n)} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(z - z_n)} \\ \implies \frac{\hbar}{2i} \oint dz \frac{P_0'}{P_0} &= \frac{\hbar}{2i} \frac{1}{2} \oint dz \frac{1}{(z - z_n)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2i} \frac{1}{2} \cdot 2\pi i \\
&= \hbar\pi
\end{aligned}$$

So erhalten wir die BOHR-SOMMERFELD-Bedingung:

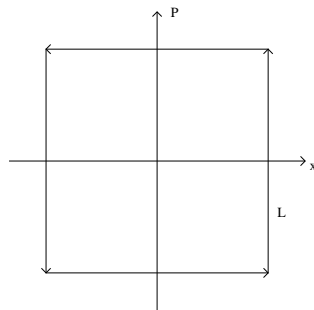
$$\oint dz P_0(z) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

mit dem klassischen Impuls: $P_0(x) = 2m(e - V(x))$

Dazu zwei Beispiele:

Potentialkasten: Hier gilt: $P_0^2 = 2mE$

Dann muß über folgendes Rechteck integriert werden:



$$\begin{aligned}
\oint dz P_0(z) &= L \cdot 2 \cdot \sqrt{2mE} \\
&= 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
\Rightarrow E_n &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 + (\dots) n + (\dots)
\end{aligned}$$

Man sieht also, daß man nur eine Näherungslösung erhält:

$$E_n^{WKB} = E_n^{wahr} + Rest, n^2 \gg n$$

Harmonischer Oszillator: Das Potential ist hier: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Somit gilt:

$$p^2 = 2m(E - V(x))$$

$$\Rightarrow \frac{p^2}{2mE} + \frac{m\omega^2}{2E} x^2 = 1$$

Das gesuchte Integral ist also die Fläche der durch diese Gleichung gegebenen Ellipse:

$$F = \oint p dx = \pi \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

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

Hier gilt: $E_n^{WKB} = E_n^{wahr}$

15 Quantenmechanik nichträumlicher Variablen: Drehimpuls und Spin

15.1 Drehimpuls

06.12.95

15.1.1 Literatur

Edmonds: Angular Momentum in Quantummechanics (Princeton University)
H.J. Lipkin: Anwendung von Lie-schen Gruppen in der Physik (BI-Verlag)

15.1.2 Exkurs

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \longrightarrow \quad \hat{l}_{jk} := \hat{x}_j\hat{p}_k - \hat{x}_k\hat{p}_j$$

In der klassischen Mechanik gibt es verschiedene Variablentypen:

Skalare: m, q, \dots

Vektoren: $\vec{x} := (x_1, x_2, \dots, x_d)$

Tensoren: $\underline{l}_{jk} := \begin{pmatrix} l_{11} & \dots & l_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{d1} & \dots & l_{dd} \end{pmatrix}$ mit definiertem Koordinatentransformationsverhalten

$$\underline{A}\vec{x} = \vec{\tilde{x}} \quad \underline{A} \text{ sei Transformation im } \mathbb{R}_d$$

$$A_{ij}x_j = \tilde{x}_i$$

$$A_{rj}A_{ik}l_{jk} = \tilde{l}_{ri}$$

Alternative oder koordinatenunabhängige Formulierung:

Skalare \longrightarrow Skalar / Skalarprodukt \longrightarrow 0-Formen

Vektoren \longrightarrow $\vec{x} \cdot d\vec{x} = x_1 dx_1 + x_2 dx_2 + x_3 dx_3$ \longrightarrow 1-Formen

Tensoren \longrightarrow $\underline{l}_{jk}(d\vec{x} \circ d\vec{x}) = l_{jk} dx_j dx_k$ antisymmetrische Matrix \longrightarrow 2-Formen

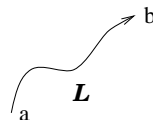
Beispiele:

m \longrightarrow m

\vec{x}, \vec{p} \longrightarrow $x := x_i dx_i, \quad p := p_j dx_j$

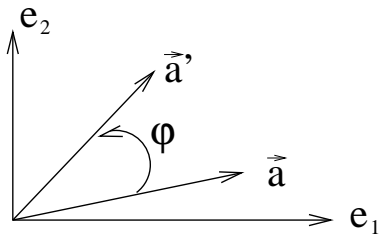
l_{jk} \longrightarrow $l : l_{jk} dx_j dx_k$

Da m, x, p und l skalar bezüglich Koordinatentransformationen sind und nie als Integranden über Punktmengen behandelt werden können (Man addiert ja Zahlen!).



p ist ein "Linienintegrand" und l ein "Flächenintegrand"

$$\int_a^b \vec{p} d\vec{x} = \int_{\mathcal{L}} p$$



Es gibt keine $n \geq d$ -Form, wobei d der Dimension des Raumes entspricht.

Es werde ein Operator $\hat{U}(\varphi, e_1, e_2)$ eingeführt und φ bedeute eine Drehung von \vec{e}_1 in Richtung \vec{e}_2 (Die übrigen Achsen werden festgehalten). Dann ist $\varphi \rightarrow \varphi_{ij}$ ebenfalls eine 2-Form.

$$\varphi_{jk} \longrightarrow \varphi := \varphi_{jk} dx_j \circ dx_k$$

$$\hat{U} := e^{\frac{i}{\hbar} \varphi}$$

d Anzahl der Komponenten

0 -

1 -

2 1

3 3

4 6

“ $\varphi \cdot l$ “ muß ein Skalar werden.

Vorübung: $a := \vec{a} d\vec{x}$, $b := \vec{b} d\vec{x}$

Daraus folgt, daß “ $a \cdot b$ ” dann ebenfalls skalar werden muß.

$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_d b_d$ in Euklidischen Räumen

$$a = a_i dx_i \quad b = b_j dx_j$$

$$a \circ b = a_i b_j dx_i dx_j = a_1 b_2 dx_1 dx_2 + \dots$$

$$*a := *(a_i dx_i) = *(a_1 dx_1 + a_2 dx_2) = a_1 dx_2 - a_2 dx_1 \quad (d=2)$$

Allgemeine Definition:

$$*\underbrace{dx_{i_1} dx_{i_2} \dots dx_{i_p}}_p := \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_p i_{p+1} \dots i_d} dx_{i_{p+1}} dx_{i_{p+2}} \dots$$

$$(1, 2, 3, \dots, d) \longrightarrow \text{Permutation} \longrightarrow (i_1, i_2, i_3, \dots, i_d)$$

$$d=2: \quad *a = a_1 \underbrace{\varepsilon_{12}}_{=1} dx_2 + a_2 \underbrace{\varepsilon_{21}}_{=-1} dx_1 = a_1 dx_2 - a_2 dx_1$$

$$\underbrace{a *b}_{\substack{d-p \\ d}} = (a_1 dx_1 + a_2 dx_2)(b_1 dx_2 - b_2 dx_1)$$

$$= a_1 b_1 dx_1 dx_2 - a_2 b_2 dx_2 dx_1 = (a_1 b_1 + a_2 b_2) dx_1 dx_2 \quad 2\text{-Form}$$

Der * macht aus einer p-Form eine (d-p)-Form.

In d=2 gilt:

$$*(a * b) = a_1 b_1 + a_2 b_2$$

Weiterhin gilt immer:

$$(*a*)b = \vec{a} \vec{b}$$

Das entspricht einer 0-Form, wenn a,b 1-Formen sind.

$$*l := *(l_{ij} dx_i dx_j) = l_{ij} \underbrace{dx_1 \dots dx_d}_{\text{ohne } dx_i dx_j} \varepsilon_{ij m_3 \dots m_d}$$

d=2:

$$*l := *(l_{12} dx_1 dx_2) = l_{12} \varepsilon_{12} = l_{12}$$

d=3:

$$\begin{aligned} *l &:= *(l_{12} dx_1 dx_2 + l_{13} dx_1 dx_3 + l_{23} dx_2 dx_3) \\ &= l_{12} \varepsilon_{123} dx_3 + l_{13} dx_2 \varepsilon_{132} + l_{23} dx_1 \varepsilon_{231} \\ &= l_{23} dx_1 + l_{31} dx_2 + l_{12} dx_3 \quad \text{1-Form} \\ &= \vec{l} dx, \quad \vec{l} = (l_{23}, l_{31}, l_{12}) \end{aligned}$$

*l ist in d=3 im wesentlichen ein Vektor $\rightarrow *l = (d-2)$ -Form (“axialer Vektor”)

$$*l * l = l_1 l_1 + l_2 l_2 + l_3 l_3 \quad (d=3)$$

$$l_1 := l_{23}; \quad l_2 := l_{31} \quad l_3 := l_{12}$$

l	\rightarrow	2-Form
*l	\rightarrow	(d-2)-Form
l*l	\rightarrow	(d-2+2)-Form
*l*l	\rightarrow	0-Form

15.1.3 Drehimpulsalgebra in der Quantenmechanik

$$\hat{l}_{ij} = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i \quad \rightarrow \quad \hat{l}$$

$$*\hat{l} * \hat{l} = \hat{l}^2 \text{ nennt man Operator “Drehimpulsquadrat”}$$

Nun die Algebra der “**Drehgruppe**” oder der “**Erzeugenden**”:

In d=3 Komponenten von *l gilt:

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{l}_k$$

$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0$. Der Casimir-Operator “ \hat{l}^2 ” vertauscht mit jedem “Erzeugenden” \hat{l}_i .

SATZ: Jede Transformationsgruppe ist in ihren Eigenschaften durch Angabe der Erzeugenden und deren algebraischen Eigenschaften vollständig festgelegt.

\hat{X}_i Erzeugende $i = 1 \dots m$
 \hat{C}_μ Casimir-Operator $\mu = 1 \dots q$

$$[\hat{C}_\mu, \hat{C}_\nu] = 0 \quad ; \quad [\hat{C}_\mu, \hat{X}_i] = 0, \quad \text{für alle } i$$

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = f_{ijk} \hat{X}_k \quad ; \quad f_{ijk} \hat{=} \text{Strukturkonstanten}$$

Drehimpuls:

$$f_{ijk} = i\hbar \varepsilon_{ijk}; \quad q = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{C} = * \hat{l} * \hat{l} = \hat{l}^2$$

Vorlesung vom 11.12.95

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi(\varphi)\rangle \quad \text{Variable: } \varphi \hat{=} (\varphi_{ij}; \quad i, j \quad \forall d)$$

[Transformation - Drehung]

Drehung um φ_{ij} ; (i-Achse um den Wert φ_{ij} in Richtung der j-Achse)

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \underbrace{*(\varphi \circ * \hat{l})}_{\text{Skalar}}\right)$$

ERINNERUNG: im \mathcal{R}_3 gilt

$$\varphi \hat{=} (\varphi_{23}, \varphi_{31}, \varphi_{12}) \quad \text{2-Form}$$

$$*\varphi \hat{=} (\varphi_1, \varphi_2, v p_3) \quad \text{d-2 = 1-Form}$$

$$\hat{l} \hat{=} (l_{23}, l_{31}, l_{21})$$

$$*\hat{l} \hat{=} (l_1, l_2, l_3)$$

$$\text{ALGEBRA: } *(\hat{l} \circ * \hat{l}) \hat{=} : \hat{l}^2$$

$$= \hat{l}_1 \hat{l}_1 + \hat{l}_2 \hat{l}_2 + \hat{l}_3 \hat{l}_3$$

1 Casimir-Operator

Einschub:

- Kommutator: $[a, b] = [a, b]_- = ab - ba$
- Anti-Kommutator: $\{a, b\} = [a, b]_+ = ab + ba$

$$\text{Kommutatoren: } [\hat{l}_i, \hat{l}_j]_- = i\hbar \varepsilon_{ijk} \cdot \hat{l}_k \quad \text{Casimir-Operator: } [\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0; \forall i$$

$$(* \hat{l}) \circ (* \hat{l}) = i\hbar \hat{l} \quad (* (l \circ * l)) \circ * l = 0$$

Algebra einer "Dreh"-Gruppe:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \cdot \hat{J}_k \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$$

Jetzt berechnen wir das Spektrum:

1. \hat{J}_i Erzeugende eines phys. Proz. \hat{J}_i ist hermitesch
 $\hat{J}_i|a, b\rangle = b|a, b\rangle \quad \exists$ reelle Eigenwerte b
keine Vertauschung von \hat{J}_i und \hat{J}_k d.h. $[\hat{J}_i, \hat{J}_k] \neq 0$, also Entscheidung treffen, welche Erzeugende gewählt wird: $\mathcal{R}_3: \hat{J}_3|a, b\rangle = b|a, b\rangle$
2. $\exists \hat{J}^2$ - Meßappatur, ebenfalls hermitesch

$$\hat{J}^2|a, b\rangle = a|a, b\rangle$$

3. Berechnen ...

$$\langle ab|\hat{J}_3^2|a, b\rangle = \underbrace{\langle \hat{J}_3 \quad ab|\hat{J}_3 \quad ab\rangle}_{a > b^2 \geq 0}$$

Wir halten fest: $a > b^2 \geq 0$

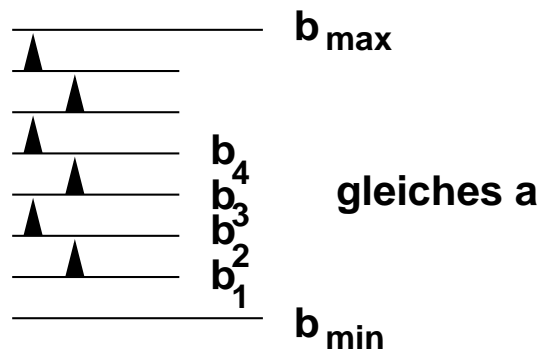
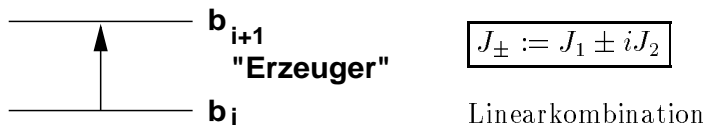


Abbildung 12: Multiplett-Schema



mögliche "Auf-" und "Absteige-" Operatoren

aus $[\hat{J}^2, \hat{J}_1] = 0$ und $[\hat{J}^2, \hat{J}_2] = 0$ folgt $[\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0$

Es gilt $[\hat{J}_3, \hat{J}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{J}_{\pm}$ wie folgende Nebenrechnung zeigt:

$$\hat{J}_3 \hat{J}_1 - \hat{J}_1 \hat{J}_3 \pm \hat{J}_3 \hat{J}_2 \mp i \hat{J}_2 \hat{J}_3 = i \hbar \hat{J}_2 \pm \hat{J}_1$$

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_3^2$$

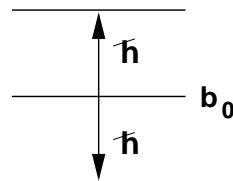
jetzt jeweils einsetzen von:

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

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

$$\begin{aligned} \hat{J}_3(\hat{J}_{\pm}|a_0 b_0\rangle) &= (\hat{J}_{\pm} \hat{J}_3 \pm \hbar \hat{J}_{\pm})|a_0 b_0\rangle \\ &= (\hat{J}_{\pm} \cdot b_0 \pm \hbar \hat{J}_{\pm})|a_0 b_0\rangle = (b_0 \pm \hbar)(\hat{J}_{\pm}|a_0 b_0\rangle) \end{aligned}$$

\hat{J}_+ heißt Aufsteigeoperator



DREHIMPULS - MULTIPLETTES

$j = 0$	$m_j = 0$	Merke: Dre- himpuls Multipletts ha- ben stets ungerade An- zahl von Zuständen
$j = 1$	$m_j = (-1, 0, 1)$	
$j = 2$	$m_j = (-2, -1, 0, 1, 2)$	
\vdots	\vdots	
\vdots	\vdots	

15.3 Spin

$\hat{j}^2 \rightarrow \hat{S}^2$ $\hat{J}_3 \rightarrow \hat{S}_3$ zum Beispiel: Dublett (exp. aus Stern-Gerlach-Versuch)

Ansatz: $s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ $\xleftarrow{n=1}$ $j = \frac{n}{2}\hbar$

$$\hat{S}^2 \Rightarrow \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\right)\hbar \qquad \hat{S}_3 \Rightarrow \pm \frac{1}{2}\hbar$$

abstrakter \mathcal{R}_3 oder E_3 : Winkeltransformation $e^{i\varphi_3 \hat{S}_3} |S, S_3\rangle$

$$\Phi(\varphi + 4\pi) = \Phi(\varphi), \text{ weil } m_s \text{ halbzahlig!}$$

$j = 0$	$m_j = 0$
$j = \frac{1}{2}$	$m_j = m_s = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
$j = 1$	\dots
$j = \frac{3}{2}$	$m_j = m_s = (-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2})$
\vdots	\vdots

Merke: Spin-Multipletts sind geradzahlig !

Konzept: Experiment besehen \rightarrow Algebra zuordnen \rightarrow Vorhersagen für das Experiment machen \rightarrow wenn Vorhersagen richtig \Rightarrow das Experiment ist quantenmechanisch verstanden

Beispiel: Das Hadron, speziell Δ (schweres Nukleon)

$m_\Delta = 1236 \text{ MeV}, \tau = \frac{3}{2}$	$\tau_3: +\frac{3}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
	Δ^{++}	Δ^+	Δ^0	Δ^-

Quartett

$$\hat{\tau}_3, \hat{\tau}^2 = \hat{\tau}^2 = \hat{\tau}_1^2 + \hat{\tau}_2^2 + \hat{\tau}_3^2; \tau_i^2 = \hat{\tau}_i \hat{\tau}_i$$

$$\tau^2 |\tau, \tau_3\rangle = \tau(\tau + 1)\hbar$$

$\tau :=$ "Isospin"

Neuer Versuch: $Y := Q_{max} + Q_{min}$, maximale + minimale Ladung

$\Delta: Y = +1$	$Y(\Xi) = -1$	$Y(\Lambda) = 0$
	$Y(\Sigma) = 0$	$Y(N) = 1$

GELL - MANN - NISHIJIMA - RELATION: $Q = \frac{Y}{2} + \tau_3$
in den 50er-Jahren Hadronen-Spektrum vorhergesagt

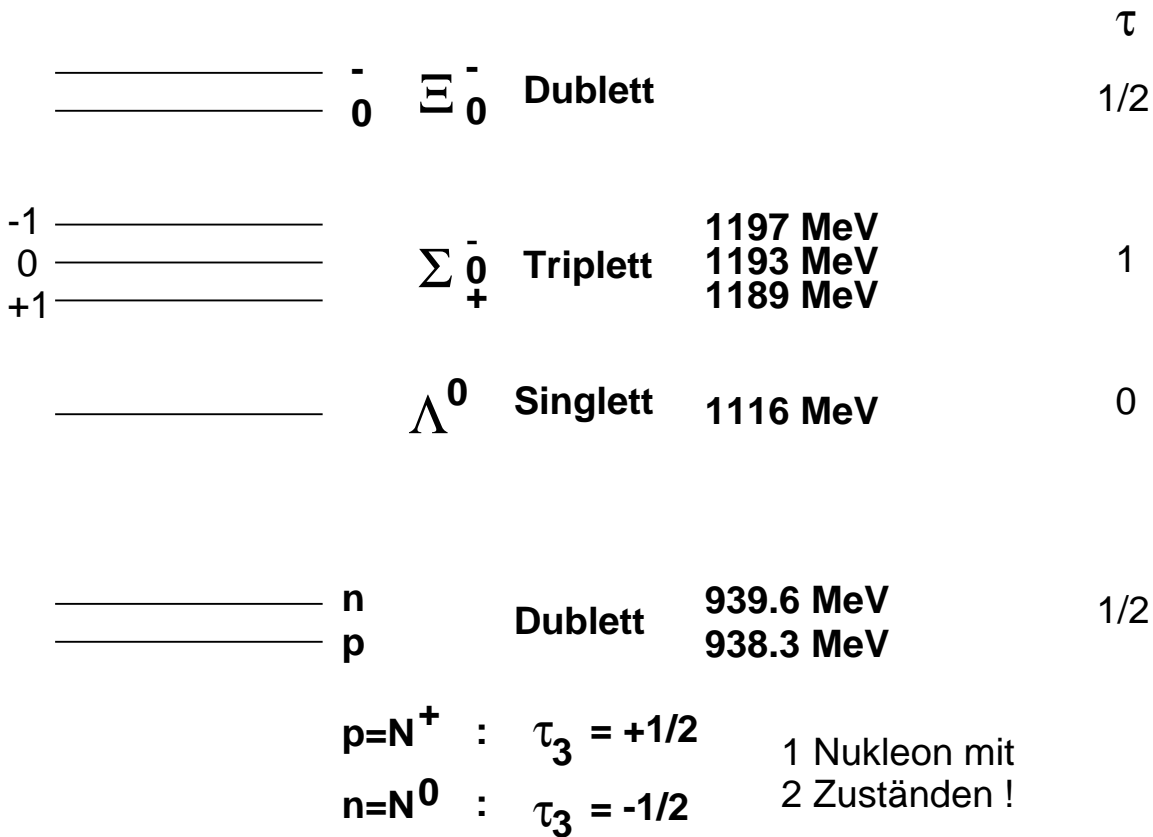
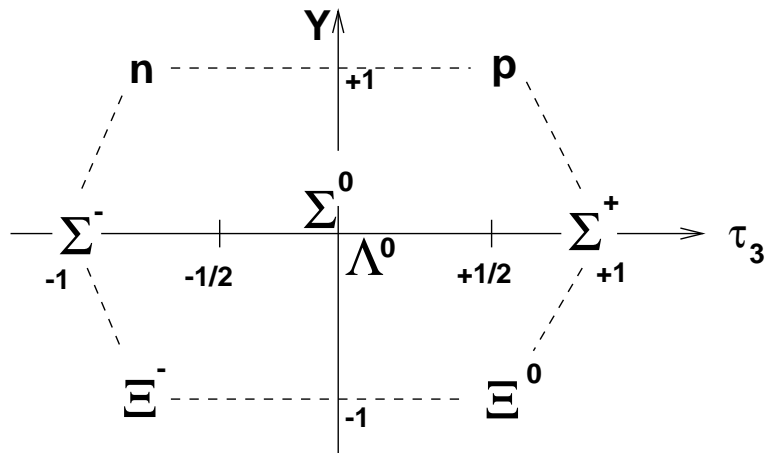


Abbildung 13: Multiplett mit 8 Zuständen $\tau = \frac{7}{2}; \tau_3 = (-\frac{7}{2}, \dots, +\frac{7}{2})$



Vorlesung vom 22.01.96

16 Wiederholung der Zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\delta_t\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} + V(x,t)\right)\psi(x,t)$$

Zeitentwicklungs-Operator: $U(t, t_0)$

$$|\alpha, t_0, t \rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0 \rangle$$

Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \delta_t U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

1. H zeitabhängig

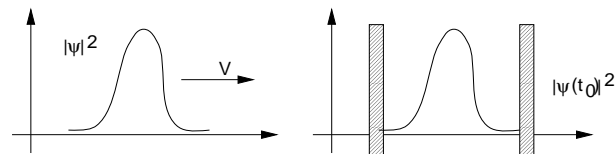
\Rightarrow Die DGL läßt sich separieren, $U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$

$$\begin{aligned} & e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |\psi, t_0 \rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \left(\sum_n c_n |\varphi_n \rangle \right) \\ &= \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} c_n(t-t_0)} |\varphi_n \rangle \end{aligned}$$

Beispiel:

$$H \neq H(t), H|\alpha, t_0 \rangle = \epsilon_\alpha |\alpha, t_0 \rangle$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_\alpha (t-t_0)}$$



"freies Teilchen einsperren"

$$|\psi, t_0 \rangle = \sum_n c_n |\varphi_n \rangle \quad 1 = \sum_n |c_n|^2 \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi(t_0) \rangle$$

2. $H = H(t) \quad [H(t_1), H(t_2)] = 0 \quad \forall t_1, t_2 \in \mathcal{R}$ Ausarbeitung: Überlege

Dir, bei welchen Systemen 2. gilt ?

kurze Nebenüberlegung:

$$\exp(H) = 1 + \frac{H}{1!} + \frac{H^2}{2!} + \dots$$

$$\exp(H_1 + H_2) \neq e^{H_1} \cdot e^{H_2} \text{ falls: } [H_1, H_2] \neq 0$$

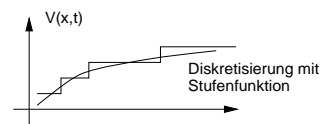
$$\text{Ansatz: } U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')\right)$$

$$t = t_0 + 2\Delta t:$$

$$\int_{t_0}^{t_0+2\Delta t} dt' H(t')$$

$$\Delta t H(t_0) + \Delta t H(t_0 + \Delta t)$$

$$\Rightarrow U(t_0 + 2\Delta t, t_0) = U(t_0 + 2\Delta t, t_0 + \Delta t) U(t_0 + \Delta t, t_0)$$



Der exakte Beweis ist trivial

3. $H(t_1)$ und $H(t_2)$ kommutieren nicht:

Formale Lösung:

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \cdot H(t_2) \cdot \dots \cdot H(t_n)$$

F. J. DYSON-SERIE Beweis in der Übung!

17 Addition von Drehimpulsen

17.1 Wiederholung: Verschiedene Drehimpulse

1. Spin oder "Eigendrehimpuls"

Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ üblicherweise definiert durch EZ's von S_z

Die Operatoren

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} \{|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\} \\ S_y &= \frac{\hbar}{2} \{-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\} \\ S_z &= \frac{\hbar}{2} \{|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\} \end{aligned}$$

erfüllen die *Kommutator-Relationen* für den Drehimpuls

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

Ausarbeitung: Schreibe die EZ von S_y und S_x als Linearkombination der EZ von S_z

\underline{S}^2 hat nur einen EW, der 2-fach entartet ist. $\underline{S}^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle$

Ausarbeitung: Schreibe die obigen Relationen im Pauli-Format auf

$$[\underline{J}^2, J_k] = 0$$

Nützliche Operatoren:

$$\begin{aligned} J_{\pm} &= J_x \pm iJ_y & [J^2, J_{\pm}] &= 0 \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z & J_+ J_{\pm} |a, b\rangle &= ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle \\ [J_z, J_{\pm}] &= \pm \hbar J_{\pm} & &= (b \pm \hbar)(J_{\pm} |a, b\rangle) \\ & & &= [J_{\pm} |a, b\rangle + b J_{\pm} |a, b\rangle] \end{aligned}$$

2. Bahndrehimpuls $\underline{L} = \underline{x} \times \underline{p}$

$L_x = yP_z - zP_y$ erfüllt auch die Drehimpuls Kommutator-Relationen!

Allgemeine EW-Gleichungen für Drehimpulsoperatoren,

$$\underline{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$\underline{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

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

($j = \frac{1}{2}$ Spin-System, j ganzzahlig, ist z.B. Bahndrehimpuls)

17.2 Drehimpuls-Addition

Zustands-Ket von einem Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen : $|x, \pm\rangle = |x'\rangle \otimes |\pm\rangle$

⇒ Spin-operator einerseits und orts- und Impulsoperator andererseits, wirken auf unterschiedliche Subräume des Hilbertraumes.

⇒ Ein beliebiger Orts- und Impuls-Operator $f(x, P)$ kommutiert mit beliebigen Spin-Operator $G(S) : [F(x, P), G(S)] = 0$

$\text{vek} L^2, \underline{L}_z, \underline{S}^2, \underline{S}_z$

Welche Eigenschaften hat der Operator $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S} = \underline{L} \otimes \underline{1} + \underline{1} \otimes \underline{S}$?

\underline{J} ist wieder ein Drehimpulsoperator!

$\underline{J}_1^2, \underline{J}_{1z}, \underline{J}_2^2, \underline{J}_{2z}$

1.

$$\begin{aligned} J_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ J_{1z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= m_1\hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ J_2^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ J_{2z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= m_2\hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

2. Eigenkets von $\underline{J}_1^2, \underline{J}_2^2, \underline{J}^2, J_z$

$$[\underline{J}^2, \underline{J}_1^2] = [\underline{J}^2, \underline{J}_2^2] = 0 \quad [\underline{J}, J_z] = 0 \text{ bleibt zu zeigen !}$$

⇒ Die obigen Operatoren sind kompatibel!

$|j_1, j_2, j, m\rangle$ sind die EK von $\underline{J}_1^2, \underline{J}_2^2, \underline{J}^2$ und J_z

Die Transformation zwischen verschiedenen Basissätzen geschieht in der üblichen Weise: (eine 1 einfügen!)

$|j_1 j_2, m_1 m_2\rangle |j_1 j_2, j_m\rangle \leftarrow$ Transformationskoeffizienten

Die Transformationskoeffizienten nennt man

CLEBSCH-GORDAN-KOEFFIZIENTEN und müssen in der Regel mühsam berechnet werden.

Eigenschaften der CG-Koeffizienten:

1.

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j_m \rangle = 0 \quad \text{für } m \neq m_1 + m_2$$

$$J_z = J_{z1} + J_{z2}$$

$$(J_z - J_{z1} - J_{z2}) |j_1, j_2; j_m\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J_z - J_{z1} - J_{z2} | j_1, j_2; j_m \rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow |m - m_1 - m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j_m \rangle = 0$$

⇒ Behauptung

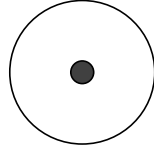
2. CLEBSCH-GORDAN-KOEFF. sind gleich Null, falls nicht gilt:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Beweis: z.B. GOTTFRIED 1986 S.215

18 Mehrteilchen Systeme

Vorlesung vom 15.01.96



H -Atom	1 Proton, 1 Elektron
He_2 -Molekül	2 He -Atome
He -Atom	2p, 2n, 2el.
\vdots	\vdots

18.1 Mehrteilchen-Systeme, 1. Teil

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}; i\hbar\delta_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

Σ : Experimentelle Kenntnis der Zerlegbarkeit in Bausteine ist nicht eindeutig,

Beispiel: H_7 -Cluster

H_7

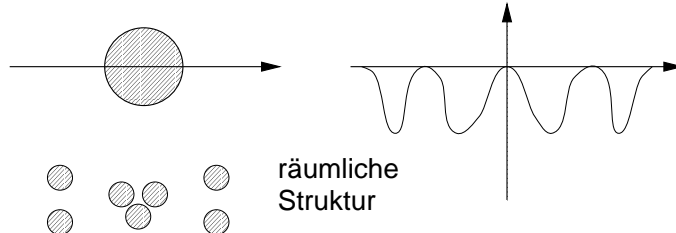
H_3, H_2, H_2

H, H, H, H, H, H, H

$Z = 7$ Aggregat +7 Elektro-

nen +7 Protonen +7 Elektro-

nen



Methode: jeweils \hat{H} konstruieren \rightarrow Schrödinger-Gleichung lösen $\rightarrow E_n$

Gesamtenergien, $|\psi_n\rangle$ Gesamtwellenfunktion

H_7 :

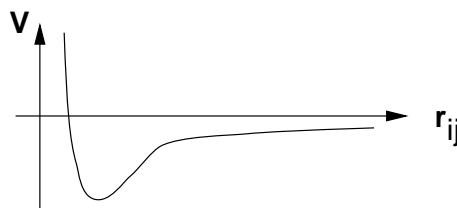
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M_{H_7}}\delta_{xx}$$

H_3, H_2, H_2 :

$\hat{H} =$

$$-\frac{\hbar^2}{2M_{H_3}}\delta_{x_{H_3}x_{H_3}} + \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{H_2}}\delta_{x_{H_2}i}x_{H_2}i \right) + V(x_{H_3}, P_{H_3}iP_{1H_2}, x_{1H_2}iP_{2H_2}, x_{2H_2})$$

$$\text{z.B.: } V = \left(-\frac{C_{H_3-H_2}}{(\gamma_{H_3} - \gamma_{H_2})^6} + \frac{D_{H_3-H_2}}{(\gamma_{H_3} - \gamma_{H_2})^{12}} \right) + \sum_{i=1}^2 \frac{C_{H_2-H_2}}{\vdots} \dots$$



7 Protonen, 7 Elektronen:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^7 -\frac{\hbar^2}{2m_p} \delta_{i x_p} + \sum_{i=1}^7 -\frac{\hbar^2}{2m_e} \delta_{i x_e} + \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_{ip} - r_{jp}|} + \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_{ie} - r_{je}|} + \sum_{i,\mu} \frac{-e^2}{|r_{ip} - r_{\mu e}|}$$

typische Näherungen: $m_e \ll m_p$

$$|\psi\rangle = \begin{cases} |\psi_{H_7}\rangle & \text{1 Teilchen-Funktion} & (x|\psi\rangle = \psi(x)) \\ |\psi_{H_3, H_2, H_2}\rangle & \text{3 Teilchen-Funktion} & x = \text{Koord. des } H_7\text{-Teilchens} \end{cases}$$

$$(X_{H_3} | C_1 X_{H_2} | C_2 X_{H_2} | \psi\rangle = \psi(X_{H_3}, X_{H_2}, X_{H_2})$$

∴ andere Zerlegung analog

18.2 Vertauschbare Operatoren

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \text{ 1 Teilchen, 1 Dimension}$$

$$[\hat{X}_\alpha, \hat{P}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta}, \alpha, \beta = 1, 2, 3 \text{ mehrere Teilchen, } N \text{ Stück: } i = 1, 2, \dots, N$$

$$[i\hat{X}_\alpha, j\hat{P}_\beta] = i\hbar \cdot 1 \cdot \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$$

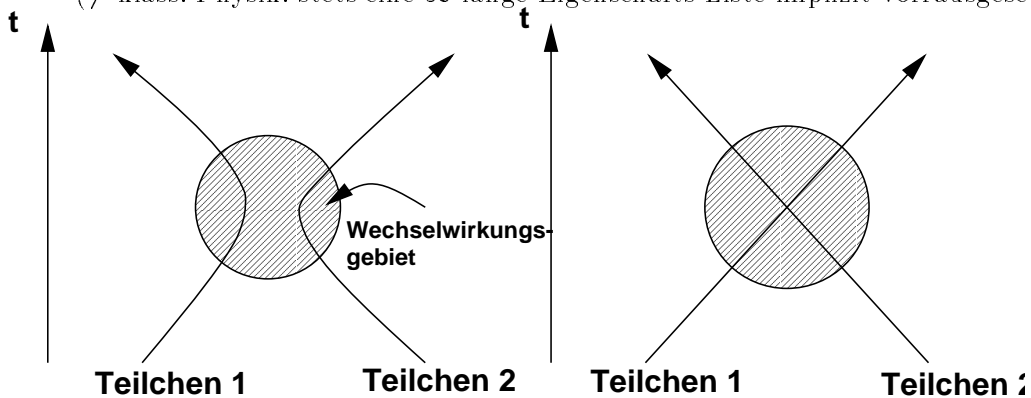
18.3 Operatoren, die mit \hat{H} vertauschen

gegeben. 2 Teilchen

Teilchen := $\{\psi(x, t); m, s, e, s_3, \dots\}$ Liste seiner Eigenschaften, diese ist stets endlich!

$|\psi : T_1, T_2\rangle$: bei gleicher Quantenzahl-Liste heißen die beiden Teilchen identisch!

(≠ klass. Physik: stets eine ∞ -lange Eigenschafts-Liste implizit vorausgesetzt)



wenn Teilchen 1 und Teilchen 2 identisch sind, ist keine Unterscheidung

$$\hat{P}_{ij} |\psi[1, 2, 3, \dots, i, \dots, j, \dots, N]\rangle = |\psi[1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N]\rangle$$

Vertauschungsoperator \hat{P}_{ij} , N identische Teilchen

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \hat{P} \psi | \hat{P} \psi \rangle = \langle \psi | \underbrace{\hat{P}^\dagger \hat{P}}_1 | \psi \rangle \quad \hat{P}^2 = 1$$

Eigenzustände zu \hat{P} :

$$\hat{P}|\varphi\rangle = \hat{P}|\varphi[1, \dots, N]\rangle = p|\varphi[1, \dots, N]\rangle = |\varphi[1, \dots, N]\rangle = p^2|\varphi[1, \dots, N]\rangle$$

$p = +1, p = -1$ 2 Eigenwerte

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{P=+1} \otimes \mathcal{H}_{P=-1}$$

Fragestellung in den 20er Jahren: vertauscht \hat{P} mit \hat{H} ?

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0, \text{ falls: } |\varphi[1, \dots, N], t=0\rangle_{p=+1} \implies |\varphi, t>0\rangle_{p=0-1}$$

1. $p=+1$, Einstein (Paris), Bose

- (a) Lichtquanten, $s=1$
- (b) Gluonen, $s=0$
- (c) Gravitonen, $s=2$
- (d) Pionen
- (e) He-Atome

2. $p=-1$, Fermi, Dirac

- (a) Elektronen, $s=\frac{1}{2}$
- (b) Quarks, $s=\frac{1}{2}$
- (c) Protonen, $s=\frac{1}{2}$
- (d) Hadronen, $s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
- (e) H-Atome
- (f) He_3 -Moleküle

experimentelle Erkenntnis:

1. *alle* bisher gemessenen Mehrteilchen-Systeme mit identischen Teilchen haben stets scharfen Eigenwert zu \hat{P} ; entweder zu $p = +1$ oder $p = -1$
2. $[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \quad \forall \hat{H} \implies$ es gibt keine Mehrteilchen-Systeme, die 1.) nicht erfüllen

PAULI: Spin-Statistik-Theorem:

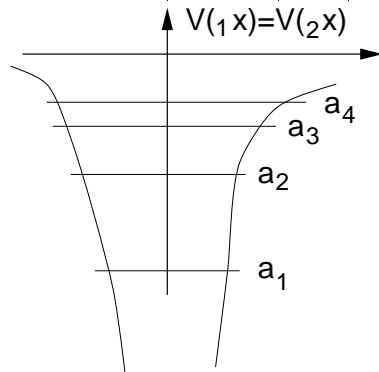
- identische Teilchen mit $p=+1$ haben stets ganzzahligen Spin
- identische Teilchen mit $p=-1$ haben stets halbzahligen Spin

18.4 Konstruktion einfacher Mehrteilchen-Zustände

Einteilchen-Zustände $\hat{H} := \hat{h}_1 + \hat{h}_2$

$$\hat{h}_1 := -\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{1x} \delta_{1x} + V(1x) \quad \hat{h}_2 := -\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{2x} \delta_{2x} + V(2x)$$

es ist dann: $|1, 2\rangle = |1\rangle \cdot |2\rangle$ Produkt zweier 1-Teilchen-Zustände



$\hat{h}|i\rangle = a_i|i\rangle$ Einteilchen Eigenzustände
 Spektren der beiden Teilchen gleich, falls
 $\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2$

$$E|1, 2\rangle = \hat{H}|1, 2\rangle$$

$$E|1\rangle|2\rangle = h_1|1\rangle|2\rangle + h_2|1\rangle|2\rangle$$

$$E = a_1 + a_2$$

Summe der Einteilchen-Energien

$|1, 2\rangle = |1\rangle|2\rangle$, sondern (?) Linearkombination, sodaß:

$$\hat{P}|1, 2\rangle_{\pm} = \pm|2, 1\rangle$$

$$|1, 2\rangle \rightarrow \frac{1}{2}(1 \pm P_{12})|1, 2\rangle$$

Ansatz:

$$P_{12}(\frac{1}{2}(1 \pm P_{12}))|1, 2\rangle = \frac{1}{2}(P_{12} \pm P_{12}^2)|1, 2\rangle = \pm\frac{1}{2}(1 \pm P_{12})|1, 2\rangle$$

$$|1, 2\rangle_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm P_{12})|1, 2\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle|2\rangle \pm |2\rangle|1\rangle)$$

wähle spez. für $\psi_1 \psi_2$:

$$|1, 1\rangle_{\pm} = \frac{1}{2}(|1\rangle|1\rangle \pm |1\rangle|1\rangle) = \begin{cases} |1\rangle|1\rangle, & \text{falls } p = +1 \\ 0, & \text{falls } p = -1 \end{cases}$$

$p = -1$: 2 Teilchen können nicht im selben Zustand sein. PAULI-PRINZIP

18.5 N-Teilchen

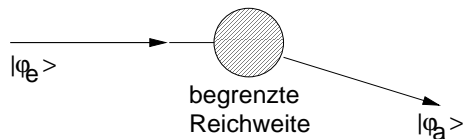
$$\hat{S}|1, 2, \dots, N\rangle = |1, 2, \dots, N\rangle_+$$

$$\hat{S} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(\nu)} (+1)^P \hat{P}_{(\nu)}$$

$$\hat{A}|1, 2, \dots, N\rangle = |1, 2, \dots, N\rangle_+$$

$$\hat{A} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P(\nu)} (-1)^P \hat{P}_{(\nu)}$$

18.6 Einfache Streuprobleme



bekanntes Gegenbeispiel: COULOMB-POTENTIAL, $V(r) \simeq \frac{1}{r}$

18.7 Ein Teilchen, nichtrelativistisch

$$i\hbar\delta_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(x))|\psi\rangle$$

Kausalität: $\delta_t \rightarrow \delta_\mu; \mu = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$\hat{H}_0 \simeq -\frac{\hbar^2}{2m}\delta_{xx} \text{ (muß linear in } P_\mu \text{ sein)}$$

18.8 N-Teilchen, nichtrelativistisch

17.01.96

Wir betrachten Mehrteilchensysteme, bei denen N Teilchen die gleiche Eigenschaftsliste haben:

$$\hat{H}(1, 2, \dots, N); \quad |\psi\rangle = |\psi(1, 2, \dots, N)\rangle; \quad \hat{p}_{ij}|\psi\rangle_{Phys} = \pm|\psi\rangle_{Phys}$$

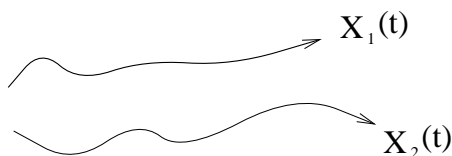
$$[\hat{p}_{ij}, \hat{H}] = 0 \quad \forall \hat{H}$$

Die Entdeckung, daß \hat{p}_{ij} mit allen \hat{H} vertauscht, war in den zwanziger Jahren eine große Überraschung.

Warum gibt es diese Eigenschaft in der klassischen Mechanik nicht?

Massenpunkt: $\{m, x(t)\}$ (vollständig lokalisiert)

N=2:



In der Quantenmechanik haben wir nicht lokalisierte Variablen:

$$\psi_1(x_1, t), \quad \psi_2(x_2, t) \quad x_1, x_2 \in \mathbb{R}$$

Es existieren nur zwei Klassen von physikalischen Mehrteilchensystemen:

a) Bose-Einstein-Teilchen, die alle einen ganzzahligen Spin besitzen

$$\text{Eigenwert } \hat{p}|\psi\rangle_{Phys} = +|\psi\rangle_{Phys}$$

b) Fermi-Dirac-Teilchen, die alle einen halbzahligen Spin besitzen

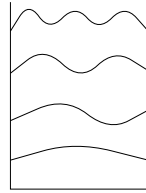
$$\text{Eigenwert } \hat{p}|\psi\rangle_{Phys} = -|\psi\rangle_{Phys}$$

$$\hat{S}|\psi\rangle = |\psi\rangle_+; \quad \hat{S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (+1)^{P_{\nu}} P_{\nu}$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle_-; \quad \hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^{P_{\nu}} P_{\nu}$$

P'_ν sind Permutationen der Teilchen.

18.9 Konstruktion von Mehrteilchenzuständen



$V_0(x)$:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 n^2$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin k_n x$$

$$k_n = \frac{\pi n}{L}$$

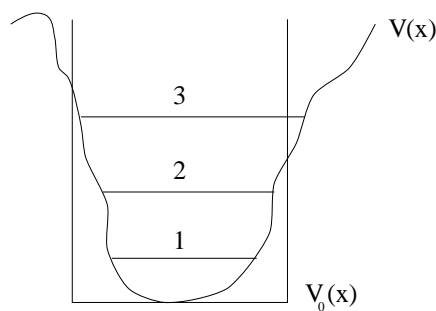
1-Teilchen:

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} + V_0, \quad \text{Basis : } \{\varphi_n(x)\}$$

$$|\psi(1)\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i(x)$$

Darstellung eines allgemeinen Zustandes - andere Kurschreibweisen:
Zum Beispiel:

$$\{\alpha_1(t), \alpha_2(t), \dots\}, \quad \text{Nebenbedingung : } \sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$



$N=1$:

Störungstheorie: $V(x) = V_0(x) + W$

Zum Beispiel:

$$|\psi\rangle, \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^0 |\varphi_n\rangle$$

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = \sum_i \beta_i \varphi_i(x)$$

$$\{\beta_1, \beta_2, \dots\}, \text{Nebenbedingung: } \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1 = \sum_i |\beta_i|^2$$

N=2:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\nu=1}^N \hat{H}_{0,\nu}}_{\sum_{\nu=1}^N \hat{H}_1} + \sum_{\nu=1}^N \hat{W} + \sum_{\nu,\mu;\nu \neq \mu}^N \hat{W}(\hat{x}_\nu, \hat{x}_\mu, \hat{p}_\nu, \hat{p}_\mu)$$

$$\text{typischerweise } \hat{W}(|\underbrace{r_i - r_j}_r|, |\underbrace{p_i - p_j}_p|)$$

$$\hat{W} = \hat{W}_0(r)(1 - cp^2), \quad c > 0$$

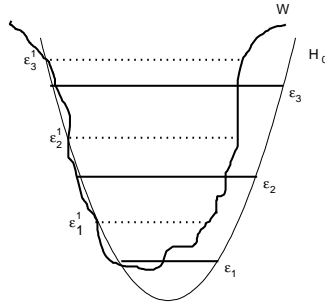
Fermionen:

Basis:

$$H_0 |\varphi_n\rangle = \varepsilon_n^0 |\varphi_n\rangle$$

$$H_1 |\psi_n\rangle = \varepsilon_n^1 |\psi_n\rangle; \quad |\psi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n |\varphi_n\rangle$$

Aus 1-T-Zuständen 2-T-Zustände konstruieren:



Teilchen 1: $|\varphi_\nu\rangle$, Teilchen 2: $|\varphi_\mu\rangle$

$$\hat{A} |\varphi_\nu\rangle_1 |\varphi_\mu\rangle_2 = \frac{1}{2} (1 - \hat{p}_{12}) |\varphi_\nu\rangle_1 |\varphi_\mu\rangle_2$$

$$= \frac{1}{2} (|\varphi_\nu\rangle_1 |\varphi_\mu\rangle_2 - |\varphi_\nu\rangle_2 |\varphi_\mu\rangle_1)$$

$$= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} |\varphi_\nu\rangle_1 & |\varphi_\nu\rangle_2 \\ |\varphi_\mu\rangle_1 & |\varphi_\mu\rangle_2 \end{vmatrix} = |\varphi_A(1,2)\rangle = S_{\mu\nu} \quad \text{“Slater – Determinante”}$$

$$|\psi(1,2)\rangle = \sum_{\mu,\nu}^{\infty} \alpha_{\mu\nu} S_{\mu\nu}$$

2-Teilchen-Basiszustände:

$$\{S_{\mu\nu}\}, \quad \forall_{\mu,\nu}$$

$$\hat{p} |\psi(1,2)\rangle = \sum_{\mu,\nu} \alpha_{\mu\nu} \hat{p} S_{\mu\nu} = -|\psi(1,2)\rangle$$

N-Teilchen:

$$|\psi(1, 2, \dots, N)\rangle = \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N=1}^{\infty} \alpha_{\nu_1 \dots \nu_N} S_{\nu_1 \dots \nu_N}$$

Suche nach dem Grundzustand:

$$\hat{H}|\psi_0(1, 2)\rangle = E_0|\psi_0(1, 2)\rangle$$

$$\left(\sum_{\nu} \hat{H}_{1,\nu} + \sum_{\nu,\mu} W(r_{\nu}, r_{\mu}) \right) \sum_{\nu_1, \nu_2} \alpha_{\nu_1 \nu_2} S_{\nu_1 \nu_2} = E_0 \sum \alpha_{\nu_1 \nu_2} S_{\nu_1 \nu_2}$$

Parameterraum, in dem die Koeffizienten zu variieren sind:

$$\alpha_{12}, \alpha_{13}, \alpha_{14}, \dots, \alpha_{23}, \alpha_{24}, \dots, \alpha_{34}, \alpha_{35}, \dots$$

Bei der Suche nach einer möglichst passenden Basis $\{\varphi_n(x)\}$ ist Sorgfalt geboten:

$$|\psi(1, 2)\rangle = \alpha_1 S_{12} + \alpha_2 S_{13} + \alpha_3 S_{23}$$

Weitere Suche nach dem Grundzustand:

$$E_0 = \langle S_{12} | \hat{H} | S_{12} \rangle = \langle S_{12} | \hat{H}_{1,1} + \hat{H}_{2,2} + \hat{W}_{12} | S_{12} \rangle$$

$$= \frac{1}{2} (\langle 1|_1 \langle 2|_2 - \langle 1|_2 \langle 2|_1) (\hat{H}_{1,1} + \hat{H}_{1,2} + \hat{W}_{12}) \frac{1}{2} (|1\rangle_1 |2\rangle_2 - |1\rangle_2 |2\rangle_1)$$

$$\frac{1}{4} \langle 1|_1 \langle 2|_2 \hat{H}_{1,2} |1\rangle_1 |2\rangle_2 =$$

$$\frac{1}{2} (\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0 + \langle 1|_1 \langle 2|_2 \hat{W}_{12} |1\rangle_1 |2\rangle_2 - \underbrace{\langle 1|_2 \langle 2|_1 | \hat{H}_1 |1\rangle_1 |2\rangle_2}_{= - \underbrace{\langle 1|_2 \langle 2|_1 |1\rangle_1 |2\rangle_2}_0 \varepsilon_1^0})$$

$$E_0 = \frac{1}{4} (\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0 + 0 + 0 + \langle 1|_1 \langle 2|_2 \hat{W}_{12} |1\rangle_1 |2\rangle_2$$

$$- \langle 1|_2 \langle 2|_1 \hat{W}_{12} |1\rangle_1 |2\rangle_2 + \langle 1|_2 \langle 2|_1 \hat{H}_1 |1\rangle_1 |2\rangle_2)$$

$$E_0 = (\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0) + \sum_{i=1}^4 W - \text{Terme} \quad (\text{Wechselwirkungsterme})$$

Dadurch haben wir erkannt, daß im allgemeinen $E = \sum_i \varepsilon_i$ nicht gilt. Die Besetzung der ungestörten Zustände ist eben nicht $(1, 1, 0, 0, \dots)$.

18.10 Zwei-Teilchen-Systeme

24.01.96

Wir haben:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{h}_1 + \hat{h}_2}_{\hat{H}_0} + V(x_1, x_2) \quad \text{lokales Potential}$$

Basis zu \hat{H}_0 : $\hat{H}_0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$$\hat{h}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{x_1x_1} + V(x_1)$$

$$\hat{h}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{x_2x_2} + V(x_2)$$

Wir betrachten zwei identische Teilchen in einem Potential $V(x)$. Die Basis eines Ein-Teilchen-Systems ($|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$) unterscheidet sich von der Zwei-Teilchen-Basis:

$$\begin{array}{lll} |a\rangle_1 |a\rangle_2, & |a\rangle_1 |b\rangle_2, & \dots \\ |b\rangle_1 |a\rangle_2, & |b\rangle_1 |b\rangle_2, & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

Der Eigenzustand zu $P_{12}|\psi\rangle$ ist jedoch $\pm|\psi\rangle$

$$\oplus \text{ Bosonen} \quad \ominus \text{ Fermionen}$$

$$\hat{A}(|a\rangle |b\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle_1 |b\rangle_2 - |a\rangle_2 |b\rangle_1)$$

$$\begin{aligned} E_{ab} &= \frac{1}{2}(\langle a|_1 \langle b|_2 - \langle b|_1 \langle a|_2)(\hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_{12})(|a\rangle_1 |b\rangle_2 - |b\rangle_1 |a\rangle_2) \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_b) + \frac{1}{2} \underbrace{(\langle a|_1 \langle b|_2 \hat{h}_{12} |a\rangle_1 |b\rangle_2 + \langle b|_1 \langle a|_2 \hat{h}_{12} |b\rangle_1 |a\rangle_2)}_{\text{"direkte" Wechselwirkungsterme}} \\ &\quad - \frac{1}{2} \underbrace{(\langle a|_1 \langle b|_2 \hat{h}_{12} |b\rangle_1 |a\rangle_2 + \langle b|_1 \langle a|_2 \hat{h}_{12} |a\rangle_1 |b\rangle_2)}_{\text{"Austauschung"}} \end{aligned}$$

Es wird je ein Term ausgewertet: $\langle a|_1 \langle b|_2 \hat{h}_{12} |a\rangle_1 |b\rangle_2$

$$\int dx'_2 \int dx'_1 \langle a|_1 \langle b|_2 x'_1 \rangle \langle x'_1 | (|x'_2 \rangle \langle x'_2 |) \hat{h}_{12}$$

$$\cdot \int dx_1 \int dx_2 (|x_1 \rangle \langle x_1 |) (|x_2 \rangle \langle x_2 |) |a\rangle_1 |b\rangle_2$$

$$= \int dx'_1 \int dx'_2 \int dx_1 \int dx_2 a^*(x'_1) b^*(x'_2) \hat{h}_{12}(x'_1, x'_2, x_1, x_2) a(x_1) b(x_2)$$

$\hat{h}_{12}(x'_1, x'_2, x_1, x_2)$ ist sehr oft $= \hat{h}_{12}(x_1, x_2) \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) + \frac{1}{2}(\partial_{x_1 - x'_1})^2 \hat{h}_{12}$

Falls es sich bei \hat{h}_{12} um ein rein lokales Potential handelt, lautet der direkte Term:

$$\int dx_1 \int dx_2 |a(x_1)|^2 |b(x_2)|^2 \hat{h}_{12}(x_1, x_2)$$

Sehr oft gilt:

$$\hat{h}_{12}(x_1, x_2) = \hat{h}_{12}(\underbrace{|x_1 - x_2|}_{=|r|})$$

Koordinatentransformation:

$$(x_1, x_2) \longrightarrow \left(\vec{r} := x_1 - x_2, \vec{R} := \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \right)$$

Der direkte Term lautet dann:

$$\int dr \int dR |a(r, R)|^2 |b(r, R)|^2 h_{12}(r)$$

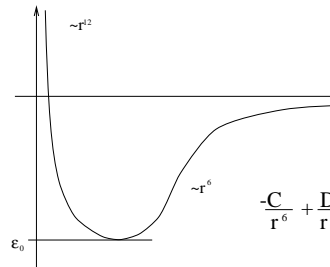
Im allgemeinen ist $r \ll R$. Deshalb ist eine Entwicklung nach der zweiten Ordnung möglich, da die linearen Terme verschwinden.

Austauschterm analog:

$$\int dx_1 \int dx_2 a^*(x_2) b^*(x_1) h(x_1, x_2) a(x_1) b(x_2)$$

Transformieren und berechnen:

Zum Beispiel: $\hat{h}_{12}(x_1, x_2) =$



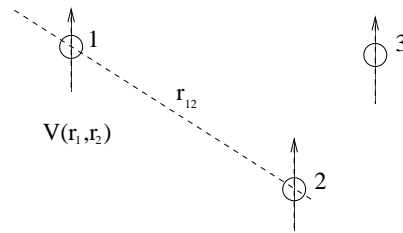
$$E_{ab} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b) + \underbrace{E_D^W}_{\text{direkt}} + \underbrace{E_A^W}_{\text{Austausch}}$$

18.11 N-Teilchensysteme

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^N h_i}_{1\text{-Teilchen-Operator}} + \underbrace{\sum_{ij} h_{ij}}_{2\text{-Teilchen-Operator}} + \sum_{ijk} h_{ijk} + \dots + \underbrace{\sum_{i_1 \dots i_N} h_{i_1 \dots i_N}}_{N\text{-Teilchen-Operator}}$$

Gibt es $N > 2$ Potentiale ?

Als Beispiel soll ein Ar^3 -Cluster betrachtet werden. Dort hat jedes Teilchen einen induzierten Dipol. Man unterscheidet zwischen zwei Fällen:



- Elektrisch statischer Fall:

$$V(1, 2, 3) = \sum_{ij}^3 V_{ij}(x_{ij})$$

- Diamagnetisch polarisierbarer Fall:

$$V(1, 2, 3) = \dots + \sum_{ijk} V_{ijk}$$

Die Festkörperphysiker benutzen einen Trick:

Anstelle von

$$h(1, \dots, N) = \sum_i^N h_i + \sum_{ij}^N h_{ij} + \dots$$

versuchen sie, die experimentellen Größen ρ_∞ und $\varepsilon_\infty = \frac{E}{A}$ mit angepassten h_i, h_j zu optimieren:

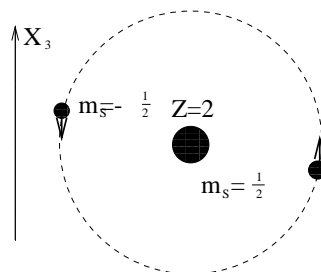
$$h(1, \dots, N) = \sum_i^N \bar{h}_i + \sum_{ij}^N \bar{h}_{ij} + \dots$$

Die sogenannte Konvergenzbeschleunigung funktioniert allerdings nur für einen sehr eingeschränkten Dichtebereich $\rho_{\text{Materie}} \simeq \rho_{\text{Gleichgewicht}}$

18.12 Zwei-Elektronen-System

Als Beispiel betrachten wir das Helium-Atom: $Z=2$, 2 Elektronen

Elektron = $\{\varphi(x, t); s, m_s\}$



$$|\psi\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2} \langle x_1, m_{s_1}; x_2, m_{s_2} | \alpha \rangle$$

$$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = -|\psi\rangle \quad \text{Fermionen}$$

$$[\hat{H}, \hat{S}_{tot}^2] = 0$$

$$|\psi\rangle = \phi(x_1, x_2)\chi$$

χ Eigenzustände zu \hat{S}^2

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) =_{S=1} \left\{ \begin{array}{c} \chi_{++} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) \\ \chi_{--} \end{array} \right\} \quad \text{Triplett}$$

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) =_{S=0} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+}) \right\} \quad \text{Singlett}$$

Idee: $\hat{p}_{12} = \hat{p}_{12}^{Ort} \hat{p}_{12}^{Spin}$

$$\Rightarrow \hat{p}_{12}^{Spin} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\psi}{\hbar^2} \hat{S}_1 \hat{S}_2 \right) \quad \text{mit} \quad \hat{S}_1 \hat{S}_2 = \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \quad \text{Triplett} \\ \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \left(-\frac{3}{4}\right) \quad \text{Singlett} \end{array} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{4} \right) = +1 \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} \left(-3 \frac{\hbar^2}{4}\right) \right) = -1 \end{array} \right\}$$

$$\hat{p}_{12}|\alpha\rangle = \hat{p}_{12}^{Ort} \hat{p}_{12}^{Spin}|\alpha\rangle$$

	ϕ	χ	$PSpin$
Antisymmetrisch	$P_{12}^{Ort}\phi = -\phi$	Triplett	+1
Symmetrisch	$P_{12}^{Ort}\phi = +\phi$	Singlett	-1

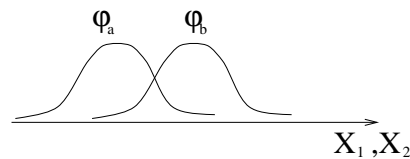
Elektron:

$$(\phi, \chi_{Spin}, \tau_{Isospin}) \rightarrow |\psi\rangle = |\phi\rangle |\chi\rangle |\tau\rangle$$

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) \pm \varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1)) \quad \text{Ortswellenfunktionsanteil}$$

$$W(x_1, x_2) = \phi^* \phi = \frac{1}{2} \underbrace{(|\varphi_a(x_1)|^2 |\varphi_b(x_2)|^2 + |\varphi_b(x_1)|^2 |\varphi_a(x_2)|^2)}_{\text{direkte Terme}} \pm \underbrace{2\text{Re}(\varphi_a^*(x_1)\varphi_b^*(x_2)\varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1) + \dots)}_{\text{Austauschterm}}$$

Die Austauschsterme beschreiben die Überlappung der Wellenfunktion



Vorlesung vom 29.01.96

19 Der Rest der Mehrteilchen ...

Betrachten 2 Fermionen (z.Bsp. Elektronen)

$$s = \frac{1}{2} \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad |\psi\rangle = \sum_{m_{s1}, m_{s2}} C_{m_{s1}, m_{s2}} \langle x_1 m_{s1}; x_2 m_{s2} | d \rangle$$

$$\hat{P}_{12} |\psi\rangle = -|\psi\rangle \quad \hat{P}_{12} = \hat{P}_{12}^{Ort} \hat{P}_{12}^{Spin}$$

$$\psi = \Phi(\underline{x}_1, \underline{x}_2) \cdot \chi$$

\hat{H} hänge nicht von den Spins ab (d.h. es findet keine Wechselwirkung über die Spins statt).

$$\chi = \begin{cases} \chi_{++} & \text{symmetrisch} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) \\ \chi_{--} & \text{symmetrisch} \end{cases}$$

$$\uparrow\uparrow \quad j = 1 \quad m_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

symmetrisches Triplet
oder

$$\chi = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) \right\}$$

$$\uparrow\downarrow \quad j = 0 \quad m_j = 0$$

antisymmetrisches (bzgl. \hat{P}_{12}^{Spin}) Singlett

$$\begin{cases} \Phi_{antisymm.} & \Rightarrow \chi_{Triplet} \\ \Phi_{symm.} & \Rightarrow \chi_{Singlett} \end{cases}$$

$$\Phi(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_A(x_1)\varphi_B(x_2) \pm \varphi_B(x_1)\varphi_A(x_2)) \quad + \text{symm.,- antisymm.}$$

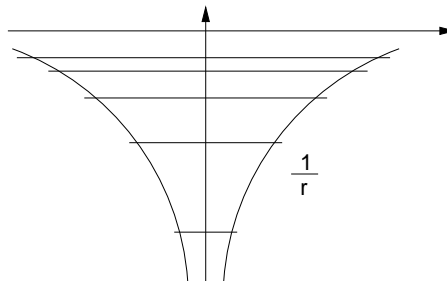
Beispiel: He-Atom

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_w$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^2 \hat{h}_i$$

$$r_i := |\underline{x}_i|$$

$$r_{12} := |\underline{x}_1 - \underline{x}_2|$$



Grundzustand $E_0 = \varepsilon_{01} + \varepsilon_{02}$

$$|\psi^0\rangle = \frac{\hat{S}}{\hat{A}} |\varphi_A^0\rangle |\varphi_B^0\rangle \quad \text{symmetrisiert oder antisymm., je nach Wellenfunktion}$$

$\varphi_{A,B,C,\dots}$ = bekannte Wasserstoff-Zustände (mit n Hauptquantenz., l, Drehimpulsquantenz. und m Magnetquantenz)

φ_A^0 = Grundzustand : $|n = 1, l = 0, m = 0\rangle = |100\rangle$

$$\Phi^0(x_1, x_2) \hat{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{Singlett} \\ \psi_{100}(x_1)\psi_{nlm}(x_2) \pm \psi_{100}(x_2)\psi_{nlm}(x_1) \\ \text{Triplett} \end{pmatrix}$$

Im Sinne der Störungstheorie bzgl. \hat{H}_w sind dies die ungestörten 2-Teilchen-Funktionen

Betrachten jetzt den Fall, daß das 2. Teilchen sich im Grundzustand befindet, es gilt also $n = 1, l = 0, m = 0 \Rightarrow$ es ist ein Singlett-Zustand ! sonst: \bar{A}

Wellenfunktion !

$$\psi_0 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \cdot e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \cdot \chi \quad a_0 = \text{Radius des H-Atoms (Bohr-Radius)}$$

$$\hat{H}_0 \psi = E_{00} \psi \quad E_{00} = \underbrace{2 \cdot 4}_8 \cdot \left(-\frac{e^2}{2a_0}\right) \quad \text{ohne } \hat{H}_w \text{ 30 mit } \hat{H}_w \text{ in 1. Ordnung}$$

Störungstheorie ergibt sich:

$$E_0 = E_{00} + E_{\Delta} \quad E_{\Delta} = \langle \psi_0 | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_0 \rangle$$

Rechnung im Sakurai [8] S.367

$$E_{\Delta} = \int dx_1^3 dx_2^3 \cdot \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} \cdot e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0} \cdot \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$r_1 = |\underline{x}_1|; \quad r_2 = |\underline{x}_2| \quad \text{Winkel } \gamma := \angle(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$$

$$\text{Ergebnis: } E_0 = E_{00} + E_{\Delta} = \left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \cdot \left(-8 + \frac{5}{2}\right) = -74,8 eV \quad \text{das Experiment liefert: } -78,8 eV$$

Variationsrechnung: $Z \rightarrow Z_{eff}$ variiert

(“Abschirmung”) $\Rightarrow Z_{eff} = 1,69$

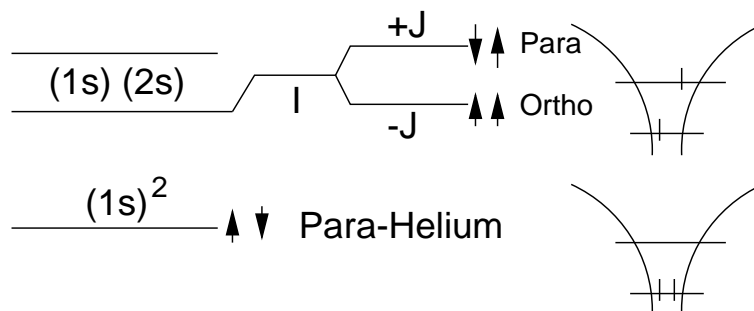
Rechnungen für niedrig angeregte Zustände:

$$E = E_{100} + E_{nlm} + E_{\Delta 100 nlm}$$

$$I := \text{direkte Terme} = \int dx_1^3 dx_2^3 |\psi_{100}(x_1)|^2 \cdot |\psi_{nlm}(x_2)|^2 \cdot \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$J := \text{Austauschterm} = \int dx_1^3 dx_2^3 \cdot \psi_{100}^*(x_1) \cdot \psi_{nlm}^*(x_2) \cdot \frac{e^2}{r_{12}} \cdot \psi_{100}(x_2) \psi_{nlm}(x_1)$$

$$E_{\Delta} = I \begin{matrix} \text{symmetrisch} \\ \pm \\ \text{antisymm.} \end{matrix} J = \left\{ \begin{array}{l} \text{Singlett} \hat{=} \text{“Para”} \\ \text{Spin} \\ \text{Triplett} \hat{=} \text{“Ortho”} \end{array} \text{ Helium} \right\}$$



Aufspaltung $\uparrow\uparrow \neq \downarrow\downarrow$ obgleich \hat{H} nicht vom Spin abhängt.

20 Young-Tableaux

$$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$$

Einteilchen Eigenschaftsliste, Elektron: $|\varphi_A(x_1); s, m_s\rangle$

$$\psi(1, 2) = \text{Phi}(x_1, x_2)\chi(s_1, m_{s1}, s_2, m_{s2})$$

man strebt an:

- $N = 2, 3, 4, \dots$ Verallgemeinerung für mehrere Teilchen
- weitere Quantenzahlen, z.B. $|\text{quark}\rangle = |\varphi_A(x_1); \frac{1}{2}; m_s; e; m_e; f; m_f\rangle$
hier steht c für colour (Farbe) z.B. "rot", "grün", "blau" und f für flavour (Geschmack)

Isospin: Nukleon:

$$|\varphi; s, m_s; \tau, m_\tau\rangle \quad \tau = \frac{1}{2}; m_\tau = \pm \frac{1}{2} \begin{cases} \text{Proton} \\ \text{Neutron} \end{cases}$$

$$\hat{P}_{12} = \begin{matrix} P_{12}^{Ort} & P_{12}^{Spin} & P_{12}^{Isospin} \\ \text{symm.} & \text{symm.} & \text{antisymm.} \\ \vdots & \text{antisymm.} & \text{symm.} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{matrix}$$

FRAGE nach Zahl und Typ der möglichen Gesamtwellenfunktionen, wird auch "book-keeping-problem" genannt!

A. Young entwickelte im Jahre 1901 das nach ihm benannte YOUNG-TABLEAUX. Im wesentlichen sind bei der Aufstellung eines solchen Tableaux drei Regeln zu beachten:

Regel 1: Jedes Elektron wird durch ein Kästchen dargestellt, eine 1 steht für Spin-Up, eine 2 für Spin-Down, Kästchen in der Horizontalen spiegeln einen symmetrischen Total-Spin wieder, die in der Senkrechten einen antisymmetrischen.

$$1 \text{ Elektron: } \square \quad : \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \square \end{array} 1 \quad \begin{array}{c} \downarrow \\ \square \end{array} 2$$

Regel 2: Nach rechts müssen die Zahlen gleich bleiben oder größer werden.

$$2 \text{ Elektronen: } \square \square \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad 2$$

Regel 3: Nach unten müssen die Zahlen steigen.

Triplet: symmetrische Zustände

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \quad \begin{array}{|c|} \hline \cancel{1} \\ \hline \cancel{1} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \cancel{1} \\ \hline \cancel{2} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \cancel{2} \\ \hline \cancel{1} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \cancel{2} \\ \hline \cancel{2} \\ \hline \end{array} \quad \longrightarrow \quad \text{Singlett}$$

Test mit 3 Elektronen: Andere Darstellung, z.B. für 3 quarks:

u, d, s für "up", "down", "strange", 3 verschieden Projektionen in einen abstrakten Raum

$$\begin{array}{l|l|l} 4 & (\text{uuu, uud, udd, ddd}) & I = \frac{3}{2} \\ & \text{Quartett} & \\ 3 & (\text{uus, uds, dds}) & I = 1 \\ & \text{Triplet} & \\ 2 & (\text{uss, dss}) & I = \frac{1}{2} \\ & \text{Doublett} & \\ 1 & (\text{sss}) & I = 0 \\ & \text{nicht da! im Isospin-Raum!} & \end{array} \quad \sum \text{DEKUPLETT}$$

$$\hat{P}_{12}^0 \hat{P}_{12}^{Ort} \cdot \hat{P}_{12}^{Spin} \cdot \hat{P}_{12}^{u,d(\text{Flavour})} \cdot \hat{P}_{12}^{colour}$$

bei dem Quartett (uuu, ...) $\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-$ Delta-Resonanz experimentell ausgemessen (Grundzustand):

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \dots\dots\uparrow\uparrow\uparrow = j = 3/2 ; \quad m = (3/2, 1/2, -$$

Quadruplett

$$\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 & 2 \\ \hline 1 & 1 & 2 & 2 \\ \hline 1 & 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \text{Zustand existiert nicht !}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 2 & \\ \hline 1 & 2 \\ \hline 2 & \\ \hline 2 & 2 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \quad \text{Doublett} \quad j = \uparrow\uparrow\downarrow$$

$$j = 1/2 ; \quad m_j = +/- 1/2$$

- $P_{12}^{Ort} \phi(1, 2, 3) = +\phi(1, 2, 3)$
vernünftige Annahme, alle 3 quarks sitzen im selben Orbit
- $P_{12}^{Spin} \chi(1, 2, 3) = +\chi(1, 2, 3)$
experimentell bestätigt
- $P_{12}^{u,d} \gamma(1, 2, 3) = -\gamma(1, 2, 3)$
Widerspruch zur FERMI-STATISTIK !

⇒ neue, Eigenschaft, neue Quantenzahl "Farbe"

$$P_{12}^{col} \delta(1, 2, 3) = -\delta(1, 2, 3) \text{ antisymm. für } \Delta$$

Singlett: ich brauche 3 Einstellmöglichkeiten:

"rot", "grün", "blau" $\hat{=} 1, 2, 3$

Das ergibt sich auch aus dem oben angesprochenen YOUNG-TABLEAUX

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} \quad \text{Singlett}$$

"man sieht nach außen vom Gesamtobjekt die Farbe nicht ("farblos")", alle bisher gemessenen Objekte (Hadronen) sind farblos



gebunden !

Wie kommt man an die Farben ran ? Antwort: Heizen und verdampfen, $T = 126 MeV = 1,2 \cdot 10^{12} K$

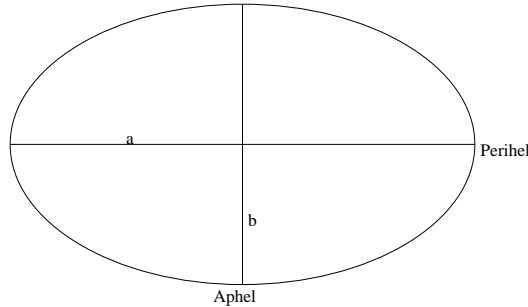
21 Das H-Atom

31.01.1996

Wir werden die Energieeigenwerte des H-Atoms berechnen. Der Hamilton-Operator lautet in diesem Fall:

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

Wir rechnen in Schwerpunktskoordinaten und Relativkoordinaten, wobei μ die reduzierte Masse ist. Zuvor stellen wir aber noch einige klassische Vorüberlegungen an: Die Bahn des Elektrons beschreibt eine Ellipse:



Die Exzentrizität der Bahn ist $e := \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$. Die Energie E ist eine Konstante der Bewegung und der Drehimpuls ist $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, $L = \frac{e^2}{2a}$, $L^2 = \mu e^2 a (1 - e^2)$

Außerdem führen wir den Runge-Lenz-Vektor ein:

$$\vec{M} := \frac{\vec{p}}{\mu} \times \vec{L} + \frac{e^2 \vec{r}}{r}$$

Der Runge-Lenz-Vektor ist ein polarer Vektorm der immer auf das Perihel zeigt und ist eine Konstante der Bewegung, wegen:

$$\dot{\vec{M}} = \frac{\dot{\vec{p}}}{\mu} \times \vec{L} + \frac{\vec{p}}{\mu} \times \dot{\vec{L}} + 2 \cdot \text{Teil} = \dots = 0$$

Wir kehren zurück zur Quantenmechanik: Aus den Vektoren \vec{r} , \vec{p} , \vec{L} werden die entsprechenden Operatoren \hat{r} , \hat{p} , \hat{L} . Aus \vec{M} wird: $\hat{M} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p}) - \frac{\chi}{r} \hat{r}$ mit $\chi = Ze^2$

Dieser Operator ist hermitesch. Der Drehimpuls-Operator hat folgende Algebra:

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0; \hat{L}_i \text{ sind die drei Erzeugenden der Drehgruppe}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0; L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0; \hat{L}^2 \text{ ist ein Casimir-Operator}$$

Eine weitere Erhaltungsgröße ist:

$$[\hat{M}, \hat{H}] = 0$$

$$\hat{L} \cdot \hat{M} = L_1 M_1 + L_2 M_2 + L_3 M_3 = \hat{M} \cdot \hat{L} = 0$$

$$\hat{M}^2 = \frac{2\hat{H}}{\mu} (\hat{L}^2 + \hbar^2) + \chi^2$$

Wenn man die Algebra der Erzeugenden der Drehgruppe

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \text{ (3 Gleichungen)}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \text{ (3 Gleichungen)}$$

und die Gleichungen

$$[\hat{M}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{M}_k \text{ (9 Gleichungen)}$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \frac{2\hat{H}}{\mu} \text{ (3 Gleichungen)}$$

zusammennimmt, erhält man eine Algebra mit 18 Gleichungen, die man wie folgt umformen kann:

Zunächst betrachten wir nur einen Unterraum von V , indem wir nur die Zustände bei einem festen E_n herausnehmen. Jetzt ist \hat{L} geeignet, um die entarteten Zustände zu benennen. Der

Hamilton-Operator wird zum Energieeigenwert $E_n < 0$, so daß man \hat{M} umschreiben kann:

$$\hat{M}' = \sqrt{-\frac{\mu}{2E_n}} \hat{M}$$

Dann erhält man die geschlossene Algebra nach Pauli:

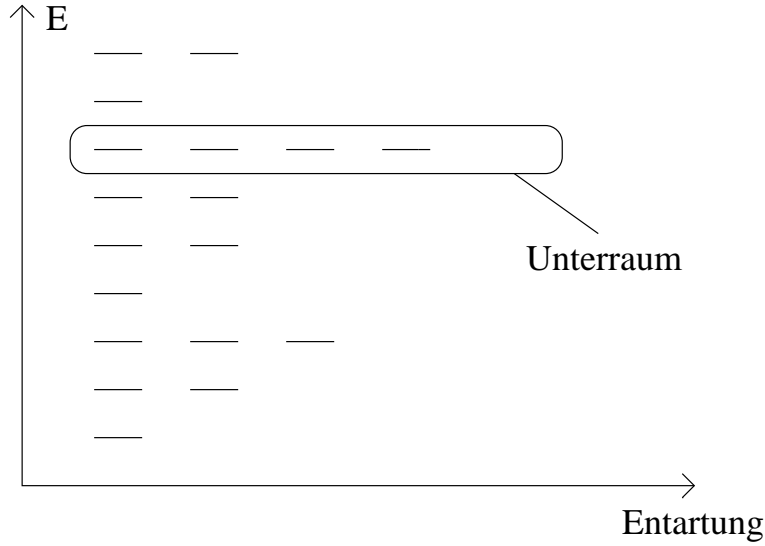
$$[\hat{M}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{M}_k$$

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

Dies ist eine Gruppe mit den 6 Erzeugenden $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3, \hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3$. Nimmt man statt der \hat{L}_i und \hat{M}_i jetzt noch die Elemente aus dem Dualraum:



$$\hat{L} \rightarrow *L; *L_i = r_j p_k - r_k p_j = L_{kj}$$

$$\hat{M}'_1 = L_{14}; \hat{M}'_2 = L_{24}; \hat{M}'_3 = L_{34}$$

Dann ergibt sich eine antisymmetrische Matrix mit 6 unabhängigen Komponenten. Diese Matrix ist aus der speziellen orthogonalen d=4-Drehgruppe (SO_4). Mit der Transformation:

$$\hat{l} := \frac{1}{2} (\hat{L} + \hat{M})$$

$$\hat{k} := \frac{1}{2} (\hat{L} - \hat{M})$$

kommt man zu einer entkoppelten Algebra:

$$\begin{aligned} [\hat{l}_i, \hat{l}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{l}_k \\ [\hat{k}_i, \hat{k}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{k}_k \\ [\hat{l}_i, \hat{k}_j] &= 0 \\ [\hat{l}, \hat{H}] &= 0 \\ SO_4 &\leftrightarrow SO_3 \times SU_2 \end{aligned}$$

Also erhält man:

$$l^2 = i(i+1)\hbar^2, i = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$k^2 = k(k+1)\hbar^2, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

\hat{l}^2 und \hat{k}^2 sind zwei Casimir-Operatoren, für die gilt:

$$\hat{l}^2 = \frac{1}{4} (\hat{L} + \hat{M}')^2$$

$$\hat{k}^2 = \frac{1}{4} (\hat{L} - \hat{M}')^2$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = [\hat{l}^2, \hat{k}_i] = 0$$

$$[\hat{k}^2, \hat{k}_i] = [\hat{k}^2, \hat{l}_i] = 0$$

$$\hat{L}\hat{M}' = 0$$

Zwei weitere Casimir-Operatoren ergeben sich aus diesen:

$$\hat{c}_1 := \hat{l}^2 + \hat{k}^2 = \frac{1}{2} (\hat{L}^2 + \hat{M}'^2)$$

$$\hat{c}_2 := \hat{l}^2 - \hat{k}^2 = \hat{L}\hat{M}' = 0$$

Wirkt der Operator \hat{c}_1 auf ein Element des oben definierten Unterraumes, so erhält man den Eigenwert:

$$c_{1q} = 2q(q+1)\hbar^2, q = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Rechnet man c_1 durch Einsetzen der jeweiligen Definitionen zurück, so erhält man:

$$c_1 = \frac{1}{2} (L^2 - \frac{\mu}{2E} M^2) = \frac{1}{2} (L^2 - \frac{\mu}{2E} (\frac{2E}{\mu} (L^2 + \hbar^2) + \chi^2)) = -\frac{1}{2}\hbar^2 + \frac{\mu\chi^2}{4E}$$

$$\Rightarrow 2q(q+1)\hbar^2 = -\frac{1}{2}\hbar^2 + \frac{\mu\chi^2}{4E}$$

Dabei ist $q = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ und E soll Eigenwert von H sein.

$$\Rightarrow E_n = -\frac{\mu\chi^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, \dots$$

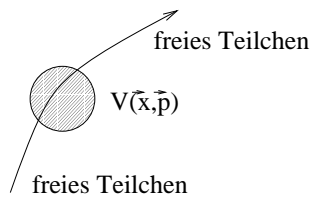
Auf diese Weise hat man die Eigenwerte ohne Verwendung der Schrödinger-Gleichung und ohne Kenntnis der Wellenfunktion erhalten.
05.02.96

22 Streutheorie

22.1 Vorbemerkungen

22.1.1 Einfachster Fall

Natürlich handelt es sich bei diesem und den folgenden Beispielen um Idealisierungen. Wir betrachten die Streuung eines nichtrelativistischen Teilchens an einem Potential V .

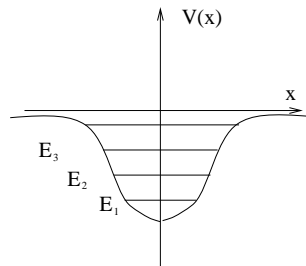


22.1.2 Gebundene Zustände

Wir betrachten hier ein System, das sich im Grundzustand E_0 befindet. Das gilt nur, wenn es mit der Außenwelt nicht wechselwirkt. Solche Systeme gibt es in der Natur natürlich nicht. Deshalb betrachten wir auch hier wieder eine Idealisierung.

Z.B. H-Atom: $E_{ion} = -13,6 \text{ eV}$

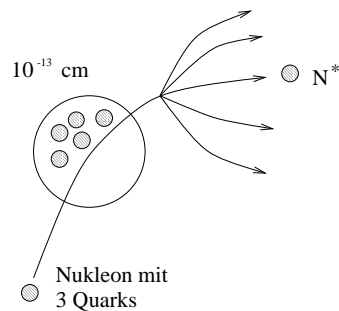
Selbst im Weltall: 3°K anheben, wegen der Hintergrundstrahlung ($10^4 \text{ }^\circ \text{K} = 1 \text{ eV}$). Die Wahrscheinlichkeit für eine Ionisierung ist proportional zu $e^{-E_{ion}/T}$.



$$\frac{E_{ion}}{T} = \frac{13}{3 \cdot 10^{-4}} = 4 \cdot 10^5$$

22.1.3 Freie, ungebundene Zustände

Hier geht das Potential $V(x)$ nicht wirklich gegen Null. Beispiele dafür sind Coulomb- oder Gravitationskräfte. Es könnte auch sein, daß noch mit weiterer Materie gestreut wird.



- Streuung in angeregten Zustand
- Überlagerung zu vielen Ausgangskanälen (Reaktionen)

Hier betrachten wir eine rein elastische, nichtrelativistische Streuung.

$$V(\vec{x}) \rightarrow \frac{1}{r} \rightarrow 0$$

$V(\vec{x})$ geht schneller gegen Null als $\frac{1}{r}$

Falls $V(x, x') \neq \delta(x - x')$ $V(x) \neq 0$ falls $x, x' \in$ Reaktionsgebiet

22.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad ; \quad \hat{H}_0 \text{ für } t \rightarrow \pm\infty$$

$$\hat{H}_0 |\phi(k)\rangle = E(k) |\phi(k)\rangle$$

Eigenwertgleichung für ungebundene Zustände

In einem Kontinuum gilt: $E(k) > 0$

Zum Beispiel:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ; \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\langle x | \phi(k) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikx}$$

ebene Welle

Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Die elastische Streuung bewirkt, daß sich der Eigenwert nicht ändert.

$$(\hat{H}_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle + \underbrace{(\hat{H}_0 - E) |\phi\rangle}_{\equiv 0}$$

$$(\hat{H}_0 - E) |\psi\rangle + V |\psi\rangle = (\hat{H}_0 - E) |\phi\rangle$$

Nach dem Dividieren mit $(\hat{H}_0 - E)$ bleibt nur eine formale Gleichung:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle - \frac{\hat{V}}{\hat{H}_0 - E} |\psi\rangle$$

Für $t \rightarrow \pm\infty$ wird die Gleichung eine

- singuläre Operator-Gleichung
- formale Operator-Gleichung
- implizite Operator-Gleichung oder eine
- Iteration in der Nähe des Punktes

In der Nähe der Singularität gilt:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{(E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)} \hat{V} |\psi\rangle$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung

22.2.1 Darstellung im Ortsraum

Wir multiplizieren die Lippmann-Schwinger-Gleichung von links mit $\langle x|$ und fügen eine 1 ein.

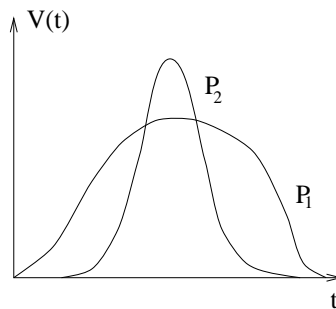
$$\psi_{\pm}(x) = \phi(x) + \int dx' \int dx'' \underbrace{\langle x | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} | x' \rangle}_{=: G_{\pm}(x, x')} \underbrace{\langle x' | \hat{V} | x'' \rangle}_{V(x', x'') \text{ ist oft } V(x') \delta(x' - x'')}$$

Für lokale Potentiale gilt:

$$\psi_{\pm}(x) = \phi(x) + \int dx' G_{\pm}(x, x') V(x') \psi(x')$$

Diese Gleichung sieht der Dyson-Serie ähnlich.

Ein mitbewegter Beobachter sieht ein zeitabhängiges Potential. Für P_2 ist es zeitlich kürzer, weil das Teilchen schneller ist:



22.2.2 Darstellung im Impulsraum

Wir multiplizieren mit $\langle p|$:

$$\psi_{\pm}(p) = \phi(p) + \int dp' \int dp'' \langle p | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} | p' \rangle \langle p' | \hat{V} | p'' \rangle \psi(p'')$$

$$\text{Oft ist } \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Operator-Funktion

$$f(\hat{p}) |p'\rangle = f(p') |p'\rangle$$

Zahlenwertige Funktion

$$\psi_{\pm}(p) = \phi(p) + \int dp' \int dp'' \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm i\varepsilon} \delta(p - p'') V(p', p'') \psi(p'')$$

falls $V(p', p'') = V(p') \delta(p' - p'')$ ist, gilt:

$$\psi_{\pm}(p) = \phi(p) + \frac{1}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\varepsilon} V(\vec{p}) \psi_{\pm}(\vec{p})$$

$G_{\pm}(p)$ ist eine sehr einfache Funktion.

Bedeutung von $G_{\pm}(x, x')$:

$$G_{\pm}(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle x | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} | x' \rangle$$

$$G_{\pm}(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int dp' \int dp'' \langle x | p' \rangle \langle p' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon} | p'' \rangle \langle p'' | x' \rangle$$

Mit $\vec{p} = \hbar k$ und $\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ gilt:

$$G_{\pm}(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 k' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\varepsilon}$$

$$\int d^3 k' \rightarrow \int_0^{\infty} dq q^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} d\cos\vartheta \frac{e^{iq|x-x'|\cos\vartheta}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon}$$

$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{1}{8\pi^2} \int dq q \frac{1}{i|x-x'|} \frac{e^{iq|x-x'|} - e^{-iq|x-x'|}}{(q^2 - k^2 \mp i\varepsilon)}$$

$p \rightarrow \pm k; \quad (q^2 - k^2) = (q+k)(q-k)$
nach Hauptsatz: $\int_{K\text{ompl.}} dy \frac{1}{y-y_0} = \frac{1}{2\pi i}$

$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{|x-x'|}$$

Hier gilt die Eigenschaft: $(\nabla^2 + k^2) G_{\pm}(x, x') = \delta(x - x')$

Mit $|x - x'| = r'$ haben wir:

$$G(r') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr'}}{r'}$$

Eine δ -Störung an der Stelle $x = x'$ produziert als erlaubte Lösung eine auslaufende "Kugelwelle"

$$\psi_{\pm}(x) = \phi(x) - \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathcal{V}'} d^3 x' \frac{e^{\pm ik r'}}{4\pi r'} V(x') \psi_{\pm}(x')$$

Bei \mathcal{V}' handelt es sich um das Volumen des (Streu-) Wechselwirkungsgebietes. Es gilt $V(x') = 0$, für alle x' , die nicht in \mathcal{V}' liegen. x liegt ebenfalls nicht in \mathcal{V}' und $|x - x'|$ ist viel größer als Null. Von nun an wird $|\vec{x}|$ r genannt.

Geometrische Auswertung von $\int d^3 k'$:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| \simeq r - r' \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}$$

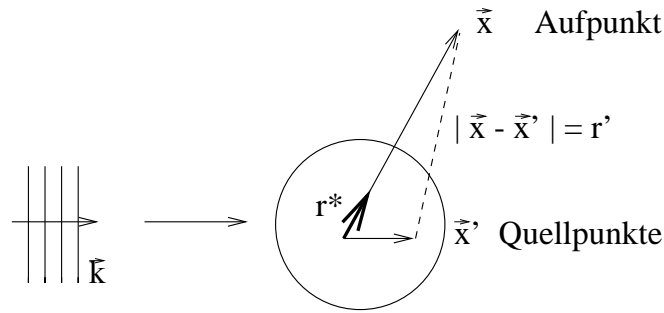
$$e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|} \simeq e^{\pm ik r} e^{\mp ik' x'}$$

Damit kommen wir zur Auswertung:

$$\psi_x(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f$$

$$\text{mit } f = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{-ik' x'}}{(2\pi)^{3/2}} V(x') \psi(x')$$

f heißt Streufunktion und ist ein reines Integral über das Streugebiet \mathcal{V}' .
Impuls-Darstellung (ohne Konstanten):



mit $\langle x | \hat{V} | x' \rangle = V(x) \delta(x - x')$
 $\int dx \langle x | \hat{V} | x' \rangle = \int dx V(x) \delta(x - x') = V(x)$

$$f \simeq \int dx' \int dx'' \langle k' | x' \rangle \langle x' | \hat{V} | x'' \rangle \langle x'' | \psi \rangle$$

$$f \simeq -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle k' | \hat{V} | \psi_+ \rangle$$

Streuungsfunktion in Impulsdarstellung

Oft sehen Potentiale so aus:

$$V(x, x') = V(x) (1 - \alpha p^2 + \beta p^4)$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \partial_{(x-x')} \quad \text{Impuls}$$

07.02.1996

Diese Gleichung soll nun in erster Näherung gelöst werden. In nullter Näherung ist die einfallende Welle mit der ausfallenden identisch:

$$\Psi_+^{(0)} = |\Phi\rangle$$

Für die Lösung in erster Ordnung erwarten wir eine Gleichung der Form:

$$\Psi_+^{(1)} = \dots |\Phi\rangle$$

Also ist die erste Näherung der Streufunktion:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^{\frac{3}{2}} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \Phi \rangle, \quad |\Phi\rangle = |\vec{k}\rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^{\frac{3}{2}} \frac{2m}{\hbar^2} \int dx''^3 \int dx'''^2 \langle \vec{k}' | x'' \rangle \langle x'' | \hat{V} | x''' \rangle \langle x''' | \vec{k} \rangle \end{aligned}$$

Wegen $\langle x'' | \hat{V} | x''' \rangle = V(x'') \delta(x'' - x''')$ vereinfacht sich das zu:

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^{\frac{3}{2}} \frac{2m}{\hbar^2} \int dx''^3 V(x'') e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot x''} \\ &= c \int dx''^3 V(x'') e^{iq \cdot x''}, \quad q := (\vec{k}' - \vec{k}) \end{aligned}$$

Dies ist die Fouriertransformierte bezüglich q . Speziell gilt für sphärisch symmetrische Potentiale:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) &= c \int dr'' r''^2 V(r'') \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \alpha e^{iqr'' \cos \alpha} \\ &= -c \frac{1}{2} \int dr r V(r) 2\pi \frac{1}{iq} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int dr r V(r) \sin qr \end{aligned}$$

Wir erhalten die Born-Näherung für sphärisch-symmetrische Potentiale:

$$f^{(1)}(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int dr r^2 V(r) \frac{\sin qr}{qr}$$

mit $q = |q| = |\vec{k}' - \vec{k}| = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$
 Dazu ein paar Bemerkungen:

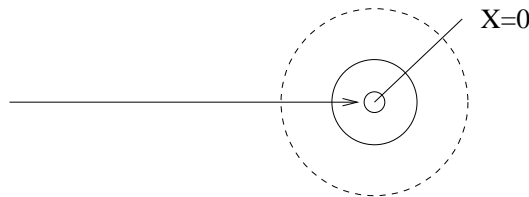
1. Die Streufunktion hängt von ϑ nur über q ab.
2. Die Streufunktion ist reell.
3. Der Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2$ ist unabhängig vom Vorzeichen des Potentials. Es ist also nicht entscheidend, ob das Potential anziehend oder abstoßend ist.
4. Wird r sehr groß, so muß entweder das Integral $\int dr r^2 V(r)$ oder q sehr klein werden. Genauso wird das Integral klein, wenn q sehr groß ist.

22.3 Optisches Theorem (fehlt noch)

12.02.96

22.4 Eikonal-Näherung

Die Eikonal-Näherung unterscheidet sich von der Born'schen Näherung. Die Born'sche Näherung behandelt Energien, die viel größer als Null sein müssen - das Streupotential soll also möglichst klein sein. Man bezeichnet dieses Verfahren auch als klassische Näherung. Die Eikonal-Näherung funktioniert bei Energien, die viel größer als das Potential V sind. Sie entspricht der semiklassischen Näherung.



$$\psi^+(x) \rightarrow e^{i S(x)/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \frac{S}{\hbar} &= \int_{-\infty}^x dt' \mathcal{L}_{klass} = \int_{-\infty}^x dt' \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right) \\ &= \int_{-\infty}^x dx' k(x') = kx + \text{Streuterm} \end{aligned}$$

S entspricht der klassischen Wirkung
 \mathcal{L} entspricht der klassischen Lagrange-Funktion

$$\frac{S}{\hbar} = kx + \int_{-\infty}^x dx' (k(x') - k)$$

$$E_{-\infty} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \underbrace{E(x)}_{\frac{\hbar^2 k^2(x)}{2m}} + V(x)$$

$$k(x) = \sqrt{\underbrace{k^2}_{\text{ursprüngliches } k \text{ (vor Streuung)}} - V(x)} = \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Taylor}}$$

$$= k \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2 k^2} \frac{1}{2} V(x) \right) = k - \frac{m}{k\hbar^2} V(x)$$

$$\frac{S}{\hbar} = kx - \int_{-\infty}^x dx' \frac{m}{k\hbar^2} V(x')$$

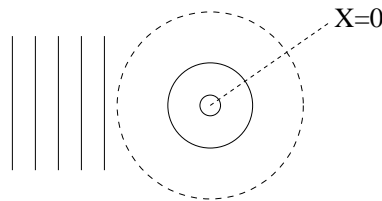
$$\psi^+(x) = e^{iS/\hbar} = e^{ikx} e^{-i \frac{m}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^x dx' V(x')}$$

Potential als Integral

Wenn wir es im wesentlichen mit Vorwärtsstreuung zu tun haben, gilt:

$$f(k', k) \simeq \frac{2m}{4\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \int_{-\infty}^x dx' \frac{e^{-ikx}}{(2\pi)^{3/2}} V \psi^+(x)$$

Bei ebenen Wellen entwickelt man wie bei Huygens nach Kugelwellen. Man entwickelt also eine ebene Welle nach der einlaufenden Kugelwelle zum Punkt $x=0$.



$\{|k\rangle\}$ k -Basis $\rightarrow \{|E, l, m\rangle\}$ Basis

1)

$$\langle E|m|E'l'm'\rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(E - E')$$

2)

$$\sum_{lm} |Elm\rangle \langle Elm| = 1 \quad , \text{ da } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$|k\rangle = \int \sum_{lm} |Elm\rangle dE \langle Elm|k\rangle$$

$$\langle k|Elm\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(k)$$

$$l_3 |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle$$

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

Die 3-Richtung entspricht der Einstrahlrichtung

$$[\hat{H}, \hat{l}_3] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \vartheta} \frac{d^{l-m}}{d \cos \vartheta^{l-m}}$$

$$Y_l^0(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{2l+1}}{4\pi} P_l(\cos \vartheta)$$

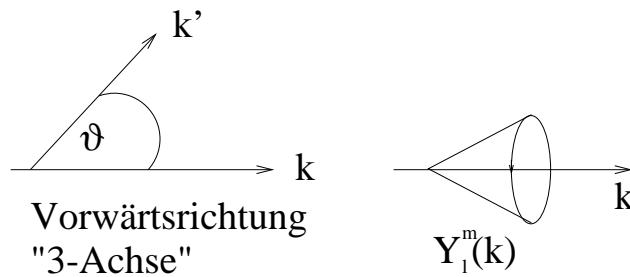
$$\langle x|Elm\rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_l(kx) Y_l^m(\hat{r})$$

Alternativ: Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}
f(k, k') &= -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \underbrace{\langle k' | \hat{T} | k \rangle}_{\text{T-Matrix}} \\
\langle k' | \hat{T} | k \rangle &= \sum_{lm} \sum_{l'm'} \langle k' | Elm \rangle \langle Elm | \hat{T} | El'm' \rangle \langle El'm' | k \rangle \\
&= -\frac{4\pi}{k} \sum_{Elm} T_{Elm l'm'} Y_{l'm'}^{m'}(\check{k}') Y_l^m(\check{k})
\end{aligned}$$

Sphärisch symmetrisches Potential:

$$T_{Elm E'l'm'} = \delta(E - E') \delta_{ll'} \delta_{mm'} T_l(E)$$



$Y_l^m(\vartheta = 0; \varphi)$ ist für $m \neq 0$ Null. Also ist $Y_l^m(\vartheta = 0; \varphi)$ nur ungleich Null für $m = 0$.
Dann gilt (k in Vorwärtsrichtung):

$$\begin{aligned}
f(k, k') &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\vartheta) \frac{\pi}{k} T_l(E) \\
\langle lm | \check{k}_z \rangle &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\vartheta) |_{\vartheta=0} \delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \\
\frac{\pi}{k} T_l(E) &=: f_l(k) \quad \text{zu messen!}
\end{aligned}$$

$$\psi^+(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\underbrace{e^{ikx}}_{\text{einlaufende freie Welle}} + \underbrace{\frac{f(\vartheta) e^{ikr}}{r}}_{\text{auslaufende Kugelwelle}} \right)$$

e^{ikx} nach Kugelwellen entwickeln:

$$\psi^+(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l(\cos\vartheta)}{2ik} \underbrace{\left(1 + 2ik + f_l(k)\right) \frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{auslaufende Partialwelle}} - \underbrace{\frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}}_{\text{einlaufende Partialwelle}}$$

Die auslaufende Welle wird im Faktor $(1 + 2ik + f_l(k)) =: S_l(k)$ modifiziert.

$S_l(k)$ muß die Bedingung erfüllen, daß der Betrag von ein- und auslaufendem Teil von $\frac{e^{ikr}}{r}$ gleich ist.

$$(1 + 2ik + f_l(k)) = 1$$

Unitaritätsbedingung

$$|S_l(k)| = 1$$

$$S_l(k) =: e^{2i\delta_l(k)} \quad \text{Die '2' ist pure Konvention!}$$

$\delta_l(k) \triangleq$ Streuphase

$$f_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} = e^{i\delta_l(k)} \frac{e^{i\delta_l(k)} - e^{-i\delta_l(k)}}{2ik} = e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k) \frac{1}{k}$$

$$f(k, k') = f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\vartheta) e^{i\delta_l(k)} \sin\delta_l(k)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, k')|^2; \quad \sigma = \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l(k)$$

Sonderfälle:

1) $\delta_l(k)$ sehr klein:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l^2(k)$$

$$f_l(k) \simeq \frac{1}{k} (1 + i\delta_l(k)) \delta_l(k) \simeq \frac{1}{k} (\delta_l(k) + i\delta_l^2(k) \dots)$$

$$\rightarrow f_l(k) = \frac{1}{k} \delta_l(k) + \dots$$

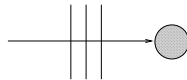
Die Streufunktion wird reell.

2) Wann wird der Wirkungsquerschnitt σ maximal?

$$\text{Für } \sin^2\delta_l(k) \simeq 1. \quad k = \frac{1}{r}$$

$$\rightarrow \sigma = 4\pi r^2 (2l+1)$$

Entspricht Plättchen mit Radius $R = 2r\sqrt{2l+1}$



3) Hard sphere Streuung

$$\sigma \approx \pi R^2$$

