

Theoretische Physik C

Quantenmechanik

Wolfgang Voos
ube2@rzstud2.rz.uni-karlsruhe.de

Oktober 1996

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
1.1 Charakterisierung und Einordnung der Quantenmechanik	1
1.2 Beispiele für Quanteneffekte	1
2 Dualismus Welle \leftrightarrow Teilchen	5
2.1 Klassische Mechanik	5
2.2 Klassische Elektrodynamik	5
2.3 Doppelspalt	7
2.4 Spektralzerlegung und Fouriertransformation	7
2.4.1 Spektralzerlegung	7
2.4.2 Fouriertransformation	8
3 Materiewellen und Schrödingergleichung	11
3.1 Realisierung des Konzepts	11
3.2 Teilchen als Wellenpakete	13
3.3 Heisenberg'sche Unschärferelation	13
4 Qualitatives Verständnis einfacher Fälle	14
4.1 Stationäre Zustände	14
4.2 Stufenpotential	15
4.3 Tunneffekt (qualitativ)	17
5 Mathematische Hilfsmittel	19
5.1 Hilbertraum der Wellenfunktionen	19
5.2 Skalarprodukt	19
5.3 Orthonormierte Systeme, Basis	20
5.4 Operatoren	21
5.4.1 adjungierte Operatoren	21
5.4.2 Eigenwerte und Eigenvektoren	22
5.4.3 Funktionen von Operatoren	23
5.4.4 Wichtige Beispiele	23
5.5 Dirac-Notation	25
5.6 Operatoren in Matrixdarstellung, Eigenwertprobleme von Matrizen	28
5.6.1 Matrixdarstellung	28
5.6.2 Eigenwerte	28
5.6.3 adjungierte Operatoren	29

6 Postulate der Quantenmechanik	30
6.1 Postulate	30
6.2 Folgerungen aus den Postulaten	32
6.3 Beispiel: Zwei-Zustandssystem	37
7 Eindimensionaler harmonischer Oszillator	39
7.1 Allgemeine Betrachtungen	39
7.2 Lösung der Schrödingergleichung	40
7.3 Erzeuger und Vernichter	41
7.4 Unschärfen im Grundzustand	43
7.5 Kohärente Zustände	44
7.5.1 Zeitliche Entwicklung der $ \alpha\rangle$ Zustände	45
7.5.2 Vollständigkeit der $ \alpha\rangle$ Zustände	46
7.5.3 Erwartungswerte für Ort und Impuls	46
7.5.4 Unschärfen kohärenter Zustände	47
8 Elektronenspin	48
8.1 Allgemeine Betrachtungen	48
8.2 Spin im homogenen Magnetfeld	49
9 Der Drehimpuls in der Quantenmechanik	52
9.1 Einführung des Drehimpulses	52
9.1.1 Bahndrehimpuls in der Quantenmechanik	52
9.1.2 Vertauschungsrelationen	53
9.1.3 Eigenfunktionen von \mathcal{L}_z und \mathcal{L}	53
9.1.4 Algebraische Behandlung des Drehimpulses	55
9.2 Drehimpuls und Drehsymmetrie	57
9.2.1 Transformationen und Invarianzbedingungen	57
9.2.2 Ortstranslationen	57
9.2.3 Zeittranslationen für zeitunabhängige Hamiltonfunktionen	58
9.2.4 Drehungen	59
9.3 Addition von Drehimpulsen	59
10 Zeitunabhängiges Zentralpotential	65
10.1 Allgemeine Betrachtungen	65
10.2 Das Wasserstoffatom	67
10.3 Isotroper harmonischer Oszillator	69
10.3.1 Kartesische Koordinaten	69
10.3.2 Kugelkoordinaten	70
11 Streutheorie	71
11.1 Wirkungsquerschnitt	72
11.2 Stationäre Streuzustände	73
11.2.1 Wirkungsquerschnitt und Streuamplitude	73
11.2.2 Berechnung von $f_E(\theta, \phi)$	74
11.2.3 Born'sche Näherung	76
11.3 Streuung am Zentralpotential: Partialwellen	76
11.3.1 Ebene und sphärische Wellen	77
11.3.2 Phasenverschiebung bei Streuung	78
11.3.3 Streuamplitude und Wirkungsquerschnitt	79

11.3.4	Optisches Theorem	80
12	Zeitunabhängige Störungstheorie	81
12.1	Allgemeine Vorgehensweise	81
12.1.1	Nicht entarteter Fall	81
12.1.2	Güte der Näherung	84
12.1.3	Entarteter Fall	84
12.2	Fein- und Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms	86
12.2.1	Feinstruktur	86
12.2.2	Hyperfeinstruktur	93
12.2.3	Zeeman-Effekt	93
13	Mehrteilchensysteme	95
13.1	Zweiteilchensysteme	95
13.1.1	Klassischer Fall	95
13.1.2	Quantenmechanischer Fall	96
13.1.3	Formale Aspekte zu Zweiteilchensystemen	97
13.2	Identische Teilchen	97
13.2.1	Klassische Vorbetrachtung	97
13.2.2	Quantenmechanische Betrachtung	97
13.2.3	Beispiel: System mit zwei identischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen	97
13.2.4	Permutationsoperatoren	98
13.2.5	Observable	99
13.2.6	Vollständig symmetrische/antisymmetrische Zustandsvektoren	100
13.2.7	Ergänzung der Postulate der Quantenmechanik	101
13.2.8	Aufhebung der Austauschentartung	101
13.2.9	Slater-Determinante	102
13.2.10	Austauschterm	103
13.2.11	Beispiel: Streuung identischer Teilchen	104

Vorwort

Dieses Skript entstand nach der Vorlesung Theorie C, die Prof. Mannel im Wintersemester 1995/96 an der Uni Karlsruhe gehalten hat. Es versucht weitgehend, den Inhalt der Vorlesung wiederzugeben (mit einigen Ergänzungen), und will und kann kein Lehrbuch ersetzen. Eher ist es zum schnellen Nachlesen bereits bekannter (und wieder vergessener) Fakten geeignet.

Dieses Skript ist nicht von Prof. Mannel autorisiert, der deshalb auch nicht für eventuelle Fehler verantwortlich ist. Trotz aller Mühe meiner beiden „Korrektoren“ Stefan Bekavac und Thorsten Seidensticker, können Fehler nicht ausgeschlossen werden. Die Benutzung dieses Skripts erfolgt daher *auf eigene Gefahr!* Falls jemand noch sachliche Fehler findet, kann er sie mir (mit Seitennummer und Korrektur bitte) per e-Mail zusenden:

ube2@rzstud2.rz.uni-karlsruhe.de

Mein Dank geht an dieser Stelle an Stefan und Thorsten für ihre unermüdlichen Versuche, mich mit immer neuen Korrekturvorschlägen in den Wahnsinn zu treiben :-), und für ihre Aufzeichnungen aus der Vorlesung. Von Thorsten ist auch der Abschnitt 5.6 über Matrizenschreibweise von Operatoren, ein Kapitel, das in der Vorlesung nicht behandelt wurde, aber auf den Übungsblättern ständig benötigt wird. Außerdem schrieb er den laut ihm zum Verständnis unbedingt nötigen Abschnitt 9.2.1 und beschrieb das **Allgemeines Verfahren zur Konstruktion der $|j_1, j_2, J, M\rangle$ -Zustände**.

Karlsruhe, Oktober 1996,

Wolfgang Voos

Kapitel 1

Einführung

1.1 Charakterisierung und Einordnung der Quantenmechanik

Bis Ende des letzten Jahrhunderts konnte man die Phänomene der Physik mit alltäglichen Erfahrungen identifizieren. Das änderte sich, als man versuchte, die Vorgänge im atomaren und kosmologischen Bereich zu verstehen. Es zeigte sich, daß bei kleinen Energien und/oder großen Geschwindigkeiten die Methoden der klassischen Physik nicht mehr anwendbar sind. So entstanden die Quanten- und die Relativitätstheorie.

Die *Relativitätstheorie* ergab sich aus der Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit c . Den klassischen kann man sich aus dem allgemeinen Fall durch den Grenzübergang $c \rightarrow \infty$ hervorgegangen denken.

Charakteristisch für die *Quantenmechanik* ist die Quantisierung der Energie, d.h. die Tatsache, daß Energie in „Portionen“, den *Energiequanten*, übertragen wird. Wichtig ist hier die Planck'sche Konstante \hbar , die im klassischen Fall als 0 betrachtet werden kann.

Berücksichtigt man beide Verallgemeinerungen, $c \neq \infty$ und $\hbar \neq 0$, so entsteht die *relativistische Quantenmechanik* oder *Quantenfeldtheorie* (siehe auch Abb. 1.1).

1.2 Beispiele für Quanteneffekte

Mitte bis Ende des 19. Jahrhunderts stieß man auf einige Effekte, die sich klassisch nicht erklären ließen:

- die Strahlung schwarzer Körper („Ultraviolett-Katastrophe“)
- der photoelektrische Effekt
- der Compton-Effekt
- die Emissionsspektren von Atomen

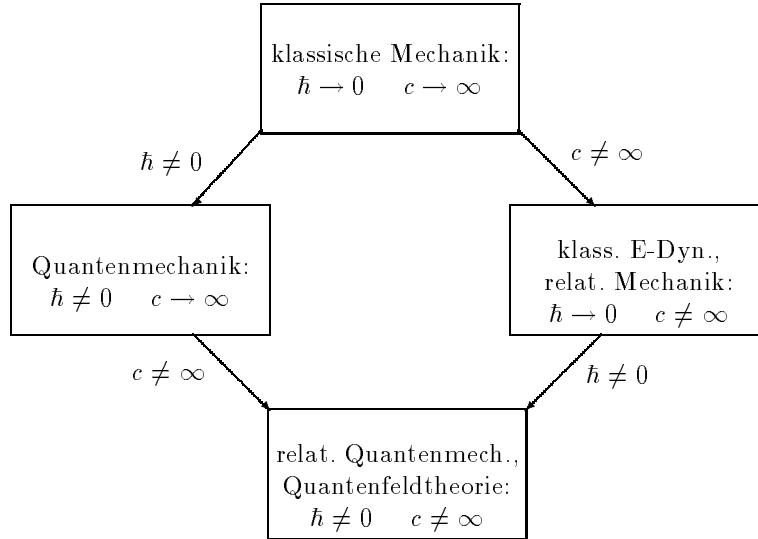


Abbildung 1.1: Übergänge zu den neuen Theorien

(a) Schwarzkörper-Strahlung

Das spektrale Emissionsvermögen $E_s(\omega, T)$ des schwarzen Körpers entspricht der abgestrahlten Energie im Frequenzintervall $[\omega, \omega + d\omega]$ bei der Temperatur T . Die klassische Theorie erhält hierfür:

$$E_s(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT \quad (1.1)$$

mit $k = 1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$, der Boltzmann-Konstanten. Integriert man hierüber von 0 bis ∞ , d.h. über den gesamten Frequenzbereich, so divergiert das Integral, d.h. der Körper würde unendlich viel Energie abstrahlen. Da dies natürlich nicht sein kann, suchte man nach besseren Lösungen. Planck konnte schließlich eine Lösung finden, die den experimentellen $E(T)$ -Zusammenhang sehr gut wiedergab, mußte dafür aber annehmen, daß Strahlungsenergie bei einer bestimmten Frequenz nur in Vielfachen einer Grundgröße, dem sogenannten Lichtquant, abgestrahlt werden kann:

$$E = n\hbar\omega \quad n = 1, 2, \dots$$

Mit dieser Annahme erhielt er das nicht divergierende Gesetz:

$$E_s(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1} \quad (1.2)$$

und $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457266 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ (heutiger Wert) aus der Anpassung an die experimentelle Kurve. Macht man in obiger Formel (1.2) „just for fun“ einmal den Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$, so erhält man (z.B. mit l'Hospital) sofort die klassische Beziehung (1.1).

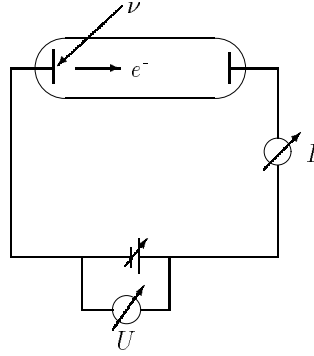


Abbildung 1.2: Photoelektrischer Effekt: Licht der Frequenz ν trifft auf die Kathode einer Vakuumröhre. Dadurch werden Elektronen freigesetzt, so daß ein Strom I durch die Anordnung fließen kann.

(b) photoelektrischer Effekt

Der in Abb. 1.2 schematisch aufgezeichnete Versuch wurde erstmals 1887 von Hertz durchgeführt. Dabei erhielt er folgende Ergebnisse:

1. $I = 0$ für alle Frequenzen $\nu < \nu_0$, wobei ν_0 nur vom Material der Kathode abhängt
2. Die Gegenspannung U , für die der Strom verschwindet, ist $U_s = \frac{h(\nu - \nu_0)}{e}$
3. Die Anzahl der freigesetzten e^- 's ($\hat{=}$ Strom) ist proportional zur Lichtintensität

Die Grenzfrequenz in 1. läßt sich klassisch nicht erklären. Insgesamt bestätigt der Versuch aber die Planck'sche Annahme und zeigt, daß mit der Frequenz der Lichtquanten auch die Energie feststeht, die sie besitzen. Damit kann man den Lichtquanten auch einen Impuls \vec{p} zuordnen und zwar mit:

$$|\vec{p}|c = \sqrt{E^2 - m^2c^4} \xrightarrow{m=0} E \Rightarrow c|\vec{p}| = h\nu = \hbar\omega$$

Führt man noch den Wellenzahlvektor \vec{k} ein, für den gilt: $|\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$ und der in die Ausbreitungsrichtung des Lichts zeigt, so erhält man die *Planck-Einstein-Relationen*:

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \vec{p} &= \hbar\vec{k} \end{aligned} \tag{1.3}$$

(c) Compton-Effekt

Das ist der wohl bekannte Effekt der Streuung von Lichtquanten an Elektronen, wobei sich die Wellenlänge des gestreuten Lichtes abhängig vom Streuwinkel zu längeren Wellenlängen hin verschiebt. Betrachtet man Licht als Welle, so ist eine solche Wellenlängenänderung nicht erklärbar. Sieht man Licht jedoch als Licht„teilchen“ (Quanten), die einen Stoß mit den Elektronen ausführen, so ist klar, daß sich dabei ihre Energie und damit die Frequenz $\nu = \frac{E}{h}$ ändert.

(d) Emissionsspektren von Atomen

Die scharfen Linien der Spektren von Atomen waren auch etwas, das man nicht verstehen konnte, da klassisch gesehen das System Atom/Elektron ein Hertz-Dipol ist und damit ständig Energie in Form von elektromagnetischen Wellen abstrahlen müßte (\Rightarrow kontinuierliches Spektrum). Das würde jedoch dazu führen, daß das e^- auf einer Spiralbahn in den Kern stürzt. Man fand recht bald ein empirisches Gesetz für die scharfen Linien des Wasserstoffspektrums, nämlich:

$$\frac{1}{\lambda} = \text{const.} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots \quad n_1 < n_2$$

Dies führte zum Bohr'schen Atommodell, mit den folgenden Postulaten:

- nur Elektronenbahnen mit dem Drehimpuls $n\hbar$ ¹ und $n \in \mathbb{N}$ sind erlaubt, was für den Fall von Kreisbahnen mit Radius r auf $mvr = n\hbar$ führt
- auf diesen Bahnen bewegt sich das Elektron strahlungsfrei
- Elektronen können von einer Bahn der Energie E zu einer anderen mit Energie E' springen und dabei die Energiedifferenz als Photon aussenden:
 $\hbar\omega = E - E'$

Betrachtet man Kreisbahnen im Coulomb-Zentralfeld, so erhält man:

$$\frac{ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow v = \frac{ze^2}{n\hbar} \Rightarrow r = \frac{n^2\hbar^2}{ze^2m}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{ze^2}{r} = \dots = -\frac{1}{2} \frac{(ze^2)^2}{\hbar^2 n^2} m$$

¹ wurde später erweitert auf: $\oint p_i dq_i = n_i \hbar$ für alle assoziierten Koordinaten und Impulse

Kapitel 2

Dualismus Welle \leftrightarrow Teilchen

2.1 Klassische Mechanik

Die klassische Mechanik beschreibt Systeme durch ihre Hamiltonfunktion

$$H(p, q) = \sum_i \dot{q}_i p_i - \mathfrak{L}$$

(\mathfrak{L} – Lagrangefunktion des Systems) in den verallgemeinerten Koordinaten (q) und Impulsen (p). Für ein Teilchen in einem zeit- und geschwindigkeitsunabhängigen Potential ergibt sich zum Beispiel mit $\mathfrak{L} = T - V$ die Hamiltonfunktion: $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$.

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus der Hamiltonfunktion zu:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \qquad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad (2.1)$$

Die Trajektorien ($\hat{=}$ Lösungen der Gleichungen $p(q)$) lassen sich im *Phasenraum* darstellen, in dem p über q aufgetragen wird. Jeder Punkt im Phasenraum entspricht einem Zustand des Systems.

2.2 Klassische Elektrodynamik

Die klassische Elektrodynamik beschreibt Systeme durch die vier Maxwellgleichungen, die im Falle ohne freie Ladungen und Ströme ($\rho \equiv 0, \vec{j} = 0$) lauten:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{E} &= -\frac{1}{c} \dot{\vec{B}} & \text{div } \vec{E} &= 0 \\ \text{rot } \vec{B} &= \frac{1}{c} \dot{\vec{E}} & \text{div } \vec{B} &= 0 \end{aligned}$$

Aus diesen Gleichungen erhält man durch

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \ddot{\vec{E}} &= \text{rot } \dot{\vec{B}} \\ &= -c \text{rot rot } \vec{E} \\ &= -c(\text{grad div } \vec{E} - \Delta \vec{E}) \\ &= c \Delta \vec{E} \end{aligned}$$

die *Wellengleichung*

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\vec{E}} = \Delta \vec{E} \quad (2.2)$$

Eine Lösung hiervon ist z.B. die ebene Welle:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}$$

mit $\omega = c |\vec{k}|$ und $\vec{k}\vec{E}_0 = 0$.

Aus zwei beliebigen Lösungen der Wellengleichung kann man sich beliebig viele andere „zusammenbasteln“, denn es gilt das *Superpositionsprinzip*:

Sind $\vec{E}_1(\vec{x}, t)$ und $\vec{E}_2(\vec{x}, t)$ Lösungen der Wellengleichung, dann ist auch jede Funktion $\vec{E}(\vec{x}, t) = \alpha \vec{E}_1(\vec{x}, t) + \beta \vec{E}_2(\vec{x}, t)$ (mit α, β konstante Faktoren) eine Lösung.

Eine andere Form von (2.2) ist die sogenannte Wellengleichung für Potentiale:

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\phi} = \Delta \phi$$

deren Lösungen ebenfalls die Form von ebenen Wellen annehmen:

$$\phi(\vec{x}, t) = \phi_0 e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}} \quad \omega(\vec{k}) = c |\vec{k}|$$

bzw., mit den Planck-Einstein-Relationen (1.3):

$$\phi = \phi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{x}}$$

Hat man eine ganze Verteilung $f(\vec{k})$ solcher ebener Wellen, so erhält man ein *Wellenpaket* $\Phi(\vec{x}, t)$ mit

$$\Phi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k f(\vec{k}) e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}$$

wobei $\omega = \omega(\vec{k})$ *Dispersionsrelation* genannt wird. Über diese Beziehung kann man zwei weitere charakteristische Größen des Wellenpakets berechnen, die Gruppen- und Phasengeschwindigkeit:

$$\begin{aligned} \text{Phasengeschwindigkeit:} \quad \vec{v}_p &= \frac{\omega(\vec{k})}{|\vec{k}|} \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \\ \text{Gruppengeschwindigkeit:} \quad \vec{v}_g &= \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \end{aligned}$$

Die physikalische Bedeutung der Phasengeschwindigkeit ist bekannt:

sie gibt die Geschwindigkeit an, mit der die einzelnen Wellen (jeweils mit eigenem Wellenvektor \vec{k}) wandern. Da ω von \vec{k} abhängt, laufen die Wellen mit der Zeit auseinander, jedoch gilt:

$$\begin{aligned} \omega(\vec{k}) &= \omega(\vec{k}_0) + (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k})) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} + \dots \quad (\text{Taylor-Entwicklung}) \\ \Phi(\vec{x}, t) &\cong \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_{\vec{k}_0}(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k}_0)t - i(\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{v}_g t + i\vec{k}\vec{x}} \\ &\approx e^{-i\omega(\vec{k}_0)t + i\vec{k}_0\vec{x}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_{\vec{k}_0}(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_0)(\vec{v}_g t - \vec{x})} \end{aligned}$$

Die Hauptbeiträge zu diesem Integral sind die Stellen, an denen die e -Funktion ≈ 1 ist, d.h. wenn $\vec{x} = \vec{v}_g t$. Das bedeutet, daß sich der Schwerpunkt des Wellenpaketes mit \vec{v}_g fortbewegt.

2.3 Doppelspalt

Ein Charakteristikum von Wellen sind Interferenzen, d.h. wenn sich zwei Wellen ϕ_1 und ϕ_2 überlagern, nimmt die resultierende Welle die Form $\phi = \phi_1 + \phi_2$ an. So kann man z.B. die Wellen betrachten, die von den Spalten einer von einer Lichtquelle beleuchteten Doppelspaltblende ausgehen. Da die Intensität proportional zu $|\phi|^2$ ist, gilt für sie:

$$I = |\phi|^2 \neq I_1 + I_2 = |\phi_1|^2 + |\phi_2|^2 \\ \Rightarrow I(\text{Spalt 1 und Spalt 2}) \neq I(\text{Spalt 1}) + I(\text{Spalt 2})$$

Reduziert man die Intensität der Lichtquelle so weit, daß man davon ausgehen kann, daß sich immer nur ein Photon auf dem Weg zum Schirm befindet und ersetzt diesen durch eine photographische Platte, so bemerkt man:

1. bei langer Belichtungszeit ($\hat{=}$ viele Photonen *nacheinander*, also keine Wechselwirkung der Photonen) erhält man ein Interferenzmuster
2. bei kurzer Belichtungszeit ($\hat{=}$ „ein“ Photon) erhält man einen lokalisierten Fleck

Im ersten Fall tritt der Wellen- und im zweiten der Teilchenaspekt des Lichtes deutlich zutage.

2.4 Spektralzerlegung und Fouriertransformation

2.4.1 Spektralzerlegung

Die elektrische Feldstärke \vec{E} hat Vektorcharakter. Dadurch kann das Licht polarisiert sein, was z.B. für den Fall der linear polarisierten Welle so aussieht:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = E_0 \hat{e}_p e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega t}$$

\hat{e}_p ist der Polarisations(-einheits-)vektor mit $\hat{e}_p^2 = 1$ (klar!), der senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung der Welle steht: $\hat{e}_p \cdot \vec{k} = 0$.

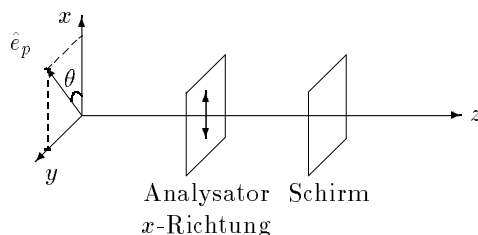


Abbildung 2.1: Polarisation des Lichts

Nachdem das Licht den Polarisationsfilter passiert hat (siehe Abb. 2.1), hat es die Intensität $I = I_0 \cos^2 \theta$. Was ist die quantenmechanische Erklärung?

Für jedes Photon gibt es nur zwei Möglichkeiten:

1. das Photon passiert den Analysator
2. das Photon wird absorbiert

Mit der Intensität I kennt man die Absorptions- bzw. Durchgangswahrscheinlichkeit ($\cos^2 \theta$) für ein einzelnes Photon. Für eine große Anzahl N von Photonen ergibt sich dann hinter dem Analysator (schwaches Gesetz der großen Zahlen):

$$N_{\text{durchgelassen}} = N \cos^2 \theta$$

Interpretation:

- (a) eine Messung ergibt nur bestimmte Resultate (Durchgang oder Absorption
 \Rightarrow „Eigenwerte“)
- (b) zu den Meßresultaten gehören zwei Vektoren \hat{e}_x (durchgelassen) und \hat{e}_y (absorbiert) (Eigenvektoren zu den beiden Eigenwerten)
- (c) ein beliebiger Vektor \hat{e}_p kann immer in die Vektoren \hat{e}_x und \hat{e}_y zerlegt werden:
 $\hat{e}_p = \hat{e}_x \cos \theta + \hat{e}_y \sin \theta$ (Prinzip der *Spektralzerlegung*)
- (d) das Quadrat der Koeffizienten ergibt die Wahrscheinlichkeiten für Absorption oder Durchgang:
 $p_D = \cos^2 \theta \quad p_A = \sin^2 \theta \quad p_A + p_D = 1$
- (e) nach der Messung hat das Licht eine definierte Polarisationsrichtung \hat{e}_x

2.4.2 Fouriertransformation

Ein eindimensionales Wellenpaket hat zu einem bestimmten Zeitpunkt die Form:

$$\phi(x, t = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) e^{ikx}$$

Wenn man $\phi(x, t = 0)$ gegeben hat, und sich für die Verteilungsfunktion $f(k)$ interessiert, so muß man die Fouriertransformation anwenden:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ik'x} \phi(x, t = 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) e^{ix(k-k')} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(k-k')} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Dabei ist die Bedeutung von $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(k-k')}$ die der δ -Distribution:

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a dx e^{ixq} &= \frac{2}{q} \sin(aq) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-a}^a dx e^{iqx} &= 2\pi \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dieses Integral existiert unabhängig von a und man definiert für $a \rightarrow \infty$:

$$\stackrel{a \rightarrow \infty}{\Rightarrow} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k-k')x} := 2\pi \delta(k - k')$$

Warum, das sieht man recht anschaulich an Abb. 2.2 (rechts): Der mittlere Peak wird mit zunehmendem a immer höher und schmaler, und der Sinus geht für $|x| > a$ immer schneller gegen 0.

Für das Rechnen mit der δ -Funktion gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \delta(q)g(q) = g(0)$$

Daraus folgt für (2.3):

$$\begin{aligned} (2.3) &\stackrel{(2.4)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) \frac{2}{(k-k')} \sin[a(k-k')] \\ &\stackrel{a \rightarrow \infty}{=} f(k') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left(\frac{2}{(k-k')} \sin[a(k-k')] \right) \\ &\quad \boxed{= f(k')} \end{aligned}$$

Wendet man die soeben erhaltenen Ergebnisse auf die ebene Welle an, so erhält man:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} e^{-ik'x} = 2\pi\delta(k-k')$$

d.h. die ebene Welle, die räumlich nicht lokalisiert ist, ist im Frequenzraum (Fourier-Transformation) „unendlich“ stark lokalisiert (genau eine Frequenz).

Die Rücktransformation kann man nutzen, um zu sehen, wie eine Welle, die bestimmte Frequenzen enthält, im x -Raum aussieht (Fourier-Synthese):

Wählt man die Verteilungsfunktion z.B. recht einfach als:

$$f(k) = \begin{cases} 1 & \text{für } -a < k < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

so erhält man:

$$\begin{aligned} \psi(x, t=0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) e^{ikx} = \int_{-a}^a \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \\ &= \frac{2}{x} \sin(ax) \end{aligned}$$

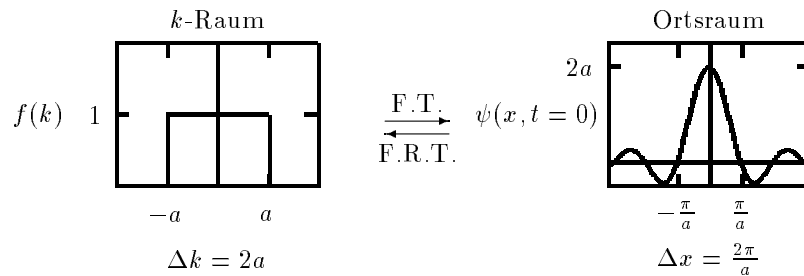


Abbildung 2.2: Fourier-Transformation

Das Wellenpaket ist weder im Frequenz- noch im x -Raum genau lokalisiert,

sondern hat eine charakteristische Breite, bzw. Unschärfe Δk bzw. Δx . Diese beiden Größen erfüllen eine sogenannte *Unschärferelation*:

$$\Delta k \Delta x = 4\pi \geq 1 \quad (2.5)$$

(Später erhält man dies aus der Heisenberg'schen Unschärferelation)

Kapitel 3

Materiewellen und Schrödingergleichung

1923 stellte *de Broglie* seine Hypothese auf, daß auch Materie sich durch Wellen beschreiben läßt, und zwar nach den Planck-Einstein-Relationen (1.3). Diese Hypothese wurde 1927 von Davisson und Germer erstmals verifiziert, die damals Interferenzen von Elektronenstrahlen nachwiesen.

3.1 Realisierung des Konzepts

1. das Teilchen wird durch eine *Wellenfunktion* $\psi(\vec{x}, t)$ beschrieben
2. $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ wird als *Wahrscheinlichkeitsdichte* interpretiert:

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

$\rho(\vec{x}, t) d\vec{x}$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t zwischen \vec{x} und $\vec{x} + d\vec{x}$ zu finden:

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d^3x \rho(\vec{x}, t) = 1$$

\Rightarrow Wellenfunktionen sind quadratintegabel , d.h.:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d^3x \text{ konvergiert}$$

3. für die Messung einer beliebigen Größe soll die Spektralzerlegung gelten. Damit ist das Resultat einer Messung (der Eigenwert a_n mit der Eigenfunktion $\psi_n(\vec{x})$) verknüpft mit einem (Wahrscheinlichkeits-)Koeffizienten c_n :

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \psi_n(\vec{x}) \Rightarrow \text{Meßergebnis ist } a_n$$

- Spektralzerlegung: $\psi(\vec{x}, t_0) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x})$
 $p_j = |c_j|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, den Wert a_j zu messen
- wenn die Messung a_j ergibt, dann ist die Wellenfunktion nach der Messung $\psi_j(\vec{x})$ (Reduktion des Wellenpakets)

4. die Zeitentwicklung des Systems wird durch die Schrödingergleichung beschrieben:
 (keine Herleitung, sondern Plausibilisierung)
 Betrachtet man die ebene Welle

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0 e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}$$

mit $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ und sucht eine Differentialgleichung, die dieses Ergebnis liefert, so erhält man:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= \hbar\omega \psi(\vec{x}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

(3.1) ist die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen.

Verallgemeinerung

Ist das Teilchen nicht mehr frei, sondern im Potential $V(\vec{x})$, so ist seine Energie

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

und damit:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \right) \\ &= \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right)}_{\mathcal{H}(\Delta, \vec{x}): \text{Hamiltonoperator}} \psi(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Noch allgemeiner ergibt sich der Hamiltonoperator aus der Hamiltonfunktion $H(\vec{x}, \vec{p})$ des Systems, wenn man den sogenannten Impulsoperator $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ verwendet:

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \mathcal{H}(\vec{x}, -i\hbar \vec{\nabla})$$

Diese Darstellung ist u.U. nicht eindeutig, denn wenn man z.B. $\mathcal{H}(-i\hbar \vec{\nabla}, \vec{x}) = H(\vec{p}, \vec{x}) = \vec{x}\vec{p}$ anwendet, so erhält man:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\psi &= \vec{x}(-i\hbar \vec{\nabla})\psi = -i\hbar \vec{x}(\vec{\nabla}\psi) \\ &\quad \Downarrow \\ &= (-i\hbar \vec{\nabla})(\vec{x}\psi) = -i\hbar(\psi \vec{\nabla} \vec{x} + \vec{x} \vec{\nabla} \psi) = -i\hbar(3\psi + \vec{x} \vec{\nabla} \psi) \end{aligned}$$

was bedeutet, daß Operatoren i.a. nicht kommutativ sind und in der QM deshalb, anders als in der klassischen Mechanik, nicht gilt:

$$\hat{p}\hat{x} = \hat{x}\hat{p} \quad (\hat{p}, \hat{x}: \text{Operatoren})$$

3.2 Teilchen als Wellenpakete

Eine ebene Welle ist gegeben durch

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0 e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}$$

mit $\omega = \hbar\vec{k}^2/(2m)$ und $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$. Ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho \sim |\psi|^2$ ist räumlich konstant. Dies ist zugleich die Wellengleichung des freien Teilchens, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit überall gleich groß ist. Überlagert man viele solcher ebener Wellen, so ergibt sich das resultierende Wellenpaket aus dem Superpositionsprinzip,

$$\phi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\vec{k}) e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}$$

einer Art verallgemeinerter Fouriertransformation.

Berechnung der Phasen- und Gruppengeschwindigkeit

$$\begin{aligned}\vec{v}_p &= \frac{\omega(\vec{k})}{|\vec{k}|^2} \vec{k} = \frac{\hbar\vec{k}}{2m} = \frac{\vec{p}}{2m} \\ \vec{v}_g &= \vec{\nabla}_k \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}_{\text{klassisch}}\end{aligned}$$

3.3 Heisenberg'sche Unschärferelation

Bei der ebenen Welle, die eine konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ρ und damit keinerlei räumliche Lokalisierung hat, stellt man eine sehr starke Lokalisierung des Impulses fest¹, denn $\vec{p} = \hbar\vec{k}'$ ist festgelegt durch $f_{\vec{k}'}(\vec{k}) = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$. Aus der vorher bekannten Beziehung

$$\Delta k \Delta x \geq 1$$

wird hiermit

$$\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar$$

und damit auf jeden Fall auch:

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation} \quad (3.2)$$

¹ d.h. das Teilchen hat keinen bevorzugten Aufenthaltsort, aber einen genau festgelegten Impuls

Kapitel 4

Qualitatives Verständnis einfacher Fälle

Betrachtet werden die Fälle:

1. zeitunabhängiges Potential
2. Stufenpotentiale, Potentialtöpfe

4.1 Stationäre Zustände

Als stationäre Zustände bezeichnet man Zustände, deren Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t)$ zeitunabhängig ist. Das bedeutet, daß eine Zeitabhängigkeit in $\psi(\vec{x}, t)$ nur in Form einer reinen Phase $e^{-i\omega t}$ auftritt:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= e^{-i\omega t} \phi(\vec{r}) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= e^{-i\omega t} \hbar\omega \phi(\vec{r}) \\ &= e^{-i\omega t} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \phi(\vec{r})\end{aligned}$$

woraus sich mit $\hbar\omega = E$ die zeitunabhängige Schrödingergleichung ergibt:

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})} \Leftrightarrow \boxed{\mathcal{H}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})} \quad (4.1)$$

Das bedeutet, daß $\phi(\vec{r})$ *Eigenfunktion* des Hamiltonoperators zum *Eigenwert* E ist. In der Regel hat \mathcal{H} allerdings nicht nur einen Eigenwert, sondern viele: $E_n = \hbar\omega_n$ ¹. Das heißt:

$$\begin{aligned}E_n \phi_n &= \mathcal{H} \phi_n \Rightarrow \phi_n, E_n \\ \Rightarrow \psi_n(\vec{r}, t) &= e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) \quad (\text{stationäre Zustände})\end{aligned}$$

¹Diese E_n des Systems mißt man meistens auch, da sie eine relativ einfach zugängliche Größe darstellen.

Aus der Superposition aller möglichen Eigenfunktionen entsteht die allgemeine Wellenfunktion:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-i\omega_n t} \phi_n(\vec{r}) \quad c_n \in \mathbb{C}$$

4.2 Stufenpotential

Ein Stufenpotential mit der Stufe bei x_0 ist definiert durch:

$$V(x) = V_0 \Theta(x - x_0) \quad (4.2)$$

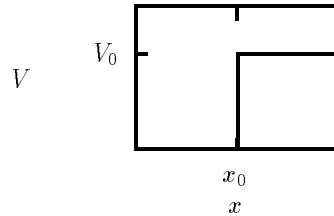


Abbildung 4.1: Stufenpotential

wobei $\Theta(x)$ definiert ist als:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ 1 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

Setzt man (4.2) in die zeitunabhängige Schrödingergleichung (4.1) ein, so erhält man:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = ((E - V_0 \Theta(x - x_0)) \psi$$

Hieraus folgen die Randbedingungen an $\psi(x)$:

Integration der Schrödingergleichung über das Intervall $(x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon)$ ergibt:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon+x_0}^{\varepsilon+x_0} \psi''(x) dx &= \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon)) &\stackrel{!}{=} E \int_{-\varepsilon+x_0}^{\varepsilon+x_0} \Theta(x - x_0) \psi(x) dx \end{aligned}$$

Außerdem gilt durch die Quadratintegrabilität: $|\psi(x)| < k$ mit geeignetem $k \in \mathbb{R}$. Damit erhält man die beiden Abschätzungen:

1. $0 \leq \left| E \int_{-\varepsilon+x_0}^{\varepsilon+x_0} \psi(x) dx \right| \leq |E| 2\varepsilon k \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$
2. $0 \leq \left| V_0 \int_{-\varepsilon+x_0}^{\varepsilon+x_0} \Theta(x - x_0) \psi(x) dx \right| = \left| V_0 \int_{x_0}^{\varepsilon+x_0} \psi(x) dx \right| \leq |V_0| \varepsilon k \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$

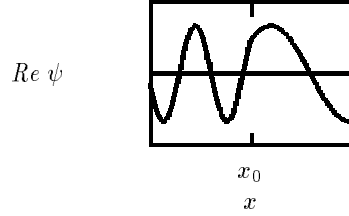


Abbildung 4.2: Schwingungsverlauf über Potentialschwelle

$$\Rightarrow (\psi'_+(x_0) - \psi'_-(x_0)) = 0 \Leftrightarrow \psi' \text{ stetig in } x_0$$

Eine weitere Integration ergibt, daß auch ψ in x_0 stetig sein muß. Diese Randbedingungen gelten für alle beschränkten Potentiale, da hier die beiden obigen Abschätzungen gelingen.

Das bedeutet:

- $\psi''(x)$ ist eine Θ -Funktion, d.h. stückweise stetig
- $\Rightarrow \psi'(x)$ ist stetig, hat aber einen „Knick“ bei x_0
- $\Rightarrow \psi(x)$ ist stetig und „glatt“ (d.h. differenzierbar)

Für ein konstantes Potential V_0 hat man den Lösungsansatz $\psi(x) = \psi_0 e^{ikx}$:

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = E - V_0 \Rightarrow k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

Je nach dem Wert des Wurzelausdrucks ergeben sich zwei Möglichkeiten:

1. $E > V_0$: dann ergibt sich die „normale“ Wellenlösung mit reellem k
2. $E < V_0$: dann ist $k = i\chi$ mit $\chi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$, woraus sich eine Wellenfunktion $\psi(x) \sim e^{\pm\chi x}$ ergibt ²

Wir betrachten jetzt $x_0 = 0$ (einfache Rechnung) und eine von „links“ einfallende Materiewelle:

Der Ansatz für $x < 0$ lautet:

$$\psi_-(x) = \underbrace{e^{ikx}}_{\text{einfallende}} + \underbrace{R e^{-ikx}}_{\text{reflekt. Welle}} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

und der für $x > 0$, da es keine nach links laufende Welle für $x > 0$ gibt:

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= T e^{iqx} & q &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \\ \Rightarrow \psi(x) &= \psi_-(x) \Theta(-x) + \psi_+(x) \Theta(x) \end{aligned}$$

R und T werden aus den Stetigkeitsbedingungen errechnet:

$$\left. \begin{aligned} \psi_+(0) = \psi_-(0) &\Rightarrow 1 + R = T \\ \psi'_+(0) = \psi'_-(0) &\Rightarrow k(1 - R) = qT \end{aligned} \right\} R = \frac{k - q}{k + q}, T = \frac{2k}{k + q}$$

²in der Regel $e^{-\chi x}$, da sonst bei der üblichen Koordinatenrichtung die Amplitude der Welle exponentiell ansteigt

Die Reflexionswahrscheinlichkeit P_R errechnet sich aus R :

$$P_R = |R|^2 = \left| \frac{k - q}{k + q} \right|^2$$

und die Transmissionswahrscheinlichkeit P_T aus T :

$$P_T = \frac{q}{k} |T|^2 = \left| \frac{2k}{k + q} \right|^2 \frac{q}{k}$$

da $P_R + P_T = 1$ (betrachte jeweils die Wellenpakete). Für die bereits oben erwähnten zwei Fälle ($E > V_0$, $E < V_0$) ergibt sich:

1. $E > V_0$: $|R|^2 < 1$, d.h. es findet teilweise Reflexion, teilweise Transmission statt
2. $E < V_0$: $q = i\chi$ mit $\chi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \Rightarrow |R|^2 = \left| \frac{k - i\chi}{k + i\chi} \right|^2 = 1$, d.h. es findet Totalreflexion statt.

R und T kann man mit den bereits aus der Optik bekannten *Reflexions-* und *Transmissionskoeffizienten* identifizieren.

4.3 Tunneffekt (qualitativ)

Hierbei betrachtet man eine Potentialbarriere mit endlicher Breite (Abb. 4.3):

$$V = \begin{cases} 0 & \text{(I) für } x < -a \\ V_0 & \text{(II) für } -a < x < a \\ 0 & \text{(III) für } x > a \end{cases}$$

und eine Energie $E < V_0$. Als Ergebnisse erhält man (Abb. 4.4):

- im Bereich I: ebene Welle
- im Bereich II: exponentielles Abklingen
- im Bereich III: ebene Welle

Daraus läßt sich ablesen, daß auch in den Bereichen II und III Wellenfunktionen existieren. Ist die Amplitude im Bereich III S , so gibt $|S|^2$ die Wahrscheinlichkeit an, daß das Teilchen im Bereich III ankommt, obwohl es klassisch nicht dahin gelangen könnte. Als Ergebnis erhält man (nichttriviale Rechnung):

$$|S|^2 \cong e^{-4\frac{\alpha}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad \text{für } ka \gg 1$$

Ein Vorgang, den man sich nur mit dem Tunneffekt erklären kann, ist z.B. der α -Zerfall. Klassisch hat das α -Teilchen keine Möglichkeit, vom Rest des Kerns wegzukommen, da der Potentialwall der schwachen Wechselwirkung, der beide zusammenhält, eigentlich zu hoch ist.

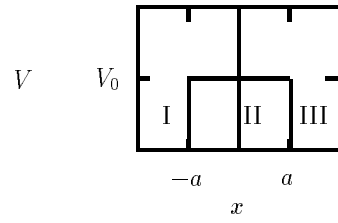


Abbildung 4.3: Potentialschwelle endlicher Breite

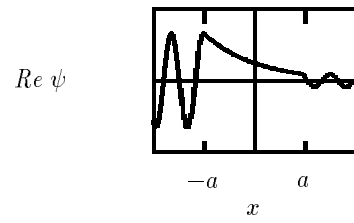


Abbildung 4.4: Ergebnisse der endlichen Potentialschwelle

Kapitel 5

Mathematische Hilfsmittel

5.1 Hilbertraum der Wellenfunktionen

Ein Hilbertraum ist ein beliebig dimensionaler, vollständiger Vektorraum H über den komplexen Zahlen, für den ein Skalarprodukt (\cdot, \cdot) definiert ist, für das gilt:

$$(f(x \in \mathbb{C}), g(x \in \mathbb{C})) \mapsto y \in \mathbb{C} \quad \forall f(x), g(x) \in H$$

Betrachtet man die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion mit $\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$, so folgt daraus über

$$1 = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) < \infty \tag{5.1}$$

daß $\psi(\vec{x}, t)$ quadratintegrabel ist, wobei \int eine Abkürzung für $\int_{-\infty}^{\infty}$ sein soll, d.h. der Integration über den gesamten Raum. Man sieht, daß (5.1) der Forderung entspricht, daß das Teilchen irgendwo sein muß.

Die Quadratintegrabilität nutzt man, um einen Vektorraum H zu definieren:

$$H = \{ \psi(\vec{x}) \mid \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \wedge \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty \}$$

Daß dies wirklich ein Vektorraum ist, sieht man über:

$$\psi_1 \in H, \psi_2 \in H, \alpha, \beta \in \mathbb{C} \Rightarrow \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \in H$$

5.2 Skalarprodukt

Das Skalarprodukt von Funktionen ist folgendermaßen definiert:

Seien $\phi(\vec{x}), \psi(\vec{x}) \in H$ und ϕ^* das konjugiert Komplexe von ϕ :

$$(\phi, \psi) := \int d^3x \phi^* \psi$$

Es hat folgende Eigenschaften, die sich aus der Definition ergeben:

$$\begin{aligned}
 (\phi, \psi) &= (\psi, \phi)^* \\
 (\phi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) &= \lambda_1 (\phi, \psi_1) + \lambda_2 (\phi, \psi_2) && \text{Linearität im 2. Argument} \\
 (\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \psi) &= \lambda_1^* (\phi_1, \psi) + \lambda_2^* (\phi_2, \psi) && \text{Antilinearität im 1. Argument} \\
 \left. \begin{aligned}
 (\phi, \phi) &\geq 0 \quad \text{und} \quad (\phi, \phi) \in \mathbb{R} \\
 (\phi, \phi) &= 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi \equiv 0
 \end{aligned} \right\} && \Rightarrow \text{Definition einer Norm: } \|\phi\| := \sqrt{(\phi, \phi)}
 \end{aligned}$$

Außerdem gilt für das Skalarprodukt und die eben definierte Norm die Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$|(\phi, \psi)| \leq \|\phi\| \cdot \|\psi\| \tag{5.2}$$

Beweis:

1. $\|\phi\| = 0 \Rightarrow$ Ungleichung erfüllt
2. $\|\phi\| \neq 0 \Rightarrow$ betrachte $f = \psi - \frac{(\phi, \psi)}{\|\phi\|^2} \phi$

$$\begin{aligned}
 0 \leq \|f\|^2 &= \left(\psi - \frac{(\phi, \psi)}{\|\phi\|^2} \phi, f \right) = (\psi, f) - \frac{(\phi, \psi)^*}{\|\phi\|^2} (\phi, f) \\
 &= \|\psi\|^2 - \frac{(\phi, \psi)}{\|\phi\|^2} (\phi, \psi)^* - \frac{(\phi, \psi)^*}{\|\phi\|^2} (\phi, \psi) + \frac{(\phi, \psi)^*}{\|\phi\|^2} \frac{(\phi, \psi)}{\|\phi\|^2} \|\phi\|^2 \\
 &= \|\psi\|^2 - \frac{1}{\|\phi\|^2} |(\phi, \psi)|^2 \\
 \Leftrightarrow |(\phi, \psi)|^2 &\leq \|\psi\|^2 \cdot \|\phi\|^2
 \end{aligned}$$

5.3 Orthonormierte Systeme, Basis

Eine Menge von Hilbertraumvektoren $\chi_n, n \in \mathbb{N}$ heißt *orthonormiert*, wenn gilt:

$$(\chi_n, \chi_m) = \delta_{nm}$$

Ein orthonormiertes System heißt vollständig bzw. *Basis*, wenn es zu jedem Vektor $\phi \in H$ Zahlen $a_n \in \mathbb{C}$ gibt, so daß

$$\left\| \phi - \sum_n a_n \chi_n \right\| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \phi = \sum_n a_n \chi_n$$

Der Hilbertraum der Quantenmechanik ist abzählbar—unendlich-dimensional und die Koeffizienten a_n bestimmt man durch:

$$a_n = (\chi_n, \phi)$$

Orthonormierung

Aus einem Satz von linear unabhängigen Vektoren $\phi_1, \dots, \phi_n \in H$ läßt sich ein Orthonormalsystem (ONS) mit den Vektoren $\chi_i, i = 1, \dots, n$ über das *Schmidt'sche Orthonormalisierungsverfahren* konstruieren:

$$(1) \chi_1 = \frac{\phi_1}{\|\phi_1\|}$$

$$(2) \chi_2' = \phi_2 - (\chi_1, \phi_2) \chi_1 \Rightarrow \chi_2 = \frac{\chi_2'}{\|\chi_2'\|}$$

⋮

$$(n) \chi_n' = \phi_n - \sum_{i=1}^{n-1} (\chi_i, \phi_n) \chi_i \Rightarrow \chi_n = \frac{\chi_n'}{\|\chi_n'\|}$$

5.4 Operatoren

Operatoren sind Abbildungen $H \rightarrow H$, d.h. sie bilden eine Funktion auf eine andere des gleichen Raumes ab. Im Gegensatz zu Funktionen wirken sie also nicht auf Punkte eines Raumes, sondern auf Funktionen, die wiederum auf Punkte wirken. (Das klingt alles sehr kompliziert, aber im Prinzip ist „Operator“ nur ein anderer Name für „Funktionsfunktion“).

Wir betrachten den Spezialfall der linearen Operatoren, die die Form einer linearen Abbildung $\mathcal{A} : H \rightarrow H$ haben, d.h.:

$$\mathcal{A}(\lambda_1 \chi_1 + \lambda_2 \chi_2) = \lambda_1 \mathcal{A} \chi_1 + \lambda_2 \mathcal{A} \chi_2 \quad \forall \chi_1, \chi_2 \in H$$

Im folgenden einige Eigenschaften von Operatoren:

Assoziativität: $(\mathcal{A} + \mathcal{B})\phi = \mathcal{A}\phi + \mathcal{B}\phi$

Distributivität: $(\mathcal{A}\mathcal{B})\phi = \mathcal{A}(\mathcal{B}\phi) = \mathcal{A}\mathcal{B}\phi$

Existenz von \mathcal{I} (neutrales Element): $\mathcal{I}\phi = \phi \quad \forall \phi \in H$

inverser Operator: $\mathcal{A}^{-1}\mathcal{A}\phi = \phi = \mathcal{A}\mathcal{A}^{-1}\phi$,

wobei es zu jedem Operator \mathcal{A} höchstens ein \mathcal{A}^{-1} gibt.

Die Multiplikation von Operatoren ist i.a. nicht kommutativ, d.h. $\mathcal{A}\mathcal{B} \neq \mathcal{B}\mathcal{A}$.

Deshalb definiert man den *Kommutator* $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] := \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$.

Für den Kommutator gilt:

$$[\mathcal{A}, \mathcal{B} + \lambda\mathcal{C}] = [\mathcal{A}, \mathcal{B}] + \lambda[\mathcal{A}, \mathcal{C}]$$

$$[\mathcal{A}, \mathcal{B}\mathcal{C}] = [\mathcal{A}, \mathcal{B}]\mathcal{C} + \mathcal{B}[\mathcal{A}, \mathcal{C}]$$

$$[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = -[\mathcal{B}, \mathcal{A}]$$

$$[\mathcal{A}, [\mathcal{B}, \mathcal{C}]] + [\mathcal{B}, [\mathcal{C}, \mathcal{A}]] + [\mathcal{C}, [\mathcal{A}, \mathcal{B}]] = 0 \quad \text{Jacobi-Identität}$$

5.4.1 adjungierte Operatoren

Zu jedem Operator \mathcal{A} gibt es einen adjungierten Operator \mathcal{A}^\dagger für den gilt:

$$(\phi, \mathcal{A}\psi) = (\mathcal{A}^\dagger\phi, \psi) \quad \forall \phi, \psi \in H \quad (5.3)$$

Aus (5.3) folgt:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}^\dagger \text{ ist linear} & \quad \text{wenn } \mathcal{A} \text{ linear} \\
 (\mathcal{A}^\dagger)^\dagger &= \mathcal{A} \\
 (\mathcal{A} + \mathcal{B})^\dagger &= \mathcal{A}^\dagger + \mathcal{B}^\dagger \\
 (\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger &= \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger \\
 (\lambda \mathcal{I})^\dagger &= \lambda^* \mathcal{I} \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \\
 (\mathcal{A} + \lambda \mathcal{B})^\dagger &= \mathcal{A}^\dagger + \lambda^* \mathcal{B}^\dagger \\
 (\mathcal{A}^{-1})^\dagger &= (\mathcal{A}^\dagger)^{-1} \quad \text{wenn } \mathcal{A}^{-1} \text{ existiert} \\
 [\mathcal{A}, \mathcal{B}]^\dagger &= [\mathcal{B}^\dagger, \mathcal{A}^\dagger]
 \end{aligned}$$

Selbstadjungierte Operatoren nennt man auch *hermitesche* Operatoren:

$$\mathcal{A} \text{ hermitesch} \Leftrightarrow \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}$$

Unitäre Operatoren sind solche, für die gilt:

$$\mathcal{A} \text{ unitär} \Leftrightarrow \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} = \mathcal{A} \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{I} \Rightarrow \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}^{-1}$$

5.4.2 Eigenwerte und Eigenvektoren

Wenn \mathcal{A} ein Operator ist, so nennt man ein $\phi \neq 0 \in H$ für das gilt:

$$\mathcal{A}\phi = \lambda\phi \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

Eigenvektor von \mathcal{A} . λ ist der zu ϕ gehörende *Eigenwert* von \mathcal{A} . Die Menge aller Eigenwerte von \mathcal{A} nennt man auch *Spektrum* von \mathcal{A} . Existieren zu einem Eigenwert λ n verschiedene Eigenvektoren, so spricht man von (n -facher) *Entartung*. Für hermitesche Operatoren ($\mathcal{A} = \mathcal{A}^\dagger$) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}\phi &= \lambda\phi \\
 \Rightarrow (\phi, \mathcal{A}\phi) &= \lambda(\phi, \phi)
 \end{aligned}$$

außerdem

$$(\phi, \mathcal{A}\phi)^* = (\mathcal{A}\phi, \phi) = \lambda^*(\phi, \phi)$$

zusätzlich

$$\begin{aligned}
 (\phi, \mathcal{A}\phi)^* &= (\mathcal{A}\phi, \phi) = (\phi, \mathcal{A}^\dagger\phi) = (\phi, \mathcal{A}\phi) \\
 \Rightarrow \lambda(\phi, \phi) &= \lambda^*(\phi, \phi) \\
 \Rightarrow \lambda &= \lambda^* \\
 \Rightarrow \boxed{\lambda \in \mathbb{R}}
 \end{aligned}$$

d.h. die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell. Außerdem gilt für hermitesche Operatoren:

- seien ϕ_1, ϕ_2 Eigenvektoren zu $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Dann gilt $(\phi_1, \phi_2) = 0$, d.h. Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

- ein hermitescher Operator hat ein vollständiges ONS von Eigenvektoren χ_n :

$$\mathcal{A}\chi_n = \lambda_n\chi_n, \phi \in H \Rightarrow \phi = \sum_n a_n\chi_n \text{ mit } a_n = (\chi_n, \phi), n \in \mathbb{N}$$

- seien \mathcal{A}, \mathcal{B} hermitesche Operatoren mit $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = 0$

\Rightarrow es existiert eine Basis von H aus gemeinsamen Eigenvektoren von \mathcal{A} und \mathcal{B}

$$\Rightarrow \exists \chi_n \in H, \lambda_n, \mu_n \in \mathbb{C} : \mathcal{A}\chi_n = \lambda_n\chi_n \wedge \mathcal{B}\chi_n = \mu_n\chi_n$$

Verallgemeinerung:

Falls $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_n$ mit $[\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j] = 0 \forall i, j$ existieren, so existieren gemeinsame Eigenvektoren von $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_n$

5.4.3 Funktionen von Operatoren

Ist $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_n$ ein Satz paarweise kommutierender Operatoren und $f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ eine Funktion von n Variablen, so ist $\mathcal{T} = f(\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_n)$ eine *Operatorfunktion* und es gilt:

$$\mathcal{A}_i\chi_k = \lambda_k^i\chi_k \Rightarrow \mathcal{T}\chi_k = f(\lambda_k^1, \dots, \lambda_k^n)\chi_k$$

Exponentialfunktion für Operatoren

Wichtigstes Beispiel für eine Operatorfunktion ist die Exponentialfunktion $e^{\mathcal{A}}$. Sie ist über die Reihenentwicklung $e^{\mathcal{A}} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\mathcal{A}^n$ definiert und erfüllt die Relation

$$e^{\mathcal{A}}e^{\mathcal{B}} = e^{\mathcal{A}+\mathcal{B}}e^{\frac{1}{2}[\mathcal{A}, \mathcal{B}]}$$

wenn $[\mathcal{A}, [\mathcal{A}, \mathcal{B}]] = [\mathcal{B}, [\mathcal{A}, \mathcal{B}]] = 0$

und die *Baker-Hausdorff-Identität*:

$$e^{\mathcal{A}}\mathcal{B}e^{-\mathcal{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\mathcal{A}, \mathcal{B}]_n$$

mit $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_n = [\mathcal{A}, [\mathcal{A}, \mathcal{B}]_{n-1}]$ und $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_0 = \mathcal{B}$.

5.4.4 Wichtige Beispiele

Zwei wichtige, in der QM immer wieder vorkommende Operatoren sind der *Impulsoperator* $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ und der *Ortsoperator* $\hat{x} = \vec{x}$. Ihr Kommutator ist der *kanonische Kommutator*:

$$[p_i, x_j] = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_i} x_j - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) = -i\hbar \left(\delta_{ij} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right)$$

$$= -i\hbar\delta_{ij}$$

Impulsoperator

Der Impulsoperator ist hermitesch:

$$\begin{aligned}
 (\phi, \hat{p}\psi) &= \int d^3x \phi^* (-i\hbar \vec{\nabla} \psi) \stackrel{\text{p.I.}}{=} \int d^3x (i\hbar \vec{\nabla} \phi^*) \psi - \underbrace{[i\hbar \phi^* \psi]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} \\
 &= \int d^3x (-i\hbar \vec{\nabla} \phi)^* \psi = (\hat{p}\phi, \psi) \\
 \Rightarrow \boxed{\hat{p} = \hat{p}^\dagger}
 \end{aligned}$$

Die oben durchgeführte partielle Integration ist erlaubt, da durch die Quadratintegrabilität die Randterme im Unendlichen verschwinden. Aufgrund der reellen Eigenwerte von \hat{p} folgt:

$$\begin{aligned}
 \hat{p}\phi_{\vec{q}}(\vec{x}) &= -i\hbar \vec{\nabla} \phi_{\vec{q}}(\vec{x}) = \vec{q}\phi_{\vec{q}}(\vec{x}) \\
 \Rightarrow \phi_{\vec{q}}(\vec{x}) &= \phi_0 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q}\vec{x}}
 \end{aligned}$$

und damit das Quadratintegral 1 ergibt ($e^{i\vec{q}\vec{x}}$ nicht normierbar):

$$\phi_{\vec{q}}(\vec{x}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^3 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q}\vec{x}}$$

d.h. die Eigenfunktionen sind ebene Wellen. Ebene Wellen sind allerdings nicht durch einen diskreten, sondern durch den „kontinuierlichen“ Index \vec{q} charakterisiert und außerdem nicht quadratintegabel. Sie sind damit $\notin H$. Andererseits kann aber jeder Vektor $\in H$ über die Fouriertransformation durch ebene Wellen dargestellt werden:

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^3 \int d^3q f(\vec{q}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q}\vec{r}} = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}}(\vec{r}) \quad (5.4)$$

Dabei ist $|f(\vec{q})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen mit dem Impuls \vec{q} zu messen. In diesem Fall bewirkt die Fouriertransformation also die Spektralzerlegung in die Eigenfunktionen des Impulses.

Die ebenen Wellen bilden daher nach (5.4) eine *uneigentliche Basis* von H und die Vektoren $\phi_{\vec{q}}$ heißen folgerichtig *uneigentliche Vektoren* (von H). Die für die Basiseigenschaft notwendige Orthogonalität zeigt man durch:

$$\begin{aligned}
 (\phi_{\vec{q}}, \phi_{\vec{q}'}) &= \int d^3x \phi_{\vec{q}}^* \phi_{\vec{q}'} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x}(\vec{q}-\vec{q}')} \\
 &= \delta(\vec{q} - \vec{q}')
 \end{aligned}$$

Ortsoperator

Die Eigenwertgleichung für den Ortsoperator $\hat{x} = \vec{x}$ lautet:

$$\begin{aligned}
 \hat{x}\psi_{\vec{\xi}} &= \vec{x}\psi_{\vec{\xi}} = \vec{\xi}\psi_{\vec{\xi}} \\
 \Rightarrow \psi_{\vec{\xi}} &= \delta(\vec{x} - \vec{\xi})
 \end{aligned}$$

Auch $\psi_{\vec{\xi}}$ ist wieder nicht quadratintegabel und hat keinen diskreten Index. Aber analog (5.4) gilt:

$$\varphi(\vec{x}) = \int d^3\xi \varphi(\vec{\xi}) \delta(\vec{x} - \vec{\xi}) = \sum_{\vec{\xi}} c_{\vec{\xi}} \psi_{\vec{\xi}}$$

Hier ist $|\varphi(\vec{\xi})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen am Ort $\vec{\xi}$ zu finden. Zeigt man jetzt noch mit:

$$\left(\psi_{\vec{\xi}}, \psi_{\vec{\xi}'}\right) = \int d^3x \delta(\vec{x} - \vec{\xi}) \delta(\vec{x} - \vec{\xi}') = \delta(\vec{\xi} - \vec{\xi}')$$

die Orthogonalität, so sieht man, daß auch die $\psi_{\vec{\xi}}$'s eine uneigentliche Basis von H bilden.

5.5 Dirac-Notation

Da die \vec{q} -Darstellung und $\vec{\xi}$ -Darstellung äquivalent sind (durch Fouriertransformation kann man die eine eindeutig in die andere überführen), jedoch ganz unterschiedlich aussehen, sucht man nach einer darstellungsunabhängigen Schreibweise. Der Ausgangspunkt hierfür ist der Hilbertraum H der quadratintegablen Funktionen. Man definiert sich einen zu H äquivalenten Raum \mathcal{E} der sogenannten Ket-Vektoren:

$$\psi(\vec{r}) \in H \leftrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

Man definiert weiter in Analogie zu H ein Skalarprodukt in \mathcal{E} , für das gilt:

$$(\phi, \psi)_H = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)_{\mathcal{E}} \in \mathbb{C}$$

Die Menge der Linearformen, d.h. der linearen Abbildungen $H \rightarrow \mathbb{C}$ bzw. $\mathcal{E} \rightarrow \mathbb{C}$ (generell Vektorraum $\rightarrow \mathbb{C}$) bildet wieder einen Vektorraum, den zugehörigen *Dualraum*. Der Dualraum \mathcal{E}^* zu \mathcal{E} ist der Raum der Bra-Vektoren $\langle\phi|$. Das Skalarprodukt läßt sich dann schreiben als:

$$(\phi, \psi) =: \langle\phi|\psi\rangle$$

Eigenschaften dieses Skalarprodukts:

$$\begin{aligned} \langle\chi|\phi\rangle^* &= \langle\phi|\chi\rangle \\ \langle\chi|\alpha\phi_1 + \beta\phi_2\rangle &= \alpha\langle\chi|\phi_1\rangle + \beta\langle\chi|\phi_2\rangle && \text{Linearität im 2. Arg.} \\ \langle\alpha\chi_1 + \beta\chi_2|\phi\rangle &= \alpha^*\langle\chi_1|\phi\rangle + \beta^*\langle\chi_2|\phi\rangle && \text{Antilinearität im 1. Arg.} \\ \langle\psi|\psi\rangle &= \|\psi\|^2 \in \mathbb{R}_0^+ \end{aligned}$$

Auch Operatoren in den beiden Räumen werden analog definiert:

$$\underbrace{\mathcal{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle}_{\text{für Kets}} \quad \underbrace{\langle\chi|\mathcal{A} = \langle\phi|}_{\text{für Bras}}$$

(Der Operator \mathcal{A} wirkt für Ket-Vektoren nach rechts und für Bra-Vektoren nach links). Die Adjunktion von Operatoren definiert man dann folgerichtig über:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}|\psi\rangle &= |\phi\rangle \in \mathcal{E} \\ \Rightarrow \exists \langle\phi| \in \mathcal{E}^* : \langle\phi| &= \langle\psi|\mathcal{A}^\dagger \end{aligned}$$

d.h. für die Adjunktion von Operatoren gilt:

$$|\phi\rangle = \mathcal{A}|\psi\rangle \stackrel{\text{Adjunktion}}{\Leftrightarrow} \langle\phi| = \langle\psi|\mathcal{A}^\dagger \quad (5.5)$$

Aus (5.5) folgt:

$$\langle\rho|\mathcal{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{A}^\dagger|\rho\rangle^*$$

was sich für hermitesche Operatoren zu

$$\langle\rho|\mathcal{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{A}|\rho\rangle^*$$

vereinfacht.

Die Eigenwertgleichung wird zu

$$\mathcal{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$$

und die Orthonormalitätsbedingung schreibt sich

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$$

Aus der Forderung nach Vollständigkeit sieht man mit $\lambda_n = \langle u_n | \phi \rangle$:

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_n \lambda_n |u_n\rangle = \sum_n \langle u_n | \phi \rangle |u_n\rangle \\ &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | \phi \rangle \stackrel{!}{=} \mathcal{I} |\phi\rangle \\ \Leftrightarrow \mathcal{I} &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \end{aligned} \quad (5.6)$$

Projektionsoperatoren

Wenn $|\phi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{E}$ mit $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ (Normierung), dann ist $\mathcal{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$ ein Operator mit $\mathcal{P}_\phi|\chi\rangle = |\phi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$. \mathcal{P}_ϕ ist nach

$$\mathcal{P}_\phi^\dagger = (|\phi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\phi| = \mathcal{P}_\phi$$

hermitesch, und außerdem gilt:

$$(\mathcal{P}_\phi)^2 = (|\phi\rangle\langle\phi|)(|\phi\rangle\langle\phi|) = |\phi\rangle \underbrace{\langle\phi|\phi\rangle}_1 \langle\phi| = |\phi\rangle\langle\phi| = \mathcal{P}_\phi$$

Einen Operator mit diesen Eigenschaften, d.h. $\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}$ und $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ nennt man *Projektionsoperator* und seine Abbildung *Projektion* (auf $|\phi\rangle$). Die Projektion liefert sozusagen die $|\phi\rangle$ -Komponente von $|\chi\rangle$.

uneigentliche Bra- und Ket-Vektoren

Wie bereits oben für die „alte“ Schreibweise gezeigt, gilt auch in der Dirac-Schreibweise für den Impulsoperator die Eigenwertgleichung:

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

mit reellem \vec{q} . Über die Regeln für das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ erhält man die Orthogonalitätsbedingung

$$\langle q | q' \rangle = \delta(\vec{q} - \vec{q}')$$

Über die Vollständigkeitsbedingung

$$|\phi\rangle = \int d^3q \langle q | \phi \rangle |q\rangle$$

erhält man die Beziehung:

$$\mathcal{I} = \int d^3q |q\rangle \langle q|$$

Analoge Rechnung für den Ortsoperator liefert:

$$\begin{aligned} \hat{x} |\xi\rangle &= \vec{\xi} |\xi\rangle && \text{Eigenwertgleichung} \\ \langle \xi | \xi' \rangle &= \delta(\vec{\xi} - \vec{\xi}') && \text{Orthogonalität} \\ |\phi\rangle &= \int d^3\xi \langle \xi | \phi \rangle |\xi\rangle && \text{Vollständigkeit} \\ \Rightarrow \mathcal{I} &= \int d^3\xi |\xi\rangle \langle \xi| && \text{Einheitsoperator} \end{aligned}$$

Wie vorher ist $\phi(\vec{\xi}) = \langle \xi | \phi \rangle$ die Wellenfunktion im Raum $\{|\xi\rangle\}$, die dem Ket $|\phi\rangle$ entspricht (Basiswechsel!).

Die Normierung der Wellenfunktion schreibt sich dann:

$$\begin{aligned} \int d^3x |\phi(\vec{x})|^2 &= \int d^3x \langle \phi | x \rangle \langle x | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \left(\int d^3x |x\rangle \langle x| \right) | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \phi \rangle \stackrel{!}{=} 1 \end{aligned}$$

Außerdem erhält man eine andere Schreibweise der Fouriertransformation über:

$$\begin{aligned} \phi(\vec{\xi}) = \langle \xi | \phi \rangle &= \langle \xi | \left(\int d^3q |q\rangle \langle q| \right) | \phi \rangle \\ &= \int d^3q \langle q | \phi \rangle \langle \xi | q \rangle \end{aligned}$$

mit $\langle q | \phi \rangle = f_\phi(\vec{q})$ und $\langle \xi | q \rangle = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}}$.

Als letztes wollen wir noch die Cauchy-Schwarz-Ungleichung in der neuen Notation schreiben:

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$$

5.6 Operatoren in Matrixdarstellung, Eigenwertprobleme von Matrizen

5.6.1 Matrixdarstellung

Es sei $\{|u_i\rangle\}$ eine Basis des Hilbert-Raumes der Ket-Vektoren, d.h. es gilt:

$$\mathcal{I} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \quad \langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$$

Dann läßt sich ein beliebiger Operator \mathcal{A} darstellen durch:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \mathcal{I} \mathcal{A} \mathcal{I} = \left(\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \right) \mathcal{A} \left(\sum_m |u_m\rangle \langle u_m| \right) \\ &= \sum_{n,m} \langle u_n | \mathcal{A} | u_m \rangle \cdot |u_n\rangle \langle u_m| = \sum_{n,m} A_{nm} |u_n\rangle \langle u_m| \end{aligned}$$

Die $A_{nm} = \langle u_n | \mathcal{A} | u_m \rangle$ heißen *Matrixelemente* bezüglich $\{|u_i\rangle\}$. Ist nun $|\psi\rangle$ ein beliebiger Ket aus dem Hilbert-Raum, so gilt

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle u_n | \psi \rangle |u_n\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$$

Damit ist $\mathcal{A}|\psi\rangle$ in der Darstellung bezüglich der Basis $\{|u_i\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}|\psi\rangle &= \sum_{n,m} A_{nm} |u_n\rangle \langle u_m| \left(\sum_i c_i |u_i\rangle \right) \\ &= \sum_{n,m,i} A_{nm} |u_n\rangle c_i \langle u_m | u_i \rangle = \sum_{n,m,i} A_{nm} c_i \delta_{mi} |u_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} A_{nm} c_m |u_n\rangle \end{aligned}$$

5.6.2 Eigenwerte

Die Eigenwertgleichung $\mathcal{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ läßt daher schreiben als:

$$\begin{aligned} (\mathcal{A} - \lambda\mathcal{I})|\psi\rangle &= 0 \\ \Leftrightarrow \sum_n \left(\sum_m (A_{nm}c_m - \lambda\delta_{nm}c_m) \right) |u_n\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem für die c_i , und man kann mit Matrizen schreiben:

$$(A - \lambda I)\vec{c} = \vec{0} \tag{5.7}$$

Dies ist die aus HM oder LA bekannte Eigenwertgleichung für Matrizen. Nicht-triviale Lösungen erhält man nur, falls $\det(A - \lambda I) = 0$ gilt. Diese Bedingung ergibt das sogenannte *charakteristische Polynom*, ein Polynom in λ , dessen Nullstellen λ_i die Eigenwerte sind. Die zugehörigen Eigenfunktionen erhält man, indem die λ_i nacheinander in $(A - \lambda_i I)\vec{c}_i = \vec{0}$ eingesetzt und die Eigenvektoren

\vec{c}_i bestimmt werden, mit denen man dann die Koeffizienten der Entwicklung bezüglich der Basis $\{|u_i\rangle\}$ kennt. Unter Umständen existieren zu einem λ_i mehrere \vec{c}_i , die (5.7) erfüllen (Entartung). Dann bestimmt man den Einheitsvektor bzw. die orthonormale Basis des Unterraums, der von diesen \vec{c}_i aufgespannt wird (Eigenraum).

Die Bestimmung von Eigenfunktionen ($\hat{=}$ Eigenvektoren) eines Operators bezüglich einer Basis entspricht also einem Eigenwertproblem der zugeordneten Matrix.

5.6.3 adjungierte Operatoren

Der adjungierte Operator läßt sich in der Matrixdarstellung leicht berechnen:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^\dagger &= \sum_{n,m} (A_{nm} |u_n\rangle \langle u_m|)^\dagger = \sum_{n,m} A_{nm}^* (|u_n\rangle \langle u_m|)^\dagger = \sum_{n,m} A_{nm}^* (\langle u_m|)^\dagger (|u_n\rangle)^\dagger \\ &= \sum_{n,m} A_{nm}^* |u_m\rangle \langle u_n| \end{aligned}$$

Wie man sieht, erhält man den adjungierten Operator einfach indem man die Matrix transponiert und von jedem Element seinen komplex konjugierten Wert nimmt. Für hermitesche Operatoren gilt daher:

$$\overline{({}^t A)} = A \quad \text{und damit} \quad A_{ii} \in \mathbb{R}$$

Kapitel 6

Postulate der Quantenmechanik

Im folgenden soll das Grundkonzept der Quantenmechanik präzise formuliert werden:

6.1 Postulate

- I) Zu einer festen Zeit $t=0$ wird der Zustand eines Systems durch einen Ket $|\psi\rangle$ beschrieben. Da der Raum \mathcal{E} ein Vektorraum ist, folgt automatisch, daß das Superpositionsprinzip gilt.
- II) Zu jeder meßbaren physikalischen Größe A gibt es einen hermiteschen Operator \mathcal{A} , der im Raum \mathcal{E} wirkt. Dieser Operator heißt ebenso wie die Meßgröße *Observable*.
- III) Die einzig möglichen Ergebnisse einer Messung von A sind die Eigenwerte des Operators \mathcal{A} , woraus folgt:
wenn \mathcal{A} ein diskretes Spektrum besitzt, dann ist die Meßgröße quantisiert.
- IV) Spektralzerlegung:

(a) diskretes Spektrum:

Sei A Observable und $\mathcal{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ mit $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ und $\mathcal{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|$. Dann gilt:

Wird die physikalische Größe A für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen, dann ist für den nichtentarteten Fall die Wahrscheinlichkeit, den Wert a_n zu messen:

$$P(a_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2 \quad \text{mit } \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

(b) kontinuierliches Spektrum:

Sei A Observable und $\mathcal{A}|\alpha\rangle = a_\alpha|\alpha\rangle$ mit $\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ und $\mathcal{I} = \int d\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$. Dann gilt:

wenn A für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen wird, dann ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, den Wert a_α zu finden:

$$\frac{dP}{d\alpha} = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2$$

V) Reduktion des Wellenpakets:

Wenn die Messung von A für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ den Wert a_n ergibt, dann ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung (nichtentarteter Fall):

$$|\psi'\rangle = |n\rangle$$

VI) Zeitentwicklung eines Zustands:

Die zeitliche Entwicklung des Zustandes $|\psi\rangle$ ist gegeben durch die Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

wobei $\mathcal{H}(t)$ der Hamilton-Operator ist. $H(t)$ ist die Observable, die der totalen Energie des Systems entspricht.

Entartung

Wenn zwei oder mehr Eigenwerte eines hermiteschen Operators gleich sind, so bezeichnet man dies als *Entartung*. Im Fall des Hamiltonoperators bedeutet dies z.B., daß mehrere Zustände mit der gleichen Gesamtenergie existieren. Wenn man die orthonormierten Eigenvektoren (d.h. $\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$) zum Eigenwert λ mit $|i\rangle$ bezeichnet ($i = 1, \dots, k$), dann ist für diesen Fall:

$$\mathcal{P}_\lambda = \sum_{i=1}^k |i\rangle \langle i|$$

der Projektor in den Unterraum zu λ . Die Postulate IV und V müssen daher modifiziert werden:

IV)' wenn die entartete Größe A für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ gemessen wird, dann ist die Wahrscheinlichkeit, den Meßwert λ zu erhalten:

$$P(\lambda) = \sum_{i=1}^k |\langle i | \psi \rangle|^2$$

V)' wenn die Messung der Größe A den entarteten Wert λ ergibt, dann ist der Zustand $|\psi'\rangle$ unmittelbar nach der Messung die normierte Projektion von $|\psi\rangle$ auf den Unterraum, der von $|i\rangle$, $i = 1, \dots, k$ aufgespannt wird:

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \mathcal{P}_\lambda | \psi \rangle}} \mathcal{P}_\lambda |\psi\rangle$$

identische Teilchen

Falls zwei oder mehr identische Teilchen betrachtet werden, muß man eine Ergänzung der Postulate vornehmen (siehe auch Abschnitt 13.2.7, Seite 101):

VII) Enthält ein System identische Teilchen, dann werden nur bestimmte Vektoren als physikalische Zustände zugelassen, nämlich entweder die vollständig symmetrischen oder die vollständig antisymmetrischen (bzgl. der identischen Teilchen) Zustandsvektoren.

Teilchen mit vollständig symmetrischen Zustandsvektoren heißen *Bosonen*, solche mit vollständig antisymmetrischen Zustandsvektoren heißen *Fermionen*.

6.2 Folgerungen aus den Postulaten

i) kompatible Observable:

Zwei Observablen A und B heißen *miteinander kompatibel*, wenn $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = 0$ ist. Ist das System im Zustand $|\psi\rangle$, und ergibt die Messung von A den Wert a_n und die Messung von B b_m , dann ist das System danach im Zustand $|n, m\rangle$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}|n\rangle &= a_n |n\rangle \wedge \mathcal{B}|m\rangle = b_m |m\rangle \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} |n, m\rangle &= \begin{pmatrix} a_n \\ b_m \end{pmatrix} |n, m\rangle \end{aligned}$$

Außerdem gilt wegen $\mathcal{A}\mathcal{B}|\psi\rangle = \mathcal{B}\mathcal{A}|\psi\rangle$, daß die Reihenfolge der Messungen egal ist.

ii) Präparation eines Zustandes:

Ein ganzer Satz $\{A_1, \dots, A_n\}$ von Observablen heißt kompatibel, wenn $[\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j] = 0 \forall i, j = 1, \dots, n$

- ist das System im Zustand $|\psi\rangle$ und die Messungen der A_i ergeben die Werte a_{k_1}, \dots, a_{k_n} , dann ist der Zustand nach der Messung $|k_1, \dots, k_n\rangle$.
- somit ist ein Zustand *präpariert*, für den die Messungen der A_i definierte Ergebnisse haben.

iii) der maximale Satz von kompatiblen Observablen $\{A_1, \dots, A_n\}$ ist der Satz mit kleinstmöglichem n , bei dem jede weitere Observable B , für die $[\mathcal{A}_i, \mathcal{B}] = 0 \forall i = 1, \dots, n$ gilt, auf eine Funktion der \mathcal{A}_i zurückgeführt werden kann.

iv) Erwartungswerte und Unschärfe:

- wie bereits gesagt, gilt für ein System im Zustand $|\psi\rangle$ und die Observable A :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}|n\rangle &= a_n |n\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, a_n zu messen, ist dann: $P_n = |\langle n | \psi \rangle|^2$
Macht man eine große Zahl von Messungen mit jeweils gleichem Ausgangszustand $|\psi\rangle$, dann ist der Erwartungswert von A :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A} \rangle &= \sum_n P_n a_n = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle a_n \\ &= \sum_n \langle \psi | n \rangle a_n \langle n | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | \mathcal{A} | n \rangle \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{=I} \\ &= \langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle \end{aligned}$$

- die *Unschärfe* von A wird als mittlere quadratische Abweichung definiert:

$$\begin{aligned}
 (\Delta A)^2 &= \langle \psi | \mathcal{A}^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle)^2 = \langle \psi | (\mathcal{A} - \langle \mathcal{A} \rangle \mathcal{I})^2 | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \mathcal{A}^2 | \psi \rangle - 2 \langle \mathcal{A} \rangle \underbrace{\langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle}_{\langle \mathcal{A} \rangle} + (\langle \mathcal{A} \rangle)^2 \\
 \Leftrightarrow (\Delta A)^2 &= \langle \mathcal{A}^2 \rangle - \langle \mathcal{A} \rangle^2
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Definiere: $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A} - \langle \mathcal{A} \rangle \mathcal{I}$ mit $\langle \tilde{\mathcal{A}} \rangle = 0$. Da \mathcal{A} hermitesch, gilt:

$$(\Delta A)^2 = \|(\mathcal{A} - \langle \mathcal{A} \rangle \mathcal{I})|\psi\rangle\|^2 = \|\tilde{\mathcal{A}}|\psi\rangle\|^2 \tag{6.2}$$

- für das Produkt der Unschärfen zweier Observablen A und B im Zustand $|\psi\rangle$ gilt:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \left| \left\langle \psi \left| \frac{\hat{i}}{2} [\mathcal{A}, \mathcal{B}] \right| \psi \right\rangle \right| \tag{6.3}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 (\Delta A)(\Delta B) &= \|\tilde{\mathcal{A}}|\psi\rangle\| \cdot \|\tilde{\mathcal{B}}|\psi\rangle\| \stackrel{(5.2)}{\geq} \left| \langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle \right| \\
 &\geq \left| \text{Im} \langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle \right| = \left| \frac{1}{2i} (\langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle - \langle \psi | \tilde{\mathcal{B}}\tilde{\mathcal{A}} | \psi \rangle) \right| \\
 &= \left| \frac{1}{2i} \langle \psi | [\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}] | \psi \rangle \right| \\
 &= \left| \left\langle \psi \left| \frac{\hat{i}}{2} [\mathcal{A}, \mathcal{B}] \right| \psi \right\rangle \right|
 \end{aligned}$$

Aus dieser Beziehung erkennt man, daß kompatible Variable gleichzeitig beliebig genau bestimmbar sind.

- Ort-Impuls-Unschärfe: $\mathcal{A} = \hat{x}$, $\mathcal{B} = \hat{p}$:

$$\begin{aligned}
 (\Delta \hat{x})(\Delta \hat{p}) &\geq \left| \left\langle \psi \left| \frac{\hat{i}}{2} [\hat{x}, \hat{p}] \right| \psi \right\rangle \right| = \left| \left\langle \psi \left| \frac{\hat{i}}{2} (i\hbar\delta_{ij}) \right| \psi \right\rangle \right| \\
 &= \frac{1}{2}\hbar \quad (\text{falls } \hat{p} \text{ der zu } \hat{x} \text{ gehörige Impuls ist})
 \end{aligned}$$

- „Energie-Zeit-Unschärfe“:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \tag{6.4}$$

Diese Relation geht nicht direkt aus (6.3) hervor, da es keinen „Zeitoperator“ gibt. Betrachtet man aber das 1-dimensionale Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int \frac{dq}{\sqrt{2\pi\hbar}} f(q) e^{-i\omega t + iqx}$$

mit $\omega = \frac{q^2}{2m\hbar}$, dann weiß man, daß sich das Paket mit der Gruppengeschwindigkeit v_g fortbewegt: $\Delta t = \frac{\Delta x}{v_g}$

Damit sieht man die Bedeutung der Zeit in (6.4). Die Energie entspricht wieder dem Hamiltonoperator. Gleichung (6.4) kann man aus der normalen Unschärferelation (3.2) herleiten durch:

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p \approx v_g \Delta p$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t = \frac{\Delta x \Delta p}{v_g} v_g \geq \frac{\hbar}{2}$$

v) Quantisierungsregeln:

Gegeben sei ein klassisches System. Wie „quantisiert“ man dieses System? Klassisch gilt, daß der Ort \vec{x}_c und der Impuls \vec{p}_c die Beobachtungsgrößen sind, und daß jede andere Beobachtungsgröße eine Funktion von \vec{x}_c und \vec{p}_c ist: $G_c = G_c(\vec{x}_c, \vec{p}_c)$

Regel:

Ordne dem Ort \vec{x}_c den Ortsoperator \hat{x} und dem Impuls \vec{p}_c den Impulsoperator \hat{p} zu, wobei für die Komponenten der kanonische Kommutator gilt:

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Der Beobachtungsgröße G muß ein hermitescher Operator \mathcal{G} zugeordnet werden. Dies geschieht dadurch, die Operatoren \hat{x} und \hat{p} in G_c eingesetzt werden und geeignet symmetrisiert wird.

Beispiele:

- Symmetrisierung bei gegebener Beobachtungsgröße:

Sei $A(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{x}\vec{p}$. Im Gegensatz zum klassischen Fall mit $\vec{x}_c\vec{p}_c = \vec{p}_c\vec{x}_c$ gilt in der Quantenmechanik:

$$(\hat{x}\hat{p})^\dagger = \hat{p}^\dagger\hat{x}^\dagger = \hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p}$$

d.h. $\mathcal{A}(\hat{x}, \hat{p})$ ist nicht hermitesch. Aber durch die Symmetrisierung:

$$\bar{\mathcal{A}}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$$

entsteht ein hermitescher Operator $\bar{\mathcal{A}}$ mit der gleichen klassischen Beobachtungsgröße.

Die folgenden Hamiltonoperatoren sind hermitesch:

- Hamiltonoperator im zeitunabhängigen äußeren Potential:

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

- Hamiltonoperator im äußeren elektromagnetischen Feld:

$$\mathcal{H}(\hat{x}, \hat{p}, t) = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}, t) \right)^2 + eA_0(\hat{x}, t)$$

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} \quad \vec{E} = -\text{grad } A_0 - \frac{1}{c} \dot{\vec{A}}$$

vi) Erhaltung der Wahrscheinlichkeit:

Für normierte Wellenfunktionen, die die Schrödingergleichung erfüllen, gilt:

$$\langle \psi(t=0) | \psi(t=0) \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \text{wegen} \quad & \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle \\ \text{und} \quad & \frac{d}{dt} \langle \psi| = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi| \mathcal{H}^\dagger = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi| \mathcal{H} \\ \text{gilt} \quad & \frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi| \right) |\psi\rangle + \langle \psi| \left(\frac{d}{dt} |\psi\rangle \right) \\ & \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle - \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle) = 0 \end{aligned}$$

woraus man ersieht, daß $\langle \psi | \psi \rangle$ eine globale Erhaltungsgröße ist.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte wurde definiert als: $|\psi(\vec{x}, t)|^2 = \rho(\vec{x}, t)$. Aus der globalen Erhaltung der Wahrscheinlichkeit folgt lokal eine Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (6.5)$$

Betrachtet man für einen Hamiltonoperator $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t)$ die Schrödingergleichung, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ \text{und} \quad -\hat{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \psi^*(\vec{x}, t) \\ \Leftrightarrow \hat{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{(\psi^* \psi)}_{=\rho(\vec{x}, t)} &= \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \end{aligned}$$

und man sieht über:

$$\begin{aligned} \text{div}(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) &= \text{div}(\psi^* \vec{\nabla} \psi) - \text{div}(\psi \vec{\nabla} \psi^*) \\ &= (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) + \psi^* \Delta \psi - (\vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^*) - \psi \Delta \psi^* \\ &= \psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* \end{aligned}$$

daß man den „Wahrscheinlichkeitsstrom“

$$\vec{j}(\vec{x}, t) := \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*)$$

setzen muß, um die Kontinuitätsgleichung (6.5) zu erfüllen.

vii) Zeitentwicklung von Erwartungswerten:

Aus $\langle \mathcal{A} \rangle (t) = \langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle$ folgt das *Ehrenfest-Theorem*:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \mathcal{A} \rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | \right) \mathcal{A}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \mathcal{A}(t)}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \mathcal{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle \right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \mathcal{A} \mathcal{H} - \mathcal{H} \mathcal{A} | \psi \rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\mathcal{A}, \mathcal{H}] | \psi \rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [\mathcal{H}, \mathcal{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} \right\rangle \tag{6.6}
 \end{aligned}$$

Im Hamiltonformalismus (klassische Mechanik) gab es eine ähnliche Beziehung:

$$\frac{d}{dt} A = \{H, A\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

($\{\cdot, \cdot\}$ Poisson-Klammer!) woraus man vermuten kann, daß die klassischen Beziehungen sich in der Quantenmechanik auf die Erwartungswerte übertragen lassen.

Wenn gilt:

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} \right\rangle = 0 \wedge [\mathcal{A}, \mathcal{H}] = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \mathcal{A} \rangle = 0$$

dann heißt A *Konstante der Bewegung*. In diesem Fall existieren gemeinsame Eigenvektoren von \mathcal{H} und \mathcal{A} (wegen $[\mathcal{A}, \mathcal{H}] = 0$):

$$\mathcal{A} |n, m\rangle = a_n |n, m\rangle \quad \mathcal{H} |n, m\rangle = E_m |n, m\rangle$$

Beispiel für Ehrenfest-Theorem: Teilchen im Potential

(Hamiltonoperator: $\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$)

Das Teilchen entspricht in der Quantenmechanik einem Wellenpaket mit $\langle \hat{x} \rangle$ als Schwerpunkt. Die Gruppengeschwindigkeit v_g des Wellenpakets ersetzt die klassische Teilchengeschwindigkeit:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \mathcal{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] \right\rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \\
 \Rightarrow \langle \hat{p} \rangle &= m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle
 \end{aligned}$$

Bei der zeitlichen Änderung des Erwartungswertes des Impulses $\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \mathcal{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [-i\hbar \vec{\nabla}, V] \rangle \\ &= -\langle \vec{\nabla} V \rangle \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= -\langle \vec{\nabla} V \rangle = \langle \vec{F} \rangle \end{aligned}$$

Klassisch gilt:

$$\vec{p} = m\dot{\vec{x}} \quad \dot{\vec{p}} = \vec{F}$$

d.h. die klassische Newton'sche Mechanik ist (wie zu erwarten war) als Grenzfall in der Quantenmechanik enthalten.

6.3 Beispiel: Zwei-Zustandssystem

Die beiden möglichen Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ bilden die Basis, es sind stationäre Zustände von \mathcal{H}_0 , dem ungestörten Hamiltonoperator. Daraus folgen die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 |1\rangle &= E_1 |1\rangle & \mathcal{H}_0 |2\rangle &= E_2 |2\rangle \\ \langle 1 | 2 \rangle &= 0 & \langle 1 | 1 \rangle &= \langle 2 | 2 \rangle = 1 \\ \mathcal{I} &= |1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2| \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator hat in der Matrixdarstellung bezüglich der Basis $|1\rangle$ und $|2\rangle$ die Form:

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

Betrachtet man $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \hat{w}$ mit einer Störung

$$\hat{w} = \begin{pmatrix} 0 & w \\ w^* & 0 \end{pmatrix}$$

so ergibt sich:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1 & w \\ w^* & E_2 \end{pmatrix}$$

Die Bestimmung der Eigenfunktionen $|\pm\rangle$ und Eigenwerte E_{\pm} dieses Hamiltonoperators in der Form

$$\mathcal{H} |+\rangle = E_+ |+\rangle \quad \mathcal{H} |-\rangle = E_- |-\rangle$$

in Abhängigkeit von E_1 , E_2 , und w (Basis: $\{|1\rangle, |2\rangle\}$) führt auf:

$$\begin{aligned}
(E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - ww^* &= 0 \Leftrightarrow E_1E_2 - (E_1 + E_2)\lambda + \lambda^2 = |w|^2 \\
\Rightarrow \left(\lambda - \frac{E_1 + E_2}{2}\right)^2 &= |w|^2 - E_1E_2 + \left(\frac{E_1 + E_2}{2}\right)^2 \\
&= |w|^2 - E_1E_2 + \frac{1}{4}(E_1^2 + E_2^2 + 2E_1E_2) \\
&= |w|^2 + \frac{1}{4}(E_1^2 + E_2^2 + 2E_1E_2 - 4E_1E_2) \\
&= |w|^2 + \frac{1}{4}(E_1 - E_2)^2 \\
\Rightarrow E_{\pm} &= \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|w|^2}
\end{aligned}$$

und mit $\bar{E} = \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$ und $\Delta = E_1 - E_2$:

$$E_{\pm} = \bar{E} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + 4|w|^2}$$

Die dazugehörigen Eigenvektoren sind (nichttriviale Rechnung):

$$\begin{aligned}
|+\rangle &= e^{-\frac{i}{2}\varphi} \cos \frac{\theta}{2} |1\rangle + e^{\frac{i}{2}\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |2\rangle \\
|-\rangle &= e^{-\frac{i}{2}\varphi} (-\sin \frac{\theta}{2}) |1\rangle + e^{\frac{i}{2}\varphi} \cos \frac{\theta}{2} |2\rangle \\
\tan \theta &= \frac{2|w|}{E_1 - E_2} \quad w = |w|e^{i\varphi}
\end{aligned}$$

Kapitel 7

Eindimensionaler harmonischer Oszillator

7.1 Allgemeine Betrachtungen

Der eindimensionale harmonische Oszillator (HO) ist deshalb von Relevanz, da man mit ihm viele Probleme in recht guter Näherung beschreiben kann. Betrachtet man ein Teilchen im Potential $V(x)$, dann kann man $V(x)$ um einen Gleichgewichtspunkt x_0 ($\hat{=}$ V hat ein Minimum in x_0) entwickeln:

$$V(x) = V(x_0) + (x - x_0) \underbrace{V'(x_0)}_{=0 \text{ in } x_0} + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 V''(x_0) + \dots$$

Für kleine Auslenkungen werden die Terme in $(x-x_0)^3$ oder höher vernachlässigt und man erhält die Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

mit

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \quad V = \frac{1}{2}kx^2 \text{ mit } k = V''(x_0)$$

Diese Funktion ist symmetrisch in x und p , was deutlicher wird, wenn man zu den neuen Koordinaten

$$P = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p \quad X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

übergeht. Die Hamiltonfunktion schreibt sich dann:

$$H(X, P) = (X^2 + P^2) \frac{\hbar\omega}{2} \tag{7.1}$$

Bemerkungen:

- i) Die Eigenwerte des HO sind positiv, da das Potential nach unten beschränkt ist

ii) Die Eigenfunktionen von \mathcal{H} haben eine definierte *Parität*. Die Parität beschreibt das Verhalten (der Funktion) bei Anwendung der Koordinatentransformation $x \mapsto -x$. Im Hilbertraum entspricht dies einem Operator Π mit $\Pi^2 = \mathcal{I}$, woraus folgt, daß die Eigenwerte von Π ± 1 sind:

$$\begin{aligned} \Pi |\psi\rangle &= -|\psi\rangle && \text{ungerade Parität (z.B. } \sin x) \\ \Pi |\psi\rangle &= |\psi\rangle && \text{gerade Parität (z.B. } \cos x) \end{aligned}$$

iii) Das Spektrum des HO ist diskret

7.2 Lösung der Schrödingergleichung

Es gilt:

$$[\mathcal{P}, \mathcal{X}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = -i \quad (7.2)$$

mit den Beziehungen

$$\mathcal{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p} \quad \mathcal{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}$$

Im Ortsraum hat man daher die Darstellung:

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &\hat{=} X & \mathcal{P} &\hat{=} -i \frac{d}{dX} \\ \Rightarrow \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2 \right) \psi_n(X) &= \epsilon_n \psi_n(X) & \text{mit } \epsilon_n &= \frac{E_n}{\hbar\omega} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{d^2}{dX^2} - (X^2 - 2\epsilon_n) \right) \psi_n(X) &= 0 \end{aligned}$$

Ein Versuch einer Lösung ist

$$\begin{aligned} \phi(X) &= e^{-\frac{1}{2}X^2} \\ \Rightarrow \phi''(X) - (X^2 - 1)\phi(X) &= 0 \end{aligned}$$

d.h. $\phi(X)$ ist Eigenfunktion zu $\epsilon_0 = \frac{1}{2}$. Das liefert uns den Lösungsansatz:

$$\begin{aligned} \phi(X) &= e^{-\frac{1}{2}X^2} h(X) \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dX^2} h - 2X \frac{d}{dX} h + (2\epsilon - 1)h &= 0 \end{aligned} \quad (7.3)$$

Setze $h(X) := \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} X^{2m+p}$. Die Parität dieser Reihe hängt nur vom Parameter p ab, und so erhält man aus (7.3) durch Einsetzen und Koeffizientenvergleich die Bedingungen

$$(2m + p + 2)(2m + p + 1)a_{2m+2} = (4m + 2p - 2\epsilon + 1)a_{2m}$$

und

$$p(p - 1)a_0 = 0$$

und daher bei beliebigem $a_0 \neq 0$:

$$p = 0 \quad \vee \quad p = 1$$

und die Rekursionsformel:

$$\frac{a_{2(m+1)}}{a_{2m}} = \frac{4m + 2p - 2\epsilon + 1}{(2m + p + 2)(2m + p + 1)} \sim \frac{1}{m} \text{ für große } m$$

Daraus folgt wiederum:

- Konvergenz für alle x
- $h(X)$ wachsen für beliebige ϵ sehr stark in x , insbesondere sind sie nicht quadratintegrabel (vgl. Entwicklung der ϵ -Funktion)
- wählt man $\epsilon = 2m_0 + p + \frac{1}{2}$ mit $m_0 \in \mathbb{N}$, damit die Reihe abbricht, so folgt mit $n = 2m_0 + p$: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ($n \in \mathbb{N}$). Für die Eigenfunktionen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} & E_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega \\ \phi_1(x) &= \left(\frac{4m^3\omega^3}{\hbar^3\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} & E_1 &= \frac{3}{2}\hbar\omega \\ \phi_2(x) &= \left(\frac{m\omega}{4\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} & E_2 &= \frac{5}{2}\hbar\omega \\ & \vdots & & \end{aligned}$$

Die Differentialgleichung, aus der wir die Polynome erhielten, war:

$$\left(\frac{d^2}{dX^2} + 2X\frac{d}{dX} + 2n\right)H_n(X) = 0$$

Die H_n sind die sogenannten *Hermite-Polynome*. Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung lautet damit:

$$\phi_n(X) = N_n H_n(X) e^{-\frac{1}{2}X^2}$$

mit N_n als Normierungsfaktor:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2}x^2}$$

7.3 Erzeuger und Vernichter

Aus den Beziehungen (7.1) und (7.2) ergibt sich für $P, X \in \mathbb{C}$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(X^2 + P^2) = \frac{\hbar\omega}{2}(X + iP)(X - iP)$$

Dies legt die Definitionen $\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} + i\mathcal{P})$ (*Vernichter* oder auch *Absteigeoperator*) und $\hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{X} - i\mathcal{P})$ (*Erzeuger* oder auch *Aufsteigeoperator*)¹ nahe, mit denen man erhält:

$$\mathcal{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \mathcal{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

und

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Den Hamilton-Operator in \hat{a} und \hat{a}^\dagger erhält man über

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^2 + \mathcal{X}^2 &= -\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) + \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2}(-\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2}(2(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})) = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \\ \Rightarrow \mathcal{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

Definiert man noch den sogenannten *Anzahloperator* $\mathcal{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, so sieht man:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \hbar\omega\left(\mathcal{N} + \frac{1}{2}\right) \\ [\mathcal{N}, \hat{a}] &= -\hat{a} \quad [\mathcal{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem von \mathcal{H} verlagert sich damit auf ein Eigenwertproblem von \mathcal{N} :

$$\mathcal{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

Definiere: Der Grundzustand $|0\rangle$ des HO wird als Eigenzustand von \mathcal{N} zum Eigenwert $n = 0$ definiert, womit sich ergibt:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}|0\rangle &= \hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = 0 \\ \Rightarrow \hat{a}|0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Über die Rechnung

$$\begin{aligned} \mathcal{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= ([\mathcal{N}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\mathcal{N})|n\rangle = [\mathcal{N}, \hat{a}^\dagger]|n\rangle + \hat{a}^\dagger\mathcal{N}|n\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger|n\rangle + n\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle \end{aligned}$$

sieht man, daß $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ der Eigenzustand von \mathcal{N} zum Eigenwert $n+1$ ist. Das heißt, \hat{a}^\dagger liefert bei Anwendung auf einen beliebigen Eigenzustand den nächsthöheren Eigenzustand (d.h. den mit dem nächsthöheren Eigenwert). \hat{a} bewirkt genau das Gegenteil, d.h. er liefert bei Anwendung auf einen beliebigen Eigenzustand den nächstniedrigeren Eigenzustand, womit sich die Bezeichnungen Vernichter für \hat{a} und Erzeuger für \hat{a}^\dagger erklären:

¹der Grund für diese Bezeichnungen wird bald klar werden

\hat{a}^\dagger „erzeugt“ ein zusätzliches Schwingungsquant, während \hat{a} ein Schwingungsquant „vernichtet“.

Damit läßt sich der Hilbertraum des HO algebraisch konstruieren:

Man postuliert einen Grundzustand $|0\rangle$ mit $\langle 0|0\rangle = 1$ und erhält:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= N_1 \hat{a}^\dagger |0\rangle && \text{mit } \langle 1|1\rangle = 1 \\ &\vdots \\ |k\rangle &= N_k \hat{a}^\dagger |k-1\rangle = N_k (\hat{a}^\dagger)^k |0\rangle && \text{mit } \langle k|k\rangle = 1 \end{aligned}$$

Die benötigten Normierungskonstanten N_i erhält man durch:

$$\begin{aligned} N_1 : \quad \langle 1|1\rangle &= |N_1|^2 \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle = |N_1|^2 \langle 0|1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle \\ &= |N_1|^2 \langle 0|0\rangle \\ &\Rightarrow N_1 = 1 \\ N_2 : \quad \langle 2|2\rangle &= |N_2|^2 \langle 0|\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|0\rangle = |N_2|^2 \langle 0|(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{a}^\dagger)|0\rangle \\ &= |N_2|^2 \langle 0|(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger)|0\rangle \\ &= |N_2|^2 \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}^\dagger] + [\hat{a},\hat{a}^\dagger]|0\rangle \\ &= |N_2|^2 2 \stackrel{!}{=} 1 \\ &\Rightarrow N_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Allgemein:

$$N_k = \frac{1}{\sqrt{k!}}$$

Die entsprechenden allgemeinen Eigenfunktionen und Eigenwerte kann man dann schreiben als:

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \end{aligned}$$

7.4 Unschärfen im Grundzustand

Für die Erwartungswerte von X und P ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{X} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|0\rangle = 0 \\ \langle \mathcal{P} \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \langle 0|\hat{a}^\dagger - \hat{a}|0\rangle = 0 \end{aligned}$$

und für die Quadrate:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{X}^2 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 0 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{a}\hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{2} \\ \langle \mathcal{P}^2 \rangle &= -\frac{1}{2} \langle 0 | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | 0 \rangle = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Daraus kann man mit Hilfe von (6.1) berechnen:

$$(\Delta P)^2 (\Delta X)^2 = \frac{1}{4} \Rightarrow (\Delta p)(\Delta x) = \frac{\hbar}{2}$$

Allgemein gilt für die Unschärfe im Zustand $|n\rangle$ (über $\Delta x = \sqrt{(n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}}$ und $\Delta p = \sqrt{(n + \frac{1}{2})m\hbar\omega}$):

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

7.5 Kohärente Zustände

Als *kohärente Zustände* bezeichnet man die Eigenzustände des Vernichtungsoperators:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad \alpha \text{ i.a. } \in \mathbb{C}$$

Die Entwicklung von $|\alpha\rangle$ in die Energieeigenfunktionen $|n\rangle$ ist:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \alpha \rangle |n\rangle \quad (7.4)$$

Hieraus erhält man über

$$\begin{aligned}\hat{a} |\alpha\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | \alpha \rangle \hat{a} |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | \alpha \rangle \sqrt{n} |n-1\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n+1 | \alpha \rangle \sqrt{n+1} |n\rangle \stackrel{!}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \alpha \rangle \alpha |n\rangle\end{aligned}$$

eine Rekursionsformel für die Koeffizienten $\langle n | \alpha \rangle$:

$$\langle n+1 | \alpha \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \langle n | \alpha \rangle$$

Explizit schreibt sich diese Formel:

$$\langle n | \alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \alpha \rangle$$

Den Faktor $\langle 0 | \alpha \rangle$ bestimmt man aus der Normierung von $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \alpha \rangle &= \sum_{n,m} \langle m | \alpha \rangle \langle n | \alpha \rangle \langle n | m \rangle = \sum_n |\langle \alpha | n \rangle|^2 \\ &= |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (|\alpha|^2)^n = |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 e^{|\alpha|^2} \stackrel{!}{=} 1 \\ \Rightarrow \langle 0 | \alpha \rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\end{aligned}$$

Aus (7.4) folgt hiermit:

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\
\Leftrightarrow |\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle
\end{aligned} \tag{7.5}$$

Dieser Ausdruck kann weiter vereinfacht werden. Dazu betrachtet man den unitären Operator

$$\mathcal{U}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}}$$

Nach der Beziehung $e^{\mathcal{A}} e^{\mathcal{B}} = e^{\mathcal{A}+\mathcal{B}} e^{\frac{1}{2}[\mathcal{A},\mathcal{B}]}$ aus Abschnitt 5.4.3 gilt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{U} &= e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{\frac{1}{2}|\alpha|^2 [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]} \\
&= e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}
\end{aligned}$$

Außerdem erhält man über die Reihenentwicklung von e^x :

$$e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\alpha^*)^n \hat{a}^n |0\rangle = |0\rangle$$

da $\hat{a} |0\rangle = 0$. Wendet man also \mathcal{U} auf den Grundzustand an, so erhält man

$$\begin{aligned}
\mathcal{U} |0\rangle &= e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} |0\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \underbrace{e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle}_{=|0\rangle} \\
&= e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} |0\rangle \\
&\stackrel{(7.5)}{=} |\alpha\rangle
\end{aligned}$$

D.h. für den kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ gilt:

$$|\alpha\rangle = \mathcal{U} |0\rangle$$

mit dem unitären Operator $\mathcal{U} = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}}$.

7.5.1 Zeitliche Entwicklung der $|\alpha\rangle$ Zustände

Sind die Energieeigenwerte E_n zur Basis $\{|n\rangle\}$ durch $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ gegeben und ist $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand, dann gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \psi(t=0) \rangle |n\rangle e^{-i\omega_n t} \quad \omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
|\alpha(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \frac{1}{\sqrt{n!}} \alpha^n |n\rangle e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})} \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha e^{-i\omega t})^n |n\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\alpha e^{-i\omega t} \hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-i\frac{\omega}{2}t} e^{\alpha e^{-i\omega t} \hat{a}^\dagger} |0\rangle \\
&= e^{-i\frac{\omega}{2}t} \mathcal{U}(\alpha e^{-i\omega t}) |0\rangle
\end{aligned}$$

7.5.2 Vollständigkeit der $|\alpha\rangle$ Zustände

Es gilt:

(i) $|\alpha\rangle$ Zustände sind nicht orthogonal:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha'|\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\frac{1}{2}|\alpha'|^2} \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{m!}} (\alpha')^n (\alpha^*)^m \langle m|n\rangle \\
&= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\frac{1}{2}|\alpha'|^2} e^{\alpha'\alpha^*} \\
&= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\alpha'|^2-2\alpha'\alpha^*)} \neq \delta(\alpha'-\alpha)
\end{aligned}$$

denn kurzes nachrechnen zeigt:

$$|\langle\alpha'|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\alpha'|^2}$$

(ii) die $|\alpha\rangle$ Zustände sind vollständig:

$$\frac{1}{\pi} \iint d(\operatorname{Re} \alpha) d(\operatorname{Im} \alpha) |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathcal{I}$$

7.5.3 Erwartungswerte für Ort und Impuls

Beim HO entsprechen die kohärenten Zustände der klassischen Bewegung am besten, wie man anhand der Erwartungswerte leicht sieht:

$$\begin{aligned}
\langle\mathcal{X}\rangle &= \langle\alpha(t)|\mathcal{X}|\alpha(t)\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle\alpha(t)|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|\alpha(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(t) + \alpha^*(t)) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha e^{-i\omega t}) \\
&= \sqrt{2} (\operatorname{Re}(\alpha) \cos(\omega t) + \operatorname{Im}(\alpha) \sin(\omega t)) \\
\langle\mathcal{P}\rangle &= \sqrt{2} (-\operatorname{Im}(\alpha) \cos(\omega t) - \operatorname{Re}(\alpha) \sin(\omega t))
\end{aligned}$$

Dies sind gerade die Gleichungen für die klassische Bewegung; daher auch die Bezeichnung „quasiklassische Zustände“. Für die Eigenzustände im nichtkohärenten Fall gilt dagegen nach Abschnitt 7.4 $\langle\mathcal{X}\rangle = \langle\mathcal{P}\rangle = 0 \forall |n\rangle$ (wurde allerdings nur für $|0\rangle$ gezeigt).

7.5.4 Unschärfen kohärenter Zustände

Zur Berechnung der Unschärfen braucht man $\langle \mathcal{X} \rangle$ und $\langle \mathcal{X}^2 \rangle$ bzw. $\langle \mathcal{P} \rangle$ und $\langle \mathcal{P}^2 \rangle$. $\langle \mathcal{X} \rangle$ wurde bereits oben berechnet, wir benötigen also noch $\langle \mathcal{X}^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \alpha(t) | \mathcal{X}^2 | \alpha(t) \rangle &= \frac{1}{2} \langle \alpha(t) | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \alpha(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \alpha(t) | \alpha^2(t) + (\alpha^*(t))^2 + 2|\alpha(t)|^2 + 1 | \alpha(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^2(t) + (\alpha^*(t))^2 + 2|\alpha(t)|^2 + 1) \langle \alpha(t) | \alpha(t) \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (\Delta X)^2 &= \langle \mathcal{X}^2 \rangle - (\langle \mathcal{X} \rangle)^2 \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^2(t) + (\alpha^*(t))^2 + 2|\alpha(t)|^2 + 1 - \alpha^2(t) - (\alpha^*(t))^2 - 2|\alpha(t)|^2) \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Analog ergibt sich für $(\Delta P)^2 = \frac{1}{2}$. Die Unschärfen sind also $\Delta X = \Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Diese Werte sind die kleinstmöglichen und außerdem zeitunabhängig. Kohärente Zustände sind also Zustände kleinster Unschärfe („minimum uncertainty states“).

Für sie gilt die Unschärferelation:

$$(\Delta X)(\Delta P) = \frac{1}{2}$$

Kapitel 8

Elektronenspin

Stern-Gerlach-Versuch

In diesem Versuch wird ein Strahl aus Ag-Atomen durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geschickt. In einem solchen \vec{B} -Feld wirkt nur auf Atome mit resultierendem Drehmoment eine Kraft. Die Ag-Atome sollten demnach im Feld nicht abgelenkt werden, da ihr Bahndrehimpuls $l = 0$ ist. Trotzdem beobachtet man eine Aufspaltung in zwei Teilstrahlen. Daraus schließt man auf die Existenz eines inneren Freiheitsgrades mit den Eigenschaften eines Drehimpulses, genannt *Spin*, der genau zwei Werte annehmen kann, also quantisiert ist.

8.1 Allgemeine Betrachtungen

Der Spin wird repräsentiert durch den Spinvektor \vec{S} (Axialvektor). Mit dem Spin verknüpft ist beim Elektron ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = g\vec{S} \quad g - \text{gyromagnetisches Verhältnis}$$

Der Spin ist über das magnetische Moment beobachtbar, d.h. es muß einen hermiteschen Operator \mathcal{S} geben, der den Spin beschreibt.

Die z -Komponente des Spins hat zwei Eigenwerte und -vektoren:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle & \mathcal{S}_z |-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \\ \langle + | + \rangle &= \langle - | - \rangle = 1 & \langle + | - \rangle &= 0 & \mathcal{I} &= (|+\rangle \langle +|) + (|-\rangle \langle -|) \end{aligned}$$

und in Matrixschreibweise:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \sigma_z & \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ |+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die anderen Komponenten des Spins sind ebenfalls als 2×2 -Matrizen darstellbar:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \sigma_x & \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathcal{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \sigma_y & \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die $\sigma_{x,y,z}$ nennt man *Pauli'sche Spinmatrizen* oder kurz *Pauli-Matrizen*. Auch \mathcal{S}_x und \mathcal{S}_y haben die Eigenwerte $\pm \frac{\hbar}{2}$. Die Komponenten sind jedoch nicht kompatibel, da

$$[\mathcal{S}_x, \mathcal{S}_y] = \frac{1}{4} \hbar^2 [\sigma_x, \sigma_y] = \frac{i}{2} \hbar^2 \sigma_z = i \hbar \mathcal{S}_z$$

Zwischen den Pauli-Matrizen gilt

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad I - \text{Einheitsmatrix}$$

und die zyklische Vertauschungsrelation

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

(z.B. $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$).

Messung des Spins:

- (i) Ist das System im Zustand $|+\rangle$ und es wird eine Messung von \mathcal{S}_z durchgeführt, so erhält man als Ergebnis $\frac{\hbar}{2}$
- (ii) Ist das System im Zustand $\alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$ mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, so hat man bei der Messung die Wahrscheinlichkeiten $P_+ = |\alpha|^2$ bzw. $P_- = |\beta|^2$ den Wert $\frac{\hbar}{2}$ bzw. $-\frac{\hbar}{2}$ zu messen.
Genauer: hat man N ($N \gg 1$) gleiche Systeme im Zustand $|\psi\rangle$, dann gilt:

$$N_+ = N |\alpha|^2 \quad N_- = N |\beta|^2$$

wobei N_{\pm} die Anzahlen der Meßergebnisse $\pm \frac{\hbar}{2}$ sind.

8.2 Spin im homogenen Magnetfeld

Hierbei betrachten wir ein Teilchen (Atom, Elektron) mit dem Spin $\frac{1}{2}$ im homogenen Magnetfeld. Wenn das konstante Magnetfeld mit \vec{B} gegeben ist, so ist die Wechselwirkungsenergie zwischen \vec{B} und \vec{S} : $W = -\vec{\mu} \vec{B}$. Legt man das Koordinatensystem so, daß gilt $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ (Einheitsvektor in z -Richtung), vereinfacht sich dies zu

$$W = -\mu_z B_z = \underbrace{-g B_z}_{=W_0} S_z$$

woraus man den Hamiltonoperator abliest:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= W_0 \mathcal{S}_z \\ \mathcal{H} |+\rangle &= \frac{\hbar W_0}{2} |+\rangle & \mathcal{H} |-\rangle &= -\frac{\hbar W_0}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

Für einen beliebigen (Ausgangs-)Zustand $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) hat man nach

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \mathcal{H} |\psi(t)\rangle \\ \Rightarrow |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

die Zeitentwicklung:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-\frac{iW_0 t}{2}} |+\rangle + \beta e^{\frac{iW_0 t}{2}} |-\rangle$$

Wenn \vec{u} ein Einheitsvektor ist, d.h. $|\vec{u}| = 1$, dann gilt mit den Konventionen aus Abb. 8.1:

$$\begin{aligned} \vec{S}\vec{u} &= S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta \\ (\vec{S}\vec{u})|\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad (\vec{S}\vec{u})|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

$|\uparrow\rangle$ bzw. $|\downarrow\rangle$ bezeichnen dabei die Spinstellung parallel bzw. antiparallel zu \vec{u} (analog $|-\rangle$): (anti-)parallel zu \vec{e}_z).

In Matrixschreibweise:

$$(\vec{S}\vec{u}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Diese Matrix hat die Eigenwerte $\lambda_{\pm} = \pm 1$ und die Eigenvektoren

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

Hiermit kann man $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ durch die Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ ausdrücken:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \\ |\downarrow\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \end{aligned}$$

Setzt man dann z.B. $|\psi\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ sieht man:

$$\alpha e^{-\frac{iW_0 t}{2}} = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \quad \beta e^{\frac{iW_0 t}{2}} = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}}$$

Und in der zeitlichen Entwicklung:

$$\theta(t) = \theta_0 \quad \varphi(t) = \varphi_0 + w_0 t \quad \text{mit } w_0 = \frac{W_0}{2}$$

Man sieht, daß θ zeitlich konstant ist, während sich φ periodisch ändert, d.h. der Spin präzediert ($\hat{=}$ Spinvektor kreist um die z -Achse; siehe Abb. 8.2). Diese Präzession nennt man *Larmor-Präzession* und w_0 die *Larmor-Frequenz*.

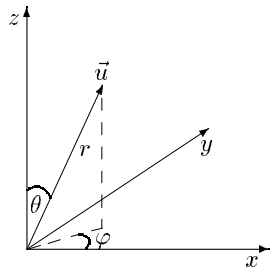


Abbildung 8.1: Kugelkoordinaten

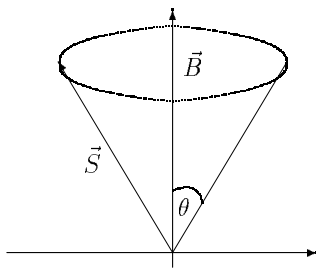


Abbildung 8.2: Larmor-Präzession

Kapitel 9

Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

9.1 Einführung des Drehimpulses

In der klassischen Physik ist der Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ unter bestimmten Bedingungen eine Erhaltungsgröße:

1. für isolierte Systeme
2. für eine Bewegung im Zentralpotential

Diese beiden Fälle treten jedoch bei einer Vielzahl von Anwendungen auf. In der Quantenmechanik stellt man den Drehimpuls durch den hermiteschen Operator \mathcal{L} dar, dessen Komponenten $\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y, \mathcal{L}_z$ Observable sind. Die Drehimpulserhaltung in den oben genannten klassischen Fällen schreibt sich mit quantenmechanischen Größen:

$$[\mathcal{L}, \mathcal{H}] = 0 \wedge \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{L} = 0 \quad \stackrel{(6.6)}{\Rightarrow} \quad \frac{d}{dt} \langle \mathcal{L} \rangle = 0$$

$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{L} = 0$ bedeutet, daß \mathcal{L} nicht explizit zeitabhängig ist. Der Drehimpuls ist eine quantisierte Größe, was sich bei den magnetischen Eigenschaften von Atomen bemerkbar macht (z.B. Zeeman-Effekt).

9.1.1 Bahndrehimpuls in der Quantenmechanik

Klassisch gilt für die Komponenten des Drehimpulses:

$$\left. \begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \right\} L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k; \quad \vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

Hier tritt kein Ordnungsproblem auf, das Symmetrisierung verlangen würde, denn Produkte aus Ortskomponenten und nicht zugehörigen Impulskomponenten kommutieren. Das bedeutet, man erhält den Operator \mathcal{L} direkt aus \vec{L} durch Ersetzen von \vec{x} und \vec{p} mit den entsprechenden Operatoren.

9.1.2 Vertauschungsrelationen

Die Vertauschungsrelationen für die einzelnen Drehimpulskomponenten berechnen sich nach:

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{p}_y\hat{x} = i\hbar\mathcal{L}_z \end{aligned}$$

Allgemein:

$$[\mathcal{L}_i, \mathcal{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \mathcal{L}_k \quad (9.1)$$

Eine weitere (Drehimpuls-)Observable, die mit den Komponenten von \mathcal{L} jedoch kommutiert, ist \mathcal{L}^2 :

$$[\mathcal{L}_i, \mathcal{L}^2] = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad \text{mit } \mathcal{L}^2 = \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2$$

Beweis:

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2, \mathcal{L}_x] &= [\mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2, \mathcal{L}_x] = [\mathcal{L}_y^2, \mathcal{L}_x] + [\mathcal{L}_z^2, \mathcal{L}_x] \\ &= \mathcal{L}_y [\mathcal{L}_y, \mathcal{L}_x] + [\mathcal{L}_y, \mathcal{L}_x] \mathcal{L}_y + \mathcal{L}_z [\mathcal{L}_z, \mathcal{L}_x] + [\mathcal{L}_z, \mathcal{L}_x] \mathcal{L}_z \\ &= \mathcal{L}_y (-i\hbar\mathcal{L}_z) + (-i\hbar\mathcal{L}_z) \mathcal{L}_y + \mathcal{L}_z (i\hbar\mathcal{L}_y) + (i\hbar\mathcal{L}_y) \mathcal{L}_z \\ &= 0 \end{aligned}$$

(Die restlichen Vertauschungsrelationen beweist man analog.) Die Kompatibilität von \mathcal{L}_i und \mathcal{L}^2 bedeutet (nach den Sätzen von Abschnitt 5.4.2), daß gemeinsame Eigenfunktionen der beiden Größen existieren. Die Konvention ist, \mathcal{L}_z zu benutzen, d.h.:

\mathcal{L}_z und \mathcal{L}^2 haben gemeinsame Eigenfunktionen

9.1.3 Eigenfunktionen von \mathcal{L}_z und \mathcal{L}

Die Eigenfunktionen von \mathcal{L}^2 und \mathcal{L}_z in der Ortsdarstellung sind die sogenannten *Kugelflächenfunktionen* (engl. *spherical harmonics*) Y_l^m . Betrachtet man \mathcal{L}_z , so ergibt sich mit $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$:

$$\mathcal{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Die Beziehungen vereinfachen sich, wenn man zu 3-dimensionalen Polarkoordinaten (Kugelkoord.) (r, ϕ, θ) übergeht:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \mathcal{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \mathcal{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \mathcal{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned}$$

woran man sieht, daß sich die gemeinsamen Eigenfunktionen in Abhängigkeit von θ und ϕ darstellen lassen (unabhängig von r !).

Das führt uns auf die Eigenwertgleichungen:

$$\mathcal{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{a})$$

$$\mathcal{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{b})$$

Dabei wird $l(l+1)$ statt irgendeiner Größe c gewählt, da sich dies später als zweckmäßig erweist. Aus der Beziehung (a) folgt:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = F_l^m(\theta) e^{im\phi}$$

und aus der Forderung $Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi + 2\pi)$ (zyklische Randbedingung) folgert man, daß m nur ganzzahlige Werte annehmen kann ($m \in \mathbb{Z}$). Außerdem kann man noch zeigen, daß

1. $l \in \mathbb{N}_0$
2. $-l \leq m \leq l$

(siehe nächster Abschnitt)

Für Y_l^m gilt weiterhin:

$$1. \int d\Omega \left(Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \right)^* Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{Orthogonalität})$$

$$2. \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^m(\theta', \phi') = \delta(\Omega - \Omega') \quad (\text{Vollständigkeit})$$

$$= \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')$$

Einige Kugelflächenfunktionen Y_l^m stehen in Tabelle 9.1.

l	m	Y_l^m
0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$\mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	± 2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$

Tabelle 9.1: Kugelflächenfunktionen Y_l^m

9.1.4 Algebraische Behandlung des Drehimpulses

Hierzu definiert man zunächst zwei Linearkombinationen von Drehimpulskomponenten:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{J}_+ &= \mathcal{J}_x + i\mathcal{J}_y \\ \mathcal{J}_- &= \mathcal{J}_x - i\mathcal{J}_y = (\mathcal{J}_+)^\dagger \end{aligned} \right\} \mathcal{J}_\pm \text{ nicht hermitesch, aber zueinander adjungiert}$$

$\mathcal{J}_{x,y,z}$ sollen zunächst nur die Vertauschungsrelationen (9.1) erfüllen. Die Vertauschungsrelationen von \mathcal{J}_\pm mit \mathcal{J}_z und \mathcal{J}^2 sind:

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_+] &= i\hbar(\mathcal{J}_y - i\mathcal{J}_x) = \hbar\mathcal{J}_+ \\ [\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_-] &= -\hbar\mathcal{J}_- \\ [\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_-] &= 2\hbar\mathcal{J}_z \\ [\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_\pm] &= 0 \end{aligned}$$

Mit diesen Gleichungen hat man eine Definition des Drehimpulses nur über Kommutatorrelationen. Von diesem Ausgangspunkt aus erhält man noch folgende Ergebnisse:

a) Für beliebige $|\psi\rangle$ gilt:

$$\langle \psi | \mathcal{J}^2 | \psi \rangle = \|\mathcal{J}_x | \psi \rangle\|^2 + \|\mathcal{J}_y | \psi \rangle\|^2 + \|\mathcal{J}_z | \psi \rangle\|^2 \geq 0$$

woraus man ablesen kann, daß die Eigenwerte von $\mathcal{J}^2 \geq 0$ sind.

b) Für $\lambda \geq 0$ gilt: $\lambda = l(l+1)$ bestimmt eindeutig $l \in \mathbb{N}_0$

c) Die Eigenwertgleichungen sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \mathcal{J}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned}$$

Diese Gleichungen wollen wir als Definitionsgleichungen für die Zustände $|l, m\rangle$ nehmen.

d) Behauptung: Für die Eigenwerte m von \mathcal{J}_z gilt:

$$\boxed{-l \leq m \leq l} \quad (9.2)$$

Beweis: Wegen $\mathcal{J}_\pm = (\mathcal{J}_\mp)^\dagger$ gilt:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{J}_+ | \psi \rangle\|^2 &= \langle \psi | \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ | \psi \rangle \geq 0 \\ \|\mathcal{J}_- | \psi \rangle\|^2 &= \langle \psi | \mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- | \psi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Man errechnet:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- &= (\mathcal{J}_x + i\mathcal{J}_y)(\mathcal{J}_x - i\mathcal{J}_y) = \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 + i[\mathcal{J}_y, \mathcal{J}_x] \\ &= \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 + \hbar\mathcal{J}_z = \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_z^2 + \hbar\mathcal{J}_z \\ \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ &= \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 - \hbar\mathcal{J}_z = \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_z^2 - \hbar\mathcal{J}_z \end{aligned}$$

und damit:

$$\begin{aligned}
\langle l, m | \mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ | l, m \rangle &= \langle l, m | \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_z^2 - \hbar \mathcal{J}_z | l, m \rangle \\
&= \hbar^2 l(l+1) - m^2 \hbar^2 - m \hbar^2 = \hbar^2 [l(l+1) - m(m+1)] \\
&= \hbar^2 [(l-m)(l+m+1)] \stackrel{!}{\geq} 0 \\
\langle l, m | \mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- | l, m \rangle &= \hbar^2 [(l+m)(l-m+1)] \stackrel{!}{\geq} 0
\end{aligned}$$

Aus diesen zwei Gleichungen erhält man die Bedingungen:

$$\begin{aligned}
(l-m)(l+m+1) \geq 0 &\Leftrightarrow -(l+1) \leq m \leq l \\
(l+m)(l-m+1) \geq 0 &\Leftrightarrow -l \leq m \leq (l+1)
\end{aligned}$$

Da beide Bedingungen gleichzeitig erfüllt sein müssen, erhält man die Bedingung (9.2).

- e) $\mathcal{J}_- |l, m\rangle$ ist ein Eigenvektor zu \mathcal{J}^2 mit dem Eigenwert $l(l+1)\hbar^2$ und Eigenvektor zu \mathcal{J}_z mit Eigenwert $(m-1)\hbar$ (Absteigeoperator!):

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^2(\mathcal{J}_- |l, m\rangle) &= \mathcal{J}_-(\mathcal{J}^2 |l, m\rangle) \\
&= l(l+1)\hbar^2 \mathcal{J}_- |l, m\rangle \\
\mathcal{J}_z(\mathcal{J}_- |l, m\rangle) &= \mathcal{J}_-(\mathcal{J}_z |l, m\rangle) + [\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_-] |l, m\rangle \\
&= m\hbar(\mathcal{J}_- |l, m\rangle) - \hbar(\mathcal{J}_- |l, m\rangle) \\
&= (m-1)\hbar(\mathcal{J}_- |l, m\rangle) \\
\Rightarrow \mathcal{J}_- |l, m\rangle &\sim |l, m-1\rangle
\end{aligned}$$

mit dieser Proportionalität und

$$\|\mathcal{J}_- |l, m\rangle\|^2 = \hbar^2 (l(l+1) - m(m-1)) \| |l, m-1\rangle \|^2$$

erhält man als Definition für eine Standard-Basis:

$$\mathcal{J}_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle$$

Analog sieht man, daß \mathcal{J}_+ Aufsteigeoperator ist:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^2(\mathcal{J}_+ |l, m\rangle) &= l(l+1)\hbar^2(\mathcal{J}_+ |l, m\rangle) \\
\mathcal{J}_z(\mathcal{J}_+ |l, m\rangle) &= (m+1)\hbar(\mathcal{J}_+ |l, m\rangle) \\
\Rightarrow \mathcal{J}_+ |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle
\end{aligned}$$

Die Grenzen machen jedoch eine Ausnahme:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_- |l, m = -l\rangle &= 0 \\
\mathcal{J}_+ |l, m = l\rangle &= 0
\end{aligned}$$

Dies sieht man direkt an:

$$\|\mathcal{J}_- |l, m\rangle\|^2 = \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] = 0 \quad \text{für } m = -l$$

f) Es gilt:

$$\begin{aligned} (\mathcal{J}_-)^{p+1} |l, m\rangle = 0 &\Leftrightarrow m - p = -l && \text{für genau ein } p \in \mathbb{Z} \\ (\mathcal{J}_+)^{q+1} |l, m\rangle = 0 &\Leftrightarrow m + q = l && \text{für genau ein } q \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

Daraus sieht man sofort, daß $2l = p + q$, d.h. $2l$ ist eine ganze Zahl ≥ 0 , woraus man $l = \frac{n}{2}$ ($n \in \mathbb{N}_0$) erhält. Außerdem ist m immer nur ganz- oder halbzahlig:

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

9.2 Drehimpuls und Drehsymmetrie

9.2.1 Transformationen und Invarianzbedingungen

Damit eine physikalische Meßgröße unter einer Transformation invariant ist, müssen die transformierten Observablen A' und Zustände $|\psi'\rangle$ folgende Bedingungen erfüllen:

Die Erwartungswerte $\langle \phi' | \mathcal{A}' | \psi' \rangle$, Wahrscheinlichkeitsdichten $|\langle \phi' | \psi' \rangle|^2$ und die Spektren der transformierten Größen müssen mit denen der ursprünglichen (\mathcal{A} , ϕ , ψ) identisch sein.

Diese Bedingungen erfüllen unitäre Transformationen U der Form:

$$|\psi'\rangle := U |\psi\rangle \quad \mathcal{A}' := U \mathcal{A} U^\dagger$$

Man sieht ($U^\dagger = U^{-1}$):

- i) $\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$
- ii) $\langle \phi' | \mathcal{A}' | \psi' \rangle = \langle \phi | U^\dagger U \mathcal{A}' U | \psi \rangle = \langle \phi | \mathcal{A} | \psi \rangle$
- iii) $\mathcal{A} | \psi \rangle = a | \psi \rangle$
 $\Rightarrow \mathcal{A}' | \psi' \rangle = U \mathcal{A}' U^\dagger U | \psi \rangle = U \mathcal{A} | \psi \rangle = a U | \psi \rangle = a | \psi' \rangle$

Die Observablen A' und Zustände $|\psi'\rangle$ entsprechen damit in ihren Eigenschaften den physikalischen Größen, die auch durch A und $|\psi\rangle$ beschrieben werden.

Für Operatoren folgert man deshalb die Invarianzbedingung:

$$U \mathcal{A}' U^\dagger = \mathcal{A} \Leftrightarrow U \mathcal{A} = \mathcal{A} U \Leftrightarrow [\mathcal{A}, U] = 0$$

9.2.2 Ortstranslationen

Betrachtet man eine Wellenfunktion ψ in einer Dimension und zur Zeit $t = 0$, so erhält man für eine Translation $\tilde{\psi}(x) = \psi(x + a)$ durch Taylor-Entwicklung:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi} &= \psi(x) + a\psi'(x) + \frac{a^2}{2}\psi''(x) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(a \frac{d}{dx} \right)^n \psi(x) = e^{a \frac{d}{dx}} \psi(x) \end{aligned}$$

und mit $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$:

$$\tilde{\psi} = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} \psi(x)$$

Allgemein kann man hierfür schreiben:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \mathcal{U}_T |\psi\rangle$$

mit dem unitären „Translationsoperator“ $\mathcal{U}_T = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$. Für diesen Operator gilt:

$$\mathcal{U}_T(a) \hat{x} \mathcal{U}_T^\dagger(a) = \hat{x} + a \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = \hat{x} + a$$

d.h. der Ortsoperator wird um a verschoben.

In der Verallgemeinerung auf 3 Dimensionen erhält man:

$$\mathcal{U}_T(\vec{a}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{p}}$$

was einer Translation um den Vektor \vec{a} entspricht.

Mathematisch gesehen bilden die Translationen eine Gruppe, die vom Impulsoperator erzeugt wird. (Genaueres zu Gruppen und erzeugenden Elementen hört man in Linearer Algebra).

Für ein freies Teilchen gilt $[\mathcal{H}, \hat{p}] = 0$, und damit:

$$\mathcal{U}_T \mathcal{H} \mathcal{U}_T^\dagger = \mathcal{H}$$

d.h. der Hamiltonoperator ist invariant gegenüber Orts-Translationen:

$$[\mathcal{H}, \mathcal{U}_T] = 0$$

Nur der Vollständigkeit halber (wird weiterhin nicht benötigt):

Eine infinitesimale Translation kann man über die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion schreiben als:

$$\mathcal{U}_T(\delta \vec{a}) \approx 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \hat{p}$$

9.2.3 Zeittranslationen für zeitunabhängige Hamiltonfunktionen

Geht man von t zu $\tilde{t} = t + \tau$ über, so gilt für den Zustand $|\psi(t)\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi(t + \tau)\rangle &= |\psi(t)\rangle + \tau \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle + \dots \\ &= e^{\tau \frac{d}{dt}} |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Mit der Schrödingergleichung $\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} |\psi(t)\rangle$ kann man weiter auflösen:

$$|\psi(t + \tau)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \tau \mathcal{H}} |\psi(t)\rangle$$

(Zeitentwicklung eines beliebigen Zustandes!) Dies liefert den Operator

$$\mathcal{U}_Z(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} \tau \mathcal{H}}$$

für eine Zeittranslation um τ . Dieser Operator ist unitär, da \mathcal{H} hermitesch ist. Aus der Energieerhaltung folgt über

$$\mathcal{U}_Z \mathcal{H} \mathcal{U}_Z^\dagger = \mathcal{H}$$

die Invarianz des Hamiltonoperators gegenüber Zeittranslationen.

9.2.4 Drehungen

Eine infinitesimale Drehung wird beschrieben durch:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \underbrace{\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}}_{\delta\vec{r}}$$

Die Änderung der Wellenfunktion unter dieser Operation ist:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\vec{r}) &= \psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r} + \delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + \dots \\ &= \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) \cdot \frac{\hat{i}}{\hbar} \vec{p} \psi(\vec{r}) + \dots \\ &= \psi(\vec{r}) + \frac{\hat{i}}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \psi(\vec{r}) + \dots \\ &= \psi(\vec{r}) + \frac{\hat{i}}{\hbar} (\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{L}) \psi(\vec{r}) + \dots\end{aligned}$$

Der Operator einer endlichen Drehung ist

$$\mathcal{U}_D = e^{\frac{\hat{i}}{\hbar} \delta\vec{\varphi} \cdot \vec{L}} = e^{\frac{\hat{i}}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{L}}$$

wobei \vec{L} dem Drehimpulsoperator in $\vec{\varphi}$ -Richtung entspricht: $\vec{L} := \varphi_x \mathcal{L}_x + \varphi_y \mathcal{L}_y + \varphi_z \mathcal{L}_z$. Dieser Operator ist ebenfalls unitär und wegen $[\mathcal{H}, \mathcal{L}] = 0$ erhält man durch

$$\mathcal{U}_D \mathcal{H} \mathcal{U}_D^\dagger = \mathcal{H}$$

die Invarianz gegenüber Drehungen.

Im allgemeinen ergeben sich durch Invarianzen Entartung. Z.B. erhält man wegen $[\mathcal{H}, \mathcal{L}_z] = 0$:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_z |l, m; n\rangle &= m\hbar |l, m; n\rangle \\ \mathcal{H} |l, m; n\rangle &= E_n |l, m; n\rangle\end{aligned}$$

woran man sieht, daß jeder Energieeigenwert $(2l+1)$ -fach entartet ist, da sich für verschiedene m bei gleichem l gleiche Energieeigenwerte ergeben.

9.3 Addition von Drehimpulsen

Klassisch ist der Drehimpuls additiv, d.h. wenn man zwei Teilchen mit den Drehimpulsen \vec{J}_1 und \vec{J}_2 hat, dann ist ihr Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$.

In der Quantenmechanik hat man für zwei Teilchen ihre Wellenfunktionen. Sind die Teilchen unabhängig voneinander, so ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, Teilchen 1 bei \vec{x}_1 und Teilchen 2 bei \vec{x}_2 zu finden:

$$|\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 = |\psi_1(\vec{x}_1)|^2 |\psi_2(\vec{x}_2)|^2$$

Ähnlich gilt für die Drehimpulse zweier Zustände $|j_1, m_1\rangle ; |j_2, m_2\rangle$:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

Mathematisch ist das ein Tensorprodukt: Ausgangspunkt sind die beiden Ket-Räume \mathcal{E}_1 und \mathcal{E}_2 und das Ergebnis liegt im Produktraum $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Wenn z.B.

$$\begin{array}{ll} \{|1, i\rangle\} & (i = 1, 2, 3, \dots) & \text{Basis von } \mathcal{E}_1 \\ \{|2, j\rangle\} & (j = 1, 2, 3, \dots) & \text{Basis von } \mathcal{E}_2 \end{array}$$

dann ist

$$\{|1, i\rangle |2, j\rangle\} \quad (i = 1, 2, 3, \dots); (j = 1, 2, 3, \dots)$$

eine Basis des Produktraumes $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Ein Vektor aus $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ ist damit darstellbar als:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |1, i\rangle |2, j\rangle \quad c_{ij} \in \mathbb{C}$$

Betrachtet man zwei Vektoren

$$\begin{array}{ll} |1, \psi\rangle \in \mathcal{E}_1 : & |1, \psi\rangle = \sum_i a_i |1, i\rangle \\ |2, \chi\rangle \in \mathcal{E}_2 : & |2, \chi\rangle = \sum_j b_j |2, j\rangle \end{array}$$

So ist der Produktvektor:

$$|\phi\rangle = |1, \psi\rangle |2, \chi\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |1, i\rangle |2, j\rangle$$

d.h. aus $|1, \psi\rangle \in \mathcal{E}_1$ und $|2, \chi\rangle \in \mathcal{E}_2$ folgt $|1, \psi\rangle |2, \chi\rangle \in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Für Operatoren, die auf solche Produktzustände wirken, gilt:

$$\begin{array}{ll} \mathcal{J}_i^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle & i = 1, 2 \\ \mathcal{J}_{i,z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = m_i \hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle & i = 1, 2 \end{array}$$

woraus sich für j_1, j_2 fest insgesamt $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Zustände ergeben. Für den Gesamtdrehimpuls gilt jetzt:

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2$$

mit den oben definierten $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$. Dieser Operator \mathcal{J} erfüllt die Drehimpulsvertauschungsrelationen, und \mathcal{J}^2 und \mathcal{J}_z sind kompatible Observable. Außerdem folgt über

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^2 &= \mathcal{J}_1^2 + \mathcal{J}_2^2 + 2\mathcal{J}_1\mathcal{J}_2 \quad (\text{da } [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] = 0) \\ &\Rightarrow [\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_1^2] = [\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_2^2] = 0 \end{aligned}$$

daß sogar $\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_z, \mathcal{J}_1^2, \mathcal{J}_2^2$ kompatible Observable sind.

Damit erhält man folgende Ergebnisse für die Addition von Drehimpulsen:

(a) die Eigenfunktionen von addierten Zuständen definiert man durch

$$\begin{array}{ll} \mathcal{J}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle = J(J + 1)\hbar^2 |j_1, j_2, J, M\rangle \\ \mathcal{J}_z |j_1, j_2, J, M\rangle = M\hbar |j_1, j_2, J, M\rangle \\ \mathcal{J}_i^2 |j_1, j_2, J, M\rangle = j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_1, j_2, J, M\rangle & \text{für } i = 1, 2 \end{array}$$

(b) jeder Vektor $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ ist ein Eigenvektor zu \mathcal{J}_z :

$$\mathcal{J}_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Außerdem gilt für den Drehimpuls:

$$-J \leq M \leq J$$

Das maximale J ist $J_{max} = j_1 + j_2$, da $M_{max} = m_{1,max} + m_{2,max}$ und $j_{i,max} = m_{i,max}$. Den minimalen Wert $J_{min} = |j_1 - j_2|$ erhält man aus geometrischen Überlegungen (strenger Beweis auch möglich).

$$\boxed{|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2}$$

Man will jetzt einen Basiswechsel von $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ nach $|J, M\rangle$ vornehmen. Im allgemeinen Fall erhält man hierfür das Ergebnis:

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = M}} \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizient}} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten, die man normal auf die im folgenden skizzierte Weise erhält, sind tabelliert.

Allgemeines Verfahren zur Konstruktion der $|j_1, j_2, J, M\rangle$ -Zustände

Zur besseren Übersicht setzen wir im Folgenden $|J, M\rangle := |j_1, j_2, J, M\rangle$ (die Werte von j_1 und j_2 seien jeweils fest und bekannt).

Ein Zustand ist schon eindeutig festgelegt:

Für $|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle$ kommt aufgrund des Eigenwerts der z -Komponente des Gesamtdrehimpulses nur $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2, j_1, j_2\rangle$ in Frage. Durch Anwendung des Absteigeoperators \mathcal{J}_- des Gesamtdrehimpulses erhält man hieraus die Zustände $|j_1 + j_2, k\rangle$ mit $-(j_1 + j_2) \leq k \leq j_1 + j_2 - 1$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \hbar \sqrt{(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) - (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{j_1 + j_2} \sqrt{2} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &\stackrel{!}{=} (\mathcal{J}_{1,-} + \mathcal{J}_{2,-}) |j_1, j_2, j_1, j_2\rangle \\ &= \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 1)} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle \\ &\quad + \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - j_2(j_2 - 1)} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle \\ &= \hbar \left(\sqrt{2j_1} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle \right) \\ \Rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2}} \left(\sqrt{j_1} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{j_2} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle \right) \end{aligned}$$

Durch wiederholte Anwendung von \mathcal{J}_- erhält man so alle Zustände $|j_1 + j_2, k\rangle$. Sind nun alle Zustände $|j_1 + j_2 - l, m\rangle$ ($l = 0, 1, \dots, i - 1$) bekannt, kann man die Zustände $|j_1 + j_2 - i, k\rangle$ konstruieren:

Für $|j_1 + j_2 - i, j_1 + j_2 - i\rangle$ existiert aufgrund der Eigenwerte zu \mathcal{J}_z die Darstellung

$$|j_1 + j_2 - i, j_1 + j_2 - i\rangle = \sum_{\substack{m_1 + m_2 = \\ j_1 + j_2 - i}} \alpha_\nu |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Für die n unbekanntenen Koeffizienten α_ν existieren n Orthonormalitätsbedingungen:

$$\langle j_1 + j_1 - k, j_1 + j_2 - i | j_1 + j_2 - i, j_1 + j_2 - i \rangle = \delta_{ik}$$

Aus diesem Gleichungssystem für die Koeffizienten α_ν kann man diese bestimmen, wobei man die Phase willkürlich so wählt, daß die Koeffizienten reell sind. Durch Anwendung von \mathcal{J}_- auf den Zustand $|j_1 + j_2 - i, j_1 + j_2 - i\rangle$ kann man wiederum alle restlichen Zustände mit $J = j_1 + j_2 - i$ konstruieren.

Mit diesem Verfahren, das wir noch an zwei Beispielen betrachten wollen, sind alle Clebsch-Gordon-Koeffizienten zu gegebenem j_1 und j_2 bestimmbar.

Beispiel 1

Betrachten wir zwei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen: $j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}$. Der Produktraum hat dann vier Zustände:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &=: |++\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &=: |-\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &=: |+\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &=: |--\rangle \end{aligned}$$

Außerdem erhält man $0 \leq J \leq 1$, d.h. $J = 0$ oder $J = 1$. Die Eigenwerte zu \mathcal{J}_z der vier Zustände sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_z |++\rangle &= \hbar |++\rangle & \mathcal{J}_z |--\rangle &= -\hbar |--\rangle \\ \mathcal{J}_z |+\rangle &= \mathcal{J}_z |-\rangle & &= 0 \end{aligned}$$

Die „Schwierigkeit“ ist jetzt, die vier Basiszustände $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$ mit Hilfe der Zustände $|++\rangle, \dots$ darzustellen, d.h. den Basiswechsel vorzunehmen. Wegen $\mathcal{J}_z = \mathcal{J}_{1,z} + \mathcal{J}_{2,z}$ und

$$\mathcal{J}_z |++\rangle = (\mathcal{J}_{1,z} + \mathcal{J}_{2,z}) |++\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2} \right) |++\rangle = \hbar |++\rangle$$

folgt

$$|1, 1\rangle = |++\rangle$$

Die weiteren Vektoren erhält man durch Anwendung des \mathcal{J}_- -Operators:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_- |1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle \\ \text{und } \mathcal{J}_- |++\rangle &= (\mathcal{J}_{1,-} + \mathcal{J}_{2,-}) |++\rangle = \hbar(|-\rangle + |+\rangle) \\ \Rightarrow \boxed{|1, 0\rangle} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle + |+\rangle) \end{aligned}$$

$$\mathcal{J}_- |1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle$$

und $\mathcal{J}_- |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{J}_{1,-} + \mathcal{J}_{2,-})(|-+\rangle + |+-\rangle) = \dots = \frac{2}{\sqrt{2}}\hbar |--\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{|1, -1\rangle = |--\rangle}$$

Den letzten Vektor, $|0, 0\rangle$ erhält man aus der Bedingung, daß $|1, 0\rangle \perp |0, 0\rangle$:

$$|0, 0\rangle = \alpha|-+\rangle - \beta|+-\rangle \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)}$$

Damit hat man als Ergebnisse das *Triplet* (zum Gesamtspin 1)

$$|1, 1\rangle = |++\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle + |+-\rangle)$$

$$|1, -1\rangle = |--\rangle$$

und das *Singulett* (zum Gesamtspin 0)

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Beispiel 2

Zwei Zustände mit unterschiedlichen Spin: $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$. Daraus ergibt sich $J = \frac{1}{2}$ oder $J = \frac{3}{2}$. Die Anzahl der Zustände beträgt $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 6$. Für die Zustände zu $J = \frac{3}{2}$ erhält man:

$$J = \frac{3}{2} \quad \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Für $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ existiert die Darstellung:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \alpha |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \beta |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

womit man errechnet:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\alpha}{\sqrt{3}} + \frac{\beta\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = 0 \quad (\Rightarrow \alpha + \sqrt{2}\beta = 0)$$

Mit der Forderung $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ erhält man:

$$\alpha^2 = 1 - \beta^2 = 1 - \frac{\alpha^2}{2} \quad \Rightarrow \quad \alpha = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \beta = -\sqrt{\frac{1}{3}}$$

Damit kann man endlich berechnen:

$$J = \frac{1}{2} \quad \begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Kapitel 10

Zeitunabhängiges Zentralpotential

10.1 Allgemeine Betrachtungen

Ein zeitunabhängiges Zentralpotential U ist gegeben durch

$$U(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$$

Klassisch gilt in einem Potential dieser Form die Drehimpulserhaltung, d.h. $\frac{d}{dt}\vec{L} = 0$. Für die Quantenmechanik können wir eine analoge Aussage noch nicht treffen. Zunächst ist der Hamiltonoperator für ein Teilchen in diesem Potential:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_t} \Delta + V(r)$$

Mit dem Laplace-Operator in Kugelkoordinaten ($r \neq 0$; $\theta \neq 0, \pi, 2\pi$; K-systemabhängige Pole)

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \mathcal{L}^2 \quad \mathcal{L} - \text{Drehimpulsoperator} \end{aligned}$$

wird dann aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (4.1):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_t r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2m_t r^2} \mathcal{L}^2 + V(r) \right) \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = E_{nlm} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$

Die Lösung des Problems erhält man in mehreren Schritten:

- i) wegen $[\mathcal{H}, \mathcal{L}_z] = 0$ und $[\mathcal{H}, \mathcal{L}^2] = 0$ existieren gemeinsame Eigenfunktionen von \mathcal{H} , \mathcal{L}^2 und \mathcal{L}_z :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \psi_{nlm}(\vec{r}) &= E_{nlm} \psi_{nlm}(\vec{r}) \\ \mathcal{L}^2 \psi_{nlm}(\vec{r}) &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{nlm}(\vec{r}) \\ \mathcal{L}_z \psi_{nlm}(\vec{r}) &= \hbar m \psi_{nlm}(\vec{r}) \end{aligned}$$

ii) man macht einen Produktansatz für $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$:

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m_t r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_t r^2} + V(r) \right) R_{nl}(r) &= E_{nl} R_{nl}(r) \end{aligned}$$

was sich mit der Substitution $R_{nl}(r) = \frac{1}{r} u_{nl}(r)$ zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_t} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_t r^2} + V(r) \right) u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r) \quad (10.1)$$

vereinfacht.

iii) die ψ_{nlm} sind quadratintegabel und orthonormiert:

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi_{nlm}^*(\vec{x}) \psi_{n'l'm'}(\vec{x}) &= \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ \Rightarrow \int_{r=0}^{\infty} dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{n'l'}(r) &= \delta_{nn'} \delta_{ll'} \\ \Rightarrow \int_{r=0}^{\infty} dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{n'l}(r) &= \delta_{nn'} \\ \Rightarrow \int_{r=0}^{\infty} dr u_{nl}^*(r) u_{n'l}(r) &= \delta_{nn'} \end{aligned}$$

iv) Verhalten von $R_{nl}(r)$ für $r \rightarrow 0$:

man setzt für $R_{nl}(r)$ eine Potenzreihe an, die die Bedingung in (iii) erfüllt:

$$R_{nl}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^s \quad s \in \mathbb{R}$$

Diesen Ansatz ($R_{nl} \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^s$) setzt man in die Differentialgleichung ein:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_t r} s(s+1) r^{s-1} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_t r^2} r^s + V(r) r^s &= E_{nl} r^s \\ \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_t} s(s+1) + \frac{\hbar^2}{2m_t} l(l+1) + r^2 V(r) &= E_{nl} r^2 \end{aligned}$$

Falls $r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$ dann erhält man hieraus die Bedingung:

$$\begin{aligned} s(s+1) &= l(l+1) \quad \text{für } r \rightarrow 0 \\ \Leftrightarrow \boxed{s=l} \vee \boxed{s=-(l+1)} \end{aligned}$$

Zulässig sind allerdings nur Lösungen, für die $R_{nl}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^l$ gilt¹. Hieraus folgert man:

$$\begin{aligned} \Rightarrow u_{nl}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^{l+1} \\ \Rightarrow u_{nl}(r=0) = 0 \end{aligned}$$

¹ eine Hermitizitätsforderung an den Hamiltonoperator ergibt die Randbedingung $u(0) = 0$, d.h. $R \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^\gamma$ mit $\gamma > -1$

10.2 Das Wasserstoffatom

Wir wollen nun die gewonnenen Erkenntnisse auf den konkreten Fall des Wasserstoffatoms anwenden. Da die Masse des Protons wesentlich größer als die des Elektrons ist, liegt der Schwerpunkt des Gesamtsystems fast im Mittelpunkt des Protons. Somit kann man anstelle des Protons ein Coulomb-Feld mit Ursprung im Kern annehmen:

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

Aus Gleichung (10.1) wird damit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right) u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r)$$

mit $u_{nl}(r=0) = 0$ und $\int_0^\infty dr u_{nl}^* u_{nl} = 1$

Das Spektrum von \mathcal{H} zerfällt damit in zwei Teile:

$E \geq 0$: das Teilchen bewegt sich auf einer Hyperbel- ($E > 0$) bzw. Parabelbahn ($E = 0$). Das Spektrum ist hier kontinuierlich (klass. Fall)

$E < 0$: das Teilchen bewegt sich auf einer Ellipsenbahn. Hier gibt es nur bestimmte erlaubte Energieeigenwerte, d.h. das Spektrum ist diskret.

Zur Vereinfachung der Betrachtung setzt man $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ (Bohr'scher Bahnradius) und $\rho = \frac{r}{a_0}$:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - l(l+1) \frac{1}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \varepsilon_{nl} \right) u_{nl}(\rho) = 0$$

wobei $\varepsilon_{nl} = -\frac{E_{nl}}{E_0}$ und $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$.

Zur Lösung dieser Differentialgleichung geht man folgendermaßen vor:

1. Vorbetrachtung:

$$\text{Asymptotisches Verhalten für } \rho \rightarrow \infty: \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \varepsilon \right) u(\rho) = 0$$

$$\Rightarrow u_{nl}(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\simeq} e^{-\rho\sqrt{\varepsilon}}$$

2. Separationsansatz zur Isolierung dieses Verhaltens: $u_{nl}(\rho) = y_{nl}(\rho)e^{-\rho\sqrt{\varepsilon}}$

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\sqrt{\varepsilon} \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] y_{nl}(\rho) = 0 \quad y_{nl}(0) = 0$$

3. Potenzreihenansatz für y_{nl} : $y_{nl}(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$
(verallgemeinerter Potenzreihenansatz - Methode von Frobenius)
Durch Einsetzen und Koeffizientenvergleich sieht man:

$$s(s-1)c_0 - l(l+1)c_0 = 0$$

und mit $c_0 \neq 0$:

$$s = l + 1 \vee s = -l$$

Nur die Lösung mit $s = l + 1$ ist verträglich mit den Randbedingungen. Daraus ergibt sich:

$$\begin{aligned} [(l+k+1)(l+k) - l(l+1)]c_k &= 2[\sqrt{\varepsilon}(l+k) - 1]c_{k-1} \\ \Leftrightarrow \frac{c_k}{c_{k-1}} &= \frac{2[\sqrt{\varepsilon}(l+k) - 1]}{k(k+l+1)} \sim \frac{1}{k} \end{aligned}$$

d.h. für beliebige ε ist das Wachstum i.a. exponentiell

4. Abbruchbedingung für die Potenzreihe ($n = k$, bei dem der Abbruch erfolgt):

mit $\sqrt{\varepsilon_{nl}}(l+n) - 1 = 0$ bricht die Reihe ab, und man erhält:

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n+l} \right)^2 \quad n \in \mathbb{N}, l \in \mathbb{N}_0$$

Einige Radialteile R_{nl} sind in Tabelle 10.1 angegeben.

n	l	R_{nl}
1	0	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$
2	0	$\frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$
	1	$\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$

Tabelle 10.1: Radialteile R_{nl} der Wellenfunktion des H-Atoms

Diskussion der Resultate:

Mit der Sommerfeld'schen Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ und der Compton-Wellenlänge des Elektrons λ_e : $a_0 = \frac{1}{\alpha} \lambda_e$.

Energieniveaus und Entartungen:

- (i) $(2l + 1)$ -fache m -Entartung für gegebenes n und l
- (ii) eine weitere Entartung ergibt sich, da E_{nl} nur von $n + l$ abhängt:

$$E_{nl} = E_{n'l'} \Leftrightarrow n' + l' = n + l$$

d.h. die *Hauptquantenzahl* $N = n + l$ legt die Energie fest:

$$E_N = -\frac{1}{2N^2} \alpha^2 mc^2$$

Die Hauptquantenzahl N kann man auch mit den *Schalen* des Atoms identifizieren.

Für festes N gilt: $l = 0, 1, 2, \dots, N - 1$.

- (iii) aus (i) und (ii) ergibt sich insgesamt ein hoher Entartungsgrad:

$$g_N = \sum_{l=0}^{N-1} (2l + 1) = N^2$$

(iv) zusätzlich gibt es noch die sog. „zufällige“ Entartung: klassisch hat das Kepler-Problem ($V \sim \frac{1}{r}$) noch eine weitere Erhaltungsgröße, den Lenz-Runge-Vektor $\vec{\Lambda} = \frac{1}{m}\vec{p} \times \vec{L} - \frac{e^2}{r}\vec{r}$ mit $\frac{d}{dt}\vec{\Lambda} = 0$. In der Quantenmechanik entspricht diesem der geeignet symmetrisierte Operator

$$\Lambda = \frac{1}{2m}(\hat{p} \times \mathcal{L} - \mathcal{L} \times \hat{p}) - \frac{e^2}{r}\hat{r}$$

Hierfür gilt: $[\mathcal{H}, \Lambda] = 0$ und $[\Lambda, \mathcal{L}] = 0$

$$\Rightarrow \Lambda^2 = \frac{\hbar}{m}(\mathcal{L}^2 + \hbar^2) + e^4$$

(Diese Entartung ist nicht wirklich zufällig, sondern Anzeichen einer höheren Symmetrie: die 6 Vektorkomponenten generieren eine O(4)-Gruppe)

10.3 Isotroper harmonischer Oszillator

Der dreidimensionale isotrope HO schwingt in einem Potential der Form

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

10.3.1 Kartesische Koordinaten

In kartesischen Koordinaten löst man das Problem durch Separation, d.h. man führt es auf drei Probleme von der Art des bereits bekannten eindimensionalen HO zurück:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) \\ &= \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_z \end{aligned}$$

$\mathcal{H}_{x,y,z}$ sind dabei logischerweise von der Form:

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2 \quad i = 1, 2, 3$$

Für die Lösung macht man einen Produktansatz:

$$\psi(\vec{x}) = \phi(x)\chi(y)\rho(z)$$

Hierbei sind ϕ, χ, ρ die Lösungen des eindimensionalen Problems:

$$\mathcal{H}_x \phi_{n_x}(x) = E_{n_x} \phi_{n_x}(x)$$

⋮

$$\Rightarrow \mathcal{H} \psi_{\vec{n}}(\vec{x}) = E_{\vec{n}} \psi_{\vec{n}}(\vec{x}) \quad \vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$$

Die Lösung dieser drei Gleichungen, bzw. der einen Vektorgleichung ist:

$$E_{\vec{n}} = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega + \underbrace{\frac{3}{2}\hbar\omega}_{\substack{\text{3-fache} \\ \text{NP-Energie}}}$$

$$\psi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \left[H_{n_x} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_{n_y} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y \right) H_{n_z} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z \right) \right] e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2+z^2)}$$

10.3.2 Kugelkoordinaten

In Kugelkoordinaten trennt man die Wellenfunktion mit den normierten Hermite-Polynomen H_n in einen radius- und einen winkelabhängigen Teil:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

Wie im Abschnitt 10.1 erhält man folgende Ergebnisse:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right) R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r)$$

$$u_{nl}(r) \stackrel{\equiv r R_{nl}(r)}{\implies} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \beta^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + \varepsilon_{nl} \right) u_{nl}(r) = 0$$

mit $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ und $\varepsilon_{nl} = \frac{2m}{\hbar} E_{nl}$.

Die weitere Vorgehensweise ist analog der beim Wasserstoffatom:

- (i) Verhalten für $r \rightarrow \infty$
- (ii) Abseparation dieses Verhaltens
- (iii) Potenzreihenansatz
- (iv) Abbruchbedingung \Rightarrow Energiequantisierung

$$\Rightarrow \varepsilon_{nl} = (2n + 2l + 3)\beta^2$$

$$\Leftrightarrow E_{nl} = \hbar\omega \left(n + l + \frac{3}{2} \right) \quad \begin{array}{l} n = 0, 1, 2, \dots \\ l = 0, 1, 2, \dots \end{array}$$

Auch hier gibt es wiederum eine „zufällige“ Entartung:

E_{nl} ist nur von $(n + l)$ abhängig und mit $N = n + l$ ist der Entartungsgrad:

$$g_N = \frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$$

Auch hier deutet der hohe Entartungsgrad wieder auf eine höhere Symmetrie hin, in diesem Fall eine SU(3)-Symmetrie.

Kapitel 11

Streutheorie

Die Motivation für die Streutheorie ist natürlich, den theoretischen Hintergrund zu Streuexperimenten zu liefern, um die dabei ablaufenden Vorgänge verstehen zu können. Ein Streuversuch läuft in vielen Fällen wie in Abb. 11.1 ab: ein Strahl aus beschleunigten Teilchen vom Typ 1 trifft auf ruhende Teilchen vom Typ 2 (Target). Die Anzahl der gestreuten Teilchen in Abhängigkeit vom Winkel wird dann durch Detektoren festgestellt.

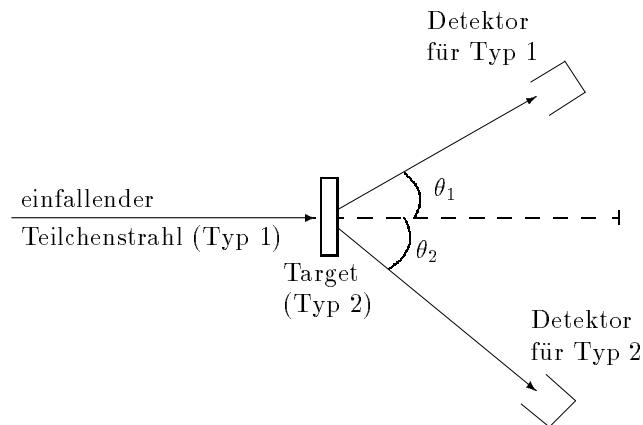


Abbildung 11.1: Streuversuch

Der einfachste Prozeß dieser Art ist der, daß zwei Teilchen stoßen:

$$(1) + (2) \rightarrow (1)' + (2)'$$

wobei Energie- und Impulserhaltungssatz gelten. Ist Teilchen 2 sehr schwer gegen Teilchen 1, dann wird praktisch kein Impuls übertragen, und man kann Teilchen 2 in der Theorie durch ein ablenkendes Potential ersetzen (siehe Abb. 11.2).

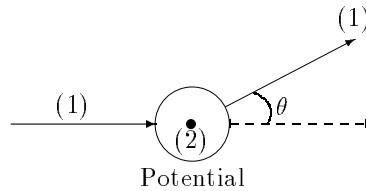


Abbildung 11.2: Streuung am Potential

11.1 Wirkungsquerschnitt

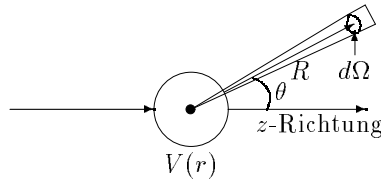


Abbildung 11.3: Bezeichnungen zum Wirkungsquerschnitt

Zur Vereinfachung der Betrachtung macht man folgende Annahmen (siehe auch Abb. 11.3):

- Teilchen fallen in z -Richtung ein
- das Zentrum des Potentials liegt im Ursprung
- Detektor ist sehr weit weg vom Potential ($R \rightarrow \infty$)

Ist jetzt F_{ein} der Fluß der einfallenden Teilchen,

$$F_{ein} = \frac{\text{Anzahl}}{\text{Fläche} \cdot \text{Zeit}}$$

so ist die Anzahl dn_s der unter dem Winkel θ in das Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit:

$$dn_s = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) F_{ein} d\Omega$$

Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$ hängt von θ und ϕ ab. Der Wirkungsquerschnitt hat die Dimension Fläche und die übliche Einheit ist ein *barn* (engl.: Scheune)

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

Der totale Wirkungsquerschnitt errechnet sich aus dem diff. Wirkungsquerschnitt durch Integration über die Einheitssphäre¹:

$$\sigma = \int_{\partial K_1(0)} d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$$

¹ $\partial K_1(0)$ ist der Rand der Kugel mit Radius 1 um den Ursprung

11.2 Stationäre Streuzustände

Der Ausgangspunkt unserer Berechnungen ist der Hamiltonoperator mit zeitunabhängigem Potential:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{r})$$

Das Teilchen wird durch ein Wellenpaket beschrieben, das wir in Eigenfunktionen des Hamiltonoperators zerlegen können. Außerdem muß für die Streuzustände (nicht gebunden!) $E > 0$ gelten. Für stationäre Zustände hat man damit die Lösung der Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi_E(\vec{r}) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi_E(\vec{r}) &= E \varphi_E(\vec{r}) \end{aligned} \quad (11.1)$$

Da $E > 0$, kann man die Wellenzahl k wie folgt definieren:

$$(\hbar k)^2 = 2mE$$

und weiter:

$$U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r})$$

Hiermit schreibt sich die Differentialgleichung (11.1):

$$(\Delta + k^2 - U(\vec{r})) \varphi_E(\vec{r}) = 0$$

Man sucht jetzt eine Lösung dieser Differentialgleichung mit den folgenden Randbedingungen:

- (a) einlaufende Teilchen (weit weg vom Potential) sind ebene Wellen: e^{ikz} ist die Lösung der Differentialgleichung für $r \rightarrow \infty$, $t \rightarrow -\infty$
- (b) im Bereich des Potentials wird die Wellenfunktion modifiziert
- (c) verläßt das Teilchen den Bereich des Potentials, verhält es sich wieder wie ein freies Teilchen

Nach dem Verlassen des Potentials hat sich damit das Wellenpaket in einen transmittierten und einen gestreuten Teil aufgespalten. Der transmittierte Teil hat weiterhin die Form e^{ikz} , während der gestreute Anteil eine auslaufende Kugelwelle $f_E(\theta, \phi) \frac{1}{r} e^{ikr}$ ist ($f_E(\theta, \phi)$: Streuamplitude). Man erhält damit die Randbedingung für φ_E im Unendlichen:

$$\varphi_E(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{ikz} + f_E(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.2)$$

11.2.1 Wirkungsquerschnitt und Streuamplitude

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte, die mit der Wellenfunktion verknüpft ist, ist (vgl. auch Abschnitt 6.2 vi), Seite 35)

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left(\varphi^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}) \right) \quad (11.3)$$

Diese Stromdichte erfüllt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad \text{mit } \rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Mit (11.3) erhält man die beiden Ergebnisse:

a) einlaufende Welle (in erster Ordnung):

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \varphi_E(\vec{r}) = \hbar k \vec{e}_z \varphi_E(\vec{r}) + \dots$$

Strom der einlaufenden Teilchen:

$$\Rightarrow \left| \vec{j}_e(\vec{r}) \right| = \frac{\hbar k}{m}$$

b) gestreuter Wahrscheinlichkeitsstrom (Übergang zu Kugelkoordinaten):

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Das führt zu den drei Komponenten:

$$\begin{aligned} \vec{j}_g \vec{e}_r &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{r^2} \left(k + \frac{i}{r} \right) \right) |f_E(\theta, \phi)|^2 = \frac{\hbar k}{m r^2} |f_E(\theta, \phi)|^2 \\ \vec{j}_g \vec{e}_\theta &= \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3} \operatorname{Re} \left(f_E^*(\theta, \phi) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} f_E(\theta, \phi) \right) \\ \vec{j}_g \vec{e}_\phi &= \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \operatorname{Re} \left(f_E^*(\theta, \phi) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} f_E(\theta, \phi) \right) \end{aligned}$$

Man sieht hieran, daß für große r \vec{j}_g parallel zu \vec{e}_r wird, da die θ - und ϕ -Richtungen mit einer Ordnung in r schneller gegen 0 gehen.

Der Fluß der einfallenden Teilchen ist proportional zu $\left| \vec{j}_e \right|$: $F_{ein} = c \left| \vec{j}_e \right|$. Damit ergibt sich die Anzahl der in das Raumwinkelement $d\Omega$ des Detektors gestreuten Teilchen zu

$$\begin{aligned} \Rightarrow dn_s &= c \vec{j}_g d\vec{s} = c r^2 (\vec{j}_g \vec{e}_r) d\Omega \\ &= c \underbrace{\frac{\hbar k}{m}}_{F_{ein}} |f_E(\theta, \phi)|^2 d\Omega \\ \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f_E(\theta, \phi)|^2 \end{aligned}$$

Die Interferenz zwischen einlaufender und gestreuter Welle sowie Mehrfachstreuung vernachlässigen wir.

11.2.2 Berechnung von $f_E(\theta, \phi)$

Die Differentialgleichung für die Streuung ist:

$$(\Delta + k^2) \varphi_E(\vec{r}) = U(\vec{r}) \varphi_E(\vec{r}) \quad (11.4)$$

Eine *Fundamentallösung* $G(\vec{r})$ ist definiert durch:

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$$

Wenn $\varphi_E^{(0)}(\vec{r})$ eine Lösung der homogenen Differentialgleichung

$$(\Delta + k^2)\varphi_E^{(0)}(\vec{r}) = 0$$

ist, dann gilt für $\varphi_E(\vec{r})$:

$$\varphi_E(\vec{r}) = \varphi_E^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi_E(\vec{r}')$$

Dies ist die Integralgleichung zu (11.4).

Beweis: Es gilt (vgl. Theorie B):

$$\Delta \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) = \delta(\vec{r})$$

Mit dem Ansatz $G_{\pm}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r} e^{\pm ikr}$ (G_{\pm} Fundamentallösung) erhält man:

$$\begin{aligned} \Delta G_{\pm}(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi} \Delta \left(\frac{1}{r} e^{\pm ikr} \right) \\ \Delta \left(\frac{1}{r} e^{\pm ikr} \right) &= \frac{1}{r} \Delta e^{\pm ikr} + e^{\pm ikr} \Delta \frac{1}{r} + 2 \left(\vec{\nabla} \frac{1}{r} \right) \left(\vec{\nabla} e^{\pm ikr} \right) \quad (11.5) \\ \Delta e^{\pm ikr} &= \left(-k^2 \pm \frac{2k\hat{i}}{r} \right) e^{\pm ikr} \\ \vec{\nabla} e^{\pm ikr} &= \pm ik e^{\pm ikr} \frac{\vec{r}}{r} \end{aligned}$$

und damit für (11.5):

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \left(-\frac{k^2}{r} \pm \frac{2ik}{r^2} - 4\pi\delta(\vec{r}) - \frac{2}{r^2}(\pm ik) + \frac{k^2}{r} \right) e^{\pm ikr} \\ &= -4\pi\delta(\vec{r}) e^{\pm ikr} = -4\pi\delta(\vec{r}) \end{aligned}$$

Als Lösung der homogenen Differentialgleichung wählt man zweckmäßig $\varphi_E^{(0)}(\vec{r}) = e^{ikz}$ und kann damit für $\varphi_E(\vec{r})$ schreiben:

$$\varphi_E(\vec{r}) = e^{ikz} + \int d^3r' G_+(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \varphi_E(\vec{r}')$$

Wenn $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$, kann man $|\vec{r} - \vec{r}'|$ entwickeln:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx |\vec{r}| + \vec{r}' \cdot \left[\vec{\nabla}_{\vec{r}'} |\vec{r} - \vec{r}'| \right]_{\vec{r}'=0} = r + \left(-\vec{r}' \frac{\vec{r}}{r} \right)$$

Mit dieser Näherung ergibt sich für G_+ ($\hat{=}$ vom Ursprung ausgehende Kugelwelle) und φ_E :

$$\begin{aligned} G_+(\vec{r} - \vec{r}') &\approx -\frac{1}{4\pi r} e^{ikr} e^{-ik\vec{r}' \cdot \frac{\vec{r}}{r}} \\ \varphi_E(\vec{r}) &\approx e^{ikz} - \frac{1}{4\pi r} e^{ikr} \int d^3r' e^{-ik\vec{r}' \cdot \frac{\vec{r}}{r}} U(\vec{r}') \varphi_E(\vec{r}') \end{aligned}$$

Und durch Vergleich mit Gleichung (11.2) sieht man:

$$f_E(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\vec{r}' \cdot \frac{\vec{r}}{r}} U(\vec{r}') \varphi_E(\vec{r}')$$

11.2.3 Born'sche Näherung

Mit den Abkürzungen $\vec{k}_i = k\vec{e}_z$ und $\vec{k}_f = k\frac{\vec{r}}{r}$ erhält man für φ_E durch wiederholtes Einsetzen der Gleichung in sich selbst (Iterationsverfahren):

$$\begin{aligned}\varphi_E(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \int d^3r' G_+(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')\varphi_E(\vec{r}') \\ &= e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \int d^3r' G_+(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} \\ &\quad + \int d^3r' G_+(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}') \int d^3r'' G_+(\vec{r}' - \vec{r}'')U(\vec{r}'')\varphi_E(\vec{r}'') = \dots\end{aligned}$$

Dies ist eine Entwicklung nach Potenzen des Potentials. Diese Entwicklung nennt man *Born'sche Reihe*. Sehr oft benutzt man nur die niedrigste nicht-triviale Ordnung (1. Ordnung im Potential). Dies bezeichnet man als *Born'sche Näherung*:

$$\begin{aligned}f_E(\theta, \phi) &\approx -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f\vec{r}'} U(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{i\vec{q}\vec{r}'} U(\vec{r}') \quad \text{mit } \vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f\end{aligned}$$

In Kugelkoordinaten gilt für diesen Vektor \vec{q} :

$$q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

11.3 Streuung am Zentralpotential: Partialwellen

Wir betrachten ein freies Teilchen. Aus der Drehimpulserhaltung folgt:

$$\varphi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \text{Radialgleichung: } \left(-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2mr^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) R_{kl}(r) = 0$$

Die Lösungen dieser Radialgleichung sind sphärische Besselfunktionen $J_l(kr)$:

$$J_l(x) = (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right)$$

und damit:

$$\varphi_{klm}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} J_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Diese Funktionen φ_{klm} sind normiert und vollständig:

$$\begin{aligned}\int d^3r \varphi_{klm}^* \varphi_{k'l'm'} &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k - k') \quad (\text{Normierung}) \\ \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \varphi_{klm}(\vec{r}) \varphi_{klm}^*(\vec{r}') &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{Vollständigkeit})\end{aligned}$$

Für sehr kleine bzw. sehr große Radien erhält man folgende Ergebnisse:

- Verhalten von $J_l(x)$ am Ursprung:

$$J_l(x) \underset{x \rightarrow 0}{\simeq} \frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

$$((2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2l+1))$$

- radiale Wahrscheinlichkeitsdichte P_R :

$$P_R \sim (kr)^2 J_l^2(kr) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} r^{2l+2}$$

Das bedeutet, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $r < r_0$ klein wird:

$$r_0 = \frac{1}{k} \sqrt{l(l+1)} = \frac{\hbar \sqrt{l(l+1)}}{\hbar k} \approx \frac{\sqrt{|\vec{L}^2|}}{|\vec{p}|} = b \quad (\text{für kleine Winkel})$$

(b ist der klassische Stoßparameter; siehe auch (11.6))

- Asymptotisches Verhalten von $J_l(x)$:

$$J_l(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{x} \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right)$$

Daraus folgt für φ_{klm} :

$$\varphi_{klm}(\vec{r}) \underset{|\vec{r}| \rightarrow \infty}{\simeq} = -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \phi) \frac{1}{2ikr} (e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}})$$

11.3.1 Ebene und sphärische Wellen

Eine ebene Welle in z -Richtung, e^{ikz} , schreibt sich in Kugelkoordinaten $e^{ikr \cos \theta}$. Die Drehimpulskomponente in z -Richtung ist:

$$\mathcal{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \Rightarrow \mathcal{L}_z e^{ikz} = 0$$

Da damit $m = 0$, bleiben nur die Komponenten

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} J_l(kr) Y_l^0(\theta, \phi)$$

Da $Y_l^0(\theta, \phi) = Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$ mit $P_l(x)$ Legendre-Polynom, erhält man:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) J_l(kr)$$

11.3.2 Phasenverschiebung bei Streuung

Man setzt wieder einmal $R_{kl}(r) = \frac{1}{r}u_{kl}(r)$ und erhält damit für φ_{klm} den Ansatz:

$$\varphi_{klm}(\vec{r}) = \frac{1}{r}u_{kl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

was bei der Differentialgleichung (11.1)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right)u_{kl}(r) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}u_{kl}(r)$$

ergibt (mit $u_{kl}(r=0) = 0$). Die asymptotische Form (für $r \rightarrow \infty$) von $u_{kl}(r)$ ist dann:

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} ae^{ikr} + be^{-ikr}$$

Man sieht, daß die asymptotische Form von $u_{kl}(r)$ der Lösung des eindimensionalen Potentialproblems aus Abschnitt 4.2 ähnelt. Da das Potential am Ursprung dort ∞ wird, verschwindet die Wellenfunktion an dieser Stelle und man kann folgern, daß einfallende und reflektierte Welle betragsmäßig gleich sind. Dies gilt auch hier für die asymptotische Form, da $r < 0$ nicht zugelassen ist ($\hat{=}$ unendlich hoher Potentialwall bei $r = 0$):

$$|a|^2 = |b|^2$$

Damit kann man weiter vereinfachen:

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} |a|(e^{ikr}e^{i\phi_a} - e^{-ikr}e^{i\phi_b}) = c \sin(kr - \beta_l)$$

Für ein Potential $V \equiv 0$ erhält man so $\beta_l^{(0)} = l\frac{\pi}{2}$ und weiter:

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} c \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)$$

δ_l heißt *Phasenverschiebung* der l -ten *Partialwelle* u_{kl} . Daraus kann man die Streuamplitude und den Wirkungsquerschnitt berechnen:

$$\begin{aligned} \varphi_{klm}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{r}Y_l^m(\theta, \phi) \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \\ = -Y_l^m(\theta, \phi)ke^{-i\delta_l} \left[\frac{1}{2ikr} \left(\underbrace{e^{-ikr}e^{il\frac{\pi}{2}}}_{\text{einlaufende Welle}} - \underbrace{e^{ikr}e^{-il\frac{\pi}{2}}e^{2i\delta_l}}_{\text{auslaufende Welle und Phasenversch.}} \right) \right] \end{aligned}$$

Nach den Betrachtungen über sphärische Besselfunktionen kann man für die l -te Partialwelle in erster Näherung den Stoßparameter $b_k(l) = \frac{1}{k}\sqrt{l(l+1)}$ annehmen. Betrachtet man ein Potential mit begrenzter Reichweite r_0 , so werden nur die Partialwellen mit $l < l_{max}$ gestreut:

$$\begin{aligned} b = \frac{\sqrt{|\vec{L}^2|}}{|\vec{p}|} \approx \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k} \\ \Rightarrow b_k(l_{max}) = r_0 \Leftrightarrow l_{max}(l_{max} + 1) = k^2r_0^2 \end{aligned} \quad (11.6)$$

11.3.3 Streuamplitude und Wirkungsquerschnitt

Ohne ein Potential, d.h. mit $V(\vec{r}) = 0$ sind die Partialwellen:

$$\begin{aligned}\psi_{frei}(\vec{r}) &= e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} J_l(kr) Y_l^0(\theta) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{1}{2ikr} [e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}}]\end{aligned}$$

Für $V \neq 0$ ergibt sich eine Phasenverschiebung:

$$\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{1}{2ikr} [e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_l}]$$

Das formt man um:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2ikr} [e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{2i\delta_l}] &= \frac{1}{2ikr} [e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} + e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} \underbrace{(1 - e^{2i\delta_l})}_{=-2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l}] \\ &= \frac{1}{2ikr} \underbrace{(e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}})}_{\text{ebene Welle in } z\text{-Richtung}} - \frac{1}{kr} e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{i\delta_l} \sin \delta_l\end{aligned}$$

Setzt man das wieder in $\psi(\vec{r})$ ein, so sieht man:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \\ = e^{ikz} + f_E(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}\end{aligned}$$

Mit diesem Ergebnis ist die Streuamplitude $f_E(\theta)$:

$$f_E(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

Hiermit kann man den totalen Wirkungsquerschnitt berechnen:

$$\begin{aligned}\sigma_{tot} &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_E(\theta)|^2 = f_E(\theta) f_E^*(\theta) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\substack{l=0 \\ l'=0}}^{\infty} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} e^{i\delta_l} e^{-i\delta_{l'}} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \underbrace{\int d\Omega Y_l^0(\theta) (Y_{l'}^0(\theta))^*}_{=\delta_{ll'}} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l =: \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (11.7)\end{aligned}$$

Der Beitrag einer jeden Partialwelle zum Wirkungsquerschnitt hat eine obere Grenze:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$$

Diese Grenze nennt man *Unitaritätsgrenze*.

11.3.4 Optisches Theorem

Die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung ist gegeben durch:

$$f_E(\theta=0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(0) \sqrt{4\pi}$$

und mit $Y_l^0(0) = \frac{\sqrt{2l+1}}{\sqrt{4\pi}}$ sieht man:

$$\Leftrightarrow f_E(\theta=0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l (\cos \delta_l + i \sin \delta_l) \quad (11.8)$$

Das optische Theorem besagt nun, daß

$$\boxed{\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}(f_E(\theta=0))}$$

(vergleiche Gleichungen (11.7) und (11.8))

Kapitel 12

Zeitunabhängige Störungstheorie

Die Motivation für diese Methoden ist, daß elementare Lösungen von $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ nur in einzelnen Fällen möglich sind. Hierzu zählen z.B. das H-Atom oder der harmonische Oszillator.

Ausgangspunkt für die Störungstheorie ist ein solches lösbares Problem mit Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 und eine kleine Differenz \mathcal{W} zwischen dem Hamiltonoperator \mathcal{H} des Systems und \mathcal{H}_0 , die Störung: $\mathcal{W} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$. Unsere Betrachtung wird sich auf zeitunabhängige Probleme beschränken.

12.1 Allgemeine Vorgehensweise

12.1.1 Nicht entarteter Fall

Man macht die folgenden Annahmen als Voraussetzung:

- $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W}$ ist der Hamiltonoperator des Problems
- das Eigenwertproblem von \mathcal{H}_0 sei gelöst: $\mathcal{H}_0|\phi_n\rangle = \epsilon_n|\phi_n\rangle$
- \mathcal{H}_0 hat ein diskretes Spektrum
- die Störung \mathcal{W} sei „klein“, d.h. alle Matrixelemente $\langle\phi_n|\mathcal{W}|\phi_m\rangle$ von \mathcal{W} sollen klein gegen die Differenzen $\epsilon_i - \epsilon_j$ sein

Um später die Entwicklungsordnungen besser erkennen zu können, wollen wir \mathcal{W} als $\mathcal{W} = \lambda\hat{\mathcal{W}}$ ($\lambda \in \mathbb{R}$) darstellen, und aus Faulheitsgründen auch gleich für $\hat{\mathcal{W}}$ wieder nur \mathcal{W} schreiben:

$$\mathcal{H}(\lambda) = \mathcal{H}_0 + \lambda\mathcal{W} \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Die Idee des Lösungsansatzes ist, daß in der Eigenwertgleichung

$$\mathcal{H}(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle$$

eine Bestimmung der einzelnen Korrekturen in Abhängigkeit von ϵ_n und $|\phi_n\rangle$ möglich ist, d.h. daß man $|\psi(\lambda)\rangle$ und $E_n(\lambda)$ als Potenzreihe in λ schreiben kann.

Der Potenzreihenansatz führt auf eine Entwicklung der Art:

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (12.1)$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0, n\rangle + \lambda |1, n\rangle + \dots \quad (12.2)$$

Diese liefert die Eigenwertgleichung

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{W})(|0, n\rangle + \lambda |1, n\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots)(|0, n\rangle + \lambda |1, n\rangle + \dots)$$

Ausrechnen und Koeffizientenvergleich mit (12.1) liefert:

$$\lambda^0 : \quad \mathcal{H}_0 |0, n\rangle = E_n^{(0)} |0, n\rangle \quad (12.3)$$

$$\lambda^1 : \quad (\mathcal{H}_0 - E_n^{(0)}) |1, n\rangle = (E_n^{(1)} - \mathcal{W}) |0, n\rangle \quad (12.4)$$

$$\lambda^2 : \quad (\mathcal{H}_0 - E_n^{(0)}) |2, n\rangle = (E_n^{(1)} - \mathcal{W}) |1, n\rangle + E_n^{(2)} |0, n\rangle \quad (12.5)$$

\vdots

$$\lambda^k : \quad (\mathcal{H}_0 - E_n^{(0)}) |k, n\rangle = (E_n^{(1)} - \mathcal{W}) |k-1, n\rangle + E_n^{(2)} |k-2, n\rangle + \dots + E_n^{(k)} |0, n\rangle$$

Hiermit kann man nun explizit die Korrekturen der verschiedenen Ordnungen in λ ausrechnen:

Ordnung 0:

Wie man sieht, muß $|0, n\rangle$ Eigenvektor von \mathcal{H}_0 sein und $E_n^{(0)}$ gehört zum Spektrum von \mathcal{H}_0 . Man setzt deshalb

$$E_n^{(0)} = \epsilon_n \quad |0, n\rangle = |\phi_n\rangle$$

was gleichzeitig den korrekten Grenzwert für $\lambda \rightarrow 0$ gewährleistet, bei dem man die Ergebnisse des ungestörten Systems erhalten sollte.

Ordnung 1:

i) Energieeigenwerte:

Projiziert man (12.4) auf $|\phi_n\rangle$, so erhält man:

$$\langle \phi_n | (\mathcal{H}_0 - \epsilon_n) | 1, n \rangle = \langle \phi_n | (E_n^{(1)} - \mathcal{W}) | \phi_n \rangle$$

und weiter wegen $\langle \phi_n | \mathcal{H}_0 = \epsilon_n \langle \phi_n |$:

$$0 = E_n^{(1)} - \langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_n \rangle$$

Die Entwicklung bis zur ersten Ordnung lautet damit:

$$E_n(\lambda) \approx \epsilon_n + \lambda \langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_n \rangle$$

d.h. die Korrekturen 1. Ordnung sind die Diagonalelemente der Matrix \mathcal{W} in der Basis $\{|\phi_i\rangle\}$.

ii) Zustand:

Bei der Projektion von (12.4) auf die restlichen Zustände $|\phi_m\rangle$ ($m \neq n$) ergibt sich jeweils:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | (\mathcal{H}_0 - \epsilon_n) | 1, n \rangle &= \langle \phi_m | (E_n^{(1)} - \mathcal{W}) | \phi_n \rangle \\ \Rightarrow (\epsilon_m - \epsilon_n) \langle \phi_m | 1, n \rangle &= - \langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle \quad \text{für } m \neq n \\ \Leftrightarrow \langle \phi_m | 1, n \rangle &= \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} \langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle \end{aligned}$$

Das bedeutet, man erhält Komponenten von $|1, n\rangle$ durch:

$$\begin{aligned} |1, n\rangle &= \sum_m \langle \phi_m | 1, n \rangle |\phi_m\rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} \langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle |\phi_m\rangle + \langle 1, n | \phi_n \rangle |\phi_n\rangle \end{aligned}$$

Um die letzte, unbekannte Komponente auszurechnen, benutzt man:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n(\lambda) | \psi_n(\lambda) \rangle &\stackrel{!}{=} 1 = (\langle \phi_n | + \lambda \langle 1, n | + \dots)(|\phi_n\rangle + \lambda |1, n\rangle + \dots) \\ &= \underbrace{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}_{=1} + \lambda (\langle 1, n | \phi_n \rangle + \langle \phi_n | 1, n \rangle) + \dots \\ \Rightarrow \text{Re}(\langle 1, n | \phi_n \rangle) &= 0 \end{aligned}$$

Die Phase wählt man so, daß $\langle \phi_n | \psi_n(\lambda) \rangle$ reell ist, unabhängig von λ .

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \psi_n(\lambda) \rangle &= \langle \phi_n | \phi_n \rangle + \lambda \langle \phi_n | 1, n \rangle + \dots \\ \Rightarrow \text{Im}(\langle 1, n | \phi_n \rangle) &= 0 \end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Korrektur 1. Ordnung zum Eigenvektor als:

$$|1, n\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |\phi_m\rangle$$

Ordnung 2:

(i) Energieeigenwert:

Mit (12.5) berechnet man:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \mathcal{H}_0 - \epsilon_n | 2, n \rangle &= \langle \phi_n | (E^{(1)} - \mathcal{W}) | 1, n \rangle + \langle \phi_n | \phi_n \rangle E_n^{(2)} \\ \Rightarrow E_n^{(2)} &= -E_n^{(1)} \underbrace{\langle \phi_n | 1, n \rangle}_{=0 \text{ (Phasenwahl)}} + \langle \phi_n | \mathcal{W} | 1, n \rangle \end{aligned}$$

Damit erhält man für die Energiekorrektur:

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | \mathcal{W} | 1, n \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_m \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

(ii) Zustand:

Mit dem gleichen Verfahren wie schon bei der 1. Ordnung erhält man:

$$|2, n\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \mathcal{W} - E_n^{(1)} | 1, n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |\phi_m\rangle - \frac{1}{2} \langle 1, n | 1, n \rangle$$

12.1.2 Güte der Näherung

Wir wollen hier abschätzen, wie gut die im vorigen Abschnitt gemachten Näherungen sind:

Es gelte $\Delta\epsilon_n = \min_k |\epsilon_n - \epsilon_k|$:

$$\begin{aligned}
 E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} |\langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle|^2 \\
 &\leq \sum_{m \neq n} \frac{1}{\Delta\epsilon_n} |\langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{\Delta\epsilon_n} \sum_{m \neq n} \langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \mathcal{W} | \phi_n \rangle \\
 &= \frac{1}{\Delta\epsilon_n} \langle \phi_n | \mathcal{W} (\mathcal{I} - |\phi_n\rangle \langle \phi_n|) \mathcal{W} | \phi_n \rangle \\
 &= \frac{1}{\Delta\epsilon_n} [\langle \phi_n | \mathcal{W}^2 | \phi_n \rangle - (\langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_n \rangle)^2] = \frac{(\Delta\mathcal{W})^2}{\Delta\epsilon_n}
 \end{aligned}$$

Die Näherung der Störungstheorie ist dann brauchbar, wenn diese Fehlerabschätzung wesentlich kleiner wird als der Term 1. Ordnung:

$$\langle \phi_n | \mathcal{W} | \phi_n \rangle \gg \frac{(\Delta\mathcal{W})^2}{\Delta\epsilon_n}$$

12.1.3 Entarteter Fall

Hat man einen g_n -fach entarteten Zustand, so schreibt sich das Eigenwertproblem von \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 \left| \phi_n^{(i)} \right\rangle = \epsilon_n \left| \phi_n^{(i)} \right\rangle \quad i = 1, \dots, g_n$$

Taylorentwicklung (wie im nicht entarteten Fall mit Parameter λ) ergibt:

Ordnung 0:

Aus

$$\left\langle \phi_n^{(i)} \left| (\mathcal{H}_0 - E_n^{(0)}) \right| 0, n \right\rangle = 0$$

folgt, daß $|0, n\rangle$ einer der Vektoren $\left| \phi_n^{(i)} \right\rangle$ sein muß und $E_n^{(0)} = \epsilon_n$:

$$E_n^{(0)} = \epsilon_n \quad |0, n\rangle = \left| \phi_n^{(j)} \right\rangle \quad j \in \{1, \dots, g_n\} \text{ fest}$$

Ordnung 1:

Hier ergibt sich:

$$\left\langle \phi_n^{(k)} \left| (\mathcal{H}_0 - \epsilon_n) \right| 1, n \right\rangle = E_{n,k}^{(1)} \left\langle \phi_n^{(k)} \left| 0, n \right\rangle - \left\langle \phi_n^{(k)} \left| \mathcal{W} \right| 0, n \right\rangle$$

Und weiter wegen $\langle \phi_n^{(k)} | \mathcal{H}_0 = \langle \phi_n^{(k)} | \epsilon_n$:

$$\Rightarrow \langle \phi_n^{(k)} | \mathcal{W} | 0, n \rangle = E_{n,k}^{(1)} \langle \phi_n^{(k)} | 0, n \rangle$$

Außerdem hat man die Darstellung des Einheitsoperators als

$$\mathcal{I} = \sum_m \sum_{j=1}^{g_m} |\phi_m^{(j)}\rangle \langle \phi_m^{(j)}|$$

woraus folgt:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n^{(k)} | \mathcal{W} | 0, n \rangle &= \sum_m \sum_{j=1}^{g_m} \langle \phi_n^{(k)} | \mathcal{W} | \phi_m^{(j)} \rangle \underbrace{\langle \phi_m^{(j)} | 0, n \rangle}_{=\delta_{nm}} \\ &= E_{n,k}^{(1)} \langle \phi_n^{(k)} | 0, n \rangle \\ \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{g_n} \underbrace{\langle \phi_n^{(k)} | \mathcal{W} | 0, n \rangle}_{W_{kj}} \underbrace{\langle \phi_n^{(j)} | 0, n \rangle}_{c_j} &= E_{n,k}^{(1)} \langle \phi_n^{(k)} | 0, n \rangle \\ \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{g_n} W_{kj} c_j &= \sum_{j=1}^{g_n} \delta_{kj} E_{n,k}^{(1)} c_j \end{aligned}$$

Das bedeutet, daß die Korrekturen 1. Ordnung die Eigenwerte der $g_n \times g_n$ -Matrix W sind. Oft folgt hieraus eine (zumindest teilweise) Aufhebung der Entartung.

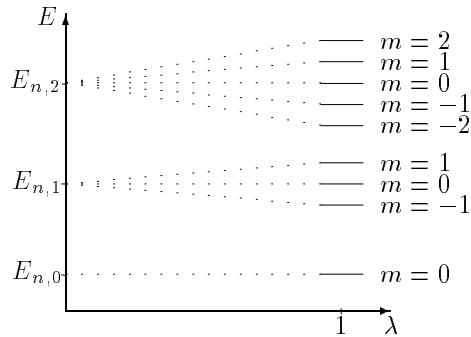


Abbildung 12.1: Aufspaltung der entarteten Energieniveaus

Beispiel:

Sei \mathcal{H}_0 ein dreihinvarianter Hamiltonoperator, d.h. $[\mathcal{H}_0, \mathcal{L}] = 0$. Dann hat man die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 |n, l, m\rangle &= \epsilon_{n,l} |n, l, m\rangle \\ \mathcal{L}^2 |n, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle \\ \mathcal{L}_z |n, l, m\rangle &= m\hbar |n, l, m\rangle \end{aligned}$$

und jeder Energieeigenwert ist $2l+1$ -fach entartet. Mit einer Störung $\mathcal{W} = \alpha \mathcal{L} \vec{B}$ durch ein externes Magnetfeld \vec{B} gilt $[\mathcal{H}, \mathcal{L}] \neq 0$ für $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W}$. Hat man ein stetiges Magnetfeld, so läßt sich diese Matrix durch entsprechende Koordinaten ($\vec{B} = B \vec{e}_z$) recht einfach diagonalisieren:

$$\begin{aligned} \mathcal{W} &= \alpha B \mathcal{L}_z \\ \Rightarrow \langle n, l, m | \mathcal{W} | n, l, m' \rangle &= \delta_{mm'} \alpha B \hbar m \end{aligned}$$

Dies ergibt (für $\alpha B > 0$) die Aufspaltungen der Energieniveaus in Abb. 12.1.

12.2 Fein- und Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms

Als Anwendungsbeispiel der Störungstheorie wollen wir die Fein- und Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms betrachten. Das in Abschnitt 10.2 angenommene $\frac{1}{r}$ -Potential beim H-Atom ist nur eine Näherung. Bei genauerer Betrachtung muß man Korrekturen durch verschiedene Wechselwirkungen beachten:

- WW zwischen Spin des Elektrons und dem Bahndrehimpuls
- WW zwischen Spin des Elektrons und dem Kernspin
- relativistische Korrekturen
- Effekte durch die endliche Protonenmasse
- WW-Effekte mit dem quantisierten Strahlungsfeld (Effekte der Quantenelektrodynamik)

Alle diese Effekte können im Rahmen einer relativistischen Beschreibung des Elektrons erfaßt werden. Diese relativistische Beschreibung liefert die *Dirac-Gleichung*. Die Reduktion der Dirac-Gleichung zur Schrödinger-Gleichung liefert einen Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W}_f + \mathcal{W}_{hf} + \mathcal{W}_{QED}$$

Der ungestörte Hamiltonoperator ist der bereits bekannte des H-Atoms:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

12.2.1 Feinstruktur

Der erste Störungsterm ist der sogenannte *Feinstrukturterm*:

$$\mathcal{W}_f = \underbrace{-\frac{1}{8m^3c^2} (\hat{p}^2)^2}_{\mathcal{W}_f^{(1)}} + \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathcal{L} \mathcal{S}}_{\mathcal{W}_f^{(2)}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V(r)}_{\mathcal{W}_f^{(3)}}$$

Interpretation der Terme:

- (i) erster Term ($\mathcal{W}_f^{(1)}$): relativistische Korrektur
Mit der relativistischen Energie

$$E = c\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^2}$$

erhält man für $p \ll mc$:

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \sqrt{1 + \frac{\hat{p}^2}{m^2 c^2}} \\ &\stackrel{\text{entwickeln}}{\approx} mc^2 \left(1 + \frac{\hat{p}^2}{2m^2 c^2} - \frac{(\hat{p}^2)^2}{8m^4 c^4} \right) \\ &= mc^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{(\hat{p}^2)^2}{8m^3 c^2} \end{aligned}$$

- (ii) zweiter Term ($\mathcal{W}_f^{(2)}$): Spin↔Bahn Wechselwirkung
Die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt ein Magnetfeld am Ort des Kerns:

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} + o\left(\frac{v^2}{c^2}\right) \quad \text{für } v \ll c$$

Der Spin des e^- 's ist wiederum verknüpft mit einem magn. Moment \vec{M} :

$$\vec{M} = g_e \frac{e}{2m} \vec{S} \quad g_e \approx 2$$

(g_e ist der sogenannte g -Faktor oder *Landé-Faktor* des Elektronen-Magnetons. $g_e = 2$ aus der Dirac-Gleichung, tatsächlich ist $g_e > 2$.)
Die Wechselwirkungsenergie zwischen dem Magnetfeld und dem magn. Moment ist dann:

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

Das \vec{E} -Feld beim H-Atom ist:

$$\vec{E} = -\frac{1}{e} \vec{\nabla} V(|\vec{r}|) = -\frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad (\text{Radialsymmetrie!})$$

Schreibt man mit diesem Ergebnis das Magnetfeld

$$\vec{B} = \frac{1}{emc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{p} \times \vec{r} = -\frac{1}{emc^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L}$$

so ergibt sich für den Wechselwirkungsterm:

$$\mathcal{W}_f^{(2)} = \frac{g_e}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathcal{L} \cdot \mathcal{S}$$

Den fehlenden Faktor 2 bringt die sogenannte *Thomas-Präzession* des e^- -Spins.

(iii) dritter Term ($\mathcal{W}_f^{(3)}$): *Darwin-Term*

Dieser Term wird durch einen relativistischen Effekt verursacht, der *Zitterbewegung* (übliche Bezeichnung, auch im Englischen!) des Elektrons. Dies ist eine Ortsunschärfe in der Größe der Compton-Wellenlänge $\lambda_e = \alpha a_0$ des e^- . D.h. der Ort des Elektrons fluktuiert, und die Fluktuationen haben die Größenordnung

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{mc}$$

Diese Unschärfe hat eine Unschärfe beim Potential zur Folge:

$$V(\vec{r} + \delta\vec{r}) = V(\vec{r}) + \delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} V(\vec{r}) \right) \delta r_i \delta r_j + \dots$$

Da die Fluktuationen rotationssymmetrisch sind, gilt:

$$\begin{aligned} \langle \delta\vec{r} \rangle &= 0 \quad \text{und} \quad \langle \delta r_i \delta r_j \rangle = \delta_{ij} \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \\ \Rightarrow V(\vec{r} + \delta\vec{r}) &\cong V(\vec{r}) + \frac{1}{2} (\Delta V(\vec{r})) \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \end{aligned}$$

Daraus kann man die Form der Korrektur ablesen:

$$\mathcal{W}_f^{(3)} \sim (\Delta V(r)) \frac{\hbar^2}{m^2 c^2}$$

Abschätzung der Größenordnungen der Korrekturterme

Betrachtet wird das Verhältnis $E \leftrightarrow \Delta E$:

(i) erster Term ($\mathcal{W}_f^{(1)}$):

mit $T = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ ist der erste Term:

$$\frac{1}{T} \frac{1}{8m^3 c^2} (\hat{p}^2)^2 = \frac{\hat{p}^2}{4m^2 c^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{\hat{v}}{c} \right)^2$$

Bezeichnet man die ungestörten Zustände mit $|n, l, m\rangle$, so erhält man:

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 |n, l, m\rangle &= 2mE_{nl} |n, l, m\rangle - 2mV(r) |n, l, m\rangle \\ \Leftrightarrow \langle n, l, m | \hat{v}^2 | n, l, m \rangle &= \frac{2}{m} E_{nl} - \frac{2}{m} \langle n, l, m | V(r) | n, l, m \rangle \end{aligned}$$

Für die Abschätzung wählt man den Grundzustand:

$$\langle x | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}: \text{Bohr'scher Radius}$$

Damit erhält man:

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0 | V(r) | 1, 0, 0 \rangle &= -\frac{e^2}{a_0} = -\frac{me^4}{\hbar^2} = -m\alpha^2 c^2 \\ \Rightarrow \left\langle 1, 0, 0 \left| \frac{\hat{v}^2}{c^2} \right| 1, 0, 0 \right\rangle &= \frac{2}{mc^2} \underbrace{E_{1,0}}_{=-\frac{m^2 c^2 \alpha^2}{2}} - \frac{2}{mc^2} \langle 1, 0, 0 | V(r) | 1, 0, 0 \rangle = \alpha^2 \end{aligned}$$

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ ist die *Feinstrukturkonstante* ($\alpha \approx \frac{1}{137}$).

Für die Abschätzung des ersten Terms berechnet man so schließlich:

$$\left\langle \frac{1}{4} \left(\frac{\hat{v}^2}{c^2} \right) \right\rangle = \frac{1}{4} \alpha^2 \approx 10^{-4}$$

(ii) zweiter Term ($\mathcal{W}_f^{(2)}$):

Man berechnet für ein Coulomb-Potential ($V(r) = -\frac{e^2}{r}$):

$$\left| \frac{\mathcal{W}_f^{(2)}}{V(r)} \right| = \left| \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{1}{V(r)} \mathcal{L} \cdot \mathcal{S} \right| \approx \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 r^2}$$

(Da $\mathcal{L}\mathcal{S}$ in der Größenordnung \hbar^2 und man den Faktor $\frac{1}{2}$ vernachlässigt.)

Damit schätzt man ab:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathcal{W}_f^{(2)}}{V(r)} \right\rangle &\approx \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \approx \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 a_0^2} \\ &= \frac{\hbar^2 e^4}{m^2 c^2 \hbar^4} = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \\ &= \alpha^2 \approx 10^{-4} \end{aligned}$$

(iii) dritter Term (Darwin-Term) ($\mathcal{W}_f^{(3)}$):

$$\Delta \left(-\frac{e^2}{r} \right) = 4\pi e^2 \delta(\vec{r})$$

Einsetzen des dritten Terms:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta V(r) &= \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m^2 c^2} \delta(\vec{r}) \\ \Leftrightarrow \left\langle n, l, m \left| \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta V(r) \right| n, l, m \right\rangle &= \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m^2 c^2} \left| \psi_{nlm}(\vec{0}) \right|^2 \end{aligned}$$

\Rightarrow Beitrag nur für $l = 0$ (z.B. Grundzustand). Außerdem kann man abschätzen:

$$\begin{aligned} |\psi_{nlm}(0)|^2 &\approx \frac{1}{a_0^3} \\ \left\langle 1, 0, 0 \left| \mathcal{W}_f^{(3)} \right| 1, 0, 0 \right\rangle &\approx \frac{\hbar^2 e^2 m^3 e^6}{2m^2 c^2 \hbar^6} \\ &= \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^4 \frac{1}{2} mc^2 \\ &= -\alpha^2 E_{1,0} \approx 10^{-4} \end{aligned}$$

Alle Korrekturterme sind damit hinreichend klein gegen die Energiedifferenzen, sodaß man die Störungstheorie anwenden kann.

Beispiel: Feinstruktur des $n=2$ - Niveaus

Für die Energieeigenwerte des H-Atoms hatten wir die Formel:

$$\epsilon_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2 \quad n = 1, 2, \dots; \quad (l = 0, 1, \dots, n-1)$$

Für $n = 2$ ergibt dies:

$$\epsilon_2 = -\frac{\alpha^2}{8} mc^2 \quad l = 0, 1$$

$l = 0$ ist der sogenannte 2s-Zustand, während $l = 1$ der 2p-Zustand ist. (Historisch: $l = s, p, d, f, \dots \hat{=} 0, 1, 2, 3, \dots$)

Der Entartungsgrad beim H-Atom ist n^2 , was für $n = 2$ zusammen mit der 2-fachen Entartung durch den Spin ($\pm\frac{1}{2}$) insgesamt eine $4 \cdot 2 = 8$ -fache Entartung gibt. Das bedeutet, man muß eine 8×8 -Matrix diagonalisieren, um die Energiekorrekturen zu erhalten.

Berechnung der Terme in \mathcal{W}_f

$$\begin{aligned} \langle 2s | \mathcal{W}_f^{(1)} | 2s \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 R_{2s}^*(r) \left(-\frac{1}{8m^3 c^2} (\hat{p}^2)^2 \right) R_{2s}(r) \\ &= -\frac{13}{128} \alpha^4 mc^2 \\ \langle 2s | \mathcal{W}_f^{(1)} | 2p \rangle &= \int d\Omega Y_0^0(\theta, \phi) \cdot Y_1^m(\theta, \phi) \int dr r^2 R_{2s}^*(r) \left(-\frac{1}{8m^3 c^2} (\hat{p}^2)^2 \right) R_{2p}(r) \\ &= 0 \quad (\text{Orthogonalität der } Y_l^m) \\ \langle 2p | \mathcal{W}_f^{(1)} | 2p \rangle &= \frac{7}{384} \alpha^4 mc^2 \\ \langle 2s | \mathcal{W}_f^{(3)} | 2s \rangle &= \frac{1}{16} \alpha^4 mc^2 \\ \langle 2p | \mathcal{W}_f^{(3)} | 2p \rangle &= 0 \\ \langle 2s | \mathcal{W}_f^{(3)} | 2p \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Das bedeutet, daß $\mathcal{W}_f^{(1)}$ und $\mathcal{W}_f^{(3)}$ durch die Wahl des Bezugssystems bereits diagonal sind. Der Spin-Bahn-Term kann diagonalisiert werden, ohne die bisher bereits diagonalisierten zu stören.

Der Spin-Bahn-Term ($\mathcal{W}_f^{(2)}$):

Zunächst betrachtet man $\mathcal{L}\mathcal{S}$: dies ist ein direktes Produkt von Bahndrehimpuls-Zuständen $|l, m_l\rangle$ und dem Spinzustand $|s, m_s\rangle$ ($s = \frac{1}{2}$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$). Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^2 |l, m_l\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m_l\rangle \\ \mathcal{L}_z |l, m_l\rangle &= \hbar m_l |l, m_l\rangle \\ \mathcal{S}^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle \\ \mathcal{S}_z |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle \end{aligned}$$

Man hat also für das direkte Produkt $|l, m_l\rangle |s, m_s\rangle$ eine Basis aus insgesamt 8 Zuständen:

$$\begin{array}{l}
 \text{2s-Zustände: } \left| 0, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \\
 \text{2p-Zustände: } \left| 1, 1 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \\
 \left| 1, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle \\
 \left| 1, -1 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, m_s \right\rangle
 \end{array} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie ist der Gesamtdrehimpuls $\mathcal{J} = \mathcal{L} + \mathcal{S}$ eine gut geeignete Quantenzahl. Deshalb führt man einen Basiswechsel zu der Basis durch, in der \mathcal{J}^2 und \mathcal{J}_z diagonal sind:

$$|J, M, l, s\rangle = \sum_{\substack{m_l, m_s \\ M=m_l+m_s}} \langle l, s, m_l, m_s | J, M, l, s\rangle |l, m_l\rangle |s, m_s\rangle$$

Diese Zustände erfüllen:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}^2 |J, M, l, s\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, M, l, s\rangle \\
 \mathcal{J}_z |J, M, l, s\rangle &= \hbar M |J, M, l, s\rangle \\
 \mathcal{L}^2 |J, M, l, s\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |J, M, l, s\rangle \\
 \mathcal{S}^2 |J, M, l, s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |J, M, l, s\rangle
 \end{aligned}$$

In dieser Basis $|J, M, l, s\rangle$ ist $\mathcal{L}\mathcal{S}$ diagonal, denn:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}^2 &= (\mathcal{L} + \mathcal{S})^2 = \mathcal{L}^2 + \mathcal{S}^2 + 2\mathcal{L}\mathcal{S} \\
 \Rightarrow \mathcal{L}\mathcal{S} &= \frac{1}{2}(\mathcal{J}^2 - \mathcal{L}^2 - \mathcal{S}^2) \\
 \Rightarrow \mathcal{L}\mathcal{S}|J, M, l, s\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}[J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)] |J, M, l, s\rangle
 \end{aligned}$$

Hieran sieht man, daß die Zustände $|J, M, l, s\rangle$ Eigenzustände von $\mathcal{L}\mathcal{S}$ sind, d.h. daß $\mathcal{L}\mathcal{S}$ diagonal ist.

In unserem Fall ist $l = 0, 1$ und $s = \frac{1}{2}$. Damit ergibt sich bei der Kopplung der Drehimpulse:

$$\begin{array}{lll}
 l = 0 & \frac{1}{2} \leq J \leq \frac{1}{2} & \Rightarrow J = \frac{1}{2} \\
 l = 1 & \frac{1}{2} \leq J \leq \frac{3}{2} & \Rightarrow J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}
 \end{array}$$

Die (historisch bedingte) Schreibweise für diese Zustände ist:

$$|nl_J\rangle \hat{=} |n, J, M, l, s\rangle$$

(man erinnere sich an die Termsymbole der Atomphysik-Vorlesung!) d.h. z.B.:

$$\begin{aligned} \left|2s_{\frac{1}{2}}\right\rangle &\hat{=} \left|2, \frac{1}{2}, M, 0, \frac{1}{2}\right\rangle & M &= \pm \frac{1}{2} \\ \left|2p_{\frac{1}{2}}\right\rangle &\hat{=} \left|2, \frac{1}{2}, M, 1, \frac{1}{2}\right\rangle & M &= \pm \frac{1}{2} \\ \left|2p_{\frac{3}{2}}\right\rangle &\hat{=} \left|2, \frac{3}{2}, M, 1, \frac{1}{2}\right\rangle & M &= \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2} \end{aligned}$$

Die Wirkung von \mathcal{LS} auf diese Zustände ist:

$$\begin{aligned} \mathcal{LS} \left|2s_{\frac{1}{2}}\right\rangle &= 0 \\ \mathcal{LS} \left|2p_{\frac{1}{2}}\right\rangle &= -\hbar^2 \left|2p_{\frac{1}{2}}\right\rangle \\ \mathcal{LS} \left|2p_{\frac{3}{2}}\right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left|2p_{\frac{3}{2}}\right\rangle \end{aligned}$$

Jetzt können wir daran gehen, den Radialanteil der Spin-Bahn-WW zu berechnen:

$$\mathcal{W}_f^{(2)} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathcal{LS}$$

Aus den vorherigen Ergebnissen sieht man, daß der Radialteil von n und l abhängt:

$$\begin{aligned} \left\langle 2p_J \left| \mathcal{W}_f^{(2)} \right| 2p_J \right\rangle &= \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle 2p_J \left| \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right| 2p_J \right\rangle \cdot \frac{\hbar^2}{2} \left[J(J+1) - 2 - \frac{3}{4} \right] \\ &= \Delta_{2p} \frac{\hbar^2}{2} \left[J(J+1) - \frac{11}{4} \right] \end{aligned}$$

($\Delta_{2p} = \frac{\alpha^4}{48\hbar^2} mc^2$). Damit hat man die 8×8 -Matrix diagonalisiert.

Ergebnisse:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad E(2s_{\frac{1}{2}}) &= -\frac{1}{8}\alpha^2 mc^2 - \frac{5}{128}\alpha^4 mc^2 + o(\alpha^6) \\ \text{(ii)} \quad E(2p_{\frac{1}{2}}) &= -\frac{1}{8}\alpha^2 mc^2 + \frac{7}{284}\alpha^4 mc^2 - \frac{1}{48}\alpha^4 mc^2 + o(\alpha^6) \\ &= -\frac{1}{8}\alpha^2 mc^2 - \frac{5}{128}\alpha^4 mc^2 + o(\alpha^6) \\ \text{(iii)} \quad E(2p_{\frac{3}{2}}) &= -\frac{1}{8}\alpha^2 mc^2 - \frac{1}{128}\alpha^4 mc^2 + o(\alpha^6) \end{aligned}$$

Vergleich von (i) und (ii) zeigt, daß diese Zustände noch entartet sind, d.h. es findet in erster Ordnung Störungstheorie keine vollständige Aufhebung der Entartung statt.

Vollständige relativistische Rechnung der $\left|2s_{\frac{1}{2}}\right\rangle, \left|2p_{\frac{1}{2}}\right\rangle$ -Entartung ergibt, daß

E nur von n und J abhängt:

$$E_{n,J} = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - J - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}$$

$$\stackrel{\text{entwickeln}}{=} mc^2 - \frac{1}{2n^2} \alpha^2 mc^2 + \frac{1}{2n^4} \left(\frac{n}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \alpha^4 mc^2 + \dots$$

12.2.2 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstruktur entsteht durch die WW des magn. Moments des Elektrons mit dem magn. Moment des Kerns (Protons):

$$\mathcal{W}_{hf} = \chi \mathcal{M}_I \mathcal{M}_S = \chi \frac{e}{2m_e} g_e \frac{e}{2m_p} g_p \mathcal{I} \mathcal{S} \quad g_e \approx 2; \quad g_p \approx -5,58$$

Beispiel: Hyperfeinstruktur für den Grundzustand

Im Grundzustand $\left| 1s_{\frac{1}{2}} \right\rangle$ braucht man vier Zustände zur Darstellung des Produkttraums $|i, m_i\rangle |s, m_s\rangle$. Wie oben diagonalisiert man durch den Übergang zum Gesamtspin $\mathcal{J} = \mathcal{I} + \mathcal{S}$ mit den Zuständen $|J, M, i, s\rangle$. Dann gilt:

$$\mathcal{I} \mathcal{S} |J, M, i, s\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - i(i+1) - s(s+1)] |J, M, i, s\rangle$$

Die Diagonalmatrixelemente sind damit ($i = \frac{1}{2}, s = \frac{1}{2} \Rightarrow J = 0, 1$):

$$\left\langle 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \mathcal{W}_{hf} \right| 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{3\hbar^2}{4} c \quad c \in \mathbb{R} \text{ konstant}$$

$$\left\langle 1, M, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \mathcal{W}_{hf} \right| 1, M, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{4} c \quad M = 0, \pm 1$$

d.h. die Aufspaltung des Grundzustands ist in der Größenordnung $\hbar^2 c$.

12.2.3 Zeeman-Effekt

Wenn man die Drehsymmetrie aufhebt, dann spalten sich die m -entarteten Zustände auf. Diese Aufhebung der Drehsymmetrie kann durch ein äußeres \vec{E} -Feld (Stark-Effekt) oder ein äußeres \vec{B} -Feld (Zeeman-Effekt) geschehen.

Das \vec{B} -Feld wirkt auf die magn. Momente:

$$\begin{array}{lll} \text{Bahnbewegung des } e^-: & \vec{M}_L = g_L \frac{e}{2m_e} \vec{L} & g_L = 1 \\ \text{Spin des } e^-: & \vec{M}_S = g_S \frac{e}{2m_e} \vec{S} & g_S \approx 2 \\ \text{Kernspin:} & \vec{M}_I = g_I \frac{e}{2m_p} \vec{I} & g_I \approx -5,58 \end{array}$$

Der Störungsterm ist damit ($\vec{B} = B \vec{e}_z$):

$$\mathcal{W}_Z = -\vec{B}(\mathcal{M}_L + \mathcal{M}_S + \mathcal{M}_I) = -w_e(\mathcal{L}_z + 2\mathcal{S}_z) + w_p \mathcal{I}_z$$

$$w_e = \frac{eB}{2m_e} \quad w_p = -g_I \frac{eB}{2m_p}$$

Und da $w_p \ll w_e$:

$$\mathcal{W}_Z \approx -w_e(\mathcal{L}_z + 2\mathcal{S}_z)$$

Zeeman-Effekt für den $|1s \frac{1}{2}\rangle$ -Zustand

Vergleicht man mit der Hyperfeinstruktur, so sieht man:

- (i) schwaches Feld: $\mathcal{W}_{hf} \gg \mathcal{W}_Z \rightarrow$ Diagonalisierung von \mathcal{W}_{hf}
- (ii) starkes Feld: $\mathcal{W}_{hf} \ll \mathcal{W}_Z \rightarrow$ Diagonalisierung von \mathcal{W}_Z
- (iii) mittleres Feld: $\mathcal{W}_{hf} \cong \mathcal{W}_Z \rightarrow$ Betrachtung wie folgt

Für den Fall (iii) muß man

$$\mathcal{W} = \mathcal{W}_{hf} + \mathcal{W}_Z = \xi \mathcal{I} \mathcal{S} - 2w_e \mathcal{S}_z + w_p \mathcal{I} z$$

diagonalisieren. Da $l = 0$, sind nur die Spins von Interesse, d.h. eine Basis des Produktraumes ist $|i, m_i\rangle |s, m_s\rangle$. Man wechselt wieder einmal zur Basis $|J, M\rangle$ ($J = 0, 1$; $M = 0$ bzw. $M = 0, 1$) und stellt sie durch $|i, m_i\rangle |s, m_s\rangle$ dar:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= \left| i, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s, \frac{1}{2} \right\rangle & |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| i, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| i, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| s, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |1, -1\rangle &= \left| i, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| s, -\frac{1}{2} \right\rangle & |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| i, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| i, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| s, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \end{aligned}$$

Die Operatoren bewirken bei diesen Zuständen:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_z |1, 1\rangle &= \frac{\hbar}{2} |1, 1\rangle & \mathcal{S}_z |1, 0\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |0, 0\rangle \\ \mathcal{S}_z |1, -1\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |1, -1\rangle & \mathcal{S}_z |0, 0\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |1, 0\rangle \end{aligned}$$

Insgesamt erhält man so für die Korrektur eine 4×4 -Matrix mit den Elementen:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \xi \frac{\hbar^2}{4} - \hbar w_e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi \frac{\hbar^2}{4} + \hbar w_e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi \frac{\hbar^2}{4} & \hbar w_e \\ 0 & 0 & \hbar w_e & -\frac{3}{4} \xi \hbar^2 \end{pmatrix}$$

und den Eigenwerten

$$\begin{aligned} E_{1/2} &= \frac{\hbar^2}{4} \xi \pm \hbar w_e \\ E_{3/4} &= -\frac{\hbar^2}{4} \xi \pm \sqrt{\left(\xi \frac{\hbar^2}{2} \right)^2 + \hbar^2 w_e^2} \end{aligned}$$

Das bedeutet, daß der vierfach entartete Grundzustand vollständig aufspaltet. Für $w_e \rightarrow 0$ ($B \rightarrow 0$) erhält man die „normale“ Hyperfeinstrukturaufspaltung.

Kapitel 13

Mehrteilchensysteme

13.1 Zweiteilchensysteme

13.1.1 Klassischer Fall

Wir betrachten zunächst ein klassisches Zweiteilchensystem mit den Koordinaten und Impulsen \vec{r}_1, \vec{p}_1 (Teilchen 1) und \vec{r}_2, \vec{p}_2 (Teilchen 2). Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen soll nur von $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ abhängen. Damit erhält man die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 - V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Zur einfacheren Betrachtung geht man dann über zu Schwerpunkt- und Relativkoordinaten:

$$\begin{aligned}\vec{R} &= \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} & \vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \Rightarrow \vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{r}; & \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{r}\end{aligned}$$

Die Lagrangefunktion wird mit diesen Koordinaten zu:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\underbrace{(m_1 + m_2)}_{=:M}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}}_{=: \mu}\dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r})$$

Die kanonisch konjugierten Impulse des Hamilton-Formalismus sind:

$$\begin{aligned}\vec{P} &= M\dot{\vec{R}} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \\ \vec{p} &= \mu\dot{\vec{r}} = \frac{1}{m_1 + m_2}(m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2)\end{aligned}$$

Für den Übergang zur Quantenmechanik braucht man noch die Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned}[r_{ki}, p_{kj}] &= i\hbar\delta_{ij} & k &= 1, 2 \\ [R_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij} & [r_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij}\end{aligned}$$

Die restlichen Kommutatoren ergeben 0.

13.1.2 Quantenmechanischer Fall

Die normierte Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ des Systems ist Wahrscheinlichkeitsamplitude, d.h. $P = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, Teilchen 1 bei \vec{r}_1 und Teilchen 2 bei \vec{r}_2 zu finden. Normierung bedeutet in diesem Fall übrigens:

$$\int d^3r_1 d^3r_2 |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = 1$$

Fragt man nur nach einem Teilchen, so ist

$$P(\vec{r}_1) = \int d^3r_2 |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen 1 bei \vec{r}_1 zu finden. Der Hamiltonoperator ist:

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2M}\mathcal{P}^2}_{\mathcal{H}_{cms}} + \underbrace{\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 + V(\vec{r})}_{\mathcal{H}_r}$$

mit $\mathcal{P} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ und $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}}$. Die Wellenfunktion in \vec{R} und \vec{r} erhält man durch

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi\left(\vec{R} + \frac{m_2\vec{r}}{m_1 + m_2}, \vec{R} - \frac{m_1\vec{r}}{m_1 + m_2}\right) = \chi(\vec{R}, \vec{r})$$

und die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist damit:

$$\mathcal{H}\chi_E(\vec{R}, \vec{r}) = E\chi_E(\vec{R}, \vec{r})$$

In unserem Fall ist $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cms} + \mathcal{H}_r$, d.h. man kann für $\chi_E(\vec{R}, \vec{r})$ einen Produktansatz machen:

$$\chi_E(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R}) \cdot \varphi(\vec{r})$$

Dieser Ansatz liefert die beiden Eigenwertgleichungen

$$\mathcal{H}_{cms}\Phi(\vec{R}) = E_{cms}\Phi(\vec{R}) \quad \mathcal{H}_r\varphi(\vec{r}) = E_r\varphi(\vec{r})$$

und $E = E_r + E_{cms}$. Die Lösung der beiden Gleichungen führt für die Schwerpunktsbewegung auf eine ebene Welle (freies Teilchen)

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\pm i\vec{k}\vec{R}} \quad E_{cms} = \frac{k^2}{2M}$$

und für die Relativbewegung auf

$$\mathcal{H}_r = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^2 + V(\vec{r})$$

d.h. auf eine „reguläre“ Schrödingergleichung mit der reduzierten Masse.

13.1.3 Formale Aspekte zu Zweiteilchensystemen

- die Produkte aus Wellenfunktionen entsprechen in Dirac-Notation einem Tensorprodukt aus Ket-Vektoren:

$$\chi_E(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\varphi(\vec{r}) \rightarrow |\chi\rangle = |\Phi\rangle |\varphi\rangle$$

- Eine Basis dieses Produktraums besteht aus Ortseigenzuständen $|\vec{R}, \vec{r}\rangle = |\vec{R}\rangle |\vec{r}\rangle$:

$$\chi_E(\vec{R}, \vec{r}) = \langle \vec{R}, \vec{r} | \chi \rangle = \langle \vec{R} | \Phi \rangle \langle \vec{r} | \varphi \rangle = \Phi(\vec{R})\varphi(\vec{r})$$

13.2 Identische Teilchen

Definition: Zwei Teilchen heißen *identisch*, wenn sie durch kein Experiment voneinander unterschieden werden können.

13.2.1 Klassische Vorbetrachtung

Die Anfangswerte $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2$ sind zu einem bestimmten Zeitpunkt (z.B. $t = 0$) vorgegeben. Für identische Teilchen ist die Lagrangefunktion invariant unter Vertauschung der Koordinaten und Impulse, woraus folgt, daß auch die Bewegungsgleichungen invariant sind.

13.2.2 Quantenmechanische Betrachtung

Von Bedeutung ist die Theorie identischer Teilchen z.B. bei der Streuung (siehe auch Abb. 13.1). Klassisch hat man Trajektorien, d.h. man kann immer angeben, welche Bahn zu welchem Teilchen gehört. In der Quantenmechanik ist der Begriff der „Bahn“ nicht definiert und deshalb hat das Problem eine Austauschentartung, da man für eine physikalische Situation mehrere orthogonale Zustandsvektoren finden kann.

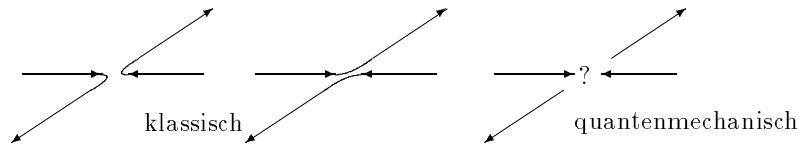


Abbildung 13.1: Streuung klassisch und quantenmechanisch

13.2.3 Beispiel: System mit zwei identischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen

Die Zustände dieses Systems sind $|s_z^{(1)}, s_z^{(2)}\rangle$, also insgesamt vier Zustände. Unter der Nebenbedingung $s_z^{(1)} + s_z^{(2)} = 0$ hat man dann nur noch die beiden Zustände

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

d.h. einen zweidimensionalen Raum mit Austauschentartung. Ein allgemeiner Zustand in diesem Raum schreibt sich:

$$|\psi\rangle = A \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + B \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad |A|^2 + |B|^2 = 1$$

Angenommen, man will jetzt die x -Komponente des Gesamtspins messen: die Wahrscheinlichkeit, für die Messung z.B. \hbar zu finden, wäre nach unseren bisherigen Methoden:

Eigenvektor zum Zustand \hbar :

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right)}_{\text{Zustände zu } s_x^{(1)}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right)}_{\text{Zustände zu } s_x^{(2)}} \\ &= \frac{1}{2} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \end{aligned}$$

Das bedeutet, daß

$$P(s_x^{(1)} + s_x^{(2)} = \hbar) = |\langle \psi | + \rangle|^2 = \frac{|A+B|^2}{4}$$

abhängig von A und B ist. Dies steht im Widerspruch zu den Postulaten, da die Teilchen identisch sind und Austauschentartung gilt.

13.2.4 Permutationsoperatoren

Die zur Lösung des Problems benötigte Technologie sind Permutationsoperatoren. *Permutationen* sind Vertauschungen von N Objekten, d.h. Abbildungen von $1, \dots, N$ auf sich selbst: $N \rightarrow \mathfrak{P}(N)$

Definition: ein *Permutationsoperator* für ein N -Teilchensystem \mathfrak{P}_α ($\alpha = \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N$, $\alpha_i \in \{1, 2, \dots, N\}$, $\alpha_i \neq \alpha_j$ für $i \neq j$) ist ein Operator mit der Eigenschaft:

$$\mathfrak{P}_\alpha |1 : n_1, 2 : n_2, \dots, N : n_N\rangle = |1 : n_{\alpha_1}, 2 : n_{\alpha_2}, \dots, N : n_{\alpha_N}\rangle$$

Zur Verdeutlichung ein Permutationsoperator für ein 2-Teilchensystem:

$$\mathfrak{P}_{21} |1 : n, 2 : m\rangle = |1 : m, 2 : n\rangle$$

Weiterhin gilt für den Permutationsoperator \mathfrak{P}_{21} :

$$\mathfrak{P}_{21}^2 = \mathcal{I} \wedge \mathfrak{P}_{21}^\dagger = \mathfrak{P}_{21} \Rightarrow \mathfrak{P}_{21}^\dagger = \mathfrak{P}_{21}^{-1}$$

Mögliche Eigenwerte von \mathfrak{P}_{21} sind ± 1 .

- Eigenvektoren $|\psi_S\rangle$ zum Eigenwert $+1$ heißen symmetrisch
- Eigenvektoren $|\psi_A\rangle$ zum Eigenwert -1 heißen antisymmetrisch

$$\mathfrak{P}_{21} |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$$

$$\mathfrak{P}_{21} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle$$

Außerdem definiert man sich noch den *Symmetrisierungsoperator*

$$\mathfrak{S} = \frac{1}{2}(\mathcal{I} + \mathfrak{P}_{21})$$

und den *Antisymmetrisierungsoperator*

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{2}(\mathcal{I} - \mathfrak{P}_{21})$$

\mathfrak{A} und \mathfrak{S} sind hermitesch und Projektionsoperatoren

$$\mathfrak{S}^2 = \mathfrak{S} \quad \mathfrak{A}^2 = \mathfrak{A}$$

und weiterhin gilt:

$$\mathfrak{A} \cdot \mathfrak{S} = 0 \quad \mathfrak{A} + \mathfrak{S} = \mathcal{I}$$

Für die Anwendung des Permutationsoperators auf beliebige Zustände $|\psi\rangle$ gilt:

$$\mathfrak{P}_{21}(\mathfrak{S}|\psi\rangle) = \mathfrak{S}|\psi\rangle \quad \mathfrak{P}_{21}(\mathfrak{A}|\psi\rangle) = -\mathfrak{A}|\psi\rangle$$

13.2.5 Observable

Wenn \mathcal{A} der Operator zur klassischen Observablen A im Einteilchenraum ist, dann seien $\mathcal{A}(1)$ und $\mathcal{A}(2)$ die Operatoren in \mathcal{E}_1 bzw. \mathcal{E}_2 . Dann hat man die offensichtliche Erweiterung unserer Observablendefinition:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(1)|\psi\rangle &= \mathcal{A}(1) \sum_{i,j} c_{ij} |1:i\rangle |2:j\rangle \\ &:= \sum_{i,j} c_{ij} (\mathcal{A}(1)|1:i\rangle) |2:j\rangle \\ \mathcal{A}(2)|\psi\rangle &:= \sum_{i,j} c_{ij} |1:i\rangle (\mathcal{A}(2)|2:j\rangle) \end{aligned}$$

Daraus kann man erkennen, daß die Permutation auf Observable nach Wahl der Basen der Einteilchenräume

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(1)|1:i\rangle &= a_i |1:i\rangle \\ \mathcal{A}(2)|2:i\rangle &= a_i |2:i\rangle \end{aligned}$$

folgendermaßen wirkt:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(1)\mathfrak{P}_{21}|1:i\rangle |2:j\rangle &= a_j |1:j\rangle |2:i\rangle \\ \Leftrightarrow \mathcal{A}(1)\mathfrak{P}_{21}^\dagger|1:i\rangle |2:j\rangle &= a_j |1:j\rangle |2:i\rangle \\ \Rightarrow \mathfrak{P}_{21}\mathcal{A}(1)\mathfrak{P}_{21}^\dagger|1:i\rangle |2:j\rangle &= a_j |1:i\rangle |2:j\rangle \\ &= \mathcal{A}(2)|1:i\rangle |2:j\rangle \\ \Rightarrow \mathfrak{P}_{21}\mathcal{A}(1)\mathfrak{P}_{21}^\dagger &= \mathcal{A}(2) \quad \mathfrak{P}_{21}\mathcal{A}(2)\mathfrak{P}_{21}^\dagger = \mathcal{A}(1) \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis gilt auch allgemein: ist $\mathcal{O}(1,2)$ ein Operator auf \mathcal{E} , dann gilt:

$$\mathfrak{P}_{21}\mathcal{O}(1,2)\mathfrak{P}_{21}^\dagger = \mathcal{O}(2,1)$$

Für symmetrische Operatoren ($\mathcal{O}_S(1,2) = \mathcal{O}_S(2,1)$) folgt damit:

$$\mathfrak{P}_{21}\mathcal{O}_S(1,2)\mathfrak{P}_{21}^\dagger = \mathcal{O}_S(1,2) \Leftrightarrow [\mathcal{O}_S(1,2), \mathfrak{P}_{21}] = 0$$

13.2.6 Vollständig symmetrische/antisymmetrische Zustandsvektoren

Definition: Ein Vektor $|\psi_S\rangle$ heißt *vollständig symmetrisch*, wenn für jede Permutation \mathfrak{P}_α gilt:

$$\mathfrak{P}_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$$

Ein Vektor $|\psi_A\rangle$ heißt *vollständig antisymmetrisch*, wenn für jede Permutation \mathfrak{P}_α gilt:

$$\mathfrak{P}_\alpha |\psi_A\rangle = \Pi_\alpha |\psi_A\rangle \quad \Pi_\alpha = \begin{cases} +1 & \text{wenn } \alpha \text{ gerade} \\ -1 & \text{wenn } \alpha \text{ ungerade} \end{cases}$$

α heißt *gerade*, wenn es durch eine gerade Anzahl Vertauschungen zweier Elemente aus der Folge $1, 2, 3, \dots, n$ hervorgegangen ist. (z.B. $1, 2, 3$ oder $3, 1, 2$)

α heißt *ungerade*, wenn es durch eine ungerade Anzahl Vertauschungen zweier Elemente aus der Folge $1, 2, 3, \dots, n$ hervorgegangen ist. (z.B. $2, 1, 3$ oder $2, 3, 1$)

Allgemeine Symmetrisierungs-/Antisymmetrisierungsoperatoren

Der Symmetrisierungs-/Antisymmetrisierungsoperator für N Teilchen ist:

$$\mathfrak{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \mathfrak{P}_\alpha \quad \mathfrak{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \Pi_\alpha \mathfrak{P}_\alpha$$

(\sum_{α} steht für die Summe über alle möglichen Permutationen α)

Die allgemeinen Operatoren \mathfrak{S} und \mathfrak{A} sind hermitesch, und für alle Permutationen \mathfrak{P}_β gilt:

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{S} &= \mathfrak{S} \mathfrak{P}_\beta = \mathfrak{S} \\ \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{A} &= \mathfrak{A} \mathfrak{P}_\beta = \Pi_\beta \mathfrak{A} \end{aligned}$$

Plausibilisierung: Es gilt:

$$\mathfrak{P}_\alpha \mathfrak{P}_\beta = \mathfrak{P}_\gamma \Rightarrow \Pi_\gamma = \Pi_\alpha \Pi_\beta$$

Damit zeigt man direkt:

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{S} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{P}_\alpha = \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \mathfrak{P}_\gamma = \mathfrak{S} \\ \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{A} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \Pi_\alpha \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{P}_\alpha = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} (\Pi_\beta^2) \Pi_\alpha \mathfrak{P}_\beta \mathfrak{P}_\alpha \\ &= \Pi_\beta \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \Pi_\gamma \mathfrak{P}_\gamma = \Pi_\beta \mathfrak{A} \end{aligned}$$

\mathfrak{S} und \mathfrak{A} sind Projektionsoperatoren und die Unterräume, auf die sie projizieren, sind zueinander orthogonal:

$$\begin{aligned}\mathfrak{S}^2 &= \left(\frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} \right) \mathfrak{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} \mathfrak{S} = \mathfrak{S} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} 1 = \mathfrak{S} \\ \mathfrak{A}^2 &= \left(\frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} \right) \mathfrak{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} \mathfrak{A} = \mathfrak{A} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \underbrace{\Pi_{\alpha} \Pi_{\alpha}}_{=1} = \mathfrak{A} \\ \mathfrak{A} \cdot \mathfrak{S} &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} \mathfrak{S} = \frac{1}{N!} \mathfrak{S} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha} = 0\end{aligned}$$

\mathfrak{S} symmetrisiert einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$:

$$\mathfrak{P}_{\alpha} \mathfrak{S} |\psi\rangle = \mathfrak{S} |\psi\rangle$$

\mathfrak{A} antisymmetrisiert einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$:

$$\mathfrak{P}_{\alpha} \mathfrak{A} |\psi\rangle = \Pi_{\alpha} \mathfrak{A} |\psi\rangle$$

Für die Summe von \mathfrak{S} und \mathfrak{A} gilt:

$$\mathfrak{S} + \mathfrak{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} (1 + \Pi_{\alpha}) \mathfrak{P}_{\alpha} = \frac{2}{N!} \sum_{\alpha \text{ gerade}} \mathfrak{P}_{\alpha}$$

13.2.7 Ergänzung der Postulate der Quantenmechanik

Die obigen Ausführungen implizieren eine Ergänzung der Postulate der Quantenmechanik für den Fall identischer Teilchen (siehe auch Abschnitt 6.1):

VII) Enthält ein System identische Teilchen, dann werden nur bestimmte Vektoren als physikalische Zustände zugelassen, nämlich entweder die vollständig symmetrischen oder die vollständig antisymmetrischen (bzgl. der identischen Teilchen) Zustandsvektoren.

Teilchen mit vollständig symmetrischen Zustandsvektoren heißen *Bosonen*, solche mit vollständig antisymmetrischen Zustandsvektoren heißen *Fermionen*.

Spin-Statistik-Theorem: alle Teilchen mit halbzahligem Spin sind Fermionen, alle Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen.

13.2.8 Aufhebung der Austauschentartung

2-Teilchen-System

Hierzu betrachten wir nochmals zwei identische Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen:
Ein allgemeiner Zustand ist

$$|\psi\rangle = a \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + b \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

Antisymmetrisiert und normiert man diesen Zustand, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}\mathfrak{A}|\psi\rangle &= \frac{1}{2}(\mathcal{I} - \mathfrak{P}_{21})|\psi\rangle = \frac{1}{2}(a-b)\left(\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right) \\ |\psi_N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right) \quad (\text{normiert})\end{aligned}$$

Dies ist nun der eindeutige Zustandsvektor, der das System in Einklang mit Postulat VII) beschreibt. Bezeichnet man die möglichen Zustände zum Gesamtspin $\mathcal{S} = \mathcal{S}^{(1)} + \mathcal{S}^{(2)}$ mit $|s, m_s\rangle$, so sieht man:

$|0, 0\rangle$ ist antisymmetrisch

$|1, m_s\rangle$ ist symmetrisch für $m_s = -1, 0, 1$

Beim Gesamtspin 1 kann daher zur symmetrischen Spinwellenfunktion nur eine antisymmetrische Ortswellenfunktion treten, die im Falle gleicher Ortszustände der beiden identischen Teilchen verschwindet. Dieser Ausschluß von absolut gleichen Zuständen identischer Teilchen bezeichnet man als *Pauli-Prinzip*. Zwei identische Teilchen müssen sich immer in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.

Man sieht dies z.B. am Quark-Modell:

Es besagt, daß Baryonen aus 3 Quarks aufgebaut sind. Ein Ω^- -Teilchen besteht z.B. aus drei s -Quarks: $\Omega^- = (s, s, s)$. Der scheinbare Verstoß gegen das Pauli-Prinzip wird hier durch eine zusätzliche Quantenzahl aufgehoben, der sogenannten Farbe der Quarks.

allgemeiner Fall

Wenn $|\psi\rangle$ ein N -Teilchen-Zustand in einem System mit Austauschentartung ist, dann ist der Zustand $\mathfrak{P}_\alpha|\psi\rangle$ für alle α äquivalent zu $|\psi\rangle$. Um die Austauschentartung aufzuheben, (anti-)symmetrisiert man:

(a) Symmetrisierung: mit $|\psi_S\rangle = \mathfrak{S}|\psi\rangle$ folgt:

$$\mathfrak{P}_\alpha|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$$

Damit ist $|\psi_S\rangle$ eindeutig und die Austauschentartung aufgehoben.

(b) Antisymmetrisierung: $|\psi_A\rangle = \mathfrak{A}|\psi\rangle$

$$\mathfrak{P}_\alpha|\psi_A\rangle = \Pi_\alpha|\psi_A\rangle$$

$\Rightarrow |\psi_A\rangle$ eindeutig

13.2.9 Slater-Determinante

Bei einem System aus N Fermionen läßt sich der antisymmetrische Zustand leicht angeben:

(a) Zweiteilchensystem:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1:n\rangle|2:m\rangle - |1:m\rangle|2:n\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{pmatrix} |1:n\rangle & |2:n\rangle \\ |1:m\rangle & |2:m\rangle \end{pmatrix}\end{aligned}$$

(b) Dreiteilchensystem:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{\alpha} \Pi_{\alpha} \mathfrak{P}_{\alpha} |1:n\rangle |2:m\rangle |3:k\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \det \begin{pmatrix} |1:n\rangle & |2:n\rangle & |3:n\rangle \\ |1:m\rangle & |2:m\rangle & |3:m\rangle \\ |1:k\rangle & |2:k\rangle & |3:k\rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(c) N -Teilchen-System:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} |1:n_1\rangle & |2:n_1\rangle & \cdots & |N:n_1\rangle \\ |1:n_2\rangle & |2:n_2\rangle & \cdots & |N:n_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |1:n_N\rangle & |2:n_N\rangle & \cdots & |N:n_N\rangle \end{pmatrix}$$

13.2.10 Austauschterm

Wir betrachten wieder einmal ein Zweiteilchensystem:

$$|\phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:\varphi\rangle |2:\chi\rangle \pm |1:\chi\rangle |2:\varphi\rangle)$$

\mathcal{A} sei eine Observable, d.h. $\mathcal{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ (in einem Einteilchenraum). Für die Basis $\{|1:n\rangle |2:m\rangle\}$ des Zweiteilchenraums ergibt sich für die Messung von \mathcal{A} die Frage:

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, für ein Teilchen a_k und für das andere a_j zu finden?

(I): Fall $a_k \neq a_j$ und $\langle k|j\rangle = 0$

Der entsprechende Zustand ist

$$|j,k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:j\rangle |2:k\rangle \pm |1:k\rangle |2:j\rangle)$$

und die Wahrscheinlichkeit damit: $P(a_j, a_k) = |\langle \phi_{\pm} | j, k \rangle|^2$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\pm} | j, k \rangle &= \frac{1}{2} ((1:\varphi | 2:\chi\rangle \pm (1:\chi | 2:\varphi\rangle) \cdot (|1:k\rangle |2:j\rangle \pm |1:j\rangle |2:k\rangle)) \\ &= \frac{1}{2} (\langle \varphi | k\rangle \langle \chi | j\rangle + \langle \varphi | k\rangle \langle \chi | j\rangle \pm \langle \chi | k\rangle \langle \varphi | j\rangle \pm \langle \chi | k\rangle \langle \varphi | j\rangle) \\ &= \underbrace{\langle \varphi | k\rangle \langle \chi | j\rangle}_{\text{direkter Term}} \pm \underbrace{\langle \varphi | j\rangle \langle \chi | k\rangle}_{\text{Austauschterm}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow P(a_j, a_k) = |\langle \varphi | k\rangle \langle \chi | j\rangle \pm \langle \varphi | j\rangle \langle \chi | k\rangle|^2$$

Vergleich: unterscheidbare Teilchen

Bei unterscheidbaren Teilchen mit einem allgemeinen Zustand

$$|\phi\rangle = |1:\varphi\rangle |2:\chi\rangle$$

kann man bei einer Messung ebenfalls nach der Wahrscheinlichkeit fragen, daß eines der beiden Resultate a_j und das andere a_k ist, ohne daß man versucht,

die Teilchen zu unterscheiden. In diesem Fall ist die Wahrscheinlichkeit aber, im Gegensatz zu oben:

$$P(a_j, a_k) = |\langle \varphi | j \rangle \langle \chi | k \rangle|^2 + |\langle \varphi | k \rangle \langle \chi | j \rangle|^2$$

(II): Identische Teilchen: $|j\rangle = |k\rangle \Rightarrow a_k = a_j$

Für Fermionen ergibt sich nach dem Pauli-Prinzip sofort: $|j, k\rangle = 0$.

Für Bosonen erhält man den symmetrischen und normierten Zustand

$$|j, j\rangle = |1 : j\rangle |2 : j\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit für diesen Zustand ist:

$$\begin{aligned} P(a_j, a_j) &= |\langle \phi_{\pm} | j, j \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1 : \varphi | \langle 2 : \chi | + \langle 1 : \chi | \langle 2 : \varphi |) | j, j \rangle \right|^2 \\ &= 2 |\langle \varphi | j \rangle \langle \chi | j \rangle|^2 \end{aligned}$$

13.2.11 Beispiel: Streuung identischer Teilchen

Bei der Streuung hat man im Schwerpunktsystem den Anfangszustand

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, \vec{p}\rangle |2, -\vec{p}\rangle \pm |1, -\vec{p}\rangle |2, \vec{p}\rangle)$$

und den Endzustand

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, \vec{p}'\rangle |2, -\vec{p}'\rangle \pm |1, -\vec{p}'\rangle |2, \vec{p}'\rangle)$$

(siehe auch Abb. 13.2)

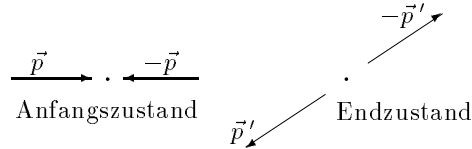


Abbildung 13.2: Anfangs- und Endzustand der Streuung

Die Zeitentwicklung des Anfangszustandes ist gegeben durch

$$|\psi_i(t)\rangle = \mathcal{U}(t) |\psi_i\rangle$$

und der Übergang zum Endzustand damit:

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \langle \psi_f | \mathcal{U}(\infty) | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle 1, \vec{p}' | \langle 2, -\vec{p}' | \pm \langle 1, -\vec{p}' | \langle 2, \vec{p}' |) \mathcal{U}(\infty) (|1, \vec{p}'\rangle |2, -\vec{p}'\rangle \pm |1, -\vec{p}'\rangle |2, \vec{p}'\rangle) \\ &= \langle 1, \vec{p}' | \langle 2, -\vec{p}' | \mathcal{U}(\infty) |1, \vec{p}\rangle |2, -\vec{p}\rangle \pm \langle 1, \vec{p}' | \langle 2, -\vec{p}' | \mathcal{U}(\infty) |1, -\vec{p}\rangle |2, \vec{p}\rangle \end{aligned}$$

Dies entspricht genau den beiden klassisch möglichen Wegen (siehe Abb. 13.1).

Index

- δ -Funktion, 8
- Antisymmetrisierungsoperator
 - allgemeiner, 100
 - Zweiteilchensystem, 99
- Anzahloperator, 42
- Atommodell
 - Bohr'sches, 4
- Austauschentartung, 97
 - Aufhebung der, 102
- Austauschterm, 103
- Bahnradius
 - Bohr'scher, 67
- Baker-Hausdorff-Identität, 23
- barn, 72
- Basis, 20
 - uneigentliche, 24
- Besselfunktionen, 76
- Cauchy-Schwarz-Ungleichung, 20
 - in Dirac-Notation, 27
- Compton-Effekt, 3
- Compton-Wellenlänge
 - des Elektrons, 68, 88
- de Broglie, 11
- Dirac-Notation, 25–27
 - adjungierter Operator, 26
 - Cauchy-Schwarz-Ungleichung, 27
 - Fouriertransformation, 27
 - Skalarprodukt, 25
- Dispersionsrelation, 6
- Drehimpuls, 52–63
 - Addition, 59
 - algebraische Behandlung, 55
 - Bahndrehimpuls, 52
 - Drehsymmetrie, 57
 - Eigenfunktionen des, 53
 - Eigenwertgleichungen, 54, 55
 - Singulett, 63
 - Triplet, 63
 - Vertauschungsrelationen, 53
- Drehungen, 59
- Dualraum, 25
- Ehrenfest-Theorem, 36
- Eigenfunktion, 14
- Eigenvektor, 22
 - antisymmetrischer, 98
 - symmetrischer, 98
- Eigenwert, 14, 22
 - Matrixdarstellung, 28
- Elektron
 - Compton-Wellenlänge, 68, 88
- Elektronenspin, 48
 - im homogenen \vec{B} -Feld, 49
- Emissionsspektren, 4
- Emissionsvermögen
 - spektrales, 2
- Energieeigenwerte
 - des isotropen 3-D HO, 70
 - des Wasserstoffatoms, 68
- Energiekorrekturen
 - entartet
 - 1. Ordnung, 84
 - nichtentartet
 - 1. Ordnung, 82
 - 2. Ordnung, 83
- Energieniveaus
 - des Wasserstoffatoms, 68
- Entartung, 31
 - beim Wasserstoffatom, 68
 - Reduktion des Wellenpakets, 31
 - Spektralzerlegung, 31
- Entartungsgrad
 - des isotropen 3-D HO, 70
 - des Wasserstoffatoms, 68
- Erwartungswert, 32
 - Zeitentwicklung von, 36
- Erzeuger, 42
- Feinstruktur

- beim Wasserstoffatom, 86
 - E-Korr. für $n = 2$, 92
 - Störungsterme, 86
- Feinstrukturkonstante
 - beim Wasserstoffatom, 68
- Fouriertransformation, 8
 - in Dirac-Notation, 27
- Fundamentallösung, 75
- Gruppengeschwindigkeit, 6
- Hamiltonfunktion
 - Hamiltonoperator, 12
 - des harmonischen Oszillators, 39
 - klassisch, 5
- Hamiltonoperator, 12
 - Zweiteilchensystem, 96
- harmonischer Oszillator
 - 1-D, 39
 - Grundzustand, 42
 - Hamiltonfunktion des, 39
 - isotroper 3-D, 69
 - Energieeigenwerte, 70
 - Entartungsgrad, 70
 - kartesische Koord., 69
 - Kugelkoord., 70
 - klassischer Grenzfall, 46
 - kohärenter Zustand, 44
 - Schrödingergleichung, 40
 - Lösung der, 41
 - Unschärfen
 - Grundzustand, 43
 - kohärente Zustände, 47
- Hauptquantenzahl, 68
- Hermite-Polynome, 41
- Hilbertraum, 19
- Hyperfeinstruktur
 - beim Wasserstoffatom, 93
 - Korrekturen für $n = 0$, 93
 - Störungsterm, 93
- identische Teilchen, 97
 - Austauschentartung, 97
 - Austauschterm, 103
 - Streuung, 104
- Impulsoperator, 12, 23
- Integralgleichung
 - der Streuung, 75
- Kommutator, 21
 - kanonischer, 23
- kompatibel, 32
- Konstante
 - der Bewegung, 36
- Kontinuitätsgleichung
 - für Wahrscheinlichkeitsdichte, 35
- Kugelflächenfunktionen, 53
 - Tabelle der, 54
- Kugelkoordinaten, 51
- Lagrangefunktion
 - Zweiteilchensystem, 95
 - in Relativkoordinaten, 95
- Landé-Faktor, 87
- Larmor-
 - Frequenz, 50
 - Präzession, 50
- Lenz-Runge-Vektor, 69
- Maxwellgleichungen, 5
- Mehrteilchensystem
 - Lagrangefunktion, 95
- Mehrteilchensysteme, 95–104
- minimum uncertainty states, 47
- Näherung
 - Born'sche, 76
- Observable, 30
 - bei identischen Teilchen, 99
 - kompatible, 32
- Operator
 - funktionen, 23
 - Absteige-, 42, 56
 - adjungierter, 21
 - in Dirac-Notation, 26
 - Matrixdarstellung, 29
 - Anzahl-, 42
 - Aufsteige-, 42, 56
 - Definition von, 21
 - Dreh-, 59
 - Eigenschaften des, 22
 - Erwartungswert, 32
 - Hamilton-, 12
 - Zweiteilchensystem, 96
 - hermitescher, 22
 - linearer, 21
 - Matrixdarstellung, 28–29
 - Eigenwerte, 28
 - Matrizelemente, 28

- Permutations-, 98
- Projektions-, 26
- selbstadjungierter, 22
- symmetrischer, 99
- Translations-
 - örtlicher, 58
 - zeitlicher, 58
- unitärer, 22
- Unschärfe, 33
- orthonormiert, 20
- Orthonormierung
 - Schmidt'sches Verfahren, 20
- Ortsoperator, 23, 24

- Parität, 40
- Partialwellen, 76
- Pauli-Matrix, 49
- Pauli-Prinzip, 102
- Permutationsoperator, 98
- Phasengeschwindigkeit, 6
- Phasenraum, 5
- Phasenverschiebung
 - von Partialwellen, 78
- photoelektrischer Effekt, 3
- Planck-Einstein-Relationen, 3
- Polynom
 - charakteristisches, 28
 - Hermite, 41
- Postulate der QM, 30–31
 - Entartung, 31
 - identische Teilchen, 31
- Produktraum, 60
 - Konstruktion des, 62
- Projektion, 26
- Projektionsoperator, 26

- quadratintegrabel, 11
- Quantisierungsregeln, 34

- Reflexionskoeffizient, 17
- Reihe
 - Born'sche, 76
- Relativkoordinaten, 95

- Schalen
 - des Wasserstoffatoms, 68
- Schrödingergleichung, 12
 - des freien Teilchens, 12
 - zeitunabhängige, 14
- Schwarzkörper-Strahlung, 2

- Schwerpunktskoordinaten, 95
- Skalarprodukt
 - des Hilbertraums, 19
 - in Dirac-Notation, 25
 - von Funktionen, 19
- Slater-Determinante, 102
- Spektralzerlegung, 8, 11
 - diskretes Spektrum, 30
 - entarteter Fall, 31
 - kontinuierliches Spektrum, 30
- Spektrum, 22
 - spherical harmonics, 53
- Spin-Statistik-Theorem, 101
- Spinmatrix
 - Pauli'sche, 49
- stationäre Zustände, 14
- Störungstheorie
 - Anwendbarkeit, 84
 - entartet
 - $|\psi\rangle$ -korr. 1. Ordnung, 84
 - E-korr. 1. Ordnung, 84
 - nichtentartet
 - $|\psi\rangle$ -korr. 1. Ordnung, 83
 - $|\psi\rangle$ -korr. 2. Ordnung, 83
 - E-korr. 1. Ordnung, 82
 - E-korr. 2. Ordnung, 83
 - zeitunabhängige, 81
- Streuamplitude, 73
 - Berechnung der, 74
 - durch Partialwellen, 79
- Streutheorie, 71–80
 - Born'sche Näherung, 76
 - Born'sche Reihe, 76
 - Integralgleichung, 75
 - Partialwellen, 76
 - optisches Theorem, 80
 - Phasenverschiebung, 78
 - Streuamplitude, 79
 - Unitaritätsgrenze, 79
 - Wirkungsquerschnitt, 79
 - stationäre Streuzustände, 73
 - Streuamplitude, 73
 - Streuamplitude, 73
 - Berechnung der, 74
 - Wirkungsquerschnitt, 72
 - differentieller, 72
 - totaler, 72
- Streuung
 - identische Teilchen, 104
- Streuversuch, 71

Streuzustände
 stationäre, 73
 Streuamplitude, 73
 Stufenpotential, 15
 Superpositionsprinzip, 6
 Symmetrisierung, 34
 Symmetrisierungsoperator
 allgemeiner, 100
 Zweiteilchensystem, 99

 Teilchen
 identische, 97
 Theorem
 optisches, 80
 Translationen
 der Zeit, 58
 des Ortes, 57
 Transmissionskoeffizient, 17
 Tunneleffekt, 17

 Unitaritätsgrenze
 bei Partialwellen, 79
 Unschärfe, 33
 Energie-Zeit, 33
 Ort-Impuls, 33
 Unschärferelation, 10
 Heisenberg'sche, 13

 Vektor
 vollständig antisymmetrischer, 100
 vollständig symmetrischer, 100
 Vektoren
 Bra-, 25
 Ket-, 25
 uneigentliche, 24
 Bra-, 27
 Ket-, 27
 Verhältnis
 gyromagnetisches, 48
 Vernichter, 42

 Wahrscheinlichkeit
 Erhaltung der, 35
 Wahrscheinlichkeitsdichte,
 Definition, 11
 Wahrscheinlichkeitsstrom, 35
 Wasserstoffatom, 67
 Energieeigenwerte, 68
 Energieniveaus, 68

 Entartung, 68
 Entartungsgrad, 68
 Feinstruktur, 86
 E-korr. für $n = 2$, 92
 Feinstrukturkonstante, 68
 Hauptquantenzahl, 68
 Hyperfeinstruktur, 93
 Schalen, 68
 Störungen, 86
 Tabelle der Radialfunktionen, 68
 Zeeman-Effekt, 93

 Wellen
 ebene, 6
 Wellenfunktion, 11
 Wellengleichung, 6
 Wellenpaket, 6
 Reduktion des, 31
 entarteter Fall, 31
 Wirkungsquerschnitt, 72
 differentieller, 72
 durch Partialwellen, 79
 totaler, 72
 durch Partialwellen, 79

 Zeeman-Effekt
 beim Wasserstoffatom, 93
 Störungsterm, 93
 Zeitentwicklung
 einer Wellenfunktion, 50
 eines Zustands, 31
 Zustand, 58
 Zentralpotential
 zeitunabhängiges, 65
 Zitterbewegung, 88
 Zustand
 kohärenter, 44
 Erzeugung durch unitären Operator, 45
 Unschärfen, 47
 Zeitentwicklung, 45
 minimaler Unschärfe, 47
 Präparation eines, 32
 Zeitentwicklung, 31, 58
 Zustandskorrekturen
 entartet
 1. Ordnung, 84
 nichtentartet
 1. Ordnung, 83
 2. Ordnung, 83
 Zustandsvektor

eindeutiger, 102
Zwei-Zustandssystem, 37
Zweiteilchensystem
 formale Aspekte, 97
 Lagrangefunktion, 95
 in Relativkoordinaten, 95
 Relativkoordinaten, 95
 Schwerpunktskoordinaten, 95