

Mitschrift zur Vorlesung

Quantenmechanik

U.-G. Meißner, J. Speth

Originalaufzeichnungen aus der Vorlesung 1997/1998,
aktualisiert mit der Vorlesung 2001/2002

gehalten an der Universität Bonn

Ausarbeitung & L^AT_EX-Satz: Lars Bähren (baehren@cip.physik.uni-bonn.de)
Letzte Änderung: 17. Mai 2002

Inhaltsverzeichnis

1	Grundgleichungen der Quantenmechanik	4
	Übungsaufgaben	8
2	Eindimensionale Quantensysteme	10
2.1	Der Potentialtopf	10
2.2	Der lineare harmonische Oszillator	16
	Übungsaufgaben	21
3	Quantenmechanische Grundbegriffe	26
3.1	Wahrscheinlichkeitsamplituden	26
3.2	Erwartungswerte und Mittelwerte	27
3.3	Der Ortsoperators in der Impulsraumdarstellung	28
3.4	Operatoren in der Quantenmechanik	29
3.5	Der lineare harmonische Oszillator ohne spezielle Darstellung	33
3.6	Wahrscheinlichkeit in der Quantenmechanik	38
	Übungsaufgaben	40
4	Das Zentralfeld-Problem	43
4.1	Quantentheorie des Drehimpulses	43
4.2	Der Drehimpuls in der Ortsraumdarstellung	53
4.3	Das sphärische Kastenpotential	58
4.4	Unendlich hoher Potentialwall	61
4.5	Teilchen im endlichen Potentialtopf	63
4.6	Der Kugeloszillator	65
4.7	Das Wasserstoff-Atom	67
4.8	Das BOHR'sche Magneton	74
	Übungsaufgaben	78
5	HILBERT-Raum und Operator-Methode	82
5.1	Grundlegende Definitionen	82
5.2	Vektoren im HILBERT-Raum	83
5.3	Operatoren im HILBERTraum	85
5.4	Lineare Operatoren als Matrizen	88
5.5	Interpretation des Meßprozesses	92
5.6	Unschärferelation	92
5.7	Zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems	93
5.8	Erwartungswert eines Operators	97
5.9	Wechselwirkungsbild	98

5.10	Zeitabhängigkeit des harmonischen Oszillators	99
5.11	Kohärenter Zustand in der Ortsdarstellung	100
5.12	Der quantenmechanische Propagator	102
	Übungsaufgaben	106
6	Pfadintegrale	109
6.1	Visualisierung des Propagators	109
6.2	Eindimensionale Pfadintegrale	110
	Übungsaufgaben	111
7	Dichte-Operator und Dichte-Matrix	114
7.1	Reine Zustände	114
7.2	Gemischte Zustände	116
8	Störungstheorie	118
8.1	Störungstheorie ohne Entartung	118
8.2	Der anharmonische Oszillator	122
8.3	Grundzustand des Helium Atoms	124
8.4	Störungstheorie mit Entartung	126
8.5	Der STARK-Effekt	129
	Übungsaufgaben	133
9	Bewegung eines geladenen Teilchens im EM-Feld	136
9.1	Der HAMILTON-Operator	136
9.2	Der Eigendrehimpuls (Spin) der Elementarteilchen	138
9.3	Die PAULI-Gleichung	141
9.4	Kopplung zweier Drehimpulse	143
9.5	Die Spin-Bahn Wechselwirkung in der Atom- und Kernphysik	145
9.6	Das Elektron im homogenen Magnetfeld	149
	Übungsaufgaben	152
10	Zeitabhängige Störungstheorie	153
10.1	Elementarer Zugang und "Goldene Regel"	153
10.2	Formaler Zugang: DYSON-Reihe	157
10.3	Pfadintegrale – Vektorpotentiale	158
10.4	Elektrische Streuung	160
10.5	Induzierte Emission und Absorption von Licht	162
10.6	Spontane Emission	166
	Übungsaufgaben	167
11	Streutheorie	169
11.1	Labor- und Schwerpunktsystem	169
11.2	Differentieller und Totaler Wirkungsquerschnitt	171
11.3	Quantenmechanische Berechnung	171
11.4	Transformation zwischen CMS und Labor-System	172
11.5	BORN'sche Näherung	173
11.6	Phasenanalyse	176
11.7	Resonanzen	176
11.8	Unitarität	176
	Übungsaufgaben	177

12 Aspekte der formalen Streutheorie	179
12.1 LIPPMAN-SCHWINGER-Gleichung	179
12.2 Die T -Matrix	181
12.3 Das Optische Theorem	181
12.4 Identische Teilchen	181
12.5 Beispiele	186
12.6 Der FOCK-Raum	187
Übungsaufgaben	187
13 Grundzüge der relativistischen Quantenmechanik	189
13.1 Prinzipien der nichtrelativistischen Theorie	189
13.2 Übergang zur relativistischen Theorie	190
13.3 KLEIN-GORDON-Gleichung	191
13.4 Die DIRAC-Gleichung	195
13.5 Erhaltungsgrößen	207
13.6 DIRAC-Teilchen in äußeren Potentialen	208
13.7 Beispiele	212
Übungsaufgaben	215
A Ergänzungen zur Vorlesung	218
A.1 Alternativer Einstieg in die relativistische Quantenmechanik	218
A.2 α, β -Formalismus	228
A.3 Vektor- und Operatorbeziehungen	235
B Klausuraufgaben	237
B.1 Erste Klausur zur Quantenmechanik I WS 1997/98	237
B.2 Zweite Klausur zur Quantenmechanik I WS 1997/98	239
B.3 Erste Klausur zur Quantenmechanik I WS 1989/90	241
B.4 Zweite Klausur zur Quantenmechanik I WS 1989/90	243
C Rechnungen zu den Übungsaufgaben	246
D Prüfungsprotokolle	265
Literaturverzeichnis	268

Grundgleichungen der Quantenmechanik

Vorbemerkungen Mit der Quantenmechanik betreten wir das Umfeld einer physikalischen Theorie, die in vielerlei Hinsicht mit fundamentalen Aussagen der klassischen Physik bricht. Wie sich im Rückblick eindrucksvoll zeigen läßt verdichteten sich zu Ende des 19. Jahrhunderts die Hinweis darauf, daß bisher verwendete, und in ihren Grundzügen auf NEWTON zurückgehende, klassische Physik nicht vollständig ist. Dies führte zur Formulierung zweier Theorien:

- der **Relativitätstheorie** und
- der **Quantentheorie**.

Dem Beispiel der MAXWELLSchen Theorie des Elektromagnetismus folgend, bemühen sich beide um eine grundlegende Beschreibung physikalischer Vorgänge.

Wie wir im folgenden sehen werden bildet die SCHRÖDINGERSche Wellengleichung den zentralen Ausgangspunkt der nichtrelativistischen Quantenmechanik; ihr kommt daher die Rolle *der* Grundgleichung zu. Dazu ist anzumerken, daß sich die Beschreibung sehr wohl aus experimentellen Befunden motivieren läßt, für den entscheidenden verallgemeinernden Schritt allerdings zunächst eine theoretische Vermutung ausgesprochen werden muß (eine Vorgehensweise, wie sie z.B. der Einführung des Verschiebungsstroms in der Elektrodynamik durch MAXWELL entspricht).

Die Quantentheorie (und auch ihre Erweiterungen in Form der Quantenelektrodynamik und Quantenfeldtheorie) hat sich bis heute als ein sehr erfolgreiche Theorie erwiesen. Dennoch können Fragestellungen in Hinblick auf ihre Interpretation und philosophischen Grundlagen nicht abschließend beantwortet werden; vielmehr ist dies unverändert Arbeitsgebiet aktueller Forschung.¹

Eigenschaften der Wellengleichung

In der Quantenmechanik wird das Verhalten eines physikalischen Systems beschrieben durch eine – im allgemeinen komplexwertige – *Wellenfunktion* $\psi(\mathbf{r}, t)$. Diese Wellenfunktion muß dann zu jeden Zeitpunkt t die, noch zu definierende, Bewegungsgleichung erfüllen. Aufgrund experimenteller Befunde muß diese neue Bewegungsgleichung folgende Eigenschaften besitzen:

¹ So ist gerade die Frage danach, ob die Quantenmechanik in der Lage ist, eine vollständige Beschreibung der physikalischen Wirklichkeit wiederzugeben (EINSTEIN, PODOLSKY, ROSEN 1935) immer wieder Gegenstand sowohl theoretischer (BELL 1964) als auch experimenteller (BRUKNER, ZUKOWSKI, ZEILINGER 2001) Untersuchungen.

1. Die Gleichung muß linear und homogen sein: dann gilt für die Lösungen das Superpositionsprinzip, welches die experimentell beobachtbaren Interferenzphänomene zuläßt. Das heißt also: sind ψ_1 und ψ_2 Lösungen, so ist es ebenfalls $\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2$.
2. Die Gleichung muß eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein; das bedeutet daß sich aus einem Anfangszustand zum einem Zeitpunkt t_0 durch geeignete Zeitentwicklung der Zustand des Systems zu einem späteren Zeitpunkt t ablesen läßt:

$$\psi(t_0) \rightarrow \psi(t) \quad \text{mit} \quad t < t_0$$

Diese Aussage muß allerdings in ihrer Anwendung auf den Meßprozeß in fundamentaler Weise eingeschränkt werden: in der klassischen Mechanik gibt es keinerlei prinzipielle Einschränkung in Bezug auf die gleichzeitige exakte Messung zweier Observablen. Für die Quantenmechanik wird sich zeigen, daß es für bestimmte Kombinationen von Observablen prinzipiell nicht möglich ist, diese simultan mit beliebiger Genauigkeit zu messen; wir werden hierauf bei der Behandlung der HEISENBERGSchen Unschärferelation zu sprechen kommen.

Die SCHRÖDINGER-Gleichung

Die NEWTONSchen Bewegungsgesetze der klassischen Punktmechanik werden in der Quantenmechanik ersetzt durch die

Zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

- (a) \hbar ist das PLANCKSche Wirkungsquantum geteilt durch 2π ; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.
- (b) m ist die Masse des Teilchens.
- (c) $V(\mathbf{r}, t)$ ist das Potential, in welchem sich das Teilchen bewegt.

Aus der Struktur wird direkt klar, daß (1.1) nicht relativistisch kovariant ist; zeitliche und räumliche Ableitung treten in unterschiedlicher Ordnung auf. Der spätere Ausbau der Theorie wird dann auf die DIRAC-Gleichung führen (Kapitel 13).

Um die Zeitabhängigkeit abzuseparieren machen wir jetzt den Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}, t) = f(t) \psi(\mathbf{r}) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \psi(\mathbf{r}) . \quad (1.2)$$

Durch Einsetzen in (1.1)

$$i\hbar \left(-i\frac{E}{\hbar} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi(\mathbf{r}) \right) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi(\mathbf{r}) = e^{-i\frac{E}{\hbar}Et} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right)$$

bekommen wir nach Abseparation der Zeitanhängigkeit die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) , \quad (1.3)$$

mit den Termen

$$\hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{und} \quad \hat{E}_{\text{pot}} = V(\mathbf{r}) .$$

Kombinieren wir den Operator für die kinetische Energie \hat{E}_{kin} mit dem Operator für die potentielle Energie \hat{E}_{pot} dann erhalten wir für die Gesamtenergie den HAMILTON-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) , \quad (1.4)$$

so daß sich (1.3) schreiben läßt als

$$\hat{H} \psi = E \psi . \quad (1.5)$$

Wir erhalten also eine Eigenwertgleichung für den Operator der Energie.

Analogie zur klassischen Mechanik

Es stellt sich natürlich jetzt die Frage nach der Möglichkeit die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) aus bekannten Prinzipien herzuleiten; so ergaben sich ja in der klassischen Punktmechanik die EULER-LAGRANGE-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_a} = 0 \quad (1.6)$$

und HAMILTON-Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_a = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_a} , \quad \dot{p}_a = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_a} \quad \text{mit} \quad \mathcal{H}(q, p, t) = \sum_a \dot{q}_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_a} - \mathcal{L}(q, p, t) \quad (1.7)$$

aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung. Es zeigt sich jedoch, daß keine derartige Herleitung für die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) aus den Gesetzen der klassischen Mechanik existiert. Was wir hingegen erwarten können, bzw. sogar fordern müssen, ist daß sich die klassischen Gesetze als Grenzfall der neuen quantenmechanischen Grundgleichung ergeben.²

Die Kombination des HAMILTON-Operators \hat{H} aus den beiden Operatoren \hat{E}_{kin} und \hat{E}_{pot} legt allerdings eine enge Verwandtschaft mit der klassischen HAMILTON-Funktion nahe:

$$\mathcal{H}(q, p, t) = \frac{1}{2m} \sum_a p_a^2 + V(q) \quad (1.8)$$

Eine noch stärkere Ähnlichkeit der Wellengleichung (1.1) ergibt sich aber mit der HAMILTON-JACOBI-Gleichung

$$H'(q, p = \frac{\partial S}{\partial q}, t) = \mathcal{H}(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 . \quad (1.9)$$

Für (1.8) ist nämlich

$$\frac{1}{2m} \sum_a \left(\frac{\partial S}{\partial q_a} \right)^2 + V(q) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

Die Versuchung liegt natürlich jetzt nahe, eine geeignetere Ersetzung für die verallgemeinerten Impulse p_a zu finden:

$$p_a \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_a} \quad \text{sowie} \quad S(q, p, t) \rightarrow \psi(\mathbf{r}, t)$$

² So stellt in der Tat das EHRENFEST Theorem den Zusammenhang zwischen quantenmechanischen Erwartungswerten und klassischen Teilchenbahnen her (siehe z.B. [14], 84–87).

Aber auch dies führt lediglich auf

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_a \frac{\partial^2}{\partial q_a^2} \psi + V(q) \psi = 0.$$

Als brauchbarer erweist sich das **Korrespondenz-Prinzip** (BOHR 1923), welches es in Reihe von Fällen erlaubt, den quantenmechanischen HAMILTON-Operator \hat{H} aus der klassischen HAMILTON-Funktion \mathcal{H} zu gewinnen. Wählen wir in (1.8)

$$q_1 = x \quad , \quad q_2 = y \quad , \quad q_3 = z$$

dann erhalten wir

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\mathbf{r})$$

Ersetzen wir jetzt die klassischen (Vektor-) Größen durch Operatoren

$$\mathcal{H} \rightarrow \hat{H} \quad \text{mit} \quad \mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad (1.10)$$

so erhalten wir in der Tat aus der HAMILTON-Funktion (1.8) den HAMILTON-Operator (1.4). Es muß allerdings angemerkt werden, daß diese Vorgehensweise nicht in jedem Fall funktioniert: Voraussetzung ist nämlich, daß (1.8) bereits alle zur Beschreibung des physikalischen Systems benötigten Größen enthält. Mit dem inneren Drehimpuls (Spin) werden wir aber später eine neue Größe kennenlernen, die über keine Parallele in der klassischen Physik verfügt.

Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion

Wie wir festgestellt haben, führen konkrete physikalische Probleme auf die Lösung von Differential- und Eigenwertgleichungen der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ bzw. $\psi(\mathbf{r})$. Damit ist allerdings noch nicht die Frage danach beantwortet, um was es sich jetzt aber genau bei dieser Wellenfunktion handelt.

Auch wenn sich diese Frage so nicht beantworten läßt, können wir doch zumindest eine Interpretation im Rahmen einer Wahrscheinlichkeit angeben:

- Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ entspricht einer *Wahrscheinlichkeitsamplitude*.
- Die beobachtbare Größe einer solchen Wahrscheinlichkeitsamplitude ist die *Wahrscheinlichkeit*

$$P(V, \psi, t) = \int_V \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3x \quad \text{mit} \quad \psi: \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{C} \quad (1.11)$$

das von der SCHRÖDINGER-Gleichung beschriebene Teilchen der Masse m in einem Volumenelement $V = [\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}]$ zu finden. Demnach stellt also

$$\psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

eine *Wahrscheinlichkeitsdichte* dar.

- Aufgrund der Wahrscheinlichkeitsinterpretation muß die Wellenfunktion die *Normierungsbedingung*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3x = 1 \quad (1.12)$$

erfüllen. Dies gilt insbesondere als Randbedingung für gebundene Systeme.

□ SPEZIELLE LITERATUR

-
- [1.1] G. ALBER, M. FREYBERGER, Physik. Blätter **55** (1999), 23
- [1.2] J.S. BELL, *On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox*, Physics I (1964), 195—200
- [1.3] N. BOHR, Zeitsch. f. Physik **13** (1923), 117
- [1.4] L. DEBROGLIE, Comptes Rendus **177** (1923), 507, 548, 630; Nature **112** (1923), 540; Thèse de doctorat, Paris 1924
- [1.5] C. BRUKNER, M. ZUKOWSKI, A. ZEILINGER, *The essence of entanglement*, quant-ph/0106119 (2001)
- [1.6] J.F. CLAUSER, M.A. HORNE, A. SHIMONY, R.A. HOLT, Phys. Rev. Lett. **23** (1969), 880
- [1.7] A. EINSTEIN, B. PODOLSKY, N. ROSEN, *Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?*, Phys. Rev. **47** (1935), 777
- [1.8] L.D. LANDAU, E.M. LIFSHITZ, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band I: Mechanik*, Akademie Verlag
- [1.9] E. SCHRÖDINGER, Ann. Phys. **79** (1926), 361, 489; *ibid.* **80** (1926), 437; *ibid.* **81** (1926), 109
- [1.10] G. WEIHS, T. JENNEWEIN, C. SIMON, H. WEINFURTER, A. ZEILINGER, *Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality conditions*, quant-ph/9810080 (1998)

Übungsaufgaben

Die mit [★] am Rand gekennzeichneten Übungsaufgaben waren nicht Bestandteil dieser Vorlesung.

[★]

Übung 1.1 – Klassische Mechanik – Quantenmechanik. In der (nicht-relativistischen) Quantenmechanik werden physikalische Systeme durch eine SCHRÖDINGER-Gleichung beschrieben, deren Lösungen, die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$, die zeitlich und räumliche Entwicklung des Systems beinhaltet. Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung kann aus der klassischen Mechanik “erraten” werden, wenn man die Wirkungswellen mit Materiewellen identifiziert, d.h. jedem Teilchen eine DEBROGLIE-Wellenlänge $\lambda = h/p$ zuordnet. Dabei ist $p(x)$ derjenige Impuls, den ein Teilchen der Energie E nach den Regeln der klassischen Mechanik am Ort x hätte.

Die für dynamische Probleme wichtige zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) kann *nicht* aus der klassischen Mechanik abgeleitet werden, da sie eine einfache Zeitableitung enthält. Allerdings kann man sie unter bestimmten Voraussetzungen auf die HAMILTON-JACOBI-Gleichung zurückführen.

(a) Zeigen Sie, daß der Ansatz

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, t)\right) \quad \text{mit} \quad S(x, t) = W(x) - Et$$

Die HAMILTON-JACOBI-Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (1.13)$$

für die Wirkungsfunktion $S(x, t)$ liefert, falls man einen Term vernachlässigt. Leiten Sie daraus die folgende Bedingung für diese Näherung aus der HAMILTON-JACOBI-Gleichung ab:

$$|p(x)|^3 \gg m\hbar \left| \frac{dV}{dx} \right|$$

Interpretieren Sie diese Bedingung.

- (b) Wie gut ist die soeben abgeleitete Bedingung für die nachfolgenden Systeme erfüllt und welche DEBROGLIE-Wellenlänge ergibt sich für sie?
1. Elektron: $m = m_e$, $V(x) = e^2/(2\pi\epsilon_0 x)$, $x = 1 \text{ \AA}$ und $E = 20 \text{ eV}$.
 2. Sauerstoff $^{16}\text{O} - ^{16}\text{O}$ System: $m_0 = 16 \text{ GeV}$, $x = 10 \text{ m}$ und $v = 180 \text{ km/h}$.
 3. Golfball: $m = 50 \text{ g}$, $V(x) = mgx$, $x = 10 \text{ m}$ und $v = 180 \text{ km/h}$.

Übung 1.2 – Lineare Algebra in endlichen Dimensionen. Sei $V \cong \mathbb{C}^n$ ein komplexer Vektorraum mit hermiteschem Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$.

- (a) Wiederholen Sie die Definition von „ $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist hermitesch“.
- (b) Sei $\{e_1, \dots, e_n\}$ eine Orthonormalbasis. Was ist $\langle e_i | e_j \rangle$? Geben Sie den Operator an, der auf den von $\{e_1, \dots, e_n\}$ aufgespannten Unterraum projiziert.
- (c) Zeigen Sie: Die Entwicklungskoeffizienten c_i eines beliebigen Vektors $x \in V$ wobei $x = \sum_{i=1}^n c_i e_i$ sind gegeben durch $c_i = \langle e_i | x \rangle$ und es gilt $\langle x | x \rangle = \sum_{i=1}^n c_i^* c_i$. Außerdem gilt: $\sum_{i=1}^n |e_i\rangle \langle e_i| = \mathbb{1}$ (Vollständigkeitsrelation).

Sei $A : V \rightarrow V$ eine lineare Abbildung, $\{e_1, \dots, e_n\}$ eine Orthonormalbasis (ONB). Zeigen Sie:

- (d) Hat A bezüglich $\{e_1, \dots, e_n\}$ die Matrix a_{ik} , so hat die hermitesch konjugierte Abbildung A^\dagger die Matrix $(a^\dagger)_{ik} = a_{ki}^*$.
- (e) Ist A hermitesch, so ist $\exp(iA)$ unitär.
- (f) Hermitesche oder unitäre Abbildungen sind „normal“, d.h. es gilt $AA^\dagger = A^\dagger A$.
- (g) Betrachten Sie eine normale Abbildung auf V mit einer ONB aus Eigenvektoren $\{e_1, \dots, e_n\}$, d.h. es gelte $A e_i = a_i e_i$, mit den Eigenwerten $a_i \in \mathbb{C}$. Zeigen Sie:

$$A \text{ hermitesch} \Rightarrow a_i \text{ reel} \quad \text{und} \quad A \text{ unitär} \Rightarrow |a_i| = 1$$

Eindimensionale Quantensysteme

Ist die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) einmal bekannt, besteht jetzt die Möglichkeit sich mit den Rechenvorschriften der Quantenmechanik vertraut zu machen. Im vorliegenden Kapitel werden wir zunächst einfache Quantensysteme vorstellen, die uns in ähnlicher Form später wiederbegegnen werden.

Für den eindimensionalen stationären Fall reduziert sich die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.1) auf

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) . \quad (2.1)$$

Lösungen hiervon werden wir jetzt für einige Potentiale $V(x)$ untersuchen.

2.1 Der Potentialtopf

Betrachten wir ein Potential der Art

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| > a \\ 0 & |x| \leq a \end{cases} \quad (2.2)$$

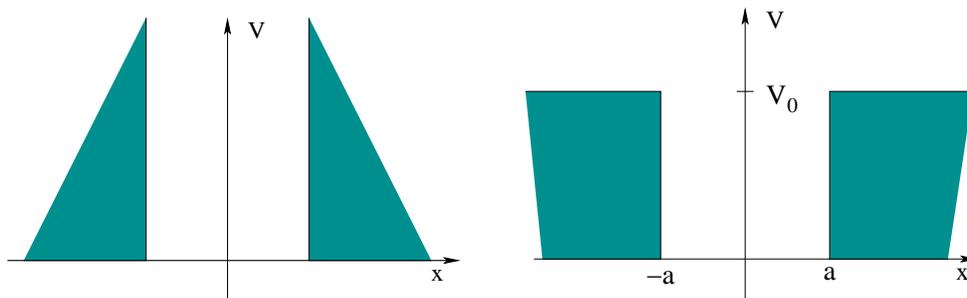


Abbildung 2.1: Potentialtöpfe: unendlicher und endlicher Fall.

Damit erhalten wir in Abhängigkeit von der Koordinate x zwei Teilprobleme (Abb. 2.1): die SCHRÖDINGER-Gleichung (2.1) zerfällt in

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) \psi(x) = 0 \quad \text{für } |x| \leq a, \quad V = 0$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right) \psi(x) = 0 \quad \text{für } |x| > a, \quad V = V_0$$

Bemerkungen:

- (a) Im Falle des unendlichen hohen Potentialtopfes ($V_0 \rightarrow \infty$) ist der Aufenthaltsbereich des Teilchen beschränkt auf $|x| \leq a$; somit gibt es ausschließlich gebundene Zustände. Hat das Potential aber eine endliche Höhe ($V(x) = V_0 < \infty$) so sind auch Zustände mit $E > V_0$ möglich – wir haben dann:

$$\begin{aligned} E < V_0 & \quad \text{gebundenes System} \\ E > V_0 & \quad \text{Streuproblem} \end{aligned}$$

Wir beschränken uns im folgenden auf gebundene Systeme.

- (b) Die Wellenfunktion ist normierbar, d.h. es gilt (1.12)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3x = 1$$

- (c) Die Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihre erste Ableitung $\psi'(x)$ sind stetig für alle x . Das heißt an einer Anschlußstelle $x = a$ muß gelten

$$\psi_-(a) = \psi_+(a) \quad \text{und} \quad \psi'_-(a) = \psi'_+(a)$$

Dies bedeutet im vorliegenden Fall insbesondere, daß die Lösungen an den Grenzen $|x| = a$ "glatt ineinander übergehen".

Führen wir jetzt die beiden Abkürzungen

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar} (V_0 - E) \quad \text{mit} \quad \alpha^2, \beta^2 > 0$$

ein, dann bekommen wir die beiden homogenen Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \begin{cases} +\alpha^2 \\ -\beta^2 \end{cases} \psi$$

Die allgemeinen Lösungen hierfür sind aber durchaus bekannt, nämlich:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x) & |x| \leq a \\ C e^{-\beta x} + D e^{\beta x} & |x| > a \end{cases} \quad (2.3)$$

Unendlich hoher Potentialtopf

Betrachten wir zunächst den einfacheren Fall, nämlich daß $V_0 \rightarrow \infty$. Wie bereits angemerkt, verschwindet in diesem Fall die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $|x| > a$, so daß ebenfalls $\psi(|x| > a) = 0$. Aus der Forderung nach Stetigkeit von $\psi(x)$ bei $x = \pm a$ folgt, daß

$$\psi(\pm a) = 0 \quad \rightarrow \quad \pm A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) = 0. \quad (2.4)$$

Trivial läßt sich dies natürlich lösen für $A = B = 0$. Da in diesem Fall aber die Wellenfunktion für alle x zu Null verschwinden würde, sind wir an Lösungen interessiert, die für $-a \leq x \leq a$ Werte ungleich Null annehmen:

$$\boxed{1} \quad A = 0 \text{ und } B \neq 0 \quad \rightarrow \quad \cos(\alpha a) = 0$$

$$\boxed{2} \quad B = 0 \text{ und } A \neq 0 \quad \rightarrow \quad \sin(\alpha a) = 0$$

Die Randbedingung bei $x = \pm a$ läßt sich erfüllen für:

$$\boxed{1} \quad \alpha a = \frac{\pi}{2} n \quad n \text{ ist ungerade, ganze Zahl}$$

$$\boxed{2} \quad \alpha a = \frac{\pi}{2} n \quad n \text{ ist gerade, ganze Zahl}$$

Da α ja verbunden war mit der Energie E , können wir also die zu einem n zugehörige Energie E_n berechnen:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad (2.5)$$

Wir erhalten also diskrete Energieeigenwerte E_n mit dem (energetisch tiefsten) Grundzustand¹

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} . \quad (2.6)$$

Aus den Energieeigenwerten lassen sich durch Rückeinsetzen wieder die Eigenfunktionen berechnen:

$$\boxed{1} \quad \psi_n(x) = B_n \cos \frac{n\pi}{2a} x \quad \text{für } n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\boxed{2} \quad \psi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi}{2a} x \quad \text{mit } n = 2, 4, 6, \dots$$

Vollständig bestimmt sind die Wellenfunktionen jetzt, wenn diese auch der Normierungsbedingung (1.12) genügen:

$$\begin{aligned} \int |\psi_n(x)|^2 dx &= 1 \\ \int B_n^2 \cos^2 \left(\frac{n\pi}{2a} x \right) dx &= B_n^2 \left[\frac{1}{2} x + \frac{1}{4} \frac{2a}{n\pi} \sin \left(2 \frac{n\pi}{2a} x \right) \right]_{-a}^a \\ &= B_n^2 \left\{ \frac{a}{2} + \frac{a}{2n\pi} \sin \left(\frac{n\pi}{a} a \right) + \frac{a}{2} - \frac{a}{2n\pi} \sin \left(\frac{n\pi}{a} (-a) \right) \right\} \\ &= B_n^2 \left\{ a + \frac{a}{2n\pi} (\sin(n\pi) - \sin(-n\pi)) \right\} \\ &= B_n^2 a \end{aligned}$$

Somit erhalten wir für die Normierungskonstanten:

$$A_n = B_n = \frac{1}{\sqrt{a}} .$$

Für die Wellenfunktionen finden wir jetzt noch eine interessante Eigenschaft; die Anwendung des Paritätsoperators P

$$\hat{P} \psi(x) = \psi(-x) = \pi \psi(x) \quad \text{mit } \pi = \pm 1$$

auf unsere Lösungen ergibt nämlich

¹ Die Möglichkeit $n = 0$ hatten wir ja ausgeschlossen, da sonst die Wellenfunktion auf ganz \mathbb{R} identisch null verschwinden würde.

- 1 $\psi(x) = \psi(-x) \Leftrightarrow \hat{P}\psi = +\psi$ positive Parität für $n = 1, 3, 5, \dots$
2 $\psi(x) = -\psi(-x) \Leftrightarrow \hat{P}\psi = -\psi$ negative Parität für $n = 2, 4, 6, \dots$

Durch Angabe der Quantenzahl n ist also die Paritätseigenschaft der Wellenfunktion vollständig definiert.

Eng zusammenhängend mit der Parität ist die Anzahl der Nullstellen bzw. Knotenpunkte der Wellenfunktion: sehr beliebt ist hier der Vergleich mit den Moden einer schwingenden Seite. Durch den Operator \hat{E}_{kin} entspricht dann die zweite Ableitung der Wellenfunktion (d.h. die Krümmung) der kinetischen Energie:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = E_{\text{kin}} \quad (2.7)$$

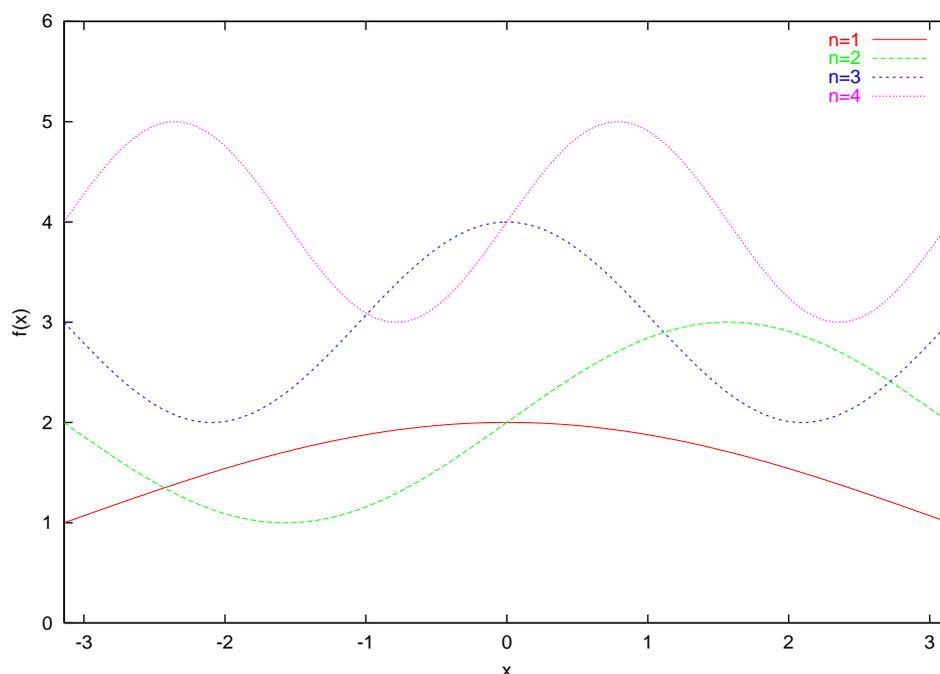


Abbildung 2.2: Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ für den unendlichen Potentialtopf. Der vertikale Offset wurde so gewählt, daß die Grundlinie der Quantenzahl n entspricht.

Anmerkung: Die hier angestellten Paritätüberbetrachtungen führen deshalb zum Erfolg, weil das Potential symmetrisch ist

$$V(x) = V(-x)$$

Damit ist dann auch der HAMILTON-Operator symmetrisch und die Anwendung einer Paritätstransformation auf eine Lösungen der Eigenwertgleichung liefert wieder eine Lösung.

Endlicher Potentialtopf

Für Potentialtopf mit endlicher Tiefe kommt ganz \mathbb{R} als Definitionsbereich der Wellenfunktion $\psi(x)$ in Betracht. Da die Wellenfunktion in den Bereichen mit $V \neq 0$ exponentiell abklingen muß um die Normier-

barkeit zu gewährleisten, erhalten wir folgenden Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} C \cdot e^{-\beta x} & x > a \\ A \cdot \sin(\alpha x) + B \cdot \cos(\alpha x) & |x| \leq a \\ D \cdot e^{\beta x} & x < a \end{cases} \quad (2.8)$$

Zusätzlich zu der Normierbarkeit

$$\int d^3x |\psi(x)|^2 = 1$$

muß noch die Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ an den beiden Stellen $x = \pm a$ gewährleistet sein:

(a) $\psi(x = \pm a)$

$$\begin{aligned} A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) &= C e^{-\beta a} & x = +a \\ -A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) &= D e^{-\beta a} & x = -a \end{aligned}$$

(b) $\psi'(x = \pm a)$

$$\begin{aligned} \alpha A \cos(\alpha a) - \alpha B \sin(\alpha a) &= -\beta C e^{-\beta a} & x = +a \\ \alpha A \cos(\alpha a) + \alpha B \sin(\alpha a) &= -\beta D e^{-\beta a} & x = -a \end{aligned}$$

Insgesamt bekommen wir also ein System von vier Gleichungen, aus dem sich die Konstanten A, B, C, D bestimmen lassen. Die Rechnung erweist sich allerdings als weitaus einfacher, wenn wir die bereits gefundenen Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion ausnutzen. Daraus folgt nämlich unmittelbar:

1 $\pi = +1 \rightarrow A = 0, B \neq 0, C = D$

2 $\pi = -1 \rightarrow B = 0, A \neq 0, C = -D$

Damit ist dann (2.8) in Abhängigkeit von der Parität:

$$\begin{aligned} \text{1} \quad \psi(x) &= \begin{cases} C e^{-\beta x} & x > a \\ B \cos(\alpha x) & |x| < a \\ C e^{\beta x} & x < -a \end{cases} & \text{2} \quad \psi(x) &= \begin{cases} C e^{-\beta x} & x > a \\ A \sin(\alpha x) & |x| < a \\ -C e^{\beta x} & x < -a \end{cases} \end{aligned}$$

Untersuchung der Stetigkeit ergibt dann:

1 $\psi(a)$ und $\psi'(a)$ sind gegeben durch

$$B \cos(\alpha a) = C e^{-\beta a} \quad \text{und} \quad \alpha B \sin(\alpha a) = \beta C e^{-\beta a}$$

Aus Division folgt:

$$\frac{\alpha \sin(\alpha a)}{\cos(\alpha a)} = \beta \quad \Leftrightarrow \quad (\alpha a) \tan(\alpha a) = \beta a$$

Führen wir jetzt neue Variablen $\xi = \alpha a$ und $\eta = \beta a$ ein; damit

$$\xi \tan \xi = \eta \quad (2.9)$$

Außerdem finden wir noch

$$B = C \frac{e^{-\beta a}}{\cos(\alpha a)}, \quad A = 0 \quad D = C$$

so daß wir jetzt alle Bedingungen für die Lösung mit positiver Parität zusammen haben.

2 Mit den Anschlußbedingungen

$$A \sin(\alpha a) = C e^{-\beta a} \quad \text{und} \quad \alpha A \cos(\alpha a) = -\beta C e^{-\beta a}$$

für $\psi(a)$ und $\psi'(a)$ erhalten wir

$$(\alpha a) \cot(\alpha a) = (\beta a) \quad \rightarrow \quad \xi \cot \xi = -\eta \quad (2.10)$$

sowie noch

$$A = C \frac{e^{-\beta a}}{\sin(\alpha a)}, \quad B = 0, \quad D = -C$$

so daß wir jetzt auch alle Bedingungen für die Lösungen mit negativer Parität zusammen haben.

Wir erhalten also zwei Lösungsgleichungen in den neuen Variablen ξ und η mit

$$\begin{aligned} \xi^2 &= \alpha^2 a^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 \\ \eta^2 &= \beta^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} a^2 (V_0 - E) \\ R^2 &= \xi^2 + \eta^2 = \eta \sqrt{1 + \tan^2 \eta} = \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0 \end{aligned}$$

Somit lassen sich ξ und η also vollständig durch Eigenschaften des Potentials (Breite a und Stärke V_0) und der Gesamtenergie E beschreiben. Lösungen (ξ_i, η_i) ergeben sich dann als Schnittpunkte der Funktionen $\xi(a, V_0, E)$, $\eta(a, V_0, E)$ und $R(a, V_0)$; wie in Abb. (2.3) zu erkennen ist, erhalten wir damit ein diskretes Spektrum von Energieeigenwerten E_n .

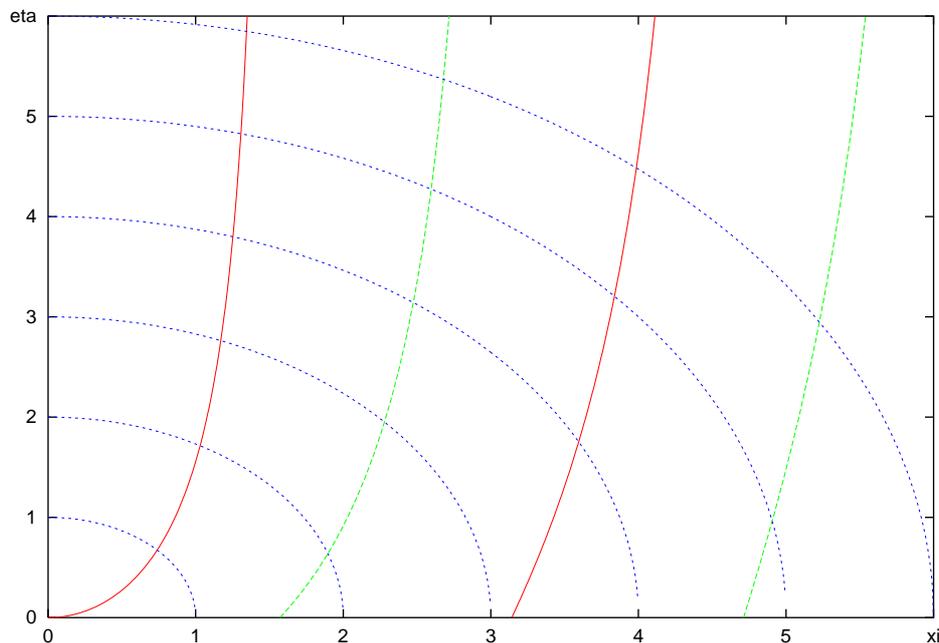


Abbildung 2.3: Graphische Lösung der Eigenwertgleichungen

Nachdem wir gezeigt haben, wie sich die Eigenwerte E_n mittels eines graphischen Lösungsverfahrens bestimmen lassen, fehlen jetzt noch die Eigenfunktionen ψ_n der Eigenwertgleichung

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

Wir erhalten:

$$\psi_n(x) = C_n \begin{cases} e^{\beta_n x} & x < -a \\ \frac{e^{-\beta_n a}}{\cos(\alpha_n a)} \cos(\alpha_n x) & |x| \leq a \\ e^{-\beta_n x} & x > a \end{cases} \quad (2.11)$$

$$\psi_n(x) = C_n \begin{cases} -e^{\beta_n x} & x < -a \\ \frac{e^{-\beta_n a}}{\sin(\alpha_n a)} \sin(\alpha_n x) & |x| \leq a \\ e^{-\beta_n x} & x > a \end{cases} \quad (2.12)$$

Die noch verbleibende Konstante C_n läßt sich jetzt aus mit der Normierungsbedingung bestimmen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = \int_{-\infty}^{-a} dx |\psi_n(x)|^2 + \int_{-a}^a dx |\psi_n(x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1$$

Beispielhaft für den Fall positiver Parität ist:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{-a} dx |\psi_n(x)|^2 + \int_{-a}^a dx |\psi_n(x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{-a} dx |C_n e^{\beta_n x}|^2 + \int_{-a}^a dx \left| C_n \frac{e^{-\beta_n a}}{\cos(\alpha_n a)} \cos(\alpha_n x) \right|^2 + \int_a^{\infty} dx |C_n e^{-\beta_n x}|^2 \\ &= C_n^2 \int_{-\infty}^{-a} dx e^{2\beta_n x} + C_n^2 \frac{e^{-2\beta_n a}}{\cos^2(\alpha_n a)} \int_{-a}^a dx \cos^2(\alpha_n x) + C_n^2 \int_a^{\infty} dx e^{-2\beta_n x} \\ &= \frac{C_n^2}{2\beta_n} \left[e^{2\beta_n x} \right]_{-\infty}^{-a} + C_n^2 \frac{e^{-2\beta_n a}}{\cos^2(\alpha_n a)} \left[\frac{x}{2} + \frac{1}{4\alpha_n} \sin(2\alpha_n x) \right]_{-a}^a - \frac{C_n^2}{2\beta_n} \left[e^{-2\beta_n x} \right]_a^{\infty} \\ &= \frac{C_n^2}{\beta_n} e^{-2\beta_n a} + C_n^2 \frac{e^{-2\beta_n a}}{\cos^2(\alpha_n a)} \left\{ a + \frac{\sin(2\alpha_n a)}{2\alpha_n a} \right\} \\ C_n &= \left\{ \frac{e^{-2\beta_n a}}{\beta_n} + \frac{e^{-2\beta_n a}}{\cos^2(\alpha_n a)} \left(a + \frac{\sin(2\alpha_n a)}{2\alpha_n a} \right) \right\}^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Somit haben wir also C_n als Funktion der Parameter α_n und β_n bestimmt.

2.2 Der lineare harmonische Oszillator

Für die klassische Bewegung eines Teilchens der Masse m in einem Potential (siehe Abb. 2.4)

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

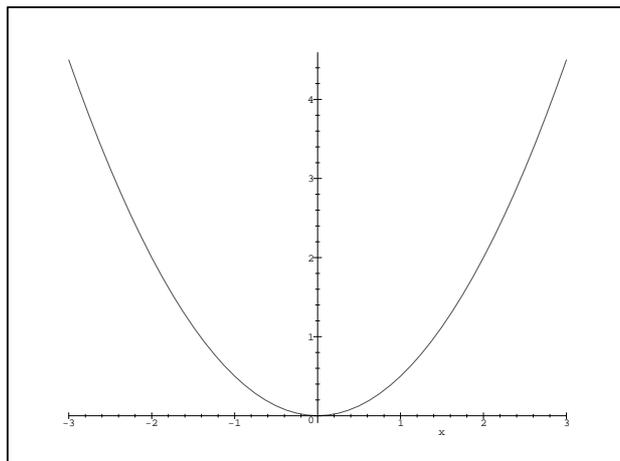


Abbildung 2.4: Linearer harmonischer Oszillator

ergibt sich die HAMILTON-Funktion

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 .$$

Mit den Ersetzungsvorschriften

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{und} \quad x \rightarrow \hat{x} = x$$

bekommen wir dann den entsprechenden quantenmechanischen HAMILTON-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

und damit die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.13)$$

Mit Hilfe der dimensionlosen Größen

$$\epsilon = \frac{x}{a_0} \quad , \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad , \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.14)$$

wird (2.13) zu

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + \frac{1}{2} z^2 \psi(z) = \varepsilon \psi(z) \quad (2.15)$$

Damit haben wir also physikalischen Inhalt des Problems formalisiert; Ziel muß es wieder sein, Lösungen der Differentialgleichung zu finden.

Lösung der Differentialgleichung Um uns die Suche nach einem geeigneten Lösungsansatz zu erleichtern, untersuchen wir zunächst das asymptotische Verhalten der Gleichung für die beiden Fälle $z \rightarrow 0$ bzw. $z \rightarrow \infty$.

Für den Fall, daß $z \rightarrow \infty$ mit $z^2 \gg \varepsilon$ bekommen wir

$$\frac{\partial \psi(z)^2}{\partial z^2} = z^2 \psi(z),$$

so daß wir wählen

$$\begin{aligned}\psi(z) &= A e^{\pm \frac{1}{2} z^2} \\ \psi'(z) &= \pm z A e^{\pm \frac{1}{2} z^2} \\ \psi''(z) &= \pm A e^{\pm \frac{1}{2} z^2} + z^2 A e^{\pm \frac{1}{2} z^2}\end{aligned}$$

Dabei können wir allerdings die Funktion mit positivem Vorzeichen direkt ausschließen, da diese nicht normierbar ist. Es bleibt also

$$\psi(z) = A e^{-\frac{1}{2} z^2}$$

und wir machen jetzt den Produktansatz

$$\psi(z) = H(z) e^{-\frac{1}{2} z^2}. \quad (2.16)$$

Setzen wir dies in (2.13) ein, so erhalten wir die folgende Differentialgleichung für $H(z)$:

$$\frac{d^2}{dz^2} H(z) - 2z \frac{d}{dz} H(z) + (2\varepsilon - 1) H(z) = 0 \quad (2.17)$$

Dies ist die HERMITESche Differentialgleichung mit den hermiteschen Polynomen $H(z)$ als Lösung. Dabei muß dann gelten, daß $(2\varepsilon - 1) = 2n$, mit $n \in \mathbb{N}$. Für die Funktion $H(z)$ machen wir jetzt den Potenzreihenansatz²

$$H(z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} z^{\nu} \quad (2.18)$$

Von diesem Ausdruck lassen sich nun die für die SCHRÖDINGER-Gleichung benötigten Terme berechnen:

$$\begin{aligned}H'(z) &= \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu} \nu z^{\nu-1} = \sum_{\mu+1=1}^{\infty} a_{\mu+1} (\mu+1) z^{\mu} = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_{\mu+1} (\mu+1) z^{\mu} \quad \curvearrowright \quad \mu = \nu - 1 \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu+1} (\nu+1) z^{\nu} \\ H''(z) &= \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu+1} (\nu+1) \nu z^{\nu-1} = \sum_{\mu+1=1}^{\infty} a_{\mu+1} (\mu+2) (\mu+1) z^{\mu} = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_{\mu+2} (\mu+2) (\mu+1) z^{\mu} \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu+2} (\nu+2) (\nu+1) z^{\nu} \\ z \cdot H'(z) &= z \cdot \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu+1} (\nu+1) z^{\nu} = \sum_{\nu=-1}^{\infty} a_{\nu+1} (\nu+1) z^{\nu} = \sum_{\mu=-1=-1}^{\infty} a_{\mu} \mu z^{\mu} = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_{\mu} \mu z^{\mu} \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \nu z^{\nu}\end{aligned}$$

² Diese Vorgehensweise ist auch unter dem Namen SOMMERFELDSche Polynommethode zu finden.

Setzen wir dies in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1)(\nu+2) a_{\nu+2} z^{\nu} - 2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu a_{\nu} z^{\nu} + (2\varepsilon-1) \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} z^{\nu} &= 0 \\ \sum_{\nu=0}^{\infty} [(\nu+1)(\nu+2) a_{\nu+2} - 2\nu a_{\nu} + (2\varepsilon-1) a_{\nu}] z^{\nu} &= 0 \\ (\nu+1)(\nu+2) a_{\nu+2} + 2\nu a_{\nu} + (2\varepsilon-1) a_{\nu} &= 0, \end{aligned}$$

so erhalten wir die Rekursionsformel

$$a_{\nu+2} = \frac{2\nu+1-2\varepsilon}{(\nu+1)(\nu+2)} a_{\nu} \quad (2.19)$$

mit den Lösungsklassen

(a) $a_0 \neq 0$ und damit alle geraden Funktionen z^{ν} mit a_2, a_4, \dots

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{1-2\varepsilon}{2} a_0 \\ a_4 &= \frac{5-2\varepsilon}{12} a_2 = \frac{(5-2\varepsilon)(1-2\varepsilon)}{24} a_0 \end{aligned}$$

(b) $a_1 \neq 0$ und damit alle ungeraden Funktionen z^{ν} mit a_3, a_5, \dots

$$a_3 = \frac{3-2\varepsilon}{6} a_1$$

Mit den so bestimmten a_{ν} muß $H_n(z)$ aber auch wieder das gefundene asymptotische Verhalten aufweisen. Für z^{ν} ist

$$a_{\nu+2} \simeq \frac{2\nu}{\nu^2} a_{\nu} = \frac{2}{\nu} a_{\nu} \quad ; \quad \nu \rightarrow \infty$$

Das heißt aber, daß sich der Exponentialanteil der Lösungsfunktion verhält wie

$$e^{z^2} \quad \text{bzw.} \quad z e^{z^2},$$

so daß für die Wellenfunktion

$$\psi(z) \rightarrow e^{z^2} e^{-\frac{1}{2}z^2} \rightarrow e^{\frac{1}{2}z^2} \quad \text{für} \quad \nu \rightarrow \infty$$

Das heißt also: wird ν in keiner Weise eingeschränkt, so wächst die Wellenfunktion $\psi(z)$ wie $\exp(\frac{1}{2}z^2)$ und ist damit nicht mehr normierbar; eine solche Funktion hatten wir aber von vorneherein als Lösung ausgeschlossen. Wir müssen also fordern, daß $H_n(z)$ endlich bleibt, was nur der Fall ist, wenn es ein $\nu = n < \infty$ gibt, bei dem die Rekursionsformel abbricht.

Diese Bedingung ist erfüllt wenn

$$2n+1-2\varepsilon = 0 \rightarrow \varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Die Lösungen ε_n sind dann also eindeutig festgelegt durch die Angabe der Zahl n , und da ε durch $\varepsilon = E/(\hbar\omega)$ verknüpft war mit der Energie E erhalten wir direkt das Spektrum der Energieeigenwerte für den linearen harmonischen Oszillator:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.20)$$

Dabei finden wir eine bemerkenswerte Eigenschaft: der harmonische Oszillator hat eine nichtverschwindende Nullpunktsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad ; \quad n = 0 .$$

Mit den Eigenwerten E_n lassen sich jetzt auch die Eigenfunktionen

$$\psi_n(z) = e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z)$$

bestimmen, wobei $H_n(z)$ die Differentialgleichung

$$H_n''(z) - 2zH_n'(z) + 2nH_n(z) = 0$$

erfüllen muß. Die Lösungen lassen sich dann auf zweierlei Weise gewinnen:

- (a) Einsetzen der a_ν aus der Rekursionsformel in die Potenzreihe für $H_n(z)$.
- (b) Berechnung der $H_n(z)$ aus der Erzeugendenfunktion

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{\partial^n}{\partial z^n} e^{-z^2} \quad (2.21)$$

In den niedrigsten Ordnungen erhalten wir damit

$$\begin{aligned} H_0(z) &= 1 \\ H_1(z) &= 2z \\ H_2(z) &= (2z)^2 - 2 \\ H_3(z) &= (2z)^3 - 6(2z) \end{aligned}$$

Die Zahl n gibt demnach den Grad des Polynoms an.

Die normierten Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators zum Eigenwert (2.20) sind dann

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (2.22)$$

Dabei zeigt sich eine Besonderheit: zu jedem Energieeigenwert E_n gehört nur eine Wellenfunktion ψ_n . Demnach liegt für den linearen harmonischen Oszillator keine Entartung vor. Wie wir später sehen werden, ist dies im dreidimensionalen Fall nicht mehr gegeben.

Anmerkungen

1. Energieeigenwerte und Wellenfunktionen für die niedrigsten Zustände sind:

$$\begin{array}{lll} n = 0 & E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega & \psi_0(x) = \alpha_0 e^{-\frac{z^2}{2}} \\ n = 1 & E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega & \psi_1(x) = \alpha_1 z e^{-\frac{z^2}{2}} \\ n = 2 & E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega & \psi_2(x) = \alpha_2 (2 - (2z)^2) e^{-\frac{z^2}{2}} \end{array}$$

2. Unter der einer Koordinatenspiegelung $(x) \rightarrow (-x)$ verhalten sich die HERMITESchen Polynome in folgender Weise:

$$H_n(-z) = (-1)^n H_n(z)$$

Die $H_n(z)$ sind demnach also Eigenfunktionen zum Paritätsoperator P und sind entweder symmetrisch (gerades n) oder antisymmetrisch (ungerades n).

3. Die Wellenfunktionen ψ_n bilden ein vollständiges System orthonormierter Funktionen:

$$\begin{array}{ll} \text{vollständig} & \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(y) = \delta(x-y) \\ \text{orthonormal} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \delta_{nm} \\ \text{normiert} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1 \end{array}$$

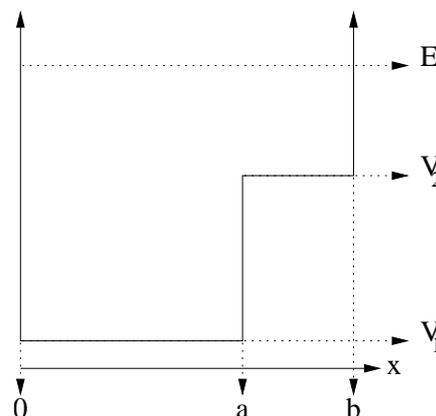
Das heißt insbesondere, daß sich Wellenfunktion vieler, allgemeinerer Potentiale nach den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators entwickeln lassen.

□ SPEZIELLE LITERATUR

- [2.1] CH. HERMITE, *Sur un nouveau développement en série de fonctions*, C. R. Acad. sc. Paris **58**, S. 93—100

Übungsaufgaben

Übung 2.1 – Potentialstufe. Geben Sie die Lösungen der eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung sowie die Eigenwertbedingung für die abgebildete Potentialstufe zwischen unendlich hohen Wänden an. Berechnen Sie die normierten Eigenfunktionen. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen im linken Bereich $0 < x < a$ und im rechten Bereich $a < x < b$ aufhält? Wie ändern sich die Resultate, falls $V_1 < E < V_2$ gilt?



Übung 2.2 – HERMITESCHE Polynome. Die HERMITESchen Polynome sind durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2} \quad (2.23)$$

(a) Beweisen die die Äquivalenz dieser Darstellung mit der Definition

$$H_n(x) = \left. \frac{\partial^n S(x, s)}{\partial s^n} \right|_{s=0} \quad \text{mit} \quad S(x, s) = e^{-s^2 + 2sx} .$$

(b) Zeigen Sie

$$\frac{\partial}{\partial x} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x) .$$

(c) Beweisen Sie die Orthogonalitätsrelation für die HERMITESchen Polynome

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} ,$$

indem Sie die Ordnung der Polynome durch partielle Integration reduzieren.

Übung 2.3 – Die Delta-Funktion. Zeigen Sie, daß die beiden Funktionenfolgen

$$f_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} \exp(-n^2 x^2) \quad \text{und} \quad g_n(x) = \frac{n}{\pi} \frac{1}{1 + n^2 x^2}$$

für $n \rightarrow \infty$ eine Darstellung der δ -Funktion liefern. Verwenden Sie dazu folgende Bedingungen, die die δ -Funktion bestimmen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1$$

und

$$\delta(x - x_0) = 0 \quad \text{falls} \quad x \neq x_0 .$$

Zeigen Sie, daß die δ -Funktion formal als erste Ableitung der Stufenfunktion

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

schreiben läßt.

Übung 2.4 – Eindimensionale Bewegung in einem δ -Potential. Betrachten Sie die eindimensionale Bewegung eines Teilchens der Masse m in einem δ -Potential:

$$V(x) = -V_0 \delta(x) \quad , \quad V_0 > 0$$

Berechnen Sie die normierten Eigenfunktionen der gebundenen Zustände. Wie viele gebundene Zustände gibt es in Abhängigkeit von V_0 ? Setzen Sie bei der Lösung voraus, daß die gesuchte Wellenfunktion $\psi(x)$ sich überall "physikalisch vernünftig" verhält, d.h. insbesondere eine statistische Interpretation zuläßt.

Übung 2.5 – HERMITESCHE Polynome. Die erzeugende Funktion der HERMITESchen Polynome $H_n(x)$ lautet

$$S(z, s) = e^{-s^2 + 2sz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n \quad (2.24)$$

Man kann die erzeugende Funktion zur Berechnung von Matrixelementen zwischen den Zuständen des harmonischen Oszillators verwenden, indem man Ausdrücke der Form $f(z)S(z, s)S(z, s')e^{-z^2}$ betrachtet. Integrieren Sie diese von $-\infty$ bis ∞ . Entwickeln Sie das Resultat in eine Potenzreihe in ss' und führen Sie einen Koeffizientenvergleich durch.

- (a) Zeigen Sie, daß das System der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(\alpha x) \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right), \quad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad (2.25)$$

orthonormiert ist.

- (b) Berechnen Sie die folgenden Matrixelemente zwischen den Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_m(x) dx \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x^2 \psi_m(x) dx .$$

- (c) Berechnen Sie die entsprechenden Matrixelemente für p und p^2 . Geben Sie $\Delta x \cdot \Delta p_x$ an.
 (d) Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie $\langle V(x) \rangle$ in jedem Zustand $\psi_n(x)$.

Übung 2.6 – Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Zeigen Sie die Orthogonalität der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des harmonischen Oszillators ohne die explizite Form der Eigenfunktionen zu verwenden. Benutzen Sie ausschließlich die Differentialgleichung.

Übung 2.7 – Diskrete Energieniveaus in einer Dimension. Wir betrachten die SCHRÖDINGER-Gleichung

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

in einer Raumdimension. $V(x)$ sei das Potential

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2 \alpha x}, \quad V_0 > 0, \alpha > 0$$

- (1) Verifizieren Sie die folgende Symmetrieeigenschaft des zugehörigen HAMILTON-Operators H : H vertauscht mit dem Paritätsoperator P

$$P f(x) = f(-x)$$

und H ist blockdiagonal, d.h.:

$$H = \frac{1}{4} (1 + P) H (1 + P) + \frac{1}{4} (1 - P) H (1 - P) .$$

Wann hat ein HAMILTON-Operator allgemein diese Eigenschaft?

- (2) Eine weitere Eigenschaft eindimensionaler quantenmechanischer Systeme ist, daß sie keine Entartung aufweisen. Beweisen Sie dies, indem Sie von zwei entarteten Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung, ϕ_1 und ϕ_2 , ausgehen und zeigen, daß sich diese nur um einen konstanten Faktor unterscheiden.

Hinweis: Bilden Sie die WRONSKI-Determinante

$$W(\phi_1, \phi_2; x) = \phi_1 \frac{\partial \phi_2}{\partial x} - \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \phi_2$$

Überprüfen und benutzen Sie die Tatsache, daß ihre Ableitung $\text{partial}_x W$ und auch W selbst verschwinden.

Nun soll mit Hilfe des Lösungsansatzes

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(x), \quad E \in \mathbb{R}, E < 0$$

stationäre Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung sowie das diskrete negative Energiespektrum bestimmt werden.

- (3) Zeigen Sie, daß mit der Substitution $\xi = \tanh \alpha x$ die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ (1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} \varphi \right\} + \left\{ s(s+1) - \frac{\varepsilon^2}{1 - \xi^2} \right\} \varphi = 0$$

wobei

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar\alpha}, \quad \frac{2mV_0}{\alpha^2 \hbar^2} = s(s+1), \quad s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right)$$

- (4) Um diese Gleichung zu lösen wird zunächst die Substitution

$$\varphi = (1 - \xi^2)^{\varepsilon/2} \omega(\xi)$$

durchgeführt. Zeigen Sie, daß dies auf die folgende Differentialgleichung für ω führt:

$$(1 - \xi^2) \omega'' - 2\xi(1 + \varepsilon) \omega' - (\varepsilon - s)(\varepsilon + s + 1) \omega = 0$$

- (5) Nun wird ω als Polynom angesetzt:

$$\omega(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Zeigen Sie, daß dann für die Koeffizienten a_l folgende Rekursionsformel gelten muß:

$$a_{k+2} = a_k \frac{k(k + 2\varepsilon + 1) + (\varepsilon - s)(\varepsilon + s + 1)}{(k + 2)(k + 1)}$$

Damit φ für $\xi = \pm 1$ (d.h. für $x = \pm\infty$) endlich bleibt (warum?), muß das Polynom endlich sein.

- (6) Zeigen Sie, daß aus dieser Abbruchbedingung $s = \varepsilon + n$ ($n \in \mathbb{N}$) und damit die diskreten Energieniveaus

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \left\{ -(1 + 2n) + \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right\}^2$$

folgen.

- (7) Wie viele Energieniveaus gibt es?

Übung 2.8 – Eindimensionaler Tunneleffekt. Wir betrachten wieder die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung

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

$V(x)$ sei eine rechteckige Potentialbarriere, d.h.

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

Mit Hilfe des Lösungsansatzes

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(x), \quad E \in \mathbb{R}$$

sollen für $E < V_0$ die stationären Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung bestimmt werden. Wir verlangen, daß $\varphi(x)$ überall stetig differenzierbar ist.

(1) Zeigen Sie, daß die Lösung folgende Form hat:

$$\varphi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & \text{falls } x \leq -a \\ C e^{k'x} + D e^{-k'x} & \text{falls } |x| < a \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx} & \text{falls } x \geq a \end{cases} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k' &= \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

wobei $A, B, C, D, F, G \in \mathbb{C}$.

3

Quantenmechanische Grundbegriffe

3.1 Wahrscheinlichkeitsamplituden

Mit der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ wird ein quantenmechanischer Zustand im Ortsraum beschrieben. Nach der Interpretation von HEISENBERG und BOHR enthält die Wellenfunktion dabei alle Informationen über ein physikalisches System, welches im Rahmen der Quantenmechanik zugänglich sind.¹

$\psi(\mathbf{r}, t)$ gibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude an, ein Teilchen bei den Koordinaten

$$x + dx, y + dy, z + dz, t + dt$$

zu finden. Ebenso ist es aber auch möglich, eine Messung im Impulsraum durchzuführen: $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ beschreibt dann ein Teilchen mit

$$p_x + dp_x, p_y + dp_y, p_z + dp_z, t + dt$$

Da sich sich beide Darstellungen stark ähneln, bietet sich die Frage an ob ein – und wenn ja welcher – Zusammenhang zwischen ihnen besteht.

Die einfachste Möglichkeit, beide Darstellungen miteinander zu verbinden, besteht über die Normierung: diese sollte unabhängig von der gewählten Darstellung – ob nun im Ort- oder im Impulsraum – erhalten sein. Wir fordern also, daß

$$\int d^3p |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 = 1 = \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 . \quad (3.1)$$

Dieser Ausdruck stellt aber nichts anderes dar, als die Aussage des PARSEVAL-Theorems der FOURIER-Theorie: dieses besagt, daß für eine Funktion $f(x)$ mit der FOURIERtransformierten

$$F(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{2\pi i x s} dx$$

die Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |F(s)|^2 ds$$

gilt. Wir stellen also die Hypothese auf, daß sich für die Darstellungen der Wellenfunktion ein ähnlicher Zusammenhang finden läßt:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \xrightarrow{\text{FT}} \psi(\mathbf{x}, t)$$

¹ Damit ist allerdings noch keine Aussage darüber gemacht, ob damit auch alle tatsächlichen physikalischen Eigenschaften erfaßt sind; dies ist der wesentliche Einwand von EINSTEIN-PODOLSKY-ROSEN.

FOURIERtransformationen

Sei $\psi(\mathbf{r}, t)$ die Darstellung der Wellenfunktion im Ortsraum und $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$ die entsprechende Darstellung im Impulsraum. Dann lassen sich bei Funktionen mittel einer FOURIERtransformation ineinander überführen:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (3.2)$$

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.3)$$

Definieren wir noch auf beiden Räume die DIRAC'sche Delta-Funktion

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) \quad (3.4)$$

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\right) \quad (3.5)$$

dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}\right) \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \underbrace{\int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\right)}_{(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \\ &= (2\pi\hbar)^{3/2} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \end{aligned}$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit betrachten wir im Folgenden nur stationäre Wellenfunktionen $\psi = \psi(\mathbf{r})$ und $\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(\mathbf{p})$.

Physikalische Bedeutung Prinzipiell macht es keinen Sinn mehr eine Aussage über das Verhalten eines einzelnen Teilchens machen zu wollen, da wir es mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu tun haben. Die Funktionen ψ und $\tilde{\psi}$ machen keine Aussagen über eine einzelne Messung sondern geben mit $|\psi|^2$ und $|\tilde{\psi}|^2$ lediglich die statistische Verteilung von N Meßwerten an. Ist dann $N \rightarrow \infty$ so reden wir auch von einer statistischen Gesamtheit.

3.2 Erwartungswerte und Mittelwerte

Der Erwartungswert beschreibt den bei mehrfacher Messung zu erwartenden Wert einer Observablen – z.B. $\mathbf{r}, \mathbf{p}, E$ – in einem Experiment. Für Meßwerte a_1, a_2, a_3, \dots mit der statistischen Häufigkeit w_1, w_2, w_3, \dots ist dann

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{i=1}^n a_i w_i && \text{für eine diskrete Verteilung} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} w(a) a da && \text{für eine kontinuierliche Verteilung} \end{aligned}$$

Sind also die Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r})$ bzw. $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ gegeben, dann läßt sich der Erwartungswert einer beliebigen Ortsfunktion (Impulsfunktion) $f(x, y, z) = f(\mathbf{r})$ berechnen durch:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r \quad (3.6)$$

$$\langle g(\mathbf{p}) \rangle = \int \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) g(\mathbf{p}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}) d^3p \quad (3.7)$$

Physikalisch sind dies wieder Mittelwerte einer Vielzahl von Messungen an N identischen Systemen.

Wenn wir jetzt Vergleiche mit einem Experiment machen wollen, so muß klar sein, in welcher Weise experimentell bestimmbare Größen (Observable) in mathematischen Rahmen der Quantenmechanik dargestellt werden:

In der Quantenmechanik wird einer Observablen A ein Operator \hat{A} in der Weise zugeordnet, so daß gilt

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d^3x \quad (3.8)$$

Bisher kennengelernt haben wir bereits den

Operator der Energie	E	\rightarrow	\hat{H} ,
Operator der Ortskoordinate	\mathbf{x}	\rightarrow	$\hat{\mathbf{x}}$,
Operator des Impulses	\mathbf{p}	\rightarrow	$-i\hbar\nabla$.

Außerdem haben wir gesehen, daß die Darstellung des Impulses im Impulsraum einfach durch $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}$ geschieht. Damit stellt sich dann aber auch die Frage, wie denn die Darstellung des Ortsoperators in der Impulsdarstellung aussieht; darauf werden wir im nächsten Abschnitt zu sprechen kommen.

Mittleres Schwankungsquadrat

Schreiben wir $\bar{A} = \langle A \rangle$, so ist

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \bar{A})^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (3.9)$$

Aus der Unschärferelation muß dann gelten

$$\sqrt{(\Delta \mathbf{x})^2} \sqrt{(\Delta \mathbf{p})^2} \geq \frac{1}{2}$$

3.3 Der Ortsoperators in der Impulsraumdarstellung

Ausschreiben der allgemeinen Definition für den Erwartungswert (3.8) für den Ortsoperator \mathbf{r} gibt zunächst

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int d^3r \psi(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) . \quad (3.10)$$

Die darin vorkommende Wellenfunktion läßt sich jetzt durch ihre FOURIERtransformierte ausdrücken:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &= \int d^3r \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \right] \mathbf{r} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p' e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \left[\int d^3p e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \right] \left[\int d^3p' \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \right] \end{aligned}$$

Betrachten wir zunächst die Integration über \mathbf{p}' : Differentiation des Ausdrucks unter dem zweiten Integral ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \left\{ \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \right\} &= \mathbf{r} \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') + \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \quad \curvearrowright \quad \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\mathbf{r}} \\ \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{p}') \right\} - \frac{\hbar}{i} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \end{aligned}$$

Integrieren wir nun hierüber, so erhalten wir eine Umformung für einen Teil unseres ursprünglichen Problems:

$$\int d^3 p' \mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}') = \int d^3 p' \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{p}') \right\} - \int d^3 p' \frac{\hbar}{i} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \frac{d}{d\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}')$$

Das erste Integral auf der rechten Seite lässt sich mit Hilfe des GAUSSSchen Satzes umformen; bei Auswertung über die ins Unendliche ausgedehnte Oberfläche verschwindet dieser Ausdruck. Damit bleibt dann nur noch

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r \int d^3 p \int d^3 p' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \left[-\frac{\hbar}{i} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}\right) \frac{d}{d\mathbf{p}'} \tilde{\psi}(\mathbf{p}')\right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r \int d^3 p \int d^3 p' \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}\right) \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}'}\right] \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \int d^3 p' \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}'}\right] (2\pi\hbar)^{3/2} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tilde{\psi}(\mathbf{p}') \\ &= \int d^3 p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}}\right] \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

Damit haben wir jetzt eine Darstellung des Ortsoperators im Impulsraum:

$$\mathbf{r} \Big|_p = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{p}} \quad (3.11)$$

Dies ist aber nichts anderes als der analoge Ausdruck wie für die Darstellung des Impulsoperators im Ortsraum

$$\hat{\mathbf{p}} \Big|_x = \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\mathbf{x}} \quad (3.12)$$

Für die Berechnung der Erwartungswerte gilt also:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &= \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) = \int d^3 p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) (i\hbar \nabla_p) \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \\ \langle \mathbf{p} \rangle &= \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_p) \psi(\mathbf{r}) = \int d^3 p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

Folgerung Physikalischen Observablen werden (lineare hermitesche) Operatoren zugeordnet, die abhängig von der Darstellung sind.

3.4 Operatoren in der Quantenmechanik

Lineare Operatoren \hat{A} wirken auf eine Linearkombination von Wellenfunktionen durch:

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2 \quad \text{mit } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Der Erwartungswert ist dann:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle_\psi &= \int \psi^*(x) (\hat{A}(x) \psi(x)) dx \\ \langle \hat{A} \rangle_{\psi^*} &= \int (\hat{A}(x) \psi(x)) \psi(x) dx\end{aligned}$$

Als adjungierten Operator definieren wir dann den Operator \hat{A}^\dagger , für welchen gilt:

$$\begin{aligned}\int (\hat{A}(x) \psi(x))^* \psi(x) dx &= \int \psi^*(x) (\hat{A}(x) \psi(x)) dx \\ \int \psi^*(x) \hat{A}^*(x) \psi(x) dx &= \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx\end{aligned}$$

Für hermitesche Operatoren (wie z.B. \hat{H}) gilt dann

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi^*} = \langle \hat{\psi} \rangle_\psi = \langle \hat{H}^\dagger \rangle_\psi$$

Für alle $\psi(x)$ soll dann gelten, daß

$$\int (\hat{H}(x) \psi(x))^* \psi(x) dx = \int \psi^*(x) (\hat{H}(x) \psi(x)) dx = \int \psi^*(x) (\hat{H}(x) \psi(x)) dx$$

Erfüllt \hat{H} dies Bedingung, muß also gelten daß $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.

DIRAC'sche Schreibweise für Skalarprodukte

Um im Folgenden die Schreibweise ein wenig zu vereinfachen und damit die Rechnungen übersichtlicher zu gestalten, verwenden wir die von DIRAC eingeführte Notation:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{A} \psi(\mathbf{x}, t) = \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle \quad (3.13)$$

Die damit neu eingeführten Symbole heißen

$$\begin{aligned}\text{bra} &: \langle \psi(t) | \hat{=} \psi^*(\mathbf{x}, t) \\ \text{ket} &: | \psi(t) \rangle \hat{=} \psi(\mathbf{x}, t)\end{aligned}$$

und hängen mit der Wellenfunktion in folgender Weise zusammen:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle \quad , \quad \psi^*(\mathbf{x}, t) = \langle \psi(t) | \mathbf{x} \rangle \quad (3.14)$$

Mit der Bezeichnung als Zustandsvektoren für $| \psi(t) \rangle$ und $\langle \psi(t) |$ ergibt sich, daß ein solcher Vektor die Menge aller Eigenfunktionen des Systems enthält:

$$\langle \psi(t) | = (\psi_1(t), \psi_2(t), \psi_3(t), \dots) \quad , \quad | \psi(t) \rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \\ \psi_3(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Damit bietet sich dann auch direkt eine vereinfachte Schreibweise für die Eigenfunktionen an:

$$\psi_n(\mathbf{x}) \rightarrow | n \rangle \quad \text{und} \quad \psi_m^*(\mathbf{x}) \rightarrow \langle m | \quad (3.16)$$

HERMITE'sche Operatoren

Die Verallgemeinerung des bereits eingeführten Ausdrucks für den Erwartungswert

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}) \mathbf{A} \psi(\mathbf{x}) d^3x = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle$$

eines Operators \mathbf{A} liefert das Matrixelement

$$\langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle^* .$$

Erfüllt der Operator jetzt die Beziehung $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$, so nennt man diesen **selbstadjungiert hermitesch**. Setzen wir nun noch $\psi_1 = \psi_2 = \psi$, dann erhalten wir insbesondere

$$\langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^* .$$

Die besondere Bedeutung hermitescher Operatoren liegt in ihrer Verknüpfung mit experimentell bestimm-
baren physikalischen Größen:

- (a) Observable werden durch hermitesche Operatoren dargestellt.
- (b) Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind reell.

Außerdem gilt: Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren bilden ein vollständiges orthonormiertes System mit

$$\begin{aligned} \langle \psi_\mu | \hat{H} | \psi_\mu \rangle &= \int \psi_\mu^*(x) \hat{H} \psi_\mu(x) dx = h_\mu \underbrace{\int \psi_\mu^*(x) \psi_\mu(x) dx}_{=1} \\ \langle \psi_\mu | \hat{H} | \psi_\nu \rangle &= \langle \psi_\mu | \psi_\nu \rangle \delta_{\mu\nu} . \end{aligned}$$

Das bedeutet: eine beliebige Wellenfunktion $\psi(x)$ läßt sich nach dem vollständigen System der Eigenfunktionen $\psi_\mu(x)$ entwickeln:

$$\psi(x) = \sum_{\mu} c_{\mu} \psi_{\mu}(x) \quad \text{mit} \quad c_{\mu} = \int \psi_{\mu}^*(x) \psi(x) dx$$

Daraus folgt dann unmittelbar, daß

$$\int \psi_{\lambda}^*(x) \psi(x) dx = \sum_{\mu} c_{\mu} \underbrace{\int \psi_{\lambda}^*(x) \psi_{\mu}(x) dx}_{\delta_{\lambda\mu}} = c_{\lambda} .$$

In der DIRAC-Schreibweise läßt sich jetzt in kompakter Form notieren

$$| \psi \rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} | \psi_{\mu} \rangle \quad \text{mit} \quad c_{\mu} = \langle \psi_{\mu} | \psi \rangle$$

Betrachten wir nun

$$\mathbf{A} | \psi_1 \rangle = a_1 | \psi_1 \rangle \quad , \quad \mathbf{A} | \psi_2 \rangle = a_2 | \psi_2 \rangle .$$

Daraus bekommen wir

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_2 | a_1 | \psi_1 \rangle = a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ \langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | a_2 | \psi_2 \rangle = a_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

mit der Differenz

$$\langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle - \langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle = (a_1 - a_2) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle .$$

Berücksichtigen wir jetzt noch, daß

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle &= a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \\ \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle^* &= a_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \\ (\langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle)^* &= a_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle &= a_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle , \end{aligned}$$

also

$$\langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle ,$$

dann haben wir für unsere begonnen Rechnung

$$\langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle - \langle \psi_2 | \mathbf{A} | \psi_1 \rangle = 0 = (a_1 - a_2) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle .$$

Da für die Eigenwerte aber gilt daß $a_1 \neq a_2$, folgt also

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0 .$$

Das heißt aber nichts anderes, als daß die zu \mathbf{A} gehörigen Eigenfunktionen ein orthogonales System bilden.

Kommutatoren

Die durch

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} \tag{3.17}$$

definierte Relation zwischen zwei Operatoren \mathbf{A}, \mathbf{B} heißt **Kommutatorrelation**.

(a) Für Impulsoperator \mathbf{P} und Ortskoordinate \mathbf{Q} in der Ortsdarstellung ist:

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_j] \psi(\mathbf{x}, t) &= \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}, x_j \right] \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} x_j - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial x_j}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}, t) + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}, t) - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \psi(\mathbf{x}, t) \\ [\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_j] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \end{aligned} \tag{3.18}$$

(b) Für \mathbf{P} und \mathbf{Q} in der Impulsdarstellung ergibt sich

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_j] \psi(\mathbf{x}, t) &= \left[P_i, -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_j} \right] \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \left(p_i \frac{\partial}{\partial p_j} - \frac{\partial}{\partial p_j} p_i \right) \psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar}{i} \left(p_i \frac{\partial}{\partial p_j} \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial p_i}{\partial p_j} \psi(\mathbf{x}, t) - p_i \frac{\partial}{\partial p_j} \psi(\mathbf{x}, t) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \psi(\mathbf{x}, t) \\
[\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_j] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \tag{3.19}
\end{aligned}$$

(c) Für eine beliebige Funktion $f(\mathbf{x})$ der Ortskoordinate ist in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}
[\mathbf{P}, f(\mathbf{x})] \psi(\mathbf{x}, t) &= \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, f(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \psi(\mathbf{x}, t) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) - f(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) \\
[\mathbf{P}, f(\mathbf{x})] &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \tag{3.20}
\end{aligned}$$

3.5 Der lineare harmonische Oszillator ohne spezielle Darstellung

Nachdem wir die Eigenwerte und Eigenfunktionen des linearen harmonischen Oszillators bereits aus der SCHRÖDINGER-Gleichung berechnet haben, wollen wir nun eine alternative Methode vorstellen, welche keinen Gebrauch einer speziellen Darstellung von Ort- und Impulsoperator macht.

Dazu sei zunächst noch einmal an DIRAC-Notation erinnert: Wir hatten gefunden, daß die Eigenfunktionen des linearen harmonischen Oszillators ein vollständiges System orthogonaler Funktionen mit Eigenwerten

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

bilden. Für zwei solche Funktionen ψ_n und ψ_m können wir auch schreiben

$$\left. \begin{array}{l} \psi_n \rightarrow |n\rangle \\ \psi_m^* \rightarrow \langle m| \end{array} \right\} \rightarrow \langle m | n \rangle = \delta_{mn}$$

Die Wellenfunktion des Grundzustandes schreibt sich demnach als $|0\rangle$.

Erzeugungs- und Vernichtungsoperator

Der HAMILTON-Operator für den linearen harmonischen Oszillator war

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2$$

mit dem Kommutator für Ortsoperator \hat{q} und Impulsoperator \hat{p}

$$[\hat{p}, \hat{q}] = \hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p} = -i\hbar$$

Dadurch motiviert führen wir jetzt als neue Größen den Erzeugungsoperator \hat{a} und den dazu adjungierten Vernichtungsoperator \hat{a}^\dagger ein:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{q} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \quad (3.21)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{q} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \quad (3.22)$$

Die so definierten Operatoren erfüllen

$$(ca)^* = c^* a^\dagger$$

und die Kommutatorrelation

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= \frac{1}{2\hbar} \left(m\omega \hat{q}^2 - i\hat{q}\hat{p} + i\hat{p}\hat{q} + \frac{\hat{p}^2}{m\omega} - m\omega \hat{q}^2 - i\hat{q}\hat{p} + i\hat{q}\hat{p} - \frac{\hat{p}^2}{m\omega} \right) \\ &= \frac{1}{2\hbar} (i\hat{q}\hat{p} + i\hat{p}\hat{q} - i\hat{q}\hat{p} + i\hat{p}\hat{q}) \\ &= \frac{i}{\hbar} (\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{q}] = 1 \end{aligned}$$

Wie wir noch sehen werden, haben beiden so definierten Operatoren gerade die Eigenschaft, daß die Erzeugung bzw. Vernichtung eines Quants mit Energie $(\hbar\omega)/2$ bewirken.

Um die so definierten Operatoren aber auch wirklich für den HAMILTON-Operator des linearen harmonischen Oszillators verwenden zu können, ist es nötig die Operatoren \hat{q} und \hat{p} durch die \hat{a}, \hat{a}^\dagger auszudrücken:

$$\begin{aligned} \hat{a} + \hat{a}^\dagger &= \frac{2}{\sqrt{2\hbar}} \sqrt{m\omega} \hat{q} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \hat{q} \\ \hat{q} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{q}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) \\ \hat{a} - \hat{a}^\dagger &= \frac{2i}{\sqrt{2\hbar}} \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} = i \sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}} \hat{p} \\ \hat{p} &= -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p}^2 &= -\frac{\hbar m\omega}{2} (\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) \end{aligned}$$

Einsetzen in den HAMILTON-Operator gibt jetzt

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2 \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - (\hat{a}^\dagger)^2) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} (2\hat{a}\hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger\hat{a}) \end{aligned}$$

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

Der im letzten Schritt neu eingeführte Operator

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (3.23)$$

heißt **Besetzungszahloperator**. Da alle weiteren Größen des HAMILTON-Operators Konstanten sind folgt aus der Hermitezität von \hat{H} daß auch \hat{n} ein hermitescher Operator ist. Mit diesem läßt sich die SCHRÖDINGER-Gleichung für den harmonischen Oszillator umschreiben:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\Psi(x) &= E\Psi(x) \\
\hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \Psi_n(x) &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \Psi_n(x) \\
\hat{n} | n \rangle &= n | n \rangle
\end{aligned} \quad (3.24)$$

Lösung des Eigenwertproblems

Für die Lösung des Eigenwertproblems ist jetzt zu zeigen, daß

- (a) $| n \rangle$ ist Eigenzustand zu \hat{n} und es gilt die Eigenwertgleichung

$$\hat{n} | n \rangle = n | n \rangle \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

- (b) Die beiden Operatoren \hat{a}^+ bzw. \hat{a} erfüllen die Eigenwertgleichungen

$$\hat{a}^+ | n \rangle = (n+1) | n \rangle \quad \text{bzw.} \quad \hat{a} | n \rangle = (n-1) | n \rangle \quad (3.26)$$

Zu Untersuchung der Eigenwerte von \hat{a}^+ und \hat{a} benötigen wir zunächst deren Kommutatoren mit \hat{n} . Unter Berücksichtigung, daß für drei Operatoren A, B und C gilt

$$[AB, C] = A [B, C] + [A, C] B$$

erhalten wir dann:

$$\begin{aligned}
[\hat{n}, \hat{a}] &= [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^+, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a} \quad \rightarrow \quad \hat{n}\hat{a} = \hat{a}\hat{n} - \hat{a} \\
[\hat{n}, \hat{a}^+] &= [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}^+] + [\hat{a}^+, \hat{a}^+] \hat{a} = \hat{a}^+ \quad \rightarrow \quad \hat{n}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{n} + \hat{a}^+
\end{aligned}$$

Angewendet auf einen Zustand $| n \rangle$ bekommen wir

$$\hat{n} (\hat{a}^+ | n \rangle) = \hat{a}^+ (\hat{n} | n \rangle) + \hat{a}^+ | n \rangle = (n+1) \hat{a}^+ | n \rangle$$

Demnach ist also $\hat{a}^+ | n \rangle$ Eigenzustand zum Eigenwert $(n+1)$. Analog dazu ist

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

Wir halten also fest:

$$\begin{aligned} \hat{a} | n \rangle &= c_{n-1} | n-1 \rangle \\ \hat{a}^+ | n \rangle &= c_{n+1} | n+1 \rangle \end{aligned}$$

Die beiden Zahlen c_{n-1} und c_{n+1} sind Normierungskonstanten; um diese zu bestimmen schreiben wir

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{n} | n \rangle &= n \langle n | n \rangle = \langle a | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle \\ &= c_{n-1} \langle n | \hat{a}^+ | n-1 \rangle \\ &= c_{n-1} \langle n-1 | \hat{a} | n \rangle^* \\ &= |c_{n-1}|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle \\ &= |c_{n-1}|^2 \end{aligned}$$

Somit ist c_{n-1} also bis auf einen globalen Phasenfaktor bestimmt:

$$c_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i\varphi}$$

Damit finden wir also

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

Vollkommen analog zu dieser Rechnung ergibt sich für \hat{a}^+

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{a} \hat{a}^+ | n \rangle &= | n \rangle (\hat{a} \hat{a}^+ + 1) | n \rangle = |c_{n+1}|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle \\ | n+1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ | n \rangle \end{aligned}$$

Als nächstes müssen wir zeigen, daß die Eigenwerte von \hat{n} nur Werte größer gleich Null annehmen ($n \geq 0$). Multiplikation der Eigenwertgleichung mit $\langle n |$ ergibt

$$\hat{n} | n \rangle = n | n \rangle \rightarrow \langle n | \hat{n} | n \rangle = n \langle n | n \rangle = n$$

Setzen wir jetzt noch die Definition von \hat{n} durch den Erzeugungs- und Vernichtungsoperator ein, so folgt:

$$\langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle = (\hat{a} | n \rangle)^* (\hat{a} | n \rangle) = |\hat{a} | n \rangle|^2 = |c_{n-1}|^2 \geq 0$$

! Hier muß eigentlich noch gezeigt werden, daß $n \in \mathbb{N}$.

Jetzt müssen wir allerdings nachprüfen, welches denn der kleinste Wert ist, den n annehmen kann. Dafür setzen wir

$$| n_{\min} \rangle = 0 \quad \text{mit} \quad \langle 0 | 0 \rangle = 1$$

Nochmalige Anwendung des Vernichtungsoperators \hat{a} gibt demnach

$$\hat{a} | n_{\min} \rangle = 0$$

Damit gilt aber auch

$$\langle n_{\min} | \hat{a}^+ \hat{a} | n_{\min} \rangle = \langle n_{\min} | \hat{n} | n_{\min} \rangle = n_{\min} = 0$$

Wegen

$$| n + 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^+ | n \rangle$$

können wir dann für den n -ten Zustand schreiben

$$\begin{aligned} | 1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}} \hat{a}^+ | 0 \rangle \\ | 2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{2}} (\hat{a}^+)^2 | 0 \rangle \\ | 3 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{3}} (\hat{a}^+)^3 | 0 \rangle \\ &\dots \\ | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n | 0 \rangle \end{aligned}$$

Für die Eigenwertgleichung folgt:

$$\hat{H} | n \rangle = E_n | n \rangle = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) | n \rangle \rightarrow E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Ortsdarstellung des Grundzustandes

Einsetzen der Ausdrücke für $\hat{q} = x$ und $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ in den Erzeugungsoperator \hat{a} ergibt

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{q} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} \frac{d}{dx} \right).$$

Damit können wir den Grundzustand

$$\hat{a} | 0 \rangle = 0$$

jetzt in folgender Weise umschreiben:

$$\begin{aligned} \hat{a} | 0 \rangle = 0 &= \int dx' \hat{a} | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle \\ \langle x | \hat{a} | 0 \rangle = 0 &= \int dx' \langle x | \hat{a} | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle \quad \curvearrowright \quad \langle x' | 0 \rangle = \psi_0(x') \\ &= \int dx' \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + \frac{x}{\sqrt{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \delta(x - x') \psi_0(x') \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) \end{aligned}$$

Für die Wellenfunktion des Grundzustandes erhalten wir also die Differentialgleichung

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

Wie sich dann direkt durch Einsetzen nachrechnen läßt ist die Lösung

$$\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.27)$$

die Wellenfunktion des Grundzustandes in der Ortendarstellung. Höher liegende Zustände lassen sich dann mittels des Erzeugungsoperators gewinnen:

$$\psi_1(x) = \hat{a} \psi_0(x) = \frac{C_1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega}x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad , \quad \dots \quad , \quad \psi_n(x) = (\hat{a})^n \psi_0(x)$$

3.6 Wahrscheinlichkeit in der Quantenmechanik

Bereits in Kapitel 1 wurde auf die Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeit eingegangen. An dieser Stelle gehen wir jetzt auf die Unterschiede zur Interpretation in der klassischen Physik ein.

- (a) Das grundlegende Konzept der Wahrscheinlichkeit ändert sich in der Quantenmechanik nicht; die Wahrscheinlichkeit P_i für das Eintreten von Ereignissen E_i ist gegeben durch

$$P_i = \frac{\text{Anzahl der Ergebnisse } E_i}{\text{Gesamtanzahl der möglichen Ergebnisse}}$$

- (b) Die Art in der Wahrscheinlichkeiten berechnet werden, unterscheidet sich fundamental von der in der klassischen Physik. Betrachten wir dazu ein mit Elektronen durchgeführtes Doppelspalt-Experiment: Klassisch bewegt sich das Elektron *entweder* durch Spalt 1 *oder* durch Spalt 2. Bezeichnet $P_1(x)$ die Wahrscheinlichkeit für den Durchgang des Elektrons durch Spalt 1 und $P_2(x)$ die Wahrscheinlichkeit für den Durchgang durch Spalt 2, dann ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem Schirm hinter dem Doppelspalt

$$P_{\text{klassisch}}(x) = P_1(x) + P_2(x)$$

Experimentell findet man allerdings ein anderes Ergebnis.

In der Quantenmechanik findet die Beschreibung zunächst durch **Wahrscheinlichkeitsamplituden**

$$\phi(x) = \phi_1(x) + \phi_2(x)$$

Die Wahrscheinlichkeit wird dann berechnet als

$$P(x) = |\phi(x)|^2 = \phi^*(x) \phi(x)$$

Demnach ergeben sich, als Neuerung gegenüber dem klassischen Bild, Interferenzterme zwischen den beiden Einzelwahrscheinlichkeiten

$$P_1(x) = |\phi_1(x)|^2 \quad \text{und} \quad P_2(x) = |\phi_2(x)|^2$$

- (c) Der Vorgang der Beobachtung selber hat Einfluß auf den Ausgang des Experiments. Bleiben wir bei dem Beispiel des Doppelspaltexperiments, so zerstört die gleichzeitige Beobachtung, durch welchen Spalt sich das Elektron bewegt, das Interferenzmuster.
- (d) Klassisch besteht prinzipiell die Möglichkeit zwei Meßgrößen mit beliebiger Genauigkeit zu bestimmen; dies ist in der Quantenmechanik nicht mehr möglich. Insbesondere verbietet die HEISENBERG'sche Unschärferelation prinzipiell die simultane exakte Messung bestimmter Kombinationen von Größen.

Der Unterschied zwischen klassischer und quantenmechanischer Wahrscheinlichkeit lässt sich auch anhand der Behandlung von möglichen Alternativen sehen:

(a) *Exklusive Alternative*

Für das angesprochene Doppelspaltexperiment sind Spalt 1 und Spalt 2 exklusive Alternativen, d.h. durch Schließen eines Spaltes oder Beobachtung des zurückgelegten Weges, lässt sich eine der Möglichkeiten ausschliessen. Das hierdurch gegebene Konzept ist das von klassischen Wahrscheinlichkeiten.

(b) *Interferierende Alternative*

Dies ist der Fall, wenn sich das Teilchen auf zwei oder mehreren Wegen bewegen kann, ohne das dabei mittels einer Messung versucht wird festzustellen, auf welchem Weg sich das Teilchen denn nun bewegt. Die Wahrscheinlichkeit wird dann gegeben durch das Quadrat einer additiv zusammengesetzten Wahrscheinlichkeitsamplitude.

$$P(x) = \left| \sum_i \phi_i(x) \right|^2$$

Stellen wir also für den Doppelspalt-Versuch die Frage, wie viele Elektronen auf einem Schirm im Bereich $[-1, 1]$ auftreffen, so erhalten wir

$$P([-1, 1]) = \int_{-1}^{+1} P(x) dx$$

Beispiel: Kern-Kern-Streuung im Schwerpunktsystem

Betrachten wir die Streuung von Kernen im Schwerpunktsystem (Abb. 3.1). Sei $\phi_{AB \rightarrow 12}$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Streuung des einlaufenden Teilchens A (B) nach 1 (2), analog dazu $\phi_{AB \rightarrow 21}$ für die Streuung A (B) nach 2 (1). Ferner sei

$$\phi_{AB \rightarrow 12} = \phi_{AB \rightarrow 21} .$$

Es gibt jetzt zwei Alternativen:

- (a) Für zwei verschiedene Teilchen $A \neq B$ sind die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$P_A = |\phi_{AB \rightarrow 12}|^2 \quad , \quad P_B = |\phi_{AB \rightarrow 21}|^2$$

und somit ist für die Messung eines Teilchens in Richtung 1

$$P_1 = P_A + P_B = 2P_A$$

- (b) Für zwei identische Teilchen $A = B$ ist keine Identifizierung mehr möglich, welches Teilchen nun in welche Richtung gestreut wurde. Demzufolge ergibt sich für die Beobachtungswahrscheinlichkeit eines Teilchens in Richtung 1

$$P_1 = |\phi_{AB \rightarrow 12} + \phi_{AB \rightarrow 21}|^2 = 4P_A$$

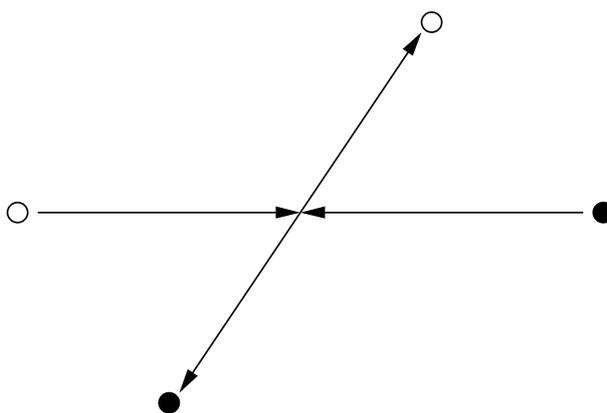


Abbildung 3.1: Kern-Kern-Streuung im CMS

□ SPEZIELLE LITERATUR

[3.1] R.N. BRACEWELL, *The Fourier Transform and its Applications*, McGraw-Hill 1978

Übungsaufgaben

Übung 3.1 – Kommutatoren. Der Kommutator zweier Operatoren **A** und **B** ist definiert durch

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A} .$$

Zeigen Sie:

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}, (\mathbf{B} + \mathbf{C})] &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \\ [\mathbf{A}, \mathbf{B} \mathbf{C}] &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \mathbf{C} + \mathbf{B} [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \\ [\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] &= 0 \end{aligned}$$

Übung 3.2 – Impulsraumdarstellung. Transformieren Sie die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung

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

in die Impulsdarstellung. Dabei ist

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx .$$

Geben Sie das Ergebnis für die Potentiale $V(x) = V_0 \cos(ax)$ und für ein beliebiges periodisches Potential, $V(x + b) = V(x)$, explizit an.

Übung 3.3 – Kommutatoren und Erwartungswerte. Gegeben sei ein vollständiger Satz von stationären Eigenzuständen des HAMILTON-Operators \mathbf{H} :

$$\mathbf{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots$$

1. Zeigen Sie, daß für einen beliebigen Operator \mathbf{A} gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) [\mathbf{A}, \mathbf{H}] \psi_n(x) dx = 0 .$$

2. Sei \mathbf{H} nun der HAMILTON-Operator eines Teilchens in einer Dimension mit einem beliebigen, differenzierbaren Potential $V(x)$.

(a) Berechnen Sie $[\mathbf{H}, \mathbf{P}]$, $[\mathbf{H}, \mathbf{X}]$ und $[\mathbf{H}, \mathbf{XP}]$

(b) Zeigen Sie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \mathbf{P} \psi_n(x) dx = 0$$

(c) Welcher Zusammenhang besteht zwischen dem Erwartungswert der kinetischen Energie

$$T_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \psi_n(x) dx$$

und dem Matrixelement

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \frac{\partial V(x)}{\partial x} \psi_n(x) dx \quad ?$$

(d) Stellen Sie den Zusammenhang her zwischen dem Erwartungswert der kinetischen Energie und dem Erwartungswert der potentiellen Energie

$$V_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) V(x) \psi_n(x) dx$$

für den Fall, daß das Potential die Form $V(x) = V_0 x^\lambda$ ($\lambda = 2, 4, \dots$) hat.

Übung 3.4 – Hermitesche Operatoren.

1. Untersuchen Sie, ob die Operatoren

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x \quad \text{und} \quad \mathbf{p}' = \hbar \nabla_x$$

hermitesch sind.

2. Es sei \mathbf{A} ein hermitescher Operator. Zeige, daß Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten orthogonal zueinander stehen.
3. Seien \mathbf{A}, \mathbf{B} hermitesch, $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$ und ϕ_a, ϕ_b Eigenzustände. Zeigen Sie, daß $\mathbf{B} \phi_a$ auch ein Eigenwert zu \mathbf{A} ist. Zeigen Sie, daß es ein System simultaner Eigenzustände von \mathbf{A} und \mathbf{B} gibt. Was bedeutet dies?

Übung 3.5 – Photonenzustände. Es beschreibe $|k\rangle = a^\dagger(k)|0\rangle$ ein Photon mit der Energie $\hbar\omega(k)$ und entsprechend $|k_1, k_2\rangle = a^\dagger(k_1)a^\dagger(k_2)|0\rangle$ zwei Photonen mit Energien $\hbar\omega(k_1)$ und $\hbar\omega(k_2)$, usw. Betrachten Sie den Operator

$$P = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar k a^\dagger(k) a(k)$$

und berechnen Sie die Kommutatoren $[P, a^\dagger(k)]$ und $[P, a(k)]$. Was ergibt also die Anwendung von P auf die Zustände $|k_1, k_2, \dots\rangle$?

Übung 3.6 – Erzeugende Funktion der Hermiteschen Polynome. Die erzeugende Funktion der hermiteschen Polynome $H_n(z)$ lautet

$$S(z, s) = e^{-s^2 + 2sz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n$$

Man kann die erzeugende Funktion zur Berechnung von Matrixelementen zwischen den Zuständen des harmonischen Oszillators verwenden, indem man Ausdrücke der Form

$$f(z)S(z, s)S(z, s')e^{-z^2}$$

betrachtet. Integrieren sie diese von $-\infty$ bis ∞ . Entwickeln sie das Resultat in eine Potenzreihe in ss' und führen sie einen Koeffizientenvergleich durch.

- (a) Zeigen sie, daß das System der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

orthonormiert ist.

- (b) Berechnen sie die folgenden Matrixelemente zwischen den Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_m(x) dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x^2 \psi_m(x) dx$$

- (c) Berechnen sie entsprechende Matrixelemente für p und p^2 . Geben Sie $\Delta x \cdot \Delta p_x$ an.
 (d) Berechnen sie den Erwartungswert der potentiellen Energie $\langle V(x) \rangle$ in jedem Zustand $\psi_n(x)$.

Das Zentralfeld-Problem

Für den Fall eines zentral-symmetrischen Feldes vereinfacht sich das Potential zu einer Funktion des radialen Abstandes allein:

$$V = V(|\mathbf{r}|) = V(r) \quad (4.1)$$

Die Kraft läßt sich demnach in folgender einfacher Weise, analog dem KEPLER-Problem der klassischen Mechanik, schreiben als

$$\mathbf{K} = -\nabla V(r) = f(r) \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.2)$$

Aus dem Energiesatz erhält man dann

$$E = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + V(|\mathbf{r}(t)|) \quad (4.3)$$

$$\frac{dE}{dt} = m\dot{\mathbf{r}}\ddot{\mathbf{r}} + \nabla V(r)\dot{\mathbf{r}} = (m\ddot{\mathbf{r}} + \nabla V(|\mathbf{r}|))\dot{\mathbf{r}} = 0 \quad (4.4)$$

Weiter gilt außerdem der Drehimpulssatz

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad \longrightarrow \quad \frac{d\mathbf{L}}{dt} = \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} = 0 \quad (4.5)$$

Für den Übergang zur Quantenmechanik verwendet man nun

$$\text{Energie} \longrightarrow \hat{H} \quad \text{Drehimpuls} \longrightarrow \hat{J}$$

Damit ist analog zur klassischen Mechanik

$$[\hat{H}, \hat{J}^2] = 0 \quad (4.6)$$

4.1 Quantentheorie des Drehimpulses

Klassisch ist der Drehimpuls gegeben durch

$$\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad \text{mit den Komponenten} \quad J_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k$$

Daran ändert sich auch in der Quantenmechanik prinzipiell nichts. Allerdings haben wir es nun nicht mehr mit Vektoren, sondern mit Operatoren zu tun. Ersetzen wir nach dem Korrespondenzprinzip

$$\mathbf{r} \rightarrow \hat{r} \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = -i\hbar \nabla_r = \frac{\hbar}{i} \nabla_r \quad (4.7)$$

so erhalten wir

$$\hat{J} = -i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla) , \quad (4.8)$$

oder bei Ausschreiben der einzelnen Komponenten:

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \quad \hat{J}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

Damit läßt sich also jetzt schon sehen, daß zwei unterschiedliche Komponenten nicht miteinander vertauschen:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = \hat{J}_i \hat{J}_k - \hat{J}_k \hat{J}_i \neq 0 \quad \text{für } P_i \neq P_k \quad (4.10)$$

Hierauf werden wir jetzt im Folgenden noch genauer eingehen.

Kommutierende Operatoren

Relationen, wie wir sie mit (4.10) eingeführt haben, sind in der Quantenmechanik von fundamentaler Bedeutung. So bezeichnet wir

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (4.11)$$

als den **Kommutator** zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} . Für zwei Operatoren gilt folgender

Satz

Wenn zwei hermitesche Operatoren kommutieren, d.h. die Relation (4.11) identisch Null erfüllen, dann besitzen sie ein vollständiges Orthogonalsystem gemeinsamer Eigenfunktionen.

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \hat{A}|n\rangle &= a_n|n\rangle \\ \hat{B}|n\rangle &= b_n|n\rangle \end{aligned}$$

Die zu \hat{A} und \hat{B} gehörenden Observablen können dann gleichzeitig beliebig genau gemessen werden.

Beweis: Wir zeigen nun den obigen Satz nacheinander in beide Richtungen.

(\Leftarrow) Gegeben sei zunächst ein vollständiges System orthonormaler Eigenfunktionen $|n\rangle$. Dann ergibt sich aus den Eigenwertgleichungen von \hat{A} und \hat{B} :

$$\begin{aligned} \hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle &\rightarrow \hat{B}\hat{A}|n\rangle = \hat{B}a_n|n\rangle = b_n a_n|n\rangle \\ \hat{B}|n\rangle = b_n|n\rangle &\rightarrow \hat{A}\hat{B}|n\rangle = \hat{A}b_n|n\rangle = a_n b_n|n\rangle \end{aligned}$$

Aus der Subtraktion der beiden Gleichungen erhalten wir dann

$$\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = 0 \quad \rightarrow \quad [\hat{B}, \hat{A}] = 0$$

Die beiden Operatoren \hat{A} und \hat{B} kommutieren also wie gefordert.

(\Rightarrow) Seien $|n\rangle$ und $|m\rangle$ zwei orthonormierte Eigenfunktionen. Dann gilt

$$\langle m | \hat{B} | n \rangle = \delta_{mn} \langle n | \hat{B} | n \rangle .$$

Verwenden wir dies bei Einfügen eine vollständigen Systems orthonomierter Funktionen, dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{B} &= \sum_m \sum_n |m\rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle \langle n | \\ &= \sum_m \sum_n |m\rangle \langle n | \hat{B} | n \rangle \langle n | n \rangle \delta_{mn} \\ &= \sum_m |m\rangle \langle m | \hat{B} | m \rangle \langle m | \end{aligned}$$

Wenden wir dies nun auf eine gemeinsame Eigenfunktion von \hat{A} und \hat{B} , mit $\hat{A} | n \rangle = a_n | n \rangle$, so finden wir:

$$\begin{aligned} \hat{B} | n \rangle &= \sum_m |m\rangle \langle m | \hat{B} | m \rangle \langle m | n \rangle \\ &= |n\rangle \langle n | \hat{B} | n \rangle \\ &= b_n |n\rangle \end{aligned}$$

Dabei ist

$$b_n = \langle n | \hat{B} | n \rangle$$

gerade der Eigenwert von \hat{B} zur gemeinsamen Eigenfunktion von \hat{A} und \hat{B} . \square

Bevor wir uns den Vertauschungsrelationen des Drehimpulsoperators zuwenden, betrachten wir noch folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC - CAB \\ &= ABC - CAB + ACB - ACB \\ &= A(BC - CB) + (AC - CA)B \\ &= A[B, C] + [A, C]B \end{aligned}$$

Wir finden also, daß

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (4.12)$$

was sich als nützlich für die Berechnung von Kommutatorrelationen mit dem Quadrat eines Operators erweisen wird. In gleicher Weise erhalten wir analog

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (4.13)$$

Kommutatorrelationen des Drehimpulses

Vertauschung zweier Komponenten. Berechnen wir nun also den Kommutator für Komponenten des Drehimpulses, wie wir es bereits in (4.10) angedeutet haben:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= [yP_z - zP_y, zP_x - xP_z] \\ &= [yP_z, zP_x] - [yP_z, xP_z] - [zP_y, zP_x] + [zP_y, xP_z] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= yP_z z P_y - zP_x y P_z - \underbrace{yP_z x P_z + xP_z y P_z}_{=0} - \underbrace{zP_y z P_x + zP_x z P_y + zP_y x P_z - xP_z z P_y}_{=0} \\
 &= y(P_z z - zP_x) P_x + x(zP_z - P_z z) P_y \\
 &= y[P_z, z] P_x + x[z, P_z] P_y \quad \curvearrowright \quad [z, P_z] = i\hbar \\
 &= i\hbar(xP_y - yP_x) \\
 &= i\hbar \hat{J}_z
 \end{aligned}$$

Damit können wir auch schreiben

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (4.14)$$

Vertauschung mit dem Drehimpulsquadrat. Welche Vertauschungsrelation läßt sich für das Quadrat des Drehimpulsoperators und eine weitere beliebige Komponente finden? Unter Berücksichtigung, daß

$$\hat{J}^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{J}_i^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$$

können wir schreiben:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = \left[\sum_{k=1}^3 \hat{J}_k^2, \hat{J}_i \right] = \sum_{k=1}^3 [\hat{J}_k \hat{J}_k, \hat{J}_i] = \sum_{k=1}^3 \hat{J}_k [\hat{J}_k, \hat{J}_i] + \sum_{k=1}^3 [\hat{J}_k, \hat{J}_i] \hat{J}_k$$

Für die verbleibenden Vertauschungsrelationen ergeben sich jetzt nach (4.14) folgende Möglichkeiten:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_i] = 0 \quad , \quad [\hat{J}_{i-1}, \hat{J}_i] = i\hbar \hat{J}_{i+1} \quad , \quad [\hat{J}_{i+1}, \hat{J}_i] = -i\hbar \hat{J}_{i-1}$$

Einsetzen ergibt dann:

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}^2, \hat{J}_k] &= \hat{J}_{k-1} [\hat{J}_{k-1}, \hat{J}_k] + \hat{J}_{k+1} [\hat{J}_{k+1}, \hat{J}_k] + [\hat{J}_{k-1}, \hat{J}_k] \hat{J}_{k-1} + [\hat{J}_{k+1}, \hat{J}_k] \hat{J}_{k+1} \\
 &= \hat{J}_{k-1} (i\hbar \hat{J}_{k+1}) + \hat{J}_{k+1} (-i\hbar \hat{J}_{k-1}) + (i\hbar \hat{J}_{k+1}) + (-i\hbar \hat{J}_{k-1}) \hat{J}_{k+1} \\
 &= i\hbar (\hat{J}_{k-1} \hat{J}_{k+1} - \hat{J}_{k+1} \hat{J}_{k-1} + \hat{J}_{k+1} \hat{J}_{k-1} - \hat{J}_{k-1} \hat{J}_{k+1}) \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Das bedeutet aber, daß es simultane Eigenfunktionen zu \hat{J}^2 und einer weiteren Komponente \hat{J}_i gibt; wir erhalten damit einen Satz von zwei Quantenzahlen

$$\hat{J}^2 | J_i M \rangle = a_j \hbar^2 | J_i M \rangle \quad , \quad \hat{J}_z | J_i M \rangle = b_M \hbar | J_i M \rangle \quad ,$$

wobei J und M sowohl ganzzahlige, als auch halbzahlige Werte annehmen können. Für \hat{J}_i wird, wie bereits angedeutet, häufig eine entsprechend orientierte z -Achse als ausgezeichnete Richtungskomponente benutzt.

Eigenwerte zum Drehimpulsoperator

Behauptung 1: Für die beiden soeben eingeführten Quantenzahlen a_j und b_M gilt:

$$a_j = J(J+1) \quad \text{und} \quad b_M = M \quad ,$$

wobei $-J \leq M \leq +J$.

Zur Vorbereitung des Beweises schieben wir allerdings einen Zwischenschritt ein. So definieren wir mit \hat{J}_x und \hat{J}_y zunächst die beiden **Leiteroperatoren**

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \quad \text{und} \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y . \quad (4.15)$$

Die hiermit möglichen Bildungen eines Produktes sind

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp &= (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \\ &= \hat{J}_x \hat{J}_x \mp i\hat{J}_x \hat{J}_y \pm i\hat{J}_y \hat{J}_x + \hat{J}_y \hat{J}_y \\ &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i(\hat{J}_y \hat{J}_x - \hat{J}_x \hat{J}_y) \quad \curvearrowright \quad -i\hbar \hat{J}_z \\ &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm \hbar \hat{J}_z \\ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar \hat{J}_z , \end{aligned} \quad (4.16)$$

so daß wir für den Kommutator von \hat{J}_+ und \hat{J}_- erhalten

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z) - (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) = 2\hbar \hat{J}_z \quad (4.17)$$

Dementsprechend bekommen wir für den Antikommutator¹

$$\{\hat{J}_+, \hat{J}_-\} = \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z) + (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) = 2(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2) \quad (4.18)$$

Aus der letzten Gleichung finden wir, daß sich \hat{J}^2 auch schreiben läßt als

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

Da es ja unser Vorhaben ist, die Eigenwerte von \hat{J}^2 und \hat{J}_z zu identifizieren, berechnen wir noch die zugehörigen Vertauschungsrelationen mit den Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] &= 0 \quad (4.19) \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] \\ &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] \\ &= i\hbar \hat{J}_y \pm i(-i\hbar \hat{J}_x) \\ &= \pm \hbar (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) \\ &= \pm \hbar \hat{J}_\pm \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die letztere Beziehung können wir noch in allgemeinerer Weise verstehen:

Behauptung 2: Für die z -Komponente \hat{J}_z des Drehimpulses und die n -te Potenz eines der Leiteroperatoren gilt:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm^n] = \pm n\hbar \hat{J}_\pm^n \quad (4.21)$$

¹ In den Büchern finden sich hierfür i.d.R. verschiedene Schreibweisen; so ist sowohl $[A, B]_+$ als auch $\{A, B\}$ eine gebräuchliche Notation für den Antikommutator.

Beweis: Wir verwenden vollständige Induktion. Für $n = 1$ haben wir die Beziehung ja bereits oben explizit berechnet. Für den Induktionsschritt $(n) \rightarrow (n + 1)$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm^{n+1}] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm^n \hat{J}_\pm] \\
 &= [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm^n] \hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm^n [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] \\
 &= (\pm n \hbar \hat{J}_\pm^n) \hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm^n (\pm \hbar \hat{J}_\pm) \\
 &= \pm n \hbar \hat{J}_\pm^{n+1} \pm \hbar \hat{J}_\pm^n \\
 &= \pm (n + 1) \hbar \hat{J}_\pm^{n+1}
 \end{aligned}$$

Damit haben wir also die Gültigkeit der obigen Behauptung 2 gezeigt. \square

An dieser Stelle können wir jetzt auch genauer erklären, warum wir die \hat{J}_\pm **Leiteroperatoren** genannt haben. Untersuchen wir nämlich die Wirkung von \hat{J}_z auch einen Zustand $|\hat{J}_\pm | J_i M \rangle$ so finden wir unter Benutzung der Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_z \hat{J}_\pm | J_i M \rangle &= (\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hbar \hat{J}_\pm) | J_i M \rangle \\
 &= \hat{J}_\pm \hat{J}_z | J_i M \rangle \pm \hbar \hat{J}_\pm | J_i M \rangle \\
 &= b_M \hbar \hat{J}_\pm | J_i M \rangle \pm \hbar \hat{J}_\pm | J_i M \rangle \\
 &= \hbar (b_M \pm 1) \hat{J}_\pm | J_i M \rangle
 \end{aligned}$$

Wir sehen also, daß die Anwendung von \hat{J}_\pm auf einen Eigenvektor von \hat{J}_z den Eigenwert um ± 1 verändert. Bei einer n -fachen Anwendung ergibt sich demnach also

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm^n | J_i M \rangle = \hbar (b_M \pm n) | J_i M \rangle ,$$

d.h. die Anwendung des Operators \hat{J}_\pm führt zu einer schrittweisen Bewegung auf der "Leiter" der Eigenwerte. Bei analoger Rechnung mit \hat{J}^2 finden wir

$$\hat{J}^2 \hat{J}_\pm | J_i M \rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}^2 | J_i M \rangle = \hbar^2 a_j \hat{J}_\pm | J_i M \rangle ,$$

d.h. die Eigenwerte des zum Quadrat des Drehimpulsoperators bleiben unverändert.

Wenden wir uns nun aber endlich wieder der Behauptung 1 vom Beginn dieses Abschnitts zu:

Beweis: (a) Wie wir gesehen haben, lassen sich die Eigenwerte zu \hat{J}_z mittels \hat{J}_\pm in Schritten von $\pm \hbar$ erhöhen bzw. erniedrigen. Die Frage ist dann natürlich, ob sich diese Operation in unbegrenzter Weise fortführen läßt. Wenn dies nicht der Fall ist, dann muß n sowohl nach oben *als auch* nach unten begrenzt sein.

Setzen wir jetzt $|\psi\rangle = |J_i M\rangle$. Dann ist der Erwartungswert für \hat{J}^2

$$\langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hbar^2 a_j | \psi \rangle = \hbar^2 a_j$$

oder ausgedrückt durch die Komponenten

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

Da aber die \hat{J}_i hermitesche Operatoren sind gilt $\hat{J}_i^\dagger = \hat{J}_i$ und damit

$$\langle \psi | \hat{J}_i^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{J}_i^\dagger \hat{J}_i | \psi \rangle = \left| \langle \hat{J}_i | \psi \rangle \right|^2$$

bzw. für \hat{J}^2

$$\langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle = \left| \langle \hat{J}_x | \psi \rangle \right|^2 + \left| \langle \hat{J}_y | \psi \rangle \right|^2 + \left| \langle \hat{J}_z | \psi \rangle \right|^2 \geq \left| \langle \hat{J}_z | \psi \rangle \right|^2$$

Für die Eigenwerte bedeutet die letzte Ungleichung aber, daß

$$\hbar^2 a_j \geq \hbar^2 b_M^2 \quad \rightarrow \quad \sqrt{a_j} \geq b_M \geq -\sqrt{a_j}$$

Das bedeutet also, daß die Eigenwerte zu \hat{J}_z durch die Eigenwerte zu \hat{J}^2 eingeschränkt werden.

(b) Bezeichnen wir nun mit M_{\max} (M_{\min}) die untere (obere) Schranke von M . Dann gilt für die erneute Anwendung von \hat{J}_+ (\hat{J}_-) auf einen Zustand mit maximalem (minimalem) M

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \hat{J}_+ | \alpha_j, M_{\max} \rangle &= \hbar (M_{\max} + 1) \hat{J}_+ | \alpha_j, M_{\max} \rangle = 0 \\ \hat{J}_z \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\min} \rangle &= \hbar (M_{\min} - 1) \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\min} \rangle = 0 \end{aligned}$$

Ebenso gilt aber auch

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ | \alpha_j, M_{\max} \rangle = 0 = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) | \alpha_j, M_{\max} \rangle = \hbar (\alpha_j - M_{\max}^2 - M_{\max})$$

so daß wir für α_j finden

$$\alpha_j = M_{\max} (M_{\max} + 1) .$$

In analoger Weise erhalten wir bei Vertauschung von \hat{J}_- und \hat{J}_+ und Anwendung auf $| \alpha_j, M_{\min} \rangle$

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\min} \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \alpha_j = M_{\min} (M_{\min} + 1) .$$

Die Eigenschaften der Leiteroperatoren ermöglichen noch einen weiteren Zusammenhang zwischen M_{\min} und M_{\max} :

$$\hat{J}_z \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\max} \rangle = \hbar (M_{\max} - n) \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\max} \rangle = \hbar m_{\min} \hat{J}_- | \alpha_j, M_{\max} \rangle$$

Nehmen wir nun die bisher gefundenen Eigenschaften von α_j zusammen, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \alpha_j &= M_{\max} (M_{\max} + 1) = M_{\min} (M_{\min} - 1) \\ &= (M_{\max} - n) (M_{\max} - n - 1) \\ &= M_{\max}^2 + n^2 - 2nM_{\max} + n - M_{\max} \end{aligned}$$

Daraus können wir nun eine Bedingung für M_{\max} ableiten:

$$\begin{aligned} M_{\max}^2 + M_{\max} &= M_{\max}^2 + n^2 - 2nM_{\max} + n - M_{\max} \\ 2M_{\max} &= n^2 - 2nM_{\max} + n \\ 2M_{\max}(1+n) &= n(n+1) \\ M_{\max} &= \frac{n}{2} \end{aligned}$$

Eine analoge Rechnung für M_{\min} liefert

$$M_{\min} = -\frac{n}{2}$$

Verwenden wir jetzt noch die durchaus gebräuchlichere Notation

$$J \equiv M_{\max} = \frac{n}{2} \quad , \quad -J \equiv M_{\min} = -\frac{n}{2}$$

dann erhalten wir endlich die gesuchte Eigenwertgleichung für \hat{J}^2 :

$$\hat{J}^2 | J, M \rangle = J(J+1) | J, M \rangle \tag{4.22}$$

□

Eigenwerte von \hat{J}_z

Eine direkte Herleitung der Eigenwertgleichung für den Drehimpulsoperator ergibt sich aus der Betrachtung der Eigenfunktionen [13]: Für die homogenen Polynome $F_{lm}(x)$ vom Grade l mit den Eigenschaften

$$F(\alpha x) = \alpha^l F(x) \quad , \quad \Delta F(x) = 0$$

ergibt sich bei Anwendung des Drehimpulsoperators \hat{J}_z

$$\hat{J}_z F_{lm} = \hbar m F_{lm}$$

Für ein gegebenes J kann M nun $(2J+1)$ Werte annehmen:

J	M
$1/2$	$-1/2, 1/2$
1	$-1, 0, 1$
$3/2$	$-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$
2	$-2, -1, 0, 1, 2$

Dieses Resultat läßt sich aber auch geometrisch interpretieren: Zum Drehimpulsquadrat

$$\hat{J} = \hbar \sqrt{J(J+1)}$$

gibt es $(2J+1)$ verschiedene Einstellmöglichkeiten der z -Komponente.

Normierung des Eigenfunktionensystems

Bilden die $| J, M \rangle$ ein orthogonales und normiertes Funktionensystem, so ist

$$\langle J', M' | J, M \rangle = \delta_{J'J} \delta_{M'M} .$$

Wie bereits gesehen ergibt die Anwendung eines der Leiteroperatoren auf eine Eigenfunktion

$$\hat{J}_\pm | J, M \rangle = c_\pm | J, M \pm 1 \rangle ,$$

wobei c_\pm eine noch zu bestimmende Proportionalitätskonstante ist. Damit erhalten wir aber auch

$$\langle J, M | \hat{J}_\pm^\dagger \hat{J}_\pm | J, M \rangle = |c_\pm|^2 \langle J, M | J, M \rangle = |c_\pm|^2 .$$

Der dabei benutzte Operator \hat{J}_\pm^\dagger läßt sich aber auch schreiben als

$$\hat{J}_\pm^\dagger = \left(\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y \right)^\dagger = \hat{J}_x^\dagger \mp i \hat{J}_y^\dagger = \hat{J}_x \mp i \hat{J}_y = \hat{J}_\mp ,$$

so daß alternativ

$$\begin{aligned} \langle J, M | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm | J, M \rangle &= \langle J, M | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z) | J, M \rangle \\ &= (\hbar^2 J(J+1) - \hbar^2 M^2 \mp \hbar^2 M) \langle J, M | J, M \rangle \\ &= \hbar^2 (J(J+1) - M^2 \mp M) . \end{aligned}$$

Damit können wir jetzt auch die Konstante c_\pm identifizieren:

$$\begin{aligned} |c_\pm|^2 &= \hbar^2 (J(J+1) - M^2 \mp M) \\ c_\pm &= \hbar \sqrt{J(J+1) - M^2 \mp M} = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} . \end{aligned}$$

Damit bekommen wir für zwei durch die Anwendung von \hat{J}_\pm auseinander hervorgehende Eigenfunktionen:

$$| J, M + 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{J(J+1) - M^2 \mp M}} \frac{\hat{J}_\pm}{\hbar} | J, M \rangle$$

Dies läßt sich jetzt noch weiter verallgemeinern: Wie wir ja gesehen hatten, nimmt M Werte zwischen $+J$ und $-J$ an; das bedeutet vor allen Dingen, daß sich Zustände $| J, M \rangle$ durch sukzessive Anwendung von \hat{J}_- auf $| J, J \rangle$ erzeugen lassen:

$$| J, M \rangle = \sqrt{\frac{(J+M)!}{(2J)!(J-M)!}} \left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar} \right)^{J-M} | J, J \rangle \quad (4.23)$$

Gleiches gilt natürlich auch für die entsprechende Anwendung von \hat{J}_+ auf $| J, -J \rangle$:

$$| J, M \rangle = \sqrt{\frac{(J-M)!}{(2J)!(J+M)!}} \left(\frac{\hat{J}_+}{\hbar} \right)^{J+M} | J, -J \rangle \quad (4.24)$$

Matrix-Darstellung des Drehimpulses

Schreibt man die Erwartungswerte von \hat{J}^2 und \hat{J}_z als Matrixelemente

$$\langle JM' | \hat{J}^2 | MJ \rangle = \hbar^2 J(J+1) \delta_{MM'} \quad (4.25)$$

$$\langle JM' | \hat{J}_z | JM \rangle = \hbar M \delta_{MM'} \quad (4.26)$$

So ergeben sich jeweils Matrizen in Diagonalform. Da

$$M' = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, J-1, J$$

$$M = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, J-1, J$$

hat die zugehörige Matrix die Gestalt

$$\begin{array}{c} -J \\ M' \downarrow \\ +J \end{array} \left(\begin{array}{ccc} & M \rightarrow & \\ \langle 1 | A | 1 \rangle & \langle 1 | A | 2 \rangle & \dots \\ \langle 2 | A | 1 \rangle & \langle 2 | A | 2 \rangle & \\ \langle 3 | A | 1 \rangle & \ddots & \\ \vdots & & \\ & & \ddots \end{array} \right) \begin{array}{c} +J \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}$$

Für die Leiteroperatoren \hat{J}_+ und \hat{J}_- ist analog

$$\langle JM' | \hat{J}_\pm | JM \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M'M \pm 1} \quad (4.27)$$

was sich aber mit

$$M'' = M \pm 1 \quad \longrightarrow \quad M = M'' \mp 1$$

umschreiben läßt zu

$$\begin{aligned} \langle JM | \hat{J}_\pm | J(M'' \mp 1) \rangle &= \hbar \sqrt{(J \mp (M'' \mp 1))(J \pm (M'' \mp 1) + 1)} \delta_{M'M''} \\ &= \hbar \sqrt{(J \mp M'' + 1)(J \pm M'' - 1 + 1)} \delta_{M'M''} \\ &= \hbar \sqrt{(J \mp M'' + 1)(J \pm M'')} \delta_{M'M''} \end{aligned}$$

(a) **Eigenzustände zu $\hat{J} = 1/2$**

Für $\hat{J} = 1/2$ gibt es zwei Zustandsvektoren, nämlich $|\frac{1}{2}, -1/2\rangle$ und $|\frac{1}{2}, 1/2\rangle$. Die Eigenzustände zu \hat{J}^2 sind dann:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}^2 | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}^2 | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\ = \frac{\hbar^2}{2} (\frac{1}{2} + 1) \\ = \frac{3}{4} \hbar^2 \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Für die Leiteroperatoren \hat{J}_\pm ergibt sich:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_+ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \sqrt{(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1)(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})} \\ = \hbar \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \hbar \sqrt{(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1)(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})} \\ = \hbar \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Bleiben also noch die Eigenwerte für eine einzelne Komponente \hat{J}_i : für \hat{J}_z erhalten wir

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \hat{J}_z | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = -\frac{\hbar}{2} \\ \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{J}_z | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \frac{\hbar}{2} \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

während sich \hat{J}_x und \hat{J}_y aus den Leiteroperatoren berechnen lassen:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-) = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(b) **Eigenzustände zu $\hat{J} = 1$**

Für $\hat{J} = 1$ ergeben sich drei Zustandsvektoren:

$$|1 \ -1\rangle, \quad |1 \ 0\rangle, \quad |1 \ 1\rangle$$

Für \hat{J}^2 und \hat{J}_z ist dann:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 1 \quad -1 | \hat{J}^2 | 1 \quad -1 \rangle = 2\hbar^2 \\ \langle 1 \quad 0 | \hat{J}^2 | 1 \quad 0 \rangle = 2\hbar^2 \\ \langle 1 \quad 1 | \hat{J}^2 | 1 \quad 1 \rangle = 2\hbar^2 \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 1 \quad -1 | \hat{J}_z | 1 \quad -1 \rangle = -\hbar \\ \langle 1 \quad 0 | \hat{J}_z | 1 \quad 0 \rangle = 0 \\ \langle 1 \quad 1 | \hat{J}_z | 1 \quad 1 \rangle = \hbar \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Für die Leiteroperatoren \hat{J}_{\pm} ergibt sich:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 1 \quad -1 | \hat{J}_+ | 1 \quad -2 \rangle = 0 \\ \langle 1 \quad 0 | \hat{J}_+ | 1 \quad -1 \rangle = \hbar\sqrt{(1-0+1)(1+0)} \\ \quad \quad \quad = \hbar\sqrt{2} \\ \langle 1 \quad 1 | \hat{J}_+ | 1 \quad 0 \rangle = \hbar\sqrt{(1-1+1)(1+1)} \\ \quad \quad \quad = \hbar\sqrt{2} \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 1 \quad -1 | \hat{J}_- | 1 \quad 0 \rangle = \hbar\sqrt{(1-1+1)(1+1)} \\ \quad \quad \quad = \hbar\sqrt{2} \\ \langle 1 \quad 0 | \hat{J}_- | 1 \quad 1 \rangle = \hbar\sqrt{(1+0+1)(1+0)} \\ \quad \quad \quad = \hbar\sqrt{2} \end{array} \right\} \rightarrow \hat{J}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

4.2 Der Drehimpuls in der Ortsraumdarstellung

Separation des LAPLACE-Operators

Wie bereits aus der klassischen Mechanik bekannt, kommt dem Drehimpuls im Falle eines radialsymmetrischen Potentials eine besondere Bedeutung zu: so läßt sich der Energiesatz schreiben als

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r) = \frac{1}{2m} (p_r^2 + p_\vartheta^2 + p_\varphi^2) + U(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + U(r)$$

Das heißt also, daß sich die Winkelanteile des Impulses mittels des Drehimpulsquadrates ausdrücken lassen.

Enger in Verbindung mit der Quantenmechanik steht aber die HAMILTON-Funktion

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + U(r) \quad (4.28)$$

Der Übergang zur SCHRÖDINGER-Gleichung vollzieht sich jetzt mittels des Korrespondenzprinzips, das heißt durch die Ersetzung klassischer (Vektor-) Größen durch die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren:

$$\mathbf{p}^2 \rightarrow \hat{p}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \quad (4.29)$$

Das bedeutet also, daß \hat{L} der dem klassischen Bahndrehimpuls l entsprechende quantenmechanische Operator sein muß. Um \hat{L} zu identifizieren, schreiben wir zunächst den LAPLACE-Operator Δ um auf Kugelkoordinaten: aus der Koordinatentransformation

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi \quad , \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi \quad , \quad z = r \cos \vartheta \quad (4.30)$$

folgt dann

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (4.31)$$

Demnach können wir den LAPLACE-Operator in zwei Anteile zerlegen:

(a) Die Ableitung nach dem Radius r allein ergibt

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

bzw. bei Anwendung auf eine Funktion $f(r)$

$$\hat{p}_r f(r) = -i\hbar \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) f(r) = -i\hbar \left(\frac{1}{r} f(r) + \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) = -i\hbar \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) f(r)$$

(b) Den Winkelanteil des LAPLACE-Operators können wir mit \hat{L}^2 identifizieren:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (4.32)$$

Zusätzlich zeichnen wir – wie schon im Falle von \hat{J} – wieder eine weitere Komponente in besonderer Weise aus:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (4.33)$$

Setzen wir nun den der vorliegenden Symmetrie angepaßten LAPLACE-Operator in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, so erhalten wir

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + U(r) \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \hbar^2 \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.34)$$

Durch einen geeigneten Lösungsansatz

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi) \quad (4.35)$$

ist es dann möglich, die SCHRÖDINGER-Gleichung zu separieren: wir bekommen eine Gleichung, die nur noch Radialanteile enthält und eine Gleichung, welche nur noch von den Winkeln ϑ und φ abhängt.

Kommutatorrelationen für \hat{L}

Die Verwandtschaft von \hat{L} mit \hat{J} legt es nahe, wieder nach einem Satz kommutierender Operatoren, bzw. simultaner Eigenfunktionen zu suchen. Wir erhalten:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \quad (4.36)$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \quad (4.37)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (4.38)$$

Das bedeutet nun im besonderen, daß sich die Wellenfunktion ψ durch einen Satz von drei Quantenzahlen charakterisieren läßt:

$$| \psi \rangle = | n, l, m \rangle = \psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.39)$$

wobei:

$$\begin{aligned} n &\equiv \widehat{H} && \text{Hauptquantenzahl} \\ l &\equiv \widehat{L} && \text{Drehimpulsquantenzahl} \\ m &\equiv \widehat{L}_z && \text{Magnetquantenzahl} \end{aligned}$$

Eigenwerte und Eigenfunktionen zu \widehat{L}^2 und \widehat{L}_z .

(a) Analog zu

$$\widehat{J}_z | J, M \rangle = \hbar M | J, M \rangle$$

erhalten wir unter Berücksichtigung des Separationsansatzes für ψ

$$\widehat{L}_z \Phi(\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = \hbar m \Phi(\varphi)$$

Diese Gleichung wird gelöst durch den Ansatz

$$\Phi(\varphi) = N \cdot e^{im\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} .$$

Behauptung: m ist ganzzahlig, also $m \in \mathbb{Z}$.

Beweis: Wir bemerken zunächst, daß $\Phi(\varphi)$ periodisch ist mit

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) .$$

Demnach ist Φ nicht in eindeutiger Weise definierbar, da die zusätzliche Phase ja bei der Berechnung des Erwartungswertes entfällt.

Wie schon bei \widehat{J} definieren wir jetzt wieder zwei Leiteroperatoren

$$\widehat{L}_{\pm} = \pm e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} \pm i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) .$$

Angewendet auf eine Funktion

$$f_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi}$$

bei maximalen Werten $|m| = l$ ergibt sich erwartungsgemäß

$$\widehat{L}_{\pm} f_{l,\pm l}(\vartheta, \varphi) = 0 ,$$

woraus wir erhalten:

$$\begin{aligned} \pm e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} \pm i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{l,\pm l}(\vartheta) e^{\pm il\varphi} &= 0 \\ \pm e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} Y_{l,\pm l}(\vartheta) e^{\pm il\varphi} + i e^{\pm i\varphi} \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,\pm l}(\vartheta) e^{\pm il\varphi} &= 0 \\ e^{\pm i\varphi(l+1)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} Y_{l,\pm l}(\vartheta) + i \cot \vartheta Y_{l,\pm l}(\vartheta) (\pm il) e^{\pm i\varphi(l+1)} &= 0 \\ \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} \mp l \cot \vartheta \right) Y_{l,\pm l}(\vartheta) &= 0 \end{aligned}$$

Wie sich durch Einsetzen leicht nachrechnen läßt, ist

$$Y_{l,\pm l}(\vartheta) = \pm c_l^{\pm} \sin^l \vartheta$$

eine Lösung dieser Differentialgleichung. Berechnen wir dann für

$$f_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) = \pm c_{\frac{1}{2}}^{\pm} \sqrt{\sin \vartheta} e^{\pm i \frac{\varphi}{2}}$$

die Wirkung von \widehat{L}_{pm} , so zeigt sich daß

$$\widehat{L}_{\pm} f_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \neq f_{\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) .$$

Da dies aber für alle halbzahligen m gilt, folgern wir, daß m ganzzahlig sein muß. \square

(b) Für das Quadrat von \widehat{L} erhalten wir mit (4.39) und dem Separationsansatz (4.35) die Eigenwertgleichung

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

Damit ist es möglich \widehat{L}^2 in der SCHRÖDINGER-Gleichung zu ersetzen und ein neues, effektives zentralsymmetrisches Potential einzuführen:

$$U'(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2}$$

Für die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ erhalten wir aus (4.34) die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{\sin^2 \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Verwenden wir für Y_{lm} den Separationsansatz

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N \Theta_l^m(\vartheta) e^{im\varphi}$$

bekommen wir eine neue Differentialgleichung für Θ :

$$-\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - m^2 \right) \Theta_l^m(\vartheta) = l(l+1) \Theta(\vartheta)$$

Mit der Substitution

$$z = \cos \vartheta \quad \text{mit} \quad \sin \vartheta = \sqrt{1-z^2} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \vartheta} = -\sqrt{1-z^2} \frac{\partial}{\partial z}$$

erhalten wir dann die verallgemeinerte LEGENDRE-Gleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} (1-z^2) \frac{\partial}{\partial z} - \frac{m^2}{1-z^2} + l(l+1) \right) \Theta_l^m(\vartheta) = 0 . \quad (4.40)$$

Lösung sind die LEGENDRE-Polynome (homogene Polynome der Ordnung l)

$$P_l^m(z) = P_l^m(\cos \vartheta) \quad , \quad P_l(\pm 1) = 0 .$$

Die vollständige Lösung des winkelabhängigen Anteils ergibt sich aus den Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (4.41)$$

Separation der SCHRÖDINGER-Gleichung

Verwenden wir jetzt den Lösungsansatz (4.35) für die SCHRÖDINGER-Gleichung (4.34), so läßt sich die Radialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \right) R_{nl}(r) = E R_{nl}(r) , \quad (4.42)$$

abseparieren; die zugehörige Gleichung für die Winkelanteile haben wir ja bereits kennengelernt. Mit der zusätzlichen Substitution

$$R_{nl}(r) = \frac{U_{nl}(r)}{r}$$

und dem Eigenwert von \hat{L}^2 erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right) \frac{U_{nl}(r)}{r} &= E \frac{U_{nl}(r)}{r} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \frac{U_{nl}(r)}{r} + U(r) \frac{U_{nl}(r)}{r} &= E \frac{U_{nl}(r)}{r} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} U_{nl}(r) + U(r) U_{nl}(r) &= E U_{nl}(r) \end{aligned} \quad (4.43)$$

Mit den Ersetzungen

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad V(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r)$$

wird daraus

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} U_{nl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} U(r) U_{nl}(r) &= \frac{2mE}{\hbar^2} U_{nl}(r) \\ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} U_{nl}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} U_{nl}(r) + V(r) U_{nl}(r) &= k^2 U_{nl}(r) \\ U_{nl}''(r) + \left\{ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) \right\} U_{nl}(r) &= 0 \end{aligned} \quad (4.44)$$

Bei der Lösungsfunktion U_{nl} muß es sich um eine quadratintegrale Funktion handeln, um zu gewährleisten, daß für das gebundene System die Normierbarkeit

$$\int |U_{nl}(r)|^2 dx = 1$$

erhalten bleibt. Desweiteren gibt es zwei unabhängige Lösungen

$$U(r) = c_1 U_1(r) + c_2 U_2(r) ,$$

da wir es mit einer homogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung zu tun haben.

Wichtige Differentialgleichungen 2. Ordnung

Wenn auch in keinsten Weise als vollständige Aufzählung zu verstehen, seien hier Typen von Differentialgleichungen 2. Ordnung mit ihren Lösungen aufgeführt, welche in der Physik (nicht allein in der Quantenmechanik) eine wichtige Rolle spielen:

(A) Konfluente, hypergeometrische Differentialgleichung (LAPLACE)

$$x u''(x) + (\gamma - x) u'(x) - \beta u(x) = 0$$

Lösungen sind konfluentes, hypergeometrischen Funktionen und Reihen:

$$u_1(x) = {}_1F_1(\beta, \gamma, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta_k}{k! \gamma_k} x^k, \quad \beta_0 = 1, \beta_k = \beta(\beta - 1) \cdots (\beta - k + 1)$$

$$u_2(x) = x_1^{1-\gamma} {}_1F_1(\beta - \gamma + 1, 2 - \gamma, x)$$

Die Funktionen sind nur linear unabhängig für $\gamma \neq n$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Die bereits kennengelernten LAGUERRESchen und HERMITESchen Polynome sind Spezialfälle dieser Klasse.

(B) BESSELSche Differentialgleichung:

$$x^2 u''(x) + x u'(x) + (x^2 + p^2) u(x) = 0$$

Lösung sind die BESSELFunktionen (4.46) mit $p = m + \frac{1}{2}$ ($m \in \mathbb{N}_0$): dabei handelt es sich um Polynome elementarer trigonometrischer Funktionen (sin, cos).

4.3 Das sphärische Kastenpotential

Das sphärische Kastenpotential wird definiert durch

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

Die freie Bewegung ($U = 0$) bei gegebenem Drehimpuls wird dann beschrieben durch die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_{nl}(r) = 0$$

Durch Einführung der dimensionslosen Größe $\rho = kr$ mit

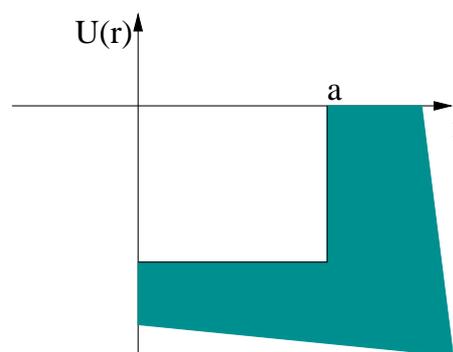
$$\frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \frac{d}{d\rho} = k \frac{d}{d\rho}$$

läßt sich $R_{nl}(r)$ umschreiben nach $R_{nl}(\rho)$

$$\begin{aligned} \left(\frac{k}{\rho} k^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \frac{\rho}{k} - \frac{k^2 l(l+1)}{\rho^2} + k^2 \right) R_{nl}(\rho) &= 0 \\ \left(\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_{nl}(\rho) &= 0 \end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung läßt sich jetzt noch ein weiteres Mal umstellen; mit

$$R_{nl}(\rho) = \frac{\chi_{nl}(\rho)}{\sqrt{\rho}}$$



bekommen wir

$$\begin{aligned} \frac{\chi'}{\rho^{3/2}} - \frac{\chi}{4\rho^{5/2}} + \frac{\chi''}{\sqrt{\rho}} - \frac{l(l+1)}{\rho^{5/2}}\chi + \frac{\chi}{\sqrt{\rho}} &= 0 \\ \frac{\chi'}{\rho} - \frac{\chi}{4\rho^2} + \chi'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\chi + \chi &= 0 \\ \chi'' + \frac{1}{\rho}\chi' + \left(1 - \frac{1}{4\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\chi &= 0 \\ \chi'' + \frac{1}{\rho}\chi' + \left(1 - \frac{1}{\rho^2}\left(l + \frac{1}{2}\right)^2\right)\chi &= 0 \quad \curvearrowright \quad \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 = P^2 \\ \chi'' + \frac{1}{\rho}\chi' + \left(1 - \frac{P^2}{\rho^2}\right)\chi &= 0 \end{aligned}$$

Werfen wir nun einen Blick auf die Lösungen (wir schreiben dafür $J_P = \chi_P$).

(a) Für beliebige P existieren zwei spezielle Lösungen:

$$\begin{aligned} J_P(\rho) &= \frac{\rho^P}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k+P+1)} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{P+2k} \\ J_{-P}(\rho) &= \dots \end{aligned}$$

(b) Wichtiger Spezialfall in der Physik ist halbzahliges P :

$$\begin{aligned} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) &= (-1)^l \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \\ J_{l-\frac{1}{2}}(\rho) &= \sqrt{\frac{2\rho}{\pi}} \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos \rho}{\rho} \end{aligned}$$

(c) Für die oben vorgenommene Ersetzung

$$R_l(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \chi_l(\rho)$$

ergeben sich als Lösungen die sphärischen BESSEL-Funktionen

$$J_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}$$

bzw. die NEUMANN-Funktionen

$$n_l(\rho) = -\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l-\frac{1}{2}}.$$

Beide Funktionensysteme bilden eine orthonormierte Basis; speziell für die BESSELfunktionen gilt:

$$\int_0^{\infty} J_l(kr) J_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} J_{(k-k')}$$

Asymptotisches Verhalten Für die gefundenen Lösungen J_l und n_l ist jetzt das Verhalten für zwei Grenzfälle von besonderer Bedeutung: Wie verhalten sich die Funktionen für $\rho \rightarrow 0$ und wie für $\rho \rightarrow \infty$?

	$\rho \rightarrow 0$	$\rho \rightarrow \infty$
$J_l(\rho)$	$\frac{\rho^l}{(2l+1)!}$	$\frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$
$n_l(\rho)$	$-\frac{(2l+1)!!}{2l+1} \frac{1}{\rho^{l+1}}$	$\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$

Hankelfunktion

Die Hankelfunktionen sind definiert durch

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = f_l(\rho) \pm i n_l(\rho) = \mp i (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}, \quad (4.45)$$

d.h. in niedrigster Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} l=0 &\rightarrow k_0^{(\pm)}(\rho) = \mp \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} \\ l=1 &\rightarrow k_1^{(\pm)}(\rho) = -\frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} \mp i \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho^2} \end{aligned}$$

BESSELFunktionen

Die BESSELFunktionen $j_\ell(z)$ sind definiert durch [13]

$$j_\ell(z) = (-1)^\ell \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^\ell \frac{\sin z}{z} \quad (4.46)$$

Damit ergibt sich in niedrigster Ordnung:

$$\begin{aligned} \ell=0 &\rightarrow j_0(z) = (-1)^0 \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^0 \frac{\sin z}{z} = \frac{\sin z}{z} \\ \ell=1 &\rightarrow j_1(z) = (-1)^1 \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right) \frac{\sin z}{z} = (-1) \frac{z \cos z - \sin z}{z^3} \\ \ell=2 &\rightarrow j_2(z) = (-1)^2 \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^2 \frac{\sin z}{z} = \frac{1}{z^5} \left(-z^2 \sin z - 2z \cos z + 2 \sin z\right) \end{aligned}$$

Diese Funktionen sind in Abb. 4.1 wiedergegeben.

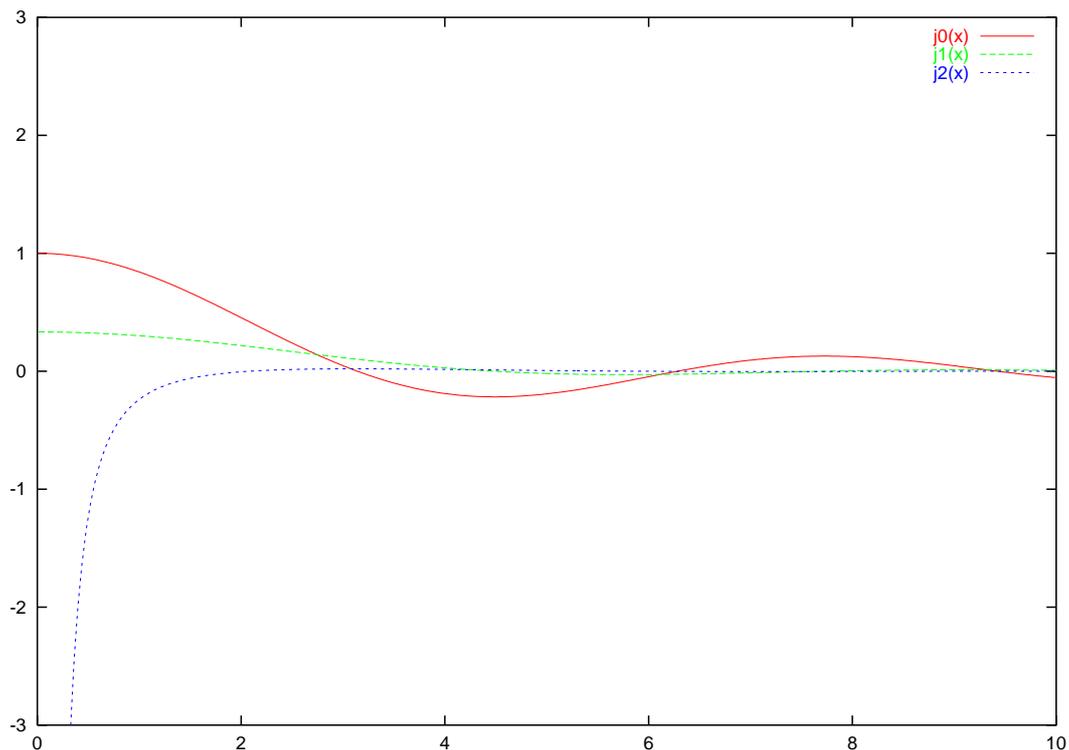


Abbildung 4.1: BESSELFunktionen niedrigster Ordnung.

4.4 Unendlich hoher Potentialwall

Ein Potentialwall, wie er in der Abbildung rechts dargestellt ist, läßt sich in folgender Weise schreiben:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases} \quad (4.47)$$

Im Bereich $0 < r < a$, wo das Potential verschwindet, liegt eine freie Bewegung vor, so daß sich die SCHRÖDINGER-Gleichung hier schreiben läßt als

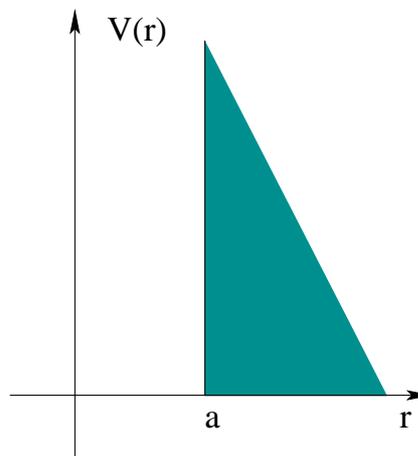
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) .$$

Als Lösung können wir wieder eine ebene Welle

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

ansetzen mit

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Leftrightarrow k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_k$$



Da die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ für $|\mathbf{r}| \geq a$ verschwindet, erhalten wir die Randbedingung

$$\psi(r > a, \vartheta, \varphi) = \psi(a, \vartheta, \varphi) = 0,$$

was nach Zerlegung in Radial- und Winkelanteil gleichbedeutend ist mit

$$R_l(r = a) = 0.$$

Mit eben dieser Zerlegung reduziert sich die SCHRÖDINGER-Gleichung auf

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) R_l(r) Y_{lm}(\varphi, \vartheta) &= E R_l(r) Y_{lm}(\varphi, \vartheta) \\ \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_l(r) &= 0. \end{aligned}$$

Wie schon vorher können wir hier wieder die Substitution $\rho = kr$ vornehmen; damit

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0$$

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung läßt sich auch hier wieder als Kombination von BESSEL-, NEUMANN- und Kugelflächenfunktionen schreiben:

$$\psi_{klm}(r, \varphi, \vartheta) = \left(A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \right) Y_{lm}(\varphi, \vartheta)$$

Demnach repräsentiert $\psi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ eine ebene Welle, welche sich in geeigneter Weise in Kugelkoordinaten ausdrücken läßt. Mit der Normierungsbedingung $B_l = 0$ ist damit für $r \leq a$

$$\psi_{klm}(r, \varphi, \vartheta) = A_l j_l(kr) Y_{lm}(\varphi, \vartheta).$$

Für $r > a$ muß die Wellenfunktion identisch Null verschwinden; somit folgt aus Stetigkeitsargumenten, daß

$$j_l(ka) = 0 \quad \text{für } r = a$$

Die Energieeigenwerte sind dann gegeben durch

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \chi_{nl}^2}{2ma^2}, \tag{4.48}$$

also zum Beispiel für den energetisch niedrigsten Zustand

$$E_{1s} = \frac{\hbar^2 \chi_{10}^2}{2ma^2}$$

Der unendliche Potentialtopf als Kern-Schalenmodell

n	l		X_{nl}	$2 \cdot (2l + 1)$	\sum	mag. Zahl
1	0	1s	3.14	2	2	2
1	1	1p	4.49	6	8	8
1	2	1d	5.76	10	18	–
2	0	2s	6.28	2	20	20
–	–	–	–	–	–	28
1	3	1f	6.98	14	34	–
2	1	2p	7.72	6	40	–
–	–	–	–	–	–	50

Für die Anzahl der Zustände $2 \cdot (2l + 1)$ bedarf es noch einer Erklärung: wie wir ja bereits gesehen haben, kann m für ein festes l die Werte ($m = -l, -l + 1, \dots, +l$) annehmen – dies führt zu dem zweiten Beitrag $(2l + 1)$. Der zusätzlich auftretende Faktor 2 hat seinen Ursprung in einem weiteren, bisher noch nicht behandelten inneren Freiheitsgrad der Teilchen, dem **Spin**. Für jedes (Kern-)Teilchen ergeben sich damit zwei Spin-Freiheitsgrade: Spin up ($\frac{1}{2}$) bzw. Spin down ($-\frac{1}{2}$).

Die im Atomkern zusammengefaßten Nukleonen (Protonen, Neutronen) gehorchen der FERMI-DIRAC-Statistik und als System dem PAULI-Verbot genügen, welches besagt:

Für ein System aus N Fermionen darf es keine zwei Teilchen geben, für welche die Eigenfunktionen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Erst diese Zusatzforderung schränkt die Anzahl der rein mathematisch denkbaren Wellenfunktionen für das System in der Weise ein, daß wir die in der Natur realisierten erhalten.

4.5 Teilchen im endlichen Potentialtopf

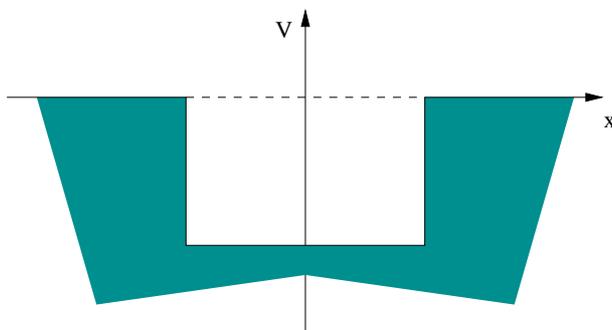


Abbildung 4.2: Endlicher Potentialtopf

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (4.49)$$

Für ein solches Potential (Abb. 4.2) gibt es für ein Teilchen in Abhängigkeit von seiner Energie zwei Bereiche:

- I gebundene Zustände für $E < 0$
- II exponentiell abfallende Funktion für $E > 0$

Die zugehörige Lösung der Radialgleichung im Bereich (I) für $E < 0$ ist

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 + E) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0 \quad \text{mit} \quad k_l^2 = \frac{2m}{\hbar} (U_0 - |E|) \quad (4.50)$$

mit den bereits bekannten Lösungen

$$R_l^I(k_l r) = A_l f_l(kr) + \underbrace{B_l n_l(kr)}_{=0} = A_l f_l(kr)$$

Für den Bereich (II) mit U_0 und $E < 0$ ist

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0 \quad \text{mit} \quad k_{II} = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|}$$

Lösungen sind hier Linearkombinationen von j_l und n_l , da im Bereich (II) $r \neq 0$. Wir wählen daher die Hankelfunktion $h^{(\pm)}$, da diese für $E > 0$ die richtige Asymptotik besitzt:

$$\begin{aligned} R_l^{II}(k_{II}r) &= C_l^\pm k_l^\pm(k_{II}r) \\ &= C_l^\pm \left(j_l(k_{II}r) \pm n_l(k_{II}r) \right) \\ &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{k_{II}r} \exp \left(\pm i(k_{II}r - \frac{1}{2}l\pi) \right) \end{aligned}$$

Die Eigenwerte folgen aus den beiden Forderungen

$$\begin{aligned} (i) \quad \Psi_I(r=a) &= \Psi_{II}(r=a) \\ (ii) \quad \Psi'_I(r=a) &= \Psi'_{II}(r=a) \end{aligned}$$

Daraus gewinnen wir

$$\begin{aligned} (i) \quad A_l j_l(k_I a) &= C_l^\pm h_l^\pm(k_{II} a) \\ (ii) \quad A_l \frac{d}{dr} j_l(k_I r) \Big|_{r=a} &= C_l^\pm \frac{d}{dr} h_l^\pm(k_{II} r) \Big|_{r=a}, \end{aligned}$$

woraus durch Umschreiben folgt

$$k_I \frac{d}{d\rho} \ln j_l(\rho) \Big|_{\rho=k_I a} = i k_{II} \frac{d}{d\rho} \ln h_l^\pm(\rho) \Big|_{\rho=k_{II} a}$$

Im einfachsten Fall – für $l = 0$ – ist dann

$$\begin{aligned} j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho} \\ j'_0(\rho) &= \frac{1}{\rho^2} (\rho \cos \rho - \sin \rho) \\ h_0^\pm(\rho) &= \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho} = \frac{1}{\rho} e^{\pm i|k_{II}|a} \\ h_0^{\pm'}(\rho) &= \frac{\rho^{\pm i}}{\rho^2} e^{\pm i\rho} \end{aligned}$$

Außerdem folgt aus

$$k_I \cot k_I a = -k_{II},$$

daß

$$k_I = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad \text{und} \quad k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|} \quad (4.51)$$

Dabei bilden die $j_l(kr)$ und $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ein vollständiges orthonormiertes System

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (4.52)$$

Für einen in eine beliebige Richtung zeigenden Wellenvektor \mathbf{k} ist dann

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (i)^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\varphi_{\mathbf{k}}, \vartheta_{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\varphi_{\mathbf{r}}, \vartheta_{\mathbf{r}}).$$

4.6 Der Kugeloszillator

Im Falle sphärischer Symmetrie ist das Potential des harmonischen Oszillators gegeben durch

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \quad (4.53)$$

so daß wir für die SCHRÖDINGER-Gleichung erhalten:

$$\left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2(r(t))}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.54)$$

Zur Separation von Radial- und Winkelanteil machen wir den Ansatz

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (4.55)$$

Setzen wir dies ein, so erhalten wir die radiale SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right) U_{nl}(r) = E_{nl} U_{nl}(r). \quad (4.56)$$

Wie schon vorher führen wir wieder neue dimensionslose Größen ein:

– Oszillatorkonstante

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad \text{mit} \quad [b^2] = \frac{Js}{kg s^{-1}} = m^2$$

– Abstandsvariable

$$\rho = \frac{r}{b}$$

– Energievariable

$$\varepsilon_{nl} = \frac{E_{nl}}{\hbar\omega}$$

Durch einsetzen erhalten wir:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\rho^2 b^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \rho^2 b^2 \right\} U_{nl}(\rho) &= E_{nl} U_{nl}(\rho) \\ \left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{m^2 \omega^2 \rho^2 b^4}{\hbar^2} - \frac{2m E_{nl}}{\hbar^2} b^2 \right\} U_{nl}(\rho) &= 0 \\ \left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho^2 - 2\varepsilon_{nl} \right\} U_{nl}(\rho) &= 0 \end{aligned}$$

Um jetzt einen geeigneten Lösungsvorschlag für $U_{nl}(\rho)$ zu finden, untersuchen wir zunächst das Verhalten der Differentialgleichung für die Grenzfälle:

(1) $\rho \rightarrow 0$:

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

Hierfür finden wir als reguläre Lösung:

$$\begin{aligned} U_{nl}(\rho) &= \rho^{l+1} \\ U'_{nl}(\rho) &= (l+1)\rho^l \\ U''_{nl}(\rho) &= l(l+1)\rho^{l-1} \end{aligned}$$

(2) $\rho \rightarrow \infty$:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 \right\} U_{nl}(\rho) = 0$$

Hierfür finden wir:

$$\begin{aligned} U_{nl}(\rho) &= \text{const} \exp\left(\pm \frac{\rho^2}{2}\right) \\ U'_{nl}(\rho) &= \pm \rho \text{const} \exp\left(\pm \frac{\rho^2}{2}\right) \\ U''_{nl}(\rho) &= \text{const} \exp\left(\pm \frac{\rho^2}{2}\right) + \rho^2 \text{const} \exp\left(\pm \frac{\rho^2}{2}\right) \end{aligned}$$

Aufgrund des asymptotischen Verhaltens machen wir jetzt den Ansatz

$$U_{nl}(\rho) = \rho^{l+1} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right) V_{nl}(\rho) \quad (4.57)$$

und erhalten dann

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - \rho \right) \frac{d}{d\rho} + 2 \left(\varepsilon_l - \left(l + \frac{1}{2} \right) \right) \right\} V_l(\rho) = 0$$

Da wir dies aber auch noch nicht direkt lösen können, führen wir noch eine weitere Substitution durch:

$$x = \rho^2$$

Das Resultat ist jetzt endlich eine bekannte Differentialgleichung: die konfluente, hypergeometrische Differentialgleichung

$$\left\{ x \frac{d^2}{dx^2} + \left(l + \frac{3}{2} - x \right) \frac{d}{dx} + \frac{\varepsilon_l - l - \frac{3}{2}}{2} \right\} V_l(x) = 0 \quad (4.58)$$

mit den konfluenten, hypergeometrischen Funktionen als Lösung. Statt aber diese Lösungsfunktionen hier in aller Ausführlichkeit zu diskutieren, machen wir wieder einen Potenzreihenansatz:

$$V_l(x) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m^{(l)} x^m$$

Um um dies für (4.58) verwenden zu können, berechnen wir außerdem noch

$$\begin{aligned} V'_l(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} m c_m^{(l)} x^{m-1} = \sum_{m=0}^{\infty} m c_m^{(l)} x^{m-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) c_{k+1}^{(l)} x^k \\ x V'_l(x) &= x \sum_{k=0}^{\infty} k c_k^{(l)} x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} k c_k^{(l)} x^k \\ V''_l(x) &= \sum_{m=2}^{\infty} m(m-1) c_m^{(l)} x^{m-2} = \sum_{k+2=2}^{\infty} (k+1)(k+2-1) c_{k+2}^{(l)} x^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) c_{k+1}^{(l)} x^k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x V_l''(x) &= x \sum_{m=2}^{\infty} m(m-1) c_m^{(l)} x^{m-2} = \sum_{m=2}^{\infty} m(m-1) c_m^{(l)} x^{m-1} \\
 &= \sum_{k+1=2}^{\infty} (k+1)(k+1-1) c_{k+1}^{(l)} x^k = \sum_{k=1}^{\infty} (k+1)k c_{k+1}^{(l)} x^k \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)k c_{k+1}^{(l)} x^k
 \end{aligned}$$

Einsetzen in (4.58) gibt dann:

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)k c_{k+1}^{(l)} x^k + \left(l + \frac{3}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) c_{k+1}^{(l)} x^k - \sum_{k=0}^{\infty} k c_k^{(l)} x^k + \frac{\epsilon_l - l - \frac{3}{2}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(l)} x^k &= 0 \\
 \sum_{k=0}^{\infty} x^k \left\{ (k+1)k c_{k+1}^{(l)} + \left(l + \frac{3}{2}\right) (k+1) c_{k+1}^{(l)} - k c_k^{(l)} + \frac{\epsilon_l - l - \frac{3}{2}}{2} c_k^{(l)} \right\} &= 0 \\
 c_{k+1}^{(l)} \left\{ (k+1)k + (k+1) \left(l + \frac{3}{2}\right) \right\} + c_k^{(l)} \left\{ \frac{\epsilon_l - l - \frac{3}{2}}{2} - k \right\} &= 0 \\
 c_{k+1}^{(l)} \left\{ (k+1) \left(k + l + \frac{3}{2}\right) \right\} + c_k^{(l)} \left\{ \frac{\epsilon_l - l - \frac{3}{2} - 2k}{2} \right\} &= 0
 \end{aligned}$$

Wir bekommen also eine Rekursionsformel für die Koeffizienten $c_m^{(l)}$:

$$c_{m-1}^{(l)} = \frac{2m + l + \frac{3}{2} - \epsilon_l}{(m+1)(2l + 2m + 3)} c_m^{(l)} \tag{4.59}$$

Der Startwert $c_0^{(l)} \neq 0$ wird durch die Normierungsbedingung für die Wellenfunktion festgelegt.

Asymptotisches Verhalten Der Fall $\rho \rightarrow \infty$ entspricht $m \rightarrow \infty$. Dann wird

$$c_{m+1}^{(l)} = \frac{1}{m+1} c_m^{(l)} \rightarrow e^x \simeq 1 + \frac{x}{1!} + \frac{1}{2!} x^2 + \dots$$

Ebenso ungünstig verhält es sich für $\rho \rightarrow \infty$:

$$V - l(\rho) \propto e^{\rho^2}$$

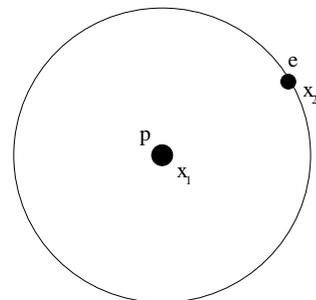
Eine solche Funktion würde dann allerdings nicht mehr der Normierungsbedingung genügen – die Reihe muß also für ein $m_{\max} < \infty$ abbrechen.

4.7 Das Wasserstoff-Atom

Grundsätzlich handelt es bei dem Wasserstoff-Atom um die Bewegung eines Teilchens der Ladung $-e$ (Elektron) in einem COULOMB-Feld eZ (Kern). Daher gilt für das Potential

$$V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_K|) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 Z}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_K|}$$

Damit können wir die zugehörige SCHRÖDINGER-Gleichung aufstellen:



$$\begin{aligned}
 \left\{ \frac{p_K^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m} + V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_K|) \right\} \psi(\mathbf{r}_K, \mathbf{r}_e) &= E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_K) \\
 \left\{ \frac{p_K^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 Z}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_K|} \right\} \psi(\mathbf{r}_K, \mathbf{r}_e) &= E \psi(\mathbf{r}_K, \mathbf{r}_e) \\
 \left\{ \frac{p_K^2}{2M} - \frac{p_e^2}{2m} \right\} \psi(\mathbf{r}_K, \mathbf{r}_e) &= \underbrace{\left\{ E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 Z}{|\mathbf{r}_K - \mathbf{r}_e|} \right\}}_{E'} \psi(\mathbf{r}_K, \mathbf{r}_e) \quad (4.60)
 \end{aligned}$$

Mit Schwerpunkt und Relativkoordinaten

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R} &= \frac{m\mathbf{r}_e + M\mathbf{r}_K}{m_e + M_K} \\
 \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_K \\
 \mu &= \frac{mM}{m+M} = 1.111709 \cdot 10^{-30} \text{ kg} \simeq m_e
 \end{aligned}$$

lassen sich auch die Differentialoperatoren umschreiben

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial r_e^2}, \frac{\partial^2}{\partial r_K^2} &\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial R^2}, \frac{\partial^2}{\partial r^2} \\
 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_e} &= \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{m}{m+M} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}
 \end{aligned}$$

Damit läßt sich (4.60) umschreiben zu

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right\} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E' \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

Für die Wellenfunktion machen wir den Separationsansatz

$$\psi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$$

Die Exponentialfunktion beschreibt die freie Bewegung des Schwerpunktes – entspricht also einer ebenen Welle.

Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung gibt jetzt

$$\begin{aligned}
 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2 Z}{r} \right\} \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} &= E' \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \\
 -\frac{\hbar^2}{2M} \chi(\mathbf{r}) (i\mathbf{k})^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - \frac{e^2 Z}{r} \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} &= E' \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \\
 \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{e^2 Z}{r} \right\} \chi(\mathbf{r}) &= E' \chi(\mathbf{r}) \\
 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - \frac{e^2 Z}{|\mathbf{r}|} \right\} \chi(\mathbf{r}) &= \underbrace{\left\{ E' - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right\}}_E \chi(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

Beim Übergang zu Kugelkoordinaten zerfallen $\chi(\mathbf{r})$ und Δ in

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{r}) &= f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ \frac{\partial^2}{\partial r^2} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left\{ \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}\end{aligned}$$

Damit

$$\begin{aligned}& \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \right. \\ & \quad \left. - \frac{e^2 Z}{r} \right\} \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = E \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} & \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} U_{nl}(r) - \frac{1}{r^2} U_{nl}(r) \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) - \frac{l(l+1) U_{nl}(r)}{r^2} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right\} \\ & \quad - \frac{e^2 Z}{r} \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = E \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} & \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{d}{dr} U_{nl}(r) - U_{nl}(r) \right) - \frac{l(l+1) U_{nl}(r)}{r^2} \right\} \\ & \quad - \frac{e^2 Z}{r} \frac{U_{nl}(r)}{r} = E \frac{U_{nl}(r)}{r} \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} & \left\{ \frac{1}{r^2} \left(\frac{d}{dr} U_{nl}(r) + r \frac{d^2}{dr^2} U_{nl}(r) - \frac{d}{dr} U_{nl}(r) \right) - \frac{l(l+1) U_{nl}(r)}{r^2} \right\} \\ & \quad - \frac{e^2 Z}{r} \frac{U_{nl}(r)}{r} = E \frac{U_{nl}(r)}{r} \\ & \quad \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r} \frac{1}{2\mu r^2} - \frac{e^2 Z}{r^2} \right\} U_{nl}(r) = E \frac{U_{nl}(r)}{r} \\ & \quad \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \hbar^2 \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2 Z}{r} - E \right\} U_{nl}(r) = 0 \\ \frac{d^2}{dr^2} U_{nl}(r) & - \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu e^2 Z}{\hbar^2 r} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right\} U_{nl}(r) = 0\end{aligned}$$

Durch Einführen der dimensionslosen Größen²

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{r}{a_0} & a_0 &= \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \\ & & & \text{BOHR'scher Radius} \\ \varepsilon &= \frac{E}{E_0} & E_0 &= \frac{1}{2} \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} = \frac{\hbar^2}{2a_0 \mu} = 13.55 \text{ eV} \\ & & & \text{Ionisierungsenergie}\end{aligned}$$

² Die in der Vorlesung an dieser Stelle gebrauchten Ausdrücke

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad \text{und} \quad E_0 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0}$$

waren sowohl in Größe als auch Dimension falsch (siehe hierzu auch Literatur). Ich habe versucht, so gut es ging, eine konsistente Darstellung mit den korrigierten Ausdrücken anzugeben – wo noch Fehler auftreten bitte ich, mir dies mitzuteilen.

ist schließlich

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{a_0^2} \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{a_0^2 \rho^2} - \frac{2\mu\epsilon^2 Z}{\hbar^2 a_0 \rho} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right\} U_{nl}(\rho) \\
& \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2\mu\epsilon^2 Z}{\hbar^2 \rho} a_0 - \frac{2\mu E}{\hbar^2} a_0^2 \right\} U_{nl}(\rho) = 0 \quad \curvearrowright \quad a_0 \\
& \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2\mu\epsilon^2 Z}{\hbar^2 \rho} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu\epsilon^2} - \frac{2\mu E}{\hbar^2} \frac{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4}{\mu^2 e^4} \right\} U_{nl}(\rho) = 0 \\
& \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{8\pi\epsilon_0 Z}{\rho} - \frac{32\pi^2 E \epsilon_0^2 \hbar^2}{\mu e^4} \right\} U_{nl}(\rho) = 0 \quad \curvearrowright \quad E_0 \\
& \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{8\pi\epsilon_0 Z}{\rho} - \frac{E}{E_0} \right\} U_{nl}(\rho) = 0 \quad \curvearrowright \quad \varepsilon \\
& \frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) - \left\{ \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{8\pi\epsilon_0 Z}{\rho} - \varepsilon \right\} U_{nl}(\rho) = 0 \tag{4.61}
\end{aligned}$$

Grenzwertbetrachtungen

Für den Radius ρ kommen zwei Grenzwerte in Betracht, welchen sich die Lösung annähern muß:

$$\begin{aligned}
\rho \rightarrow 0 & \quad : \quad \frac{d^2 u_l}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_l = 0 \quad \Rightarrow \quad u_l \sim \rho^{l+1} \\
\rho \rightarrow \infty & \quad : \quad \frac{d^2 u_l}{d\rho^2} - \varepsilon u_l = 0 \quad \Rightarrow \quad u_l \sim \exp(-\sqrt{\varepsilon} \rho)
\end{aligned}$$

Daher wählen wir den Ansatz

$$U_l(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho)$$

Die Ableitung von $U_{nl}(\rho)$ wird dann

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{d\rho^2} U_{nl}(\rho) &= \frac{d}{d\rho} \left\{ (l+1)\rho^l e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + \sqrt{\varepsilon} \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d}{d\rho} F_l(\rho) \right\} \\
&= l(l+1)\rho^{l-1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + (l+1)\rho^l \sqrt{\varepsilon} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + (l+1)\rho^l e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d}{d\rho} F_l(\rho) \\
&\quad + (l+1)\sqrt{\varepsilon} \rho^l e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + \varepsilon \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} F_l(\rho) + \sqrt{\varepsilon} \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d}{d\rho} F_l(\rho) \\
&\quad + (l+1)\rho^l e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d}{d\rho} F_l(\rho) + \sqrt{\varepsilon} \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d}{d\rho} F_l(\rho) + \rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \frac{d^2}{d\rho^2} F_l(\rho) \\
&= \rho^l e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2\left((l+1) + \sqrt{\varepsilon} \rho\right) \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{l(l+1)}{\rho} + 2(l+1)\sqrt{\varepsilon} + \varepsilon \rho\right) \right\} F_l(\rho)
\end{aligned}$$

Einsetzen in (4.61)

$$\rho^{l+1} e^{\sqrt{\varepsilon} \rho} \left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} + \sqrt{\varepsilon}\right) \frac{d}{d\rho} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} \sqrt{\varepsilon} - \frac{Z}{\rho} + \varepsilon\right) \right\} F_l(\rho) = 0$$

Jetzt noch Substitution $\bar{\rho} = \sqrt{4\varepsilon} \rho$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\bar{\rho}}{\sqrt{4\varepsilon}} \right)^{l+1} \exp \left(\frac{\sqrt{\varepsilon} \bar{\rho}}{\sqrt{2\varepsilon}} \right) \left\{ 4\varepsilon \frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} + 2 \left(\sqrt{4\varepsilon} \frac{l+1}{\bar{\rho}} + \sqrt{\varepsilon} \right) \sqrt{4\varepsilon} \frac{d}{d\bar{\rho}} \right. \\
& \quad \left. + 2 \left(\sqrt{4\varepsilon} \frac{l+1}{\bar{\rho}} \sqrt{\varepsilon} - \sqrt{4\varepsilon} \frac{Z}{\varepsilon} + \varepsilon \right) \right\} F_l(\bar{\rho}) = 0 \\
& \left(\frac{\bar{\rho}}{\sqrt{4\varepsilon}} \right)^{l+1} e^{\frac{\bar{\rho}}{\sqrt{4\varepsilon}}} \left\{ 4\varepsilon \frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} + 4\varepsilon \left(2 \frac{l+1}{\bar{\rho}} + 1 \right) \frac{d}{d\bar{\rho}} + 4\varepsilon \left(\frac{l+1}{\bar{\rho}} - \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon} \bar{\rho}} + \frac{1}{\varepsilon} \right) \right\} F_l(\bar{\rho}) = 0 \\
& \left(\frac{\bar{\rho}}{\sqrt{4\varepsilon}} \right)^{l+1} e^{\frac{\bar{\rho}}{\sqrt{4\varepsilon}}} \left\{ \frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} + \left(2 \frac{l+1}{\bar{\rho}} + 1 \right) \frac{d}{d\bar{\rho}} + \left(\frac{l+1}{\bar{\rho}} - \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon} \bar{\rho}} + \frac{1}{\varepsilon} \right) \right\} F_l(\bar{\rho}) = 0 \\
& \left\{ \bar{\rho} \frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} + (2(l+1) - \bar{\rho}) \frac{d}{d\bar{\rho}} + \left(\frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1 \right) \right\} F_l(\bar{\rho}) = 0
\end{aligned}$$

Für $F_l(\bar{\rho})$ machen wir – analog zu S. 18 – den Potenzreihenansatz

$$\begin{aligned}
F_l(\bar{\rho}) &= \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} \\
\frac{d}{d\bar{\rho}} F_l(\bar{\rho}) &= \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu} \cdot \nu \cdot \bar{\rho}^{\nu-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu} \\
\frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} F_l(\bar{\rho}) &= \sum_{\nu=1}^{\infty} (\nu+1) a_{\nu+1} \nu \bar{\rho}^{\nu-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1)(\nu+2) a_{\nu+2} \bar{\rho}^{\nu} \\
\bar{\rho} \frac{d}{d\bar{\rho}} F_l(\bar{\rho}) &= \bar{\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu a_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} \\
\bar{\rho} \frac{d^2}{d\bar{\rho}^2} F_l(\bar{\rho}) &= \bar{\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1)(\nu+2) a_{\nu+2} \bar{\rho}^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu(\nu+1) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu}
\end{aligned}$$

Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung führt auf die Rekursionsformel

$$\begin{aligned}
& \bar{\rho} F_l''(\bar{\rho}) + (2(l+1) - \bar{\rho}) F_l'(\bar{\rho}) + \left(\frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1 \right) F_l(\bar{\rho}) = 0 \\
& \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu(\nu+1) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu} + 2(l+1) \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu+1) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu} - \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu a_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} + \left(\frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1 \right) \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} = 0 \\
& \sum_{\nu=0}^{\infty} \left\{ \left(\nu(\nu+1) + 2(l+1)(\nu+1) \right) a_{\nu+1} \bar{\rho}^{\nu} + \left(\frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} - \nu - l - 1 \right) a_{\nu} \bar{\rho}^{\nu} \right\} = 0 \\
& \left(\nu + 2(l+1) \right) (\nu+1) a_{\nu+1} + \left(\frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} - \nu - l - 1 \right) a_{\nu} = 0 \\
& a_{\nu+1} = \frac{\nu + l + 1 - \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}}}{\left(\nu + 2(l+1) \right) (\nu+1)} a_{\nu} = \frac{\nu + l + 1 - \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}}}{2(l+1)(\nu+1) + \nu(\nu+1)} a_{\nu} \tag{4.62}
\end{aligned}$$

Für große ν wird dies zu

$$a_{\nu+1} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\nu} a_{\nu}$$

und läßt sich damit als Exponentialfunktion $e^{\sqrt{\varepsilon}\bar{\rho}}$ schreiben. Zum Erhalt der Normierbarkeit muß die Reihe bei $\nu = n_r$ abbrechen, also

$$a_{n_r+1} = 0 \Leftrightarrow 0 = \frac{n_r + l + 1 - \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}}}{2(l+1)(n_r+1) + (n_r+1)n_r} a_{n_r}$$

$$n_r + l + 1 = \frac{Z}{\sqrt{\varepsilon}} \Leftrightarrow \varepsilon = \frac{Z^2}{(n_r + l + 1)^2} = \frac{Z^2}{n^2}, \quad n = \text{Hauptquantenzahl}$$

Dies ergibt die Energie-Eigenwerte

$$E_{n_r, l} = E_0 \varepsilon = \frac{1}{2} \frac{\mu e^4}{(2\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{Z^2}{(n_r + l + 1)^2}$$

Zu gegebenem n, l hat man

$$F_{nl}(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

Damit läßt sich die Radialfunktion schreiben als

$$R_{nl}(\rho) = \frac{U_{nl}(r)}{r} = N_{nl} \left(\frac{r}{a_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{r}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{2r}{na_0}\right)$$

Der Normierungsfaktor N_{nl} folgt aus der Bedingung, daß

$$\int_0^\infty dr |R_{nl}(r)|^2 r^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad N_{nl} = \frac{Z}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{((n+1)!)^3} \frac{1}{a^{3/2}}}$$

Diskussion der physikalischen Bedeutung der Lösung

(a) Parität Die zu

$$n = n_r + l + 1$$

gehörenden Drehimpulse sind entartet; dies führt zu einem Paritätsumschwung.

(b) Entartung Der Grad der Entartung wird beschrieben durch

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

Diese Charakteristik ist eine Eigenart des $\frac{1}{r}$ -Potentials.

Beim KEPLERproblem ist

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{[\mathbf{p}, \mathbf{L}]}{\mu}$$

konstant, was bedeutet, daß die Halbachse konstant ist. In der Quantenmechanik ist der RUNGE-LENZ-Vektor

$$\hat{A} = \frac{\hat{r}}{r} - \left[\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p} \right]$$

mit den Eigenschaften

$$[\hat{A}, H] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{L}_i, \hat{A}_k] = i \varepsilon_{ikl} \hat{L}_l$$

\hat{A} ist demnach eine zusätzliche Erhaltungsgröße.

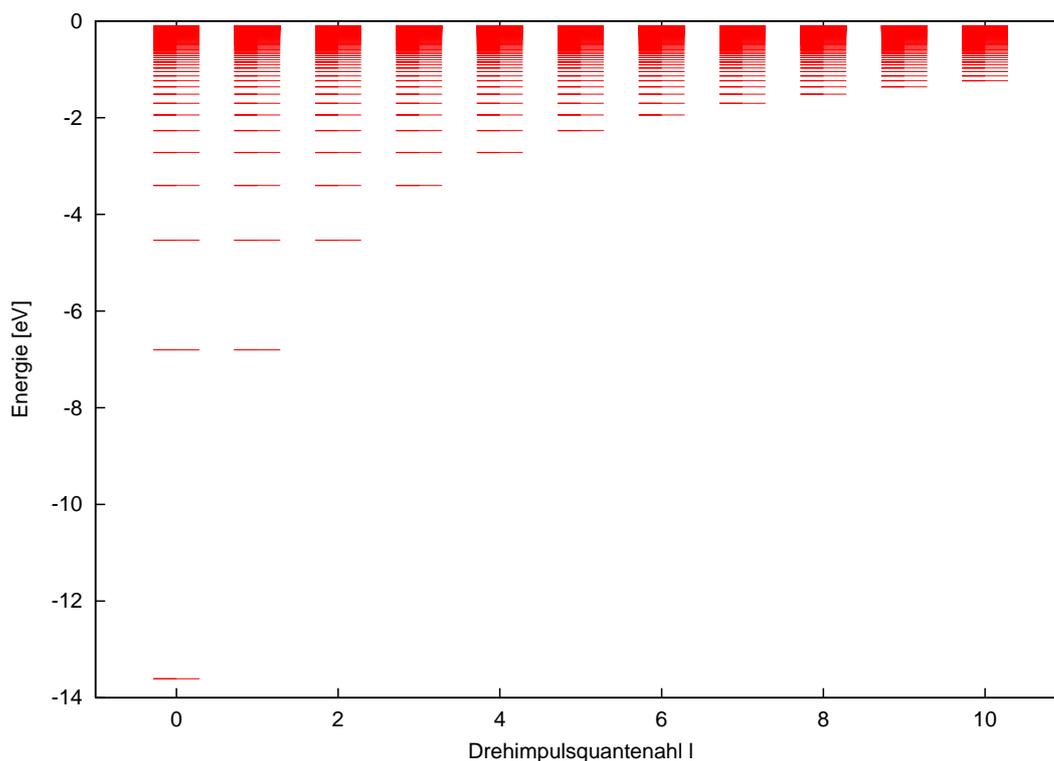


Abbildung 4.3: Energie-Eigenwerte des Wasserstoff-Atoms für verschiedene Drehimpulse

(c) **Spektren** Die beim Übergang zwischen zwei Zuständen abgestrahlte Energie ist

$$\Delta E = \hbar\omega = E_n - E_m .$$

Die zugehörige Frequenz ist

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi\nu} = \underbrace{\left(\frac{c^4 \mu}{4\hbar^3 c}\right)}_{R_y} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) .$$

Daraus ergibt sich z.B. für die BALMER-Serie:

$$\nu = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad n \geq 3$$

(d) **Zustände** Für den $1s$ -Zustand gilt

$$\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = 2\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) Y_{00}(\vartheta, \varphi) \quad (4.63)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein solches Elektron in diesem Zustand ist

$$w_{1s}(\mathbf{r}) d^3 r = \psi_{1s}^*(\mathbf{r}) \psi_{1s}(\mathbf{r}) d^3 r$$

Zur Berechnung der räumlichen Verteilung integrieren wir über den gesamten Raum

$$w_{1s}(\mathbf{r}) r^2 d^3r = N_{1s}^2 \exp\left(-\frac{2Ze}{a_0}\right) \frac{1}{4\pi} r^2 dr d\Omega$$

$$w_{1s}(\mathbf{r}) r^2 d^3 = \frac{N_{1s}^2}{4\pi} \exp\left(-\frac{2Ze}{a_0}\right) r^2 dr$$

Das Maximum liegt bei

$$\frac{d w_{1s} r^2}{dr} = 0 = \left(Zr - \frac{2Z}{a_0} r^2\right) \frac{N_{1s}^2}{4\pi} \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right)$$

und entspricht damit für $Z = 1$ dem BOHR'schen Radius

$$r_0 = \frac{a_0}{2} = \frac{\hbar^2}{2\mu e^2}$$

Quantenzahlen			Eigenfunktionen $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$
n	ℓ	m	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$

Tabelle 4.1: Einige vollständige Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms.

4.8 Das BOHR'sche Magneton

Klassisches BOHR'sches Atommodell

Die magnetische Momentendichte ist

$$\mu(\mathbf{r}) = \frac{1}{2c} [\mathbf{r}, \mathbf{j}(\mathbf{r})] \quad \rightarrow \quad \mathbf{m} = \int d^3r \mu(\mathbf{r}) = \frac{1}{2c} \int d^3r [\mathbf{r}, \mathbf{j}(\mathbf{r})] \quad (4.64)$$

Für eine bewegte Punktladung mit der Ladungsstromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_i e \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

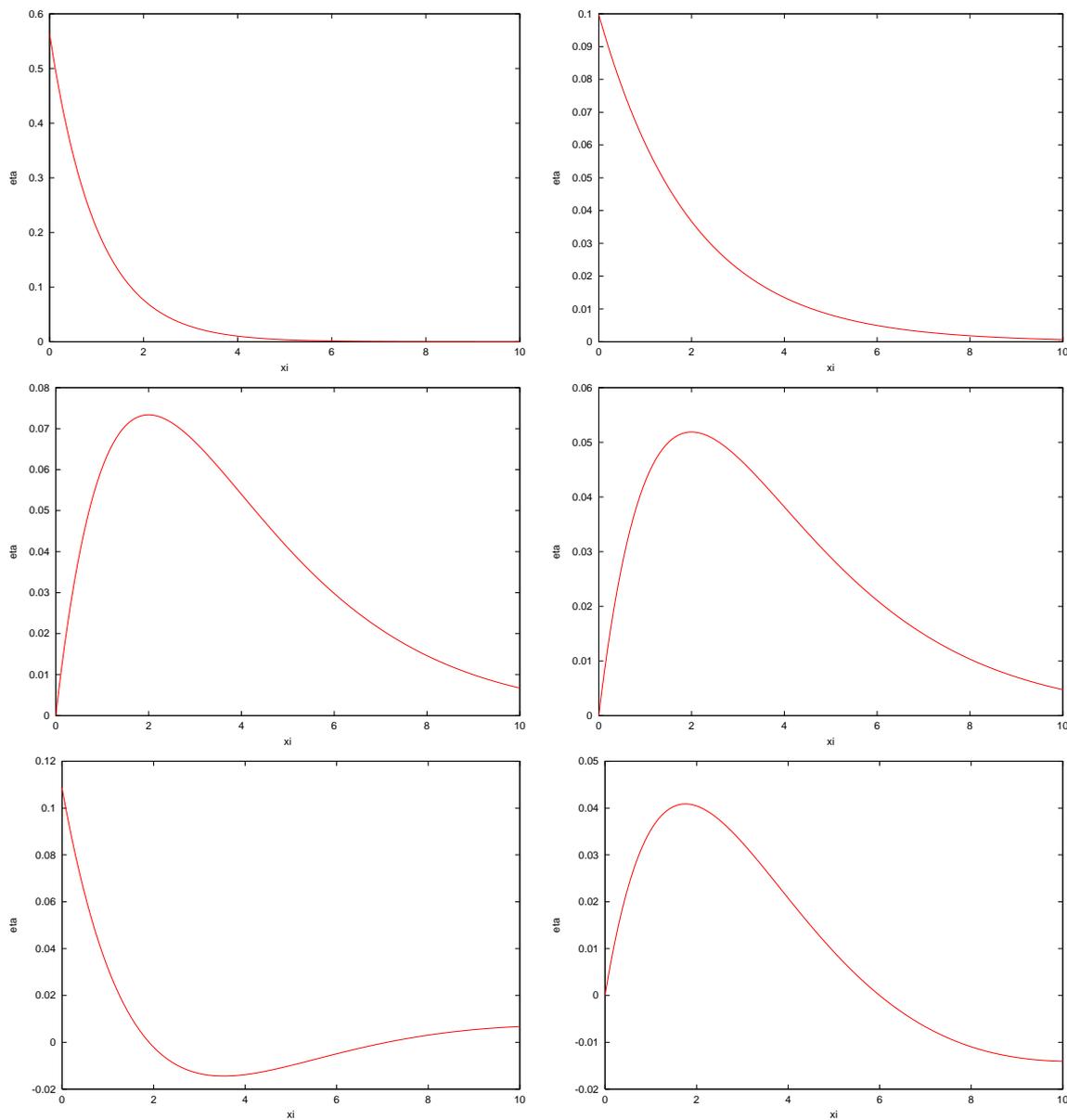


Abbildung 4.4: Radialanteil der Wellenfunktionen aus Tabelle 4.1. Der Radius ist in Einheiten von a_0 angegeben.

ergibt sich daher das magnetische Moment

$$\begin{aligned}\mu(\mathbf{r}) &= \frac{e}{2c} \sum_i [\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \\ \mathbf{m} &= \int d^3r \mu(\mathbf{r}) = \frac{e}{2mc} [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] = \frac{e}{2mc} \sum_i l_i = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \\ \frac{|\mathbf{m}|}{|\mathbf{L}|} &= \frac{e}{2mc} = \text{const}\end{aligned}$$

Quantenmechanische Behandlung

$$\begin{aligned}\hat{\mu}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2c} [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})] \\ \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) &= -\frac{e\hbar}{2m_e i} \{ \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi_\alpha(\mathbf{r}) - \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \nabla \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \}\end{aligned}$$

Stromoperator

Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho}(\mathbf{r}, t) + \text{div } \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0$$

In der Quantenmechanik sind nun $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. -strom definiert über die Wellenfunktion. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte können wir sofort schreiben:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.65)$$

Die zugehörige SCHRÖDINGER-Gleichung für die beide Wellengleichungen ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi \\ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi^* \\ \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} d^3r &= \int \Psi^* \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi d^3r \\ \int \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} d^3r &= \int \Psi \frac{-1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi^* d^3r\end{aligned}$$

Durch Addition

$$\int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) d^3r = \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi^* \Psi d^3r = \frac{\partial}{\partial t} \int \rho(\mathbf{r}, t) d^3r$$

Durch Subtraktion

$$\frac{\hbar}{2mi} \int (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) d^3r = \frac{\hbar}{2mi} \int \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) d^3r$$

Kombination der beiden letzten Gleichungen

$$\int d^3r \left\{ \dot{\rho}(\mathbf{r}, t) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \underbrace{(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)}_{\alpha \hat{\mathbf{j}}} \right\} = 0$$

Durch Vergleich mit der klassischen Behandlung finden wir die

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{1}{2m} (\Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi - \Psi \hat{\mathbf{p}} \Psi^*) \quad (4.66)$$

Damit läßt sich schreiben

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{r}) &= -\frac{e\hbar}{2m_e i} \frac{1}{2c} \{ \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) [\mathbf{r} \times \nabla] \Psi_\alpha(\mathbf{r}) - \Psi_\alpha(\mathbf{r}) [\mathbf{r} \times \nabla] \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \} \\ \hat{\mathbf{L}} &= [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] = \frac{\hbar}{i} [\mathbf{r} \times \nabla] \\ &= -\frac{e}{4mc} \{ \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \mathbf{L} \Psi_\alpha(\mathbf{r}) - \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \mathbf{L} \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \} \end{aligned}$$

Da nicht alle Komponenten gleichzeitig meßbar sind, ist

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = \Psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Für die z -Komponente

$$\begin{aligned} L_z \Psi_{nlm} &= \hbar \Psi_{nlm} \\ \mu_z(\mathbf{r}) &= -\frac{e}{2mc} \frac{1}{2} \left\{ \underbrace{\Psi_{nlm}^* L_z \Psi_{nlm}}_{m\hbar \Psi_{nlm}} - \underbrace{\Psi_{nlm} L_z \Psi_{nlm}^*}_{-m\hbar \Psi_{nlm}^*} \right\} \\ &= -\frac{e}{2mc} \hbar m |\Psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 \\ m_z &= \int d^3r \mu_z(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{e}{2mc} \hbar m \int |\Psi_{nlm}|^2 d^3r \\ &= -\frac{e}{2mc} \underbrace{\hbar m}_{l_z} \\ &= -\frac{e}{2mc} l_z \end{aligned}$$

Damit ist analog zur klassischen Behandlung

$$\frac{|m_z|}{|l_z|} = \frac{e}{2mc}$$

Übungsaufgaben

Übung 4.1 – Kommutatorrelationen. Die drei Operatoren A , B und C seien gegeben durch

$$A \psi(x) = x^3 \psi(x) \quad B \psi(x) = x \frac{d}{dx} \psi(x) \quad C \psi(x) = \int_{-\infty}^x y \psi(y) dy$$

(a) Berechnen Sie $[A, B]$ und $[B, C]$.

(b) Lösen Sie das Eigenwertproblem $C \psi(x) = \lambda \psi(x)$. Welche Aussage über die Eigenwerte kann man aus der Bedingung der Normierbarkeit der Wellenfunktion $\psi(x)$ treffen?

Übung 4.2 – Der Drehimpulsoperator. (a) Zeigen Sie explizit, daß der Drehimpulsoperator $\mathbf{J} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ hermitesch ist, d.h.

$$\int \psi^* \mathbf{J} \psi d^3x = \int (\mathbf{J} \psi)^* \psi d^3x .$$

(b) Beweisen Sie die folgende Relation:

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J}$$

Übung 4.3 – Kommutatorrelationen. Für zwei Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} gelte $[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0$. Zeigen Sie, daß unter dieser Voraussetzung folgt:

$$[\mathbf{A}^n, \mathbf{B}] = n \mathbf{A}^{n-1} [\mathbf{A}, \mathbf{B}] .$$

Verwenden Sie dazu vollständige Induktion.

Übung 4.4 – Der Translationsoperator. Der Translationsoperator $\mathbf{T}(\mathbf{a})$, für die Parallelverschiebung um die endliche Strecke \mathbf{a} ist durch

$$\mathbf{T}(\mathbf{a}) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$

definiert. Bestimmen Sie $\mathbf{T}(\mathbf{a})$, indem Sie ihn durch den Impulsoperator $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ ausdrücken. Berechnen Sie dazu $\mathbf{T}(\mathbf{a})$ im eindimensionalen Fall durch einen TAYLORreihenansatz.

Übung 4.5 – Kommutatorrelationen. Beweisen Sie die Beziehung

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

mit den Beziehungen

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_0 &= \mathbf{B} \\ [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_1 &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \\ [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_2 &= [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] \\ [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_n &= [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_{n-1}] . \end{aligned}$$

Betrachten Sie dazu den Operator $\mathbf{F}(\alpha) = e^{\alpha \mathbf{A}} \mathbf{B} e^{-\alpha \mathbf{A}}$. Entwickeln Sie $\mathbf{F}(\alpha)$ in eine TAYLORreihe nach α und berechnen Sie die Differentialquotienten. Zeigen Sie, daß für den Spezialfall $[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0$ folgt

$$e^{\mathbf{A}} \mathbf{B} e^{-\mathbf{A}} = \mathbf{B} + [\mathbf{A}, \mathbf{B}] .$$

Übung 4.6 – Kugelflächenfunktionen. Die Kugelflächenfunktionen niedrigster Ordnung sind gegeben durch

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) & Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi} & Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi} \end{aligned}$$

mit $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{l,m}^*$.

Zeigen Sie, daß diese Kugelflächenfunktionen die Orthonormalitätsbedingung

$$\int Y_{l',m'}^*(\theta, \phi) Y_{l,m}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

erfüllen, und zwar für die Spezialfälle $Y_{1,m}$ mit $m = -1, 0, 1$ und $Y_{l,0}$ mit $l = 0, 1, 2$.

Übung 4.7 – Beugung an einem Spalt. Betrachten Sie die Beugung einer Elektronenwelle an einem Spalt. Vor dem Spalt ist der Impuls der Elektronen in z -Richtung festgelegt, während die räumliche Ausdehnung der Welle in y -Richtung unendlich ist. Die Position des ersten Interferenzminimums ist gegeben durch das aus der Optik bekannte Gesetz

$$\sin \theta_{\min} = \frac{\lambda}{a},$$

wobei λ die Wellenlänge und a die Spaltbreite bezeichnet. Schätzen Sie die Orts- und Impulsunschärfen Δy und Δp_y der Elektronen nach dem Durchgang durch den Spalt ab. Verwenden Sie dazu im Fall der Impulsunschärfe die Position des ersten Interferenzminimums und berechnen Sie das Produkt

$$\Delta y \cdot \Delta p_y.$$

Diskutieren Sie, warum als Ergebnis dieser Betrachtung nicht der exakte Wert der Unschärferelation folgt.

Übung 4.8 – Eigenfunktionen und Eigenwerte. Der eindimensionale HAMILTONoperator

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

habe das vollständige System von Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ und die Eigenwerte E_n , so daß gilt

$$\mathbf{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle.$$

Beweisen Sie die folgenden Relationen:

$$\sum_n (E_n - E_m) |\langle \psi_n | \mathbf{x} | \psi_m \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

und

$$\sum_n (E_n - E_m)^2 |\langle \psi_n | \mathbf{x} | \psi_m \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \psi_m | \mathbf{p}^2 | \psi_m \rangle.$$

Übung 4.9 – Rotationsoperator. Zeigen Sie, daß der Operator, der eine Drehung des Koordinatensystems um die z -Achse um den Winkel α beschreibt, durch

$$\hat{D}(\alpha) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z\right)$$

gegeben ist.

S. 250

Übung 4.10 – Zweidimensionales KEPLER-Problem. Behandeln Sie das zweidimensionale KEPLER-Problem, d.h. geben Sie die Eigenwerte (für $E < 0$) und Eigenfunktionen im Potential

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

an, wobei angenommen sei, daß die Lösung nicht von z abhängt.

Übung 4.11 – Starres Hantelmolekül. Ein starres Hantelmolekül rotiere im Raum um den Koordinatenursprung mit zwei Freiheitsgraden, den Polarwinkeln ϑ und φ (Rotator). Es werde durch den HAMILTON-Operator

$$H = \frac{1}{2\Theta}\tilde{L}^2$$

beschrieben, wobei Θ das Trägheitsmoment ist.

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte, Eigenfunktionen und eventuelle Entartungsgrade.

(b) Zu einem bestimmten Zeitpunkt befinde sich der Rotator im Zustand

$$\psi(\vartheta, \varphi) = a(\cos^2 \vartheta + \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi)$$

Mit welcher Wahrscheinlichkeit liefert eine Messung von L^2 die Werte $6\hbar^2, 2\hbar^2, 0$?

(c) Mit welcher Wahrscheinlichkeit ergibt die gleichzeitige Messung von L^2 und L_z das Wertepaar $(6\hbar^2, -2\hbar)$?

Übung 4.12 – Kristallfeldoperator. Der HAMILTON-Operator

$$H = A\hat{L}_z^2 + B(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$$

wird in der Festkörperphysik als sogenannter Kristallfeldoperator häufig zur Beschreibung des elektrischen Feldes in einem Kristall herangezogen.

Bestimmen Sie seine Eigenwerte und seine *reellen* Eigenfunktionen.

Übung 4.13 – Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators. Die Wellenfunktion $\psi_m^{(0)}$ seien Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator \hat{J}_z , d.h.

$$\hat{J}_z \psi_m^{(0)} = m \psi_m^{(0)}$$

[zur einfacheren Schreibweise seien alle Drehimpulse in Einheiten von \hbar angegeben].

(a) Zeigen Sie, daß die gedrehte Wellenfunktion

$$\psi_m = \exp(-i\varphi\hat{J}_z) \exp(-i\vartheta\hat{J}_y) \psi_m^{(0)}$$

Eigenfunktionen des gedrehten Operators

$$\hat{J}_\xi = \hat{J}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \hat{J}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \hat{J}_z \cos \vartheta$$

sind, d.h.

$$\hat{J}_\xi \psi_m = m \psi_m .$$

Hinweis: Zeigen Sie zunächst die Beziehung

$$\begin{aligned} \exp(-i\vartheta \hat{J}_y) \hat{J}_z \exp(i\vartheta \hat{J}_y) &= \hat{J}_z \cos \vartheta + \hat{J}_x \sin \vartheta \\ \exp(-i\varphi \hat{J}_z) \hat{J}_x \exp(i\varphi \hat{J}_z) &= \hat{J}_x \cos \varphi + \hat{J}_y \sin \varphi \end{aligned}$$

(b) Gegeben sei ein System von Eigenfunktionen zur Drehimpulsoperator

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \\ \hat{J}_z |jm\rangle &= \hbar m |jm\rangle . \end{aligned}$$

Berechnen Sie:

$$\Delta J_i = \sqrt{\langle jm | \hat{J}_i^2 | jm \rangle - \langle jm | \hat{J}_i | jm \rangle^2} \quad \text{für } i = x, y, z$$

Übung 4.14 – Kommutatorrelationen für den Drehimpulsoperator. Beweisen Sie die Relationen

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{x}_j] &= i \epsilon_{ijk} \hat{x}_k \\ [\hat{L}_i, \hat{p}_j] &= i \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \\ [\hat{L}_i, \hat{p}^2] &= [\hat{L}_i, \hat{x}^2] = 0 \end{aligned}$$

wobei \hat{L}_i die drei kartesischen Komponenten des Drehimpulsoperators sind für $i = x, y, z$. Dabei ist ϵ_{ijk} der vollständig antisymmetrische Tensor.

Übung 4.15 – Drehimpulsoperator in sphärischen Koordinaten. Berechnen Sie die Operatoren \hat{L}_x , \hat{L}_y und \hat{L}_z in sphärischen Koordinaten, ausgehend von der Tatsache, daß \hat{L}_x , \hat{L}_y und \hat{L}_z die Generatoren von infinitesimalen Rotationen sind:

$$\psi'(\mathbf{r}) = (1 + i d\alpha \hat{\mathbf{L}}) \psi(\mathbf{r}) .$$

Übung 4.16 – Drehoperatoren. Zeigen Sie, daß die Drehoperatoren

$$\hat{D}_z(\alpha) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{J}_z\right) \quad \text{und} \quad \hat{D}_y(\beta) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_y\right)$$

nicht miteinander vertauschen.

Übung 4.17 – Rotationssymmetrisches Potential. Es sei ein Potential vorgegeben, das um eine Gerade (z -Achse) rotationssymmetrisch ist.

(a) Man behandle die SCHRÖDINGER-Gleichung in Zylinderkoordinaten und zeige, daß der Drehimpuls um die z -Achse quantelt ist.

(b) Was gilt für die Lösung in z -Richtung, falls das Potential nicht von z abhängt?

(c) Bestimmen Sie die Gleichung für den Radialanteil der Wellenfunktion.

HILBERT-Raum und Operator-Methode

5.1 Grundlegende Definitionen

1. \mathcal{H} ist ein linearer, normierter Vektorraum über der Menge \mathbb{C} der komplexen Zahlen: dann gilt für zwei Funktionen $f, g \in \mathcal{H}$ und Zahlen $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, daß

$$\alpha f + \beta g \in \mathcal{H}$$

2. Über \mathcal{H} ist ein Skalarprodukt definiert, d.h. jedem Paar von Vektoren f, g ist eine komplexe Zahl (f, g) zugeordnet:

$$\begin{aligned} (f, g_1 + g_2) &= (f, g_1) + (f, g_2) \\ (f, \alpha g) &= \alpha (f, g) \\ (g, f) &= (f, g)^* \\ (f, g) = 0 &\Leftrightarrow f \perp g \\ f = \alpha g &\Leftrightarrow f \parallel g \\ \|g\| &= \sqrt{(g, g)} \quad \text{norm} \end{aligned}$$

$$(\alpha f, g) = (g, \alpha f)^* = (\alpha (g, f))^* = \alpha^* (g, f)^* = \alpha^* (f, g)$$

3. \mathcal{H} ist vollständig, d.h. zu jeder CAUCHY-Folge von Vektoren aus \mathcal{H} existiert ein Grenzelement von \mathcal{H} .
4. \mathcal{H} ist von abzählbar unendlicher Dimension; es existiert ein System orthogonaler und auf die Länge 1 normierter Vektoren e_i mit höchstens abzählbar unendlichen reellen Elementen. Jedes Element $f \in \mathcal{H}$ kann nach diesem System entwickelt werden:

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n e_n$$

5. Es gilt die SCHWARZ'sche Ungleichung

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$$

Für eine detaillierte Diskussion der mathematischen Eigenschaften siehe [13].

Beispiele

(a) \mathcal{H}_1 : Menge aller Spaltenvektoren

$$a = (a_\nu) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

mit komplexwertigen Einträgen $a_\nu \in \mathbb{C}$ und endlicher Norm $\sum_{\nu=1}^{\infty} |a_\nu|^2 < \infty$. Das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren a und b ist dann

$$a \cdot b = (a_1, a_2, \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu^* b_\nu$$

In DIRAC'scher Notation läßt sich dies kompakt schreiben als

$$\langle a | b \rangle \quad \text{mit} \quad \langle a | = (a_1, a_2, \dots) \quad \text{und} \quad | b \rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

(b) \mathcal{H}_2 : Menge aller komplexwertigen quadratintegriblen Funktionen. Dann ist für $f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r}) \in \mathbb{C}$

$$(f, g) = \int d^3 r f^*(\mathbf{r}) g(\mathbf{r})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3 r |f(\mathbf{r})|^2 < \infty$$

5.2 Vektoren im HILBERT-Raum

Die SCHRÖDINGER-Gleichung liefert ein vollständiges orthonormiertes System

$$\Psi_\mu(\mathbf{r}) \quad \mu = 1, 2, \dots$$

Die Ψ_μ verhalten sich wie Einheitsvektoren – sie stellen daher die Einheitsvektoren im HILBERT-Raum dar

$$\Psi_\mu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi_\mu \rangle \quad \Psi_\mu^* = \langle \Psi_\mu | \mathbf{r} \rangle$$

Die HILBERT-Raum-Vektoren sind demnach

$$\langle \Psi_\mu | \quad \text{“bra”}$$

$$| \Psi_\mu \rangle \quad \text{“ket”}$$

Die so definierten Vektoren haben die Eigenschaften:

1. Orthogonalität

$$\int d^3r \Psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \Psi_\mu(\mathbf{r}) = \int d^3r \langle \Psi_\lambda | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi_\mu \rangle = \delta_{\lambda\mu}$$

2. Vollständigkeit

$$\int d^3r | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | = 1$$

3. Orthonormalität

$$\langle \Psi_\lambda | \Psi_\mu \rangle = \delta_{\lambda\mu}$$

 4. Vollständigkeit Ψ_α kann nach $\{\Psi_n(\mathbf{r})\}$ entwickelt werden

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(\mathbf{r}) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} a_\mu^{(\alpha)} \Psi_\mu(\mathbf{r}) \\ \langle \mathbf{r} | \Psi_\alpha \rangle &= \sum_{\mu} a_\mu^{(\alpha)} \langle \mathbf{r} | \Psi_\mu \rangle \\ \int d^3r \Psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) &= \sum_{\mu} a_\mu^{(\alpha)} \underbrace{\int d^3r \Psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \Psi_\mu(\mathbf{r})}_{\delta_{\lambda\mu}} = a_\lambda^{(\alpha)} \end{aligned}$$

Folgerungen:

1.

$$\begin{aligned} | \Psi_\alpha \rangle &= \sum_{\mu} a_\mu^{(\alpha)} | \phi_\mu \rangle \\ a_\mu^{(\alpha)} &= \langle \phi_\mu | \Psi_\alpha \rangle = \int d^3r \langle \phi_\mu | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi_\alpha \rangle \\ | \Psi_\alpha \rangle &= \sum_{\mu} \langle \phi_\mu | \Psi_\alpha \rangle | \phi_\mu \rangle = \underbrace{\sum_{\mu} | \phi_\mu \rangle \langle \phi_\mu |}_{=1} \cdot | \Psi_\alpha \rangle \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \phi_\mu^*(\mathbf{r}) \phi_\mu(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \sum_{\mu} \langle \mathbf{r}' | \phi_\mu \rangle \langle \phi_\mu | \mathbf{r} \rangle &= \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

Darstellung "reiner" Zustände

Ein HILBERTraum-Vektor $|\psi_\alpha\rangle$ entspricht einem "reinen" Zustand in der Quantenmechanik – z.B. für das Wasserstoff-Atom

$$|\Psi\rangle = |n, l, m\rangle$$

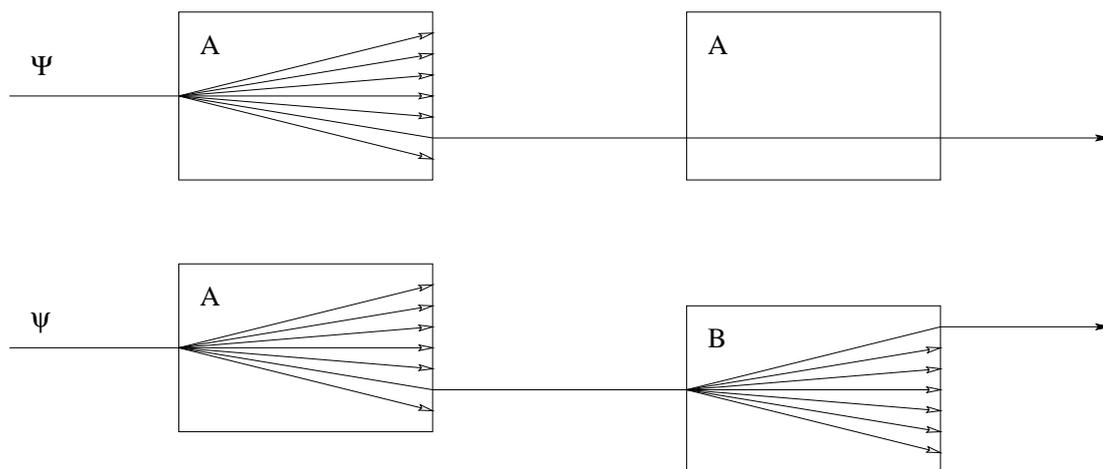


Abbildung 5.1: Präparation eines reinen Zustandes: eine Reihenschaltung der Filterung ist möglich, wenn $[a_j, b_j] = 0$

5.3 Operatoren im HILBERTraum

Für die SCHRÖDINGER-Gleichung bieten sich zwei äquivalente Darstellungen an:

$$H \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad \Leftrightarrow \quad H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle$$

Damit ist für einen beliebigen Vektor $A | \Psi \rangle = | \Psi' \rangle$

Operatoren im HILBERTraum

Unter einem Operator A versteht man eine Abbildung, die jedem Zustand $| \Psi \rangle \in \mathcal{H}$ eindeutig einen Zustand $| \Psi' \rangle \in \mathcal{H}$ zuordnet.

Lineare Operatoren

Hier gelten folgende Vektorraumaxiome:

$$\begin{aligned} A_1 | \Psi \rangle &= A_2 | \Psi \rangle \quad \Rightarrow \quad A_1 = A_2 \\ (A_1 + A_2) | \Psi \rangle &= A_1 | \Psi \rangle + A_2 | \Psi \rangle \\ (A_1 A_2) | \Psi \rangle &= A_1 (A_2 | \Psi \rangle) \\ \hat{0} | \Psi \rangle &= 0 \\ \mathcal{I} | \Psi \rangle &= | \Psi \rangle \end{aligned}$$

Adjungierte Operatoren

$$\langle \gamma | A | \alpha \rangle = \int \phi_\gamma^*(\mathbf{r}) A \phi_\alpha(\mathbf{r}) d^3r$$

$$\begin{aligned}
 \langle \gamma | A | \alpha \rangle &= \langle \hat{\gamma} | \alpha \rangle \\
 A^\dagger | \gamma \rangle &= | \hat{\gamma} \rangle \\
 \\
 \langle \gamma | A | \alpha \rangle &= \langle \hat{\gamma} | \alpha \rangle \\
 &= \langle \alpha | \hat{\gamma} \rangle^* \\
 &= \langle \alpha | A^\dagger | \gamma \rangle^* \\
 \\
 \langle \gamma | A | \alpha \rangle &= \langle \alpha | A^\dagger | \gamma \rangle^* \\
 \langle \gamma | \hat{\alpha} \rangle &= \langle \hat{\alpha} | \gamma \rangle^* \\
 | \hat{\alpha} \rangle &= A | \alpha \rangle = | A \alpha \rangle \\
 \langle \hat{\alpha} | &= \langle \alpha | A^\dagger = \langle A \alpha | \\
 \\
 (A^\dagger)^\dagger &= A \\
 (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger
 \end{aligned}$$

A^\dagger wirkt im dualen Raum \mathcal{H}^* so, wie A in \mathcal{H} .

Selbstadjungierte (hermitesche) Operatoren

Hermitescher Operator

$$A | \alpha \rangle = A^\dagger | \alpha \rangle \quad \Rightarrow \quad A^\dagger = A$$

- (a) Die Erwartungswerte sind reel.
- (b) Eigenzustände sind orthogonal

$$\begin{aligned}
 A | \alpha_j \rangle &= a_j | \alpha_j \rangle \\
 \langle a_i | A | \alpha_j \rangle &= \langle a_i | a_j | \alpha_j \rangle = a_j \langle a_i | \alpha_j \rangle = \langle a_j | A | \alpha_i \rangle^* = a_i \langle a_i | \alpha_j \rangle \\
 (a_i - a_j) \langle a_i | \alpha_j \rangle &= 0
 \end{aligned}$$

Reziproker (inverser) Operator

$$\left. \begin{aligned}
 | \beta \rangle &= A | \alpha \rangle \\
 A^{-1} | \beta \rangle &= | \alpha \rangle
 \end{aligned} \right\} A^1 A = A A^1 = 1$$

Unitäre Operatoren

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

Damit entsprechen

$$\begin{aligned} |\bar{\Psi}\rangle &= U|\Psi\rangle \\ \bar{A} &= UAU^\dagger \end{aligned}$$

unitären Transformationen. Unter einer derartigen Transformation unverändert bleiben:

1. *Eigenwert*

$$\begin{aligned} \langle \bar{\Psi} | \bar{\phi} \rangle &= \langle \bar{\Psi} | U | \phi \rangle = \langle \phi | U^\dagger | \Psi \rangle \\ &= \langle \phi | UU^\dagger | \Psi \rangle^* \\ &= \langle \Psi | (UU^\dagger)^\dagger | \phi \rangle \\ &= \langle \Psi | U^\dagger U | \phi \rangle \\ &= \langle \Psi | \phi \rangle \end{aligned}$$

2. *Skalarprodukt*

$$\langle \bar{\phi} | \bar{A} | \phi \rangle = \langle \phi | U^\dagger U A U^\dagger U | \phi \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle$$

3. *Erwartungswert*

$$\begin{aligned} A | a_i \rangle &= a_i | a_i \rangle \\ \bar{A} | \bar{a}_i \rangle &= \bar{a}_i | \bar{a}_i \rangle \end{aligned}$$

$$\bar{A} | \bar{a}_i \rangle = U A U^\dagger U | a_i \rangle = U A | a_i \rangle = U a_i | a_i \rangle = a_i | \bar{a}_i \rangle$$

Insbesondere gilt:

Physikalische Aussagen bleiben unter unitären Transformationen invariant !

Projektionsoperatoren

Aufteilung des HILBERT-Raumes in zwei Teilräume

$$\mathcal{H} = \mathcal{U} \otimes \mathcal{V}$$

so daß für zwei Elemente $u \in \mathcal{U}$ und $v \in \mathcal{V}$ gilt

$$\langle u | v \rangle = 0 .$$

Jeder Vektor $|\psi\rangle$ läßt sich dann zerlegen in

$$|\psi\rangle = |\psi_{\mathcal{U}}\rangle + |\psi_{\mathcal{V}}\rangle \quad \text{wobei} \quad |\psi_{\mathcal{U}}\rangle \in \mathcal{U}, |\psi_{\mathcal{V}}\rangle \in \mathcal{V} .$$

1. P_u ist hermitesch

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | P_u | \Psi \rangle &= \langle \Psi' | \Psi_u \rangle = \langle \Psi'_u | \Psi_u \rangle = \langle \Psi'_u | \Psi \rangle \\ \langle \Psi'_u | &= \langle \Psi' | P_u \end{aligned}$$

2. $P_u^2 \neq P_u$

$$P_u^2 | \Psi \rangle = P_u | \Psi_u \rangle = | \Psi_u \rangle = P_u | \Psi \rangle$$

3. P_u besitzt Eigenzustände 1 oder 0

$| p \rangle$ sei Eigenzustand zu P_u

$$(P_u^2 - P_u | p \rangle) = \underbrace{(p^2 - p)}_{=0} | p \rangle = 0$$

Demnach gilt $P = 0, 1$

$$\begin{aligned} P_u | p \rangle = | p \rangle & : p = 1 & | p \rangle \in \mathcal{U} \\ P_u | p \rangle = 0 & : p = 0 & | p \rangle \in \mathcal{V} \end{aligned}$$

4. Bildung eines vollständigen Orthonormalen-Systems (VONS)

$$\begin{aligned} | \Psi \rangle &= P_u | \Psi \rangle + P_v | \Psi \rangle \\ \mathcal{I} | \Psi \rangle &= \mathcal{I} P_u | \Psi \rangle + \mathcal{I} P_v | \Psi \rangle \\ P_v | \Psi \rangle &= (\mathcal{I} - P_u) | \Psi \rangle \\ P_u &= \mathcal{I} - P_v \end{aligned}$$

Mit den Basen

$$\{ | u \rangle \} \quad \text{mit} \quad u = 1, \dots, N \quad \text{und} \quad \{ | v \rangle \} \quad \text{mit} \quad v = N + 1, \dots, \infty$$

für \mathcal{U} und \mathcal{V} läßt sich dann schreiben

$$P_u = \sum_{n=1}^N | u \rangle \langle u | \quad \text{und} \quad P_v = \sum_{n=N+1}^{\infty} | v \rangle \langle v |$$

5.4 Lineare Operatoren als Matrizen

\mathcal{H} wird aufgespannt durch $|\Psi_n\rangle$ mit

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1$$

(a) Wellenvektor

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \Psi_n$$

Damit läßt sich die eindeutig zuordnen

$$|\Psi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

(b) Operator Mit der Umschreibung

$$A = 1 \cdot A \cdot 1 = \sum_{m,n} |\phi_n\rangle \underbrace{\langle \phi_n | A | \phi_m \rangle}_{A_{nm}} \langle \phi_m |$$

bekommt man die Zuordnung

$$A = (A_{nm}) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1m} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \\ A_{n1} & & \cdots & A_{nm} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Eine Abbildung im Hilbert-Raum läßt sich dann schreiben:

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle &= \sum_m A|\phi_m\rangle \langle \phi_m | \Psi\rangle \\ \langle \phi_n | A | \Psi\rangle &= \sum_m \langle \phi_n | A | \phi_m\rangle \langle \phi_m | \Psi\rangle \\ \Psi' &= \sum_m A_{nm} \Psi_m \\ \begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \\ \vdots \\ \Psi'_n \\ \vdots \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1m} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & & \vdots & \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \\ A_{n1} & \cdots & \cdots & A_{nm} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_n \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Für den Fall $|\Psi'\rangle = a\Psi$ wird dies zu einer Eigenwertgleichung:

$$\begin{pmatrix} (A_{11} - a) & A_{12} & \cdots & A_{1m} \\ A_{21} & (A_{22} - a) & & \\ \vdots & & \ddots & \\ A_{n1} & & & (A_{nm} - a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

(c) Transponierter Wellenvektor

$$\langle \Psi | = \sum_n \langle \Psi | \phi_n \rangle \langle \phi_n | = \sum_n \langle \phi_n | \Psi \rangle^* \langle \phi_n | = \sum_n \Psi_n^* \langle \phi_n |$$

Dann läßt sich identifizieren

$$\langle \Psi | \quad \longleftrightarrow \quad (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \dots, \Psi_n, \dots)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 U^\dagger U &= 1 \\
 \sum_m \langle i | U^\dagger | m \rangle \langle m | U | j \rangle &= \langle i | j \rangle = \delta_{ij} \\
 \sum_m \langle m | U | i \rangle^* \langle m | U | j \rangle &= \delta_{ij}
 \end{aligned}$$

□

Für eine zweidimensionale Drehmatrix

$$R = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

ist

$$\tilde{R}R = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Damit entspricht eine unitäre Matrix einer Drehung im Hilbert-Raum.

Für einen Operator A mit dem Eigenfunktionensystem

$$A | a_n \rangle = a_n | a_n \rangle$$

erhält man als Matrixelemente

$$\langle a_n | A | a_m \rangle = A_{nm} = \langle a_n | a_n | a_m \rangle = a_n \delta_{nm}$$

Jetzt gibt es immer eine unitäre Transformation, die eine Matrix auf Diagonalform bringt:

$$a_i \delta_{ij} = \langle a_i | A | a_j \rangle = \sum_{n,m} \langle a_i | \phi_m \rangle \langle \phi_m | A | \phi_n \rangle \langle \phi_n | a_j \rangle$$

$$U_{im} = \langle a_i | \phi_m \rangle$$

$$\langle \phi_m | a_j \rangle = \langle a_j | \phi_m \rangle^* = U_{mj}^\dagger$$

$$\sum_m \langle a_i | \phi_m \rangle \langle \phi_m | a_j \rangle = \langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$$

Veranschaulichung

	Matrix	Komponenten	Beispiel
	A	a_{ij}	$\begin{pmatrix} 1 & i \\ 1+i & 2 \end{pmatrix}$
transponiert	A^t	$(A^t)_{ij} = A_{ji}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1+i \\ i & 2 \end{pmatrix}$
komplex konjugiert	A^*	$(A^*)_{ij} = (A_{ij})^*$	$\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1-i & 2 \end{pmatrix}$
hermitesch konjugiert oder adjungiert	$A^\dagger = (A^t)^*$	$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$	$\begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ -i & 2 \end{pmatrix}$

5.5 Interpretation des Meßprozesses

A sei ein linearer hermitescher Operator mit den Eigenwerten/-funktionen

$$\begin{aligned} A | \phi_n \rangle &= a_n | \phi_n \rangle \\ \{ | \phi_n \rangle \} \\ \sum_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | &= 1 \end{aligned}$$

Ein beliebiger Zustandsvektor läßt sich dann nach dieser Basis entwickeln

$$| \hat{\Psi} \rangle = \sum_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle$$

Der Erwartungswert bei Anwendung eines Operators

$$A | \Psi \rangle = \sum_n a_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle$$

ist dann

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \sum_n \langle \Psi | a_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle \\ &= \sum_n a_n \langle \Psi | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle \\ &= \sum_n a_n | \langle \phi_n | \Psi \rangle |^2 \end{aligned}$$

Mögliche Meßwerte für die Messung der der Observablen A an einem einzelnen Teilchen der quantenmechanischen Gesamtheit sind die Eigenwerte a_n . Nach vielen Einzelmessungen ist $|\langle \Psi | \phi_n \rangle|^2$ die relative Wahrscheinlichkeit.

5.6 Unschärferelation

Für zwei hermite'sche Operatoren L, M gilt

$$(LM - ML)^\dagger = (LM)^\dagger - (ML)^\dagger = M^\dagger L^\dagger - L^\dagger M^\dagger = -(L^\dagger M^\dagger - M^\dagger L^\dagger)$$

und allgemein

$$[L, M] = i\hbar C \quad , \quad C^\dagger = -C \quad (\text{antihermitesch})$$

Jetzt Betrachtung der mittleren Schwankungsquadrate

$$\begin{aligned} (\Delta L)^2 &= \langle \Psi | (L - \hat{L})^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \tilde{L} | \Psi \rangle \\ (\Delta M)^2 &= \langle \Psi | (M - \hat{M})^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \tilde{M} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

Für den hiervon zu bildenden Kommutator gilt

$$[\tilde{L}, \tilde{M}] = [L, M] = i\hbar C$$

Jetzt

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \tilde{L}^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | \tilde{M}^2 | \Psi \rangle &= \langle \tilde{L}\Psi | \tilde{L}\Psi \rangle \langle \tilde{M}\Psi | \tilde{M}\Psi \rangle \\
 \langle \tilde{L}\Psi | \tilde{M}\Psi \rangle &= \langle \Psi | \tilde{L}\tilde{M} | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \left(\frac{1}{2}(\tilde{M}\tilde{L} + \tilde{M}\tilde{L}) + \frac{1}{2}(\tilde{L}\tilde{M} - \tilde{M}\tilde{L}) \right) | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \left(\frac{1}{2}(\tilde{L}\tilde{M} + \tilde{M}\tilde{L}) + \frac{1}{2}i\hbar C \right) | \Psi \rangle
 \end{aligned}$$

Mit der SCHWARZ'schen Ungleichung

$$\sqrt{\langle f | f \rangle} \sqrt{\langle g | g \rangle} \geq |\langle f | g \rangle|$$

läßt sich dann abschätzen

$$\begin{aligned}
 \sqrt{\langle \Psi | \tilde{L}^2 | \Psi \rangle} \sqrt{\langle \Psi | \tilde{M}^2 | \Psi \rangle} &\geq \langle \Psi | \tilde{L}\tilde{M} | \Psi \rangle \\
 \sqrt{\langle \Psi | \tilde{L}^2 | \Psi \rangle} \sqrt{\langle \Psi | \tilde{M}^2 | \Psi \rangle} &\geq \frac{1}{2}i\hbar \langle \Psi | C | \Psi \rangle
 \end{aligned}$$

Somit gilt für die Schwankungsquadrate die HEISENBERG'sche Unschärferelation

$$\sqrt{(\Delta L)^2} \sqrt{(\Delta M)^2} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \Psi | C | \Psi \rangle| \quad (5.2)$$

Im Spezialfall von Ort und Impuls ist dies

$$[P_j, Q_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \quad \rightarrow \quad \sqrt{(\Delta P_j)^2} \sqrt{(\Delta Q_k)^2} \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk} \quad (5.3)$$

5.7 Zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems

Die zeitliche Entwicklung zwischen einem Anfangszustand $|\Psi(t_0)\rangle$ und dem Zustand $|\Psi(t)\rangle$ zu einem späteren Zeitpunkt soll nun ausgedrückt werden mittels eines Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$. Wir schreiben dann

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \quad (5.4)$$

Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$

Die wichtigsten Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators sind:

1. $U(t, t_0)$ ausgewertet für $t = t_0$ ergibt die Identität:

$$U(t_0, t_0) = \text{id}$$

2. $U(t, t_0)$ ist transitiv, das heißt die zeitliche Entwicklung eines Systems vom Zeitpunkt t_0 nach t' und anschließend nach t läßt sich schreiben als

$$U(t, t_0) = U(t, t') U(t', t_0) \quad \text{für } t > t' > t_0$$

3. Wegen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion Ψ muß die Norm von $|\Psi\rangle$ erhalten bleiben:

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle U \Psi(t_0) | U \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | U^\dagger U | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

Dazu muß aber gelten, daß $U^\dagger U = 1$, was also bedeutet, daß U ein *unitärer Operator* ist.

4. Aufgrund der Transitivitätseigenschaft von U können wir auch schreiben

$$U(t_0, t_0) = U(t_0, t') U(t', t_0) = 1,$$

so daß sich

$$U^{-1}(t_0, t) = U(t, t_0)$$

als inverser Zeitentwicklungsoperator identifizieren läßt.

Infinitesimale Entwicklung

Für den Fall einer infinitesimalen Zeitdifferenz Δt läßt sich $U(t, t_0)$ entwickeln

$$U(t + \Delta t, t) = 1 + K(t)\Delta t \quad (5.5)$$

Aus der Unitarität von $U(t, t_0)$ folgt dann

$$\begin{aligned} U^\dagger U = 1 &= (1 + K^\dagger(t)\Delta t) (1 + K(t)\Delta t) \\ &= 1 + K(t)\Delta t + K^\dagger(t)\Delta t + K^\dagger(t)K(t)(\Delta t)^2 \end{aligned}$$

Für Terme linearer Ordnung in Δt kann dies aber nur gelten, wenn

$$K^\dagger(t) = -K(t) \quad (5.6)$$

$K(t)$ ist demnach antihermitesch. Als einfachster Fall für diese Bedingung setzen wir daher

$$K(t) = -\frac{i}{\hbar}H(t) \quad (5.7)$$

und damit auch

$$U(t + \Delta t, t) = 1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\Delta t$$

Die zeitliche Änderung eines Zustandes läßt sich dann ausdrücken durch

$$\begin{aligned} |\Psi(t + \Delta t)\rangle &= U(t + \Delta t, t) |\Psi(t)\rangle \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\Delta t\right) |\Psi(t)\rangle \\ &= |\Psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}H(t)\Delta t |\Psi(t)\rangle \\ \frac{|\Psi(t + \Delta t)\rangle - |\Psi(t)\rangle}{\Delta t} &= -\frac{i}{\hbar}H(t) |\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist aber nichts anderes als der Differenzenquotient, so daß wir durch Limesbildung sofort erhalten

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Psi(t + \Delta t)\rangle - |\Psi(t)\rangle}{\Delta t} = \frac{d}{dt} \Psi(t)$$

Für infinitesimale Zeitintervalle ist also

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

Zeitanhängige SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle = H(t) | \Psi(t) \rangle \quad (5.8)$$

Durch nochmaliges Umschreiben mit

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

erhalten wir die vollkommen äquivalente

Operatorgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (5.9)$$

Durch Umstellen können wir hieraus eine Integralgleichung für $U(t, t_0)$ aufstellen:

$$\begin{aligned} d U(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t, t_0) dt \\ \int_{U(t_0, t_0)}^{U(t, t_0)} d U(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) U(\tau, t_0) d\tau \\ U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) U(\tau, t_0) d\tau \end{aligned} \quad (5.10)$$

Lösungen von $U(t, t_0)$

(a) H ist zeitunabhängig. Dann macht man für (5.9) den Lösungsansatz

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \cdot (t - t_0)\right)$$

Entwickelt man dies für kleine Zeiten

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right) \\ &= 1 + \left(-\frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right)^2 + \dots \\ \frac{d}{dt} U(t, t_0) &= -\frac{iH}{\hbar}(t - t_0) + \left(-\frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right) \left(-\frac{iH}{\hbar}\right) + \dots \\ &= -\frac{iH}{\hbar} \left(1 - \frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right) + \dots \end{aligned}$$

und berücksichtigt nur Terme maximal linearer Ordnung, so erhält man wieder eine Lösung für (5.9)

$$\begin{aligned} i\hbar \left(-\frac{iH}{\hbar} \right) \left(1 - \frac{iH}{\hbar}(t-t_0) \right) &= H \left(1 - \frac{iH}{\hbar}(t-t_0) - \frac{1}{2} \left(-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)^2 \right) \right) \\ H - \frac{iH^2}{\hbar^2}(t-t_0) &= H - \frac{iH^2}{\hbar^2}(t-t_0) \end{aligned}$$

(b) H ist zeitabhängig, aber die H zu verschiedenen Zeiten t_i kommutieren.

$$U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right)$$

(c) H ist zeitabhängig und die H zu verschiedenen Zeiten t_i kommutieren nicht.

In diesem Fall läßt sich der Zeitentwicklungsoperator nur iterativ durch Einsetzen in die rechte Seite der Integralgleichung (5.10) bestimmen; durch eine weitere Zerlegung erhalten wir

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

so daß bei Einsetzen

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

Bei Einfügen einer weiteren Zerlegung

$$U(t_2, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_2} H(t_3) U(t_3, t_0) dt_3$$

ist demnach

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) \\ &\quad - \left(\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H(t_1) H(t_2) H(t_3) U(t_3, t_0) \end{aligned}$$

Bei vollständiger rekursiver Ersetzung erhält man dann die¹

¹ Dazu auch: [14], 68—73.

DYSON-Reihe

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2) \dots H(t_n) \quad (5.11)$$

5.8 Erwartungswert eines Operators

Je nach der Art, wie die Zeitentwicklung eines Operators berücksichtigt wird unterscheiden wir:

(a) SCHRÖDINGERbild

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Phi(t) | A_S | \Phi(t) \rangle$$

Die Zustände $|\Phi(t)\rangle$ ändern sich gemäß der Bewegungsgleichung, während die Operatoren zeitlich konstant sind (abgesehen für den Fall einer expliziten Zeitabhängigkeit).

(b) HEISENBERGBild: Durch die Benutzung des Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$ läßt sich schreiben

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | A_S | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle U(t, t_0)\Psi(t_0) | A_S | U(t, t_0)\Psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \Psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \Psi(t_0) | A_H(t) | \Psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Die Zeitabhängigkeit der Zustände wird demnach durch den Zeitentwicklungsoperator auf den neuen Operator $A_H = U^\dagger A_S U$ übertragen – die Zustände $|\Psi(t_0)\rangle$ selber sind jetzt durch die Startwerte gegeben und damit konstant.

Bewegungsgleichung für A_H

Ableitung des als $A_H(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0)$ definierten Operators im HEISENBERGBild nach der Zeit ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H &= \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A_S U + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger A_S \frac{\partial U}{\partial t} \\ &= \left(\frac{i}{\hbar} U^\dagger H \right) A_S U + U^\dagger \dot{A}_S U + U^\dagger A_S \left(-\frac{i}{\hbar} H U \right) \\ &= \frac{1}{\hbar} U^\dagger H U U^\dagger A_S U + U^\dagger \dot{A}_S U - \frac{i}{\hbar} U^\dagger A_S U U^\dagger H U \\ &= \frac{i}{\hbar} H_H A_H + U^\dagger \dot{A}_S U - \frac{i}{\hbar} A_H H_H \\ &= \frac{i}{\hbar} (H_H A_H - A_H H_H) + U^\dagger \dot{A}_S U \\ &= \frac{i}{\hbar} [H_H, A_H] + \left(\frac{\partial}{\partial t} A_S \right)_H \end{aligned}$$

Hängt A_S also nicht explizit von der Zeit ab, so ist

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} A_S \right)_H = 0$$

und damit

$$\frac{d}{dt}A_H = \frac{i}{\hbar} [H_H, A_H] \quad (5.12)$$

Ein derartiger Zusammenhang für die zeitliche Änderung einer Meßgröße ist aber bereits aus der klassischen Mechanik bekannt—mittels der POISSON-Klammern läßt sich dort schreiben

$$\frac{d}{dt}A = \{A, \mathcal{H}\} ,$$

wobei $A = A(p, q)$ eine Funktion der verallgemeinerten Koordinaten q und der verallgemeinerten Impulse p ist. Somit bietet sich formal an dieser Stelle der folgende Übergang zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik an:

$$-\frac{i}{\hbar} [A_H, H_H] \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \{A, \mathcal{H}\}$$

5.9 Wechselwirkungsbild

Der HAMILTON-Operator wird zerlegt in einen bereits bekannten Teil – z.B. beim harmonischen Oszillator $H_0 = \frac{p^2}{2m}$ – und einen Störungsterm

$$H = H_0 + H' .$$

Durch Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung erhält man dann

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = (H_0 + H') |\Psi(t)\rangle ,$$

woraus sich das bereits bekannte Verhalten von H_0 abseparieren läßt

$$|\Psi_I(t)\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right) |\Psi(t)\rangle .$$

Ψ_I ist dabei die Wellenfunktion im Wechselwirkungsbild. Bei zeitlicher Ableitung erhält man jetzt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_I(t)\rangle &= -H_0 |\Psi_I(t)\rangle + \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right) (H_0 + H') |\Psi(t)\rangle \\ &= \underbrace{(-H_0 + H') |\Psi_I(t)\rangle}_{=0} \\ &\quad + \underbrace{\exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right) H' \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right)}_{H_I} |\Psi_I(t)\rangle \\ &= H_I(t) |\Psi_I(t)\rangle . \end{aligned}$$

Analog ist für einen beliebigen Operator

$$\begin{aligned} A_I(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)\right) A e^{-iH_0} \\ i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) &= [A_I(t), H_0] \end{aligned}$$

Wechselwirkungsbild

Im Wechselwirkungsbild sind Zustände und Operatoren zeitabhängig.

Zusammenfassend gilt für die verschiedenen Bilder:

	Zustände $ \Psi\rangle$	Operatoren A
Schrödingerbild	$ \Psi(t)\rangle$	A
Heisenbergbild	$ \Psi\rangle$	$A(t)$
Wechselwirkungsbild	$ \Psi(t)\rangle$	$A(t)$

Da zum Wechsel zwischen den verschiedenen Darstellungen nur unitäre Transformationen verwendet wurden, sind alle drei Bilder also vollkommen äquivalent.

5.10 Zeitabhängigkeit des harmonischen Oszillators

Im eindimensionalen Fall ist

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{5.13}$$

mit den zeitunabhängigen Operatoren x, p, a^\dagger, a . Unter Verwendung der Beziehung

$$e^{i\lambda B} A e^{-i\lambda B} = A + i\lambda [B, A] + \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right) [B, [B, A]] + \dots + \left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right) [B, [B, \dots, [B, A]] \dots]$$

läßt sich dann schreiben

$$\begin{aligned} x(t) &= U^\dagger(t, 0)x(0)U(t, 0) \\ &= x(0) + \frac{it}{\hbar} [H, x(0)] + \left(\frac{i^2t^2}{\hbar^2}\right) [H, [H, x(0)]] + \dots \\ &\quad \text{für die "ungeraden" Terme ist } [H, x(0)] = -\frac{i\hbar}{m}p(0), \\ &\quad \text{und für die "geraden" Terme } [H, p(0)] = i\hbar m\omega^2x(0) \\ &= x(0) + \frac{p(0)}{m}t + \frac{1}{2!}t^2\omega^2x(0) - \frac{1}{3!}\frac{t^3\omega^3p(0)}{m} + \dots \\ &= x(0)\cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega}\sin(\omega t) \end{aligned}$$

Analog dazu ergibt sich für den Impuls

$$p(t) = -m\omega x(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t).$$

Allerdings hatten wir bereits gesehen, daß

$$\langle n | x(t) | n \rangle = 0 \quad \text{bzw.} \quad \langle n | p(t) | n \rangle = 0,$$

da sich die $x(t), p(t)$ durch die Operatoren a^\dagger, a darstellen lassen, diese aber nur Zustände $(n, n + 1)$ bzw. $(n, n - 1)$ miteinander verbinden. Es bleibt also die Frage, welcher quantenmechanische Zustand jetzt dem klassischen Oszillator ähnelt. Für einen solche Zustand nämlich muß die Wellenfunktion

- oszillieren, d.h. das Teilchen führt eine periodische Bewegung aus, und
- nicht zerfließen, d.h. das Wellenpaket bleibt in seiner Form erhalten (keine Dispersion)

Demzufolge muß es sich bei dem gesuchten Zustand um einen *kohärenten Zustand* handeln, wobei

$$a | \lambda \rangle = \lambda | \lambda \rangle$$

λ ist im allg. ein komplexer Eigenwert zum Energiezustand $| \lambda \rangle$ des harmonischen Oszillators.

Eigenschaften kohärenter Zustände

1. Drücke $| \lambda \rangle$ durch Energieeigenzustände aus:

$$| \lambda \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n) | n \rangle$$

Die Verteilung $|f(n)|^2$ ist vom Poisson-Typ:

$$|f(n)|^2 = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle}$$

2. $| \lambda \rangle$ kann aus dem Oszillator-Grundzustand durch eine endliche Transformation erzeugt werden.
3. $| \lambda \rangle$ erfüllt zu jeder Zeit die minimale Unschärferelation

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

5.11 Kohärenter Zustand in der Ortsdarstellung

Wellenpakete minimaler Unschärfe

Für ein Wellenpaket mit minimaler Unschärfe

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

und mittleren Schwankungsquadraten

$$\Delta x = \sqrt{(x - \langle x \rangle)^2} \quad \Delta p_x = \sqrt{(p_x - \langle p_x \rangle)^2}$$

hat man die Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \exp\left(ip_0 x - \frac{x^2}{4(\Delta x)^2}\right) \quad (5.14)$$

mit den Konstanten $p_0 = \langle p \rangle$ und x . Damit stellt

$$|\Psi(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\Delta x} \exp\left(-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}\right)$$

eine Gaußverteilung um $\langle x \rangle = 0$ mit mittlerem Schwankungsquadrat $(\Delta x)^2$ dar. Mittels einer Fouriertransformation – siehe hierzu auch Aufgabe 5.1 – erhält man dann die zugehörige Darstellung im Impulsraum

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(\Delta x)^2}{\hbar^2} (p - p_0)^2\right) \quad (5.15)$$

Dies ist eine Gaußverteilung um $\langle p \rangle = 0$ mit mittlerem Schwankungsquadrat

$$(\Delta p)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\Delta x)^2$$

so daß wir durch einfaches umschreiben erhalten

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

Zustände des harmonischen Oszillators

Wellenfunktion und SCHRÖDINGER-Gleichung sind

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \exp\left(\frac{i \langle p \rangle x}{\hbar} - \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4(\Delta x)^2} - i\varphi(t)\right) \quad (5.16)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (5.17)$$

sollen die klassische Differentialgleichung für den Erwartungswert des Ortes

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x \rangle + \omega^2 \langle x \rangle = 0 \quad (5.18)$$

wiedergeben. Zur Bestimmung von Δx und $\varphi(t)$ setzen wir also (5.16) in (5.17) ein:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{2(\Delta x)^2} + \left(\frac{i \langle p \rangle}{\hbar} - \frac{(x - \langle x \rangle)}{2(\Delta x)^2} \right)^2 \right] + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + i\hbar \left[\frac{i \langle p \rangle x}{\hbar} - \frac{(x - \langle x \rangle) \langle \dot{x} \rangle}{2(\Delta x)^2} - i\dot{\varphi}(t) \right] &= 0 \\ \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^2} + \frac{m \langle \dot{x} \rangle^2}{2} - \frac{\hbar^2 x^2}{8m(\Delta x)^4} - \frac{\hbar^2 \langle x \rangle^2}{8m(\Delta x)^4} + \frac{\hbar^2 \langle x \rangle x}{4m(\Delta x)^4} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + m\omega^2 \langle x \rangle x + \hbar \dot{\varphi}(t) &= 0 \\ \langle x \rangle x \left[m\omega^2 - \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^4} \right] + \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^2} + \frac{m \langle \dot{x} \rangle^2}{2} + \frac{x^2}{2} \left[m\omega^2 - \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^4} \right] - \frac{\hbar^2 \langle x \rangle^2}{8m(\Delta x)^4} + \hbar \dot{\varphi}(t) &= 0 \\ \left[\frac{x^2}{2} + \langle x \rangle x \right] \left[\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4(\Delta x)^4} \right] + \frac{1}{4(\Delta x)^2} + \frac{m^2 \langle \dot{x} \rangle^2}{2\hbar^2} - \frac{\langle x \rangle^2}{8(\Delta x)^4} + \frac{m}{\hbar} \dot{\varphi}(t) &= 0 \end{aligned}$$

Dies ergibt dann

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) \\ \dot{\varphi} &= \frac{m}{2\hbar} \left(\langle \dot{x} \rangle^2 - \omega^2 \langle x \rangle^2 \right) + \frac{\omega}{2} \\ \varphi &= \frac{1}{2\hbar} \langle p \rangle \langle x \rangle + \frac{\omega}{2} t \end{aligned}$$

Damit läßt sich dann die Wellenfunktion (5.16) schreiben als

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{i\langle p \rangle x}{\hbar} - \frac{m\omega}{2\hbar}(x - \langle x \rangle)^2\right) \exp\left(-\frac{i\omega t}{2} - i\frac{\langle p \rangle \langle x \rangle}{\hbar}\right)$$

Für $\langle x \rangle = 0$ und $\langle p \rangle = 0$ ist dann

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i\omega t}$$

die Wellenfunktion des Grundzustandes des harmonischen Oszillators.

Die mittlere Energie läßt sich jetzt schreiben als

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2}\right) \quad (5.19)$$

Der kohärente Zustand wird durch $\langle x(t) \rangle$ vollständig bestimmt. $\langle x(t) \rangle$ erfüllt die klassische Schwingungsgleichung (5.18), so daß weiter gilt

$$\frac{m\omega \langle x \rangle + i \langle p \rangle}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = a e^{-i\omega t} \quad \text{mit} \quad |a|^2 = \langle n \rangle$$

Entwickelt man $\Psi(x, t)$ nach den Wellenfunktionen der stationären Zustände des Oszillators

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Psi_n \\ \Psi_0(x, t) &= \Psi_0(x) \exp\left(-i\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega t\right) \\ a_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi dx \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß sich der Oszillator im n-ten Zustand befindet ist dann

$$\omega_n = |a_n|^2 = e^{-\langle n \rangle} \frac{\langle n \rangle^n}{n!}$$

5.12 Der quantenmechanische Propagator

Vorhaben wird es sein, einen Operator zu finden, durch den sich die Übergangsamplitude $\langle \mathbf{r}_2 t_2 | \mathbf{r}_1 t_1 \rangle$ in einer integralen Form

$$\Psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3 r_1 K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) \Psi(\mathbf{r}_1, t_1) \quad (5.20)$$

ausdrücken läßt.

Konstruktion des Propagators

Wir hatten bereits gesehen, daß

$$\begin{aligned} | \Psi(t_2) \rangle &= U(t_2, t_1) | \Psi(t_1) \rangle \\ \Psi(\mathbf{r}_2, t_2) &= \langle \mathbf{r}_2 | \Psi(t_2) \rangle \\ \int d^3 r | r_1 \rangle \langle r_1 | &= 1 \end{aligned}$$

Somit bekommen wir durch Umschreiben

$$\begin{aligned}
 \Psi(\mathbf{r}_2, t_2) &= \langle \mathbf{r}_2 | \Psi(t_2) \rangle \\
 &= \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \Psi(t_1) \rangle \\
 &= \int d^3 r_1 \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 | \Psi(t_1) \rangle \\
 &= \int d^3 r_1 K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) \Psi(\mathbf{r}_1, t_1)
 \end{aligned}$$

Für die Kausalbedingung $t_2 > t_1$ hat man damit den (retardierten)

Propagator

$$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) = \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1) \quad (5.21)$$

$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1)$ ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß ein Teilchen, welches zur Zeit t_1 bei \mathbf{r}_1 startet, zur Zeit t_2 am Punkt \mathbf{r}_2 gemessen wird.

Kompositionseigenschaft des Propagators

Statt dem direkten Übergang

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{r}_0, t_0) &\longrightarrow (\mathbf{r}, t) \\
 &\langle \mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle
 \end{aligned}$$

können wir nach Zerlegung des Intervalls $[t_0, t]$ in n Abschnitte mit

$$t_n > t_{n-1} > t_{n-2} > \dots > t_1 > t_0$$

schreiben

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{r}_0, t_0) &\longrightarrow (\mathbf{r}_1, t_1) \dots (\mathbf{r}_{n-1}, t_{n-1}) \longrightarrow (\mathbf{r}_n, t_n) \\
 &\langle \mathbf{r}_n, t_n | \mathbf{r}_{n-1}, t_{n-1} \rangle \langle \mathbf{r}_{n-1}, t_{n-1} | \mathbf{r}_{n-2}, t_{n-2} \rangle \dots \langle \mathbf{r}_1, t_1 | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle
 \end{aligned}$$

Die Übergänge lassen sich jetzt durch den Zeitentwicklungsoperator schreiben

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{r}_n, t_n | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle &= \langle \mathbf{r}_n | U(t_n, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle \\
 &= \langle \mathbf{r}_n | U(t_n, t_{n-1}) U(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots U(t_1, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle \\
 &= \langle \mathbf{r}_n | U(t_n, t_{n-1}) \int d^3 r_{n-1} | \mathbf{r}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{r}_{n-1} | U(t_{n-1}, t_{n-2}) \int d^3 r_{n-2} \\
 &\quad \dots \langle \mathbf{r}_1 | U(t_1, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle \\
 &= \int d^3 r_{n-1} \int d^3 r_{n-2} \dots \int d^3 r_1 K(\mathbf{r}_n, t_n, \mathbf{r}_{n-1}, t_{n-1}) \\
 &\quad K(\mathbf{r}_{n-1}, t_{n-1}, \mathbf{r}_{n-2}, t_{n-2}) \dots K(\mathbf{r}_1, t_1, \mathbf{r}_0, t_0) \\
 &= \int d^3 r_{n-1} \int d^3 r_{n-2} \dots \int d^3 r_1 K(n, n-1) K(n-1, n-2) \dots K(1, 0)
 \end{aligned}$$

Propagator in der Energiedarstellung

Wenn der Hamilton-Operator nicht explizit zeitabhängig ist, läßt sich der Propagator (5.21) schreiben als

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) &= \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1) \\
&= \langle \mathbf{r}_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)\right) | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1) \\
&= \langle \mathbf{r}_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)\right) \sum_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1) \\
&= \sum_n \langle \mathbf{r}_2 | \phi_n \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \langle \phi_n | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1) \\
&= \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \Theta(t_2 - t_1)
\end{aligned}$$

Um jetzt weitere Aussagen über $K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1)$ machen zu können, betrachten wir eine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung zum Zeitpunkt t_2 :

$$\underbrace{\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H(\mathbf{r}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}_2}) \right]}_{\hat{O}} \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) = 0 \quad (5.22)$$

Wenden wir diesen Operator \hat{O} auf $K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1)$ an, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{O}K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) &= \hat{O} \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \Theta(t_2 - t_1) \\
&= i\hbar \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \delta(t_2 - t_1) \\
&\quad + \Theta(t_2 - t_1) \hat{O} \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \\
&= i\hbar \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \delta(t_2 - t_1) \\
&\quad + \Theta(t_2 - t_1) \underbrace{\hat{O} \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t_2\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t_1\right) \phi_n^*(\mathbf{r}_1)}_{=0} \\
&= i\hbar \sum_n \underbrace{\phi_n(\mathbf{r}_2) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t_2 - t_1)\right)}_{=1} \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \delta(t_2 - t_1) \\
&= i\hbar \sum_n \langle \mathbf{r}_2 | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \mathbf{r}_1 \rangle \delta(t_2 - t_1) \\
&= i\hbar \sum_n \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1 \rangle \delta(t_2 - t_1) \\
&= i\hbar \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \delta(t_2 - t_1)
\end{aligned}$$

$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1)$ ist die Greensfunktion dieser Gleichung und eindeutig bestimmt durch die Randbedingungen.

Eigenschaften für den Spezialfall $t_1 = 0, \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}, t_2 = t$

In diesem Fall ist die GREENSfunktion jetzt

$$\begin{aligned} G(t) &= \int d^3r K(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}, 0) \\ &= \int d^3r \sum_n |\langle \mathbf{r} | n \rangle|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \\ &= \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \end{aligned}$$

Die Summe erstreckt sich dabei über alle möglichen Zustände $|k\rangle$. Führen wir jetzt mit $\beta = i\frac{t}{\hbar}$ eine imaginäre Zeit ein, so ergibt sich

$$G(t) \rightarrow Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

Für $t(\beta) \rightarrow \infty$ ist dann die Energie des Grundzustandes ablesbar; diese beträgt $E \sim e^{-E_0\beta}$. Das zugehörige Energiespektrum erhalten wir nun mittels FOURIERtransformation.

Beispiele

1. Freies Teilchen in einer Dimension

Für einen Impulseigenzustand $|\tilde{p}\rangle$ gilt

$$H|\tilde{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\tilde{p}\rangle \quad \text{und} \quad p|\tilde{p}\rangle = \tilde{p}|\tilde{p}\rangle .$$

Der zugehörige Propagator ist

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) &= \langle x_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)\right) | x_1 \rangle \\ &= \int d\tilde{p} \langle x_2 | \tilde{p} \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)\right) \langle \tilde{p} | x_1 \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{p} \exp\left(\left(i\tilde{p}(x_2 - x_1) - i\tilde{p}^2(t_2 - t_1)\right) \frac{1}{2m\hbar}\right) , \end{aligned}$$

wobei die Impulsdarstellung

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar}\right)$$

benutzt wurde. Zur Auswertung des Integrals benötigen wir, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2(x+a)^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{a} , \quad \text{Re} a > 0 .$$

Allerdings läßt sich dies nicht direkt auf das zu berechnende Integral anwenden. Daher greifen wir zu einem Trick: wir führen dazu eine Rotation in der komplexen Ebene um $\frac{\pi}{2}$ durch; damit gehen die Variablen über in

$$\tilde{p} \rightarrow e^{i\frac{\pi}{4}\tilde{p}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(1+i)\tilde{p} \quad \text{und} \quad \tilde{p}^2 \rightarrow e^{i\frac{\pi}{2}\tilde{p}^2} = i\tilde{p}^2$$

Nach Ausführung der Rotation haben wir dann

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) &\sim \alpha \left(\tilde{p}^2 \frac{\beta}{\sqrt{2}\alpha} (1+i)\tilde{p} \right) \\ &= \alpha \left\{ \left(\tilde{p} + \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha} (1+i) \right)^2 - i \frac{\beta}{4\alpha^2} \right\}, \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\alpha = \frac{t_2 - t_1}{2a\hbar} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{x_2 - x_1}{\hbar}$$

Unter Verwendung dieser Ersetzungen wird der Propagator für ein freies Teilchen schließlich:

$$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)}} \exp \left\{ \frac{im(x_2 - x_1)^2}{2\hbar(t_2 - t_1)} \right\} \quad (5.23)$$

2. Harmonischer Oszillator

$$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t_2 - t_1))}} \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega(t_2 - t_1))} (x_2^2 + x_1^2) \cos(\omega(t_2 - t_1)) - 2x_1 x_2 \right) \quad (5.24)$$

Übungsaufgaben

Übung 5.1 – FOURIERtransformierte einer GAUSSverteilung. Zeige, daß die FOURIERtransformierte einer GAUSSverteilung

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

wieder eine GAUSSverteilung (im Impulsraum) ergibt.

Übung 5.2 – Vertauschungsrelationen.

1. A, B, C seien Operatoren, die die Vertauschungsrelation $[A, B^\dagger] = C$ erfüllen. Sei U ein unitärer Operator und $\tilde{A} = U A U^\dagger$, $\tilde{B} = U B U^\dagger$, $\tilde{C} = U C U^\dagger$. Beweisen Sie, daß dann gilt:

$$[\tilde{A}, \tilde{B}^\dagger] = \tilde{C}$$

2. Sei A ein hermitescher Operator und \mathcal{A} eine Darstellung in einer Basis als Matrix. Zeigen Sie, daß gilt:

$$\det(e^A) = e^{\text{Spur}(A)}$$

Beachten Sie, daß hermitesche Matrizen nur reelle Eigenwerte haben und daher immer diagonalisiert werden können.

Übung 5.3 – Darstellung von Operatoren. Gegeben sei ein zweidimensionaler Zustandsraum mit der Basis $\{ |u_1\rangle, |u_2\rangle \}$. Betrachten Sie in dieser Basis die Operatoren σ_y und M mit den Darstellungen

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix}$$

1. Sind die Operatoren σ_y und M hermitesch?
2. Berechnen Sie für beide Operatoren die Eigenwerte und Eigenvektoren (als Linearkombinationen der Zustände $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$).
3. Bestimmen Sie jeweils die Projektionsoperatoren auf diese Eigenvektoren, in dem Sie die Darstellungsmatrizen angeben.

Übung 5.4 – Projektionsoperatoren. Betrachten Sie den Operator $K = |\Phi\rangle\langle\Psi|$. Die Zustandsvektoren $|\Psi\rangle$ und $|\Phi\rangle$ seien auf eins normiert.

1. Wann ist K hermitesch?
2. Wann ist K ein Projektionsoperator?
3. Zeigen Sie, daß K sich in der Form $K = \lambda P_1 P_2$ schreiben läßt, wenn $|\Phi\rangle$ und $|\Psi\rangle$ nicht orthogonal sind. Dabei soll λ eine komplexe Zahl und P_1, P_2 Projektionsoperatoren sein.

Übung 5.5 – Erwartungswerte von Operatoren.

1. Sei $\langle O \rangle(t)$ der Erwartungswert eines Operators im *Schrödingerbild* zu einem Zeitpunkt t . O_H bezeichne den entsprechenden Operator im *Heisenbergbild*. Zeigen Sie die Gültigkeit der Beziehung

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle(t) = \left\langle \frac{dO_H}{dt} \right\rangle$$

2. Berechnen Sie

$$\frac{d(O^2)_H}{dt}$$

und damit

$$\frac{d(X^2)_H}{dt} \quad \text{und} \quad \frac{dT_H}{dt}$$

wobei T der Operator für die kinetische Energie ist.

3. Zeigen Sie, daß die Ableitung des Erwartungswertes $\langle V(X) \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle X^2 \rangle$ nach t für alle Zustände des eindimensionalen harmonischen Oszillators verschwindet. Ersetzen Sie dazu die Orts- und Impulsoperatoren durch die Leiteroperatoren

$$\begin{aligned} A(t) &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X(t) + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P(t) \right) \\ A^+(t) &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X(t) - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P(t) \right) \end{aligned}$$

und nutzen Sie die Orthogonalität der Eigenfunktionen des Oszillators aus.

Übung 5.6 – SCHRÖDINGERbild / HEISENBERGbild.

1. Betrachten Sie die Ortskoordinate x als einen Operator im SCHRÖDINGERbild und bestimmen Sie den entsprechenden Operator im HEISENBERGbild, und zwar

- (a) für ein freies Teilchen
 (b) für den harmonischen Oszillator

Hinweis:

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

mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned} [A, B]_0 &= B \\ [A, B]_1 &= [A, B] \\ [A, B]_2 &= [A, [A, B]] \\ [A, B]_n &= [A, [A, B]_{(n-1)}] . \end{aligned}$$

2. Bestimmen Sie den Orts- und Impulsoperator für den eindimensionalen harmonischen Oszillator, dessen Kraftzentrum sich gleichmäßig mit der Geschwindigkeit v entlang der Oszillatordichtung bewegt, im HEISENBERGbild:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x - vt)^2}{2} .$$

Hinweis: Leite zunächst die Differentialgleichungen für die zeitliche Entwicklung der Operatoren her—deren Lösungen sind die gesuchten Operatoren.

3. Berechnen Sie die Kommutatoren

$$[p_H(t_1), x_H(t_2)] , \quad [p_H(t_1), p_H(t_2)] , \quad [x_H(t_1), x_H(t_2)]$$

für die Operatoren aus dem ersten Aufgabenteil.

Aus der Vorlesung ist bekannt, daß für die Unschärfe zweier Operatoren A, B gilt:

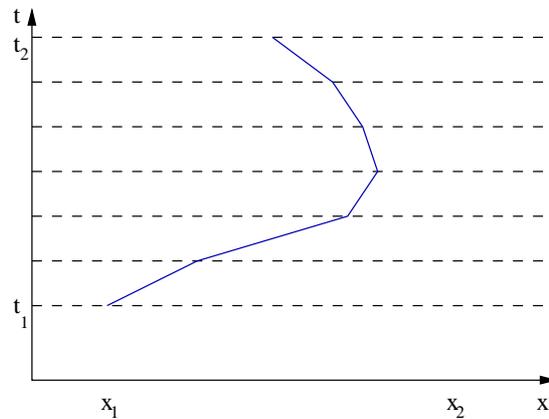
$$\langle \Delta^2 A \rangle \langle \Delta^2 B \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

4. Zeige, daß im Falle der freien Bewegung die Ortsunschärfe mit der Zeit zunimmt.

Die Idee des Pfadintegral stellt einen alternativen Zugang zur quantenmechanischen Beschreibung physikalischer Vorgänge dar und geht auf R.P. FEYNMAN (1948,1965) zurück.

6.1 Visualisierung des Propagators

Machen wir ein erstes Gedankenexperiment: Die Bewegung eines Teilchens zwischen den beiden Punkten (x_1, t_1) und (x_2, t_2) lasse sich nicht lückenlos überwachen. Wohl aber haben wir die Möglichkeit, wie bei einem Stroboskopverfahren, Momentaufnahmen von der Bewegung Teilchens zu Zeitpunkten $t_1 < t_i < t_2$ zu machen. Auf diese Weise erhalten wir eine Reihe von Positionsangaben x_i . Damit wird direkt klar, daß die Teilchenbewegung umso genauer bestimmbar ist, je besser die zeitliche Auflösung unserer Momentaufnahmen ist.



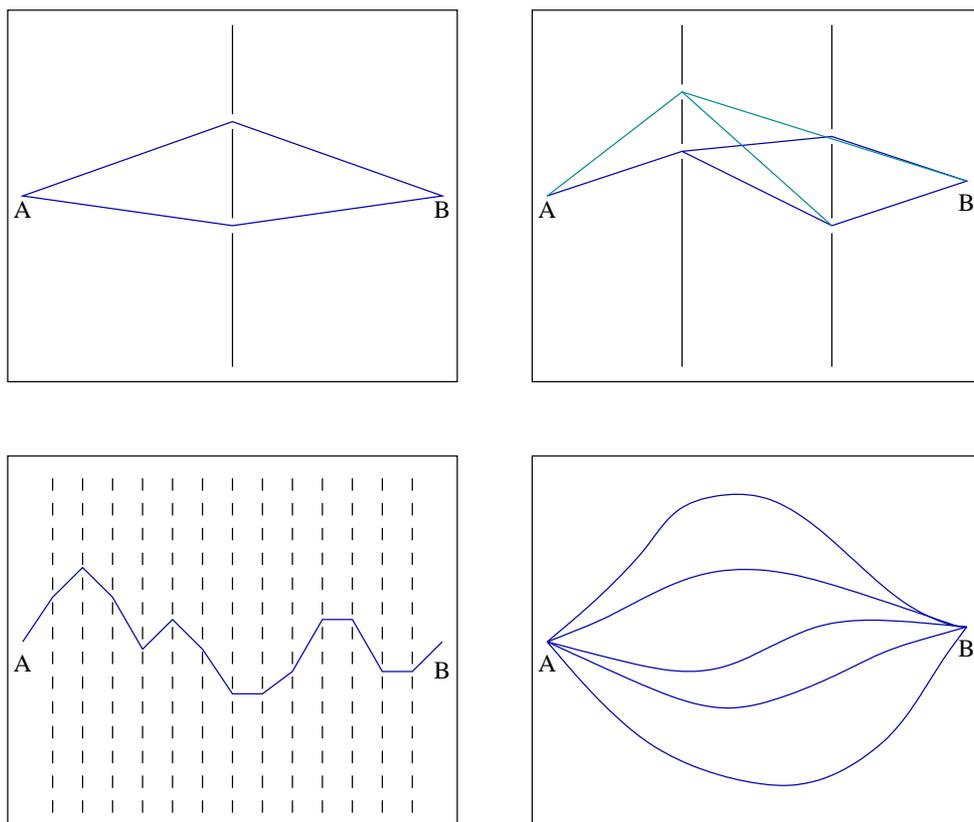


Abbildung 6.1: Gedankenexperiment: In Abwandlung des YOUNG'schen Doppelschlitze-Versuches wird die Anzahl der Trennwände mit Durchgangsmöglichkeiten sukzessive erhöht. Werden schließlich die Abstände der Trennwände infinitesimal, während die Anzahl der Durchlässe gegen unendlich strebt, so erhalten wir den Übergang zum kontinuierlichen Fall.

6.2 Eindimensionale Pfadintegrale

Allgemeine Definitionen

Im Rahmen der klassischen Mechanik bildet die LAGRANGE-Funktion $L(x(t), \dot{x}(t))$ den zentralen Ausgangspunkt für die Analyse der Teilchenbewegung. Die Bewegungsgleichungen selber werden aus einem Variationsansatz für das Wirkungsintegral

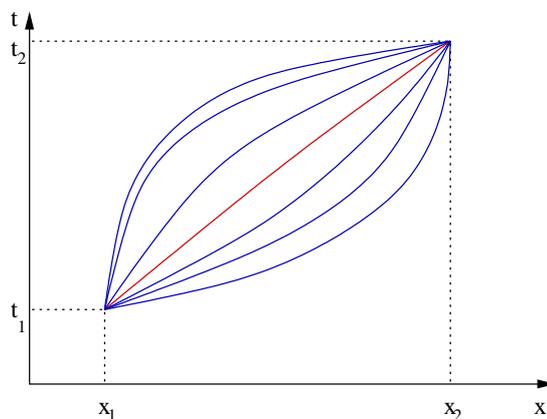
$$S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(x(t), \dot{x}(t)) dt \quad (6.1)$$

gewonnen: die Forderung, daß

$$\delta S = S[x + \delta x] - S[x] = 0 \quad (6.2)$$

führt auf die EULER-LAGRANGE-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (6.3)$$



Bei der Ableitung werden die Pfade, welche ein Teilchen zwischen zwei festen Koordinaten $x_1(t_1)$ und $x_2(t_2)$ zurücklegen kann variiert.

Wir wollen nun an dieser Stelle einen vergleichbaren Ansatz im Rahmen der Quantenmechanik verwenden.

Wir betrachten also die Bewegung eines Teilchens zwischen Startpunkt x_1 zum Zeitpunkt t_1 und Endpunkt x_2 zum Zeitpunkt t_2 . Die Menge der möglichen Pfade sei durch $\{x(t)\}$ gegeben. Die Bewegung zwischen zwei Punkten wird in der Quantenmechanik durch einen Propagator

$$K(x_2, x_1) = \sum_{\{x(t)\}} \psi_{\{x(t)\}} \quad (6.4)$$

beschrieben. Damit zeigt sich auch schon direkt ein fundamentaler Unterschied zur klassischen Betrachtung: selbst wenn dort eine virtuelle Verrückung der Pfade vorgenommen wird, gibt es letztendlich nur einen Pfad, auf dem sich das Teilchen bewegt. In der Quantenmechanik hingegen tragen alle Pfade bei. Allerdings muß die klassische Lösung wieder als Grenzfall der Quantenmechanischen Beschreibung vorhanden sein; dies läßt sich erreichen durch einen Ansatz

$$\psi[x(t)] = \text{const} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right). \quad (6.5)$$

Ableitung aus der “üblichen” Quantenmechanik

Klassischer Grenzfall

Harmonischer Oszillator

□ SPEZIELLE LITERATUR

[6.1] R.P. FEYNMAN, *Space Time Approach to Nonrelativistic Quantum mechanics*, Rev. Mod. Phys., **20** (1948), 367

[6.2] R.P. FEYNMAN, A.R. HIBBS, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965)

Übungsaufgaben

Übung 6.1 – Pfadintegral des harmonischen Oszillators. Der Propagator ist im Pfadintegralformalismus gegeben durch

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}, \quad \varepsilon = \frac{t_f - t_i}{N}.$$

Im Falle eines eindimensionalen harmonischen Oszillators lautet die Wirkung

$$S[x] = \varepsilon \sum_{n=1}^N \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x_n^2 \right),$$

wobei $x_0 = x_i$, $x_N = x_f$. Die klassische Lösung $x^{cl}(t)$ folgt aus der Extremalbedingung für die Wirkung $\frac{\delta S[x]}{\delta x_k} = 0$ im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ und ist bekannt. Deshalb entwickeln wir die Wirkung um $x^{cl}(t)$. Dazu setzen wir an $x_k = x_k^{cl} + \eta_k$ mit $\eta_0 = \eta_N = 0$ (warum?). Die η_k repräsentieren dann die Quantenfluktuationen um den klassischen Pfad.

- (a) Entwickle die Wirkung um den klassischen Pfad in den Variablen η_k . Beachte, daß höchstens quadratische Terme auftreten. Zeige, daß der Propagator dann lautet

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]} \int \prod_{k=1}^{N-1} d\eta_k e^{\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \varepsilon \sum_{n=1}^N \left(\left(\frac{\eta_n - \eta_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \omega^2 \eta_n^2 \right) \right)}$$

Zur Vereinfachung werden die Variablen gemäß $\eta_k \rightarrow \sqrt{\frac{m}{2\hbar\varepsilon}} \eta_k$ umskaliert und zu einem Vektor η zusammengefaßt.

- (b) Zeige, daß sich der Propagator damit auf die Form bringen läßt

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) \propto \int \prod_{k=1}^{N-1} d\eta_k e^{(i\eta^T B \eta)}$$

mit $B = \begin{pmatrix} b & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & b & -1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ & & & -1 & b & 1 \\ & & & 0 & -1 & b \end{pmatrix}$, wobei $b = 2 - \varepsilon^2 \omega^2$

Damit haben wir ein Gauß'sches Inetgral erhalten. Berechnen Sie dies nun um zu zeigen, daß

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon \det B} \right)$$

Hinweis: Für solche ein mehrdimensionales Gauß'sches Integral gilt

$$\int d^N y e^{iy^T A y} = (i\pi)^{\frac{N}{2}} (\det A)^{-\frac{1}{2}}$$

- (c) Um $\det B$ zu berechnen zeige zunächst, daß die Determinanten I_n der $n \times n$ -Untermatrizen von B die Rekursionsformel

$$I_{n+1} = bI_n - I_{n-1}, \quad \text{bzw} \quad \begin{pmatrix} I_{n+1} \\ I_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_n \\ I_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_0 \end{pmatrix}$$

für $n = 1, \dots, N - 2$ mit $I - 0 = 1, I_1 = b$ erfüllen. Überprüfen Sie, daß die auftretende Matrix sich wie folgt diagonalisieren läßt

$$\begin{pmatrix} b & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} S^{-1} \quad \text{mit} \quad S := \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

und $\lambda_{\pm} = \frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4}}{2}$. Berechne damit $\det B = I_{N-1} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+^N - \lambda_-^N)$.

(d) Da wir an dem Grenzfall $N \rightarrow \infty$ interessiert sind, bleibt noch zu zeigen:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_{\pm}^N = e^{\pm i\omega(t_f - t_i)},$$

und daß wir damit den Propagator erhalten

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t_f - t_i))} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x^{cl}]}.$$

Die Wirkung für den klassischen Pfad lautet

$$S[x^{cl}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega(t_f - t_i))} [(x_f^2 + x_i^2) \cos(\omega(t_f - t_i)) - 2x_f x_i'] .$$

Dichte-Operator und Dichte-Matrix

Für den Fall, daß die Beschreibung eines Quantenzustandes nicht vollständig ist, benötigt man mehrere Wellenfunktionen.¹

Das System befinde sich im Zustand $|\Psi_k\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit p_k . Dann soll gelten:

$$\sum_k p_k = 1 \quad 0 \leq p_k \leq 1 \quad (7.1)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \quad (7.2)$$

Wir gehen jetzt von folgenden Annahmen aus:

1. Die Wellenfunktionen $|\Psi_k\rangle$ seien orthogonal.
2. Die $|\Psi_k\rangle$ verhalten sich untereinander wie klassische Wahrscheinlichkeiten, d.h. sie interferieren nicht.

7.1 Reine Zustände

Wir entwickeln einen Zustand $|\Psi\rangle$ nach einem vollständigen Orthonormalen-System $\{|u_n\rangle\}$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \quad (7.3)$$

Für eine Observable $\langle A \rangle$

$$\begin{aligned} \langle u_n | A | u_p \rangle &= A_{np} \\ \langle A(t) \rangle &= \langle \phi(t) | A | \phi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) A_{np} c_p(t) \end{aligned}$$

mit dem Projektionsoperator $|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$ läßt sich schreiben

$$\langle u_n | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | u_p \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (7.4)$$

Damit definieren wir jetzt

¹ z.B. läßt sich das natürliche Licht als inkohärente Überlagerung von Polarisationszuständen auffassen.

Dichteoperator

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (7.5)$$

Dichtematrix

$$\rho_{np}(t) = \langle u_n | \rho(t) | u_p \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (7.6)$$

Wir wollen nun zeigen, daß $\rho(t)$ alle Informationen enthält, die man mit $|\Psi(t)\rangle$ berechnen kann:

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Tr}(\rho(t)) = 1 \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \sum_{n,p} \underbrace{\langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle}_{\rho_{pn}} \underbrace{\langle u_n | A | u_p \rangle}_{A_{np}} \\ &= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \\ &= \text{Tr}(\rho(t)) \end{aligned} \quad (7.8)$$

Die zeitliche Änderung des Dichteoperators (7.5) ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= \left(\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right) \langle \Psi(t)| + |\Psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \Psi(t)| \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| + \frac{1}{-i\hbar} |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] \end{aligned} \quad (7.9)$$

Die Wahrscheinlichkeit, den Erwartungswert a_n von A zu messen ist

$$P(a_n) = \langle \Psi(t) | P_n | \Psi(t) \rangle = \text{Tr}(P_n \rho(t)) \quad (7.10)$$

Eigenschaften von $\rho(t)$

1. Eine willkürlich wählbare Phase verursacht keine Änderung.

$$\begin{aligned} |\Psi'(t)\rangle &= e^{i\theta} |\Psi(t)\rangle \quad \text{mit} \quad \theta \in \mathbb{R} \\ \rho'(t) &= |\Psi(t)\rangle e^{-i\theta} e^{i\theta} \langle \Psi(t)| = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \rho(t) \end{aligned}$$

2. $\rho(t)$ ist hermitesch, d.h.

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t)$$

3. Projektionseigenschaft

$$\rho^2(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \rho(t)$$

Dies gilt allerdings – wir wir noch sehen werden – nur für den Fall, daß es sich um reine Zustände handelt.

4. Spur

$$\text{Tr}(\rho^2(t)) = 1$$

7.2 Gemischte Zustände

Treten jetzt die Zustände $|\Psi_k\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit p_k auf, so ist

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k p_k |\phi_k\rangle \quad (7.11)$$

mit

$$0 \leq p_1, p_2, \dots \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_k p_k = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit, den Erwartungswert a_n zu messen ist dann

$$\begin{aligned} P(a_n) &= \sum_k p_k P_k(a_n) \\ &= \sum_k p_k \langle \Psi_k | P_n | \Psi_k \rangle \\ &= \sum_k p_k \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | P_n | \Psi_k \rangle \\ &= \sum_k p_k \langle \Psi_k | \rho_k P_n | \Psi_k \rangle \\ &= \sum_k p_k \text{Tr}(\rho_k P_n) \\ &= \text{Tr}\left(\sum_k p_k \rho_k P_n\right) \\ &= \text{Tr}(\rho P_n) \end{aligned}$$

Dabei wurde

$$\rho \equiv \sum_k p_k \rho_k$$

als gewichteter Mittelwert der Dichteoperatoren verwendet.

Eigenschaften von $\rho(t)$

1. Die von $\rho(t)$:

$$\text{Tr}\left(\sum_k p_k \rho_k\right) = \text{Tr} \sum_k p_k \underbrace{\text{Tr}(\rho_k)}_1 = \sum_k p_k = 1$$

2. Projektionseigenschaft:

$$\rho^2 \neq \rho \quad \text{und} \quad \text{Tr}(\rho^2) \leq 1$$

Sei $\{|\Psi_k\rangle\}$ ein VONS. Dann ist ρ diagonal mit den Eigenwerten p_k :

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \sum_k p_k^2 |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| < 1 \quad \text{da alle } p_k < 1 \\ &= 1 \quad \text{nur wenn ein } p_k = 1 \text{ und alle anderen } p_{i \neq k} = 0 \end{aligned}$$

3. Eigenwert eines Operators:

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \text{Tr} \left(\rho \sum_n a_n P_n \right) = \text{Tr}(\rho A)$$

Dabei handelt es sich um den Ensemble-Mittelwert für eine Vielzahl von Wellenfunktionen.

4. Zeitentwicklung

$$i\hbar \rho(t) = [H(t), \rho(t)]$$

5. $\rho(t)$ ist positiv-definit.

$$\langle u | \rho | u \rangle = \sum_k p_k \langle u | \rho | u \rangle = \sum_k p_k |\langle u | \Psi_k \rangle|^2 \geq 0$$

Dichtematrix

$\rho(t)$ beschreibt die volle quantenmechanische Entwicklung reiner und gemischter Zustände.

Beispiel: Drehimpuls $1/2$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

1. Reine Zustände

$$\rho_1 = |+\rangle \langle +| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \rho^2$$

$$\text{Tr}(\rho_1) = 1$$

$$\rho_2 = |-\rangle \langle -| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \rho^2$$

$$\text{Tr}(\rho_2) = 1$$

2. Gemischter Zustand: Überlagerung von $|+\rangle$ und $|-\rangle$

$$\begin{aligned} \rho_g &= \omega_1 |+\rangle \langle +| + \omega_2 |-\rangle \langle -| \\ &= \omega_1 |+\rangle \langle +| + (1 - \omega_1) |-\rangle \langle -| \\ &= \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & 1 - \omega_1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\rho^2 = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & (1 - \omega_1)^2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Tr}(\rho) = 1$$

Störungstheorie

Eine exakte Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t) = H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t) \quad (8.1)$$

die die Energie der stationären Zustände von Systemen bestimmt, ist nur für einige sehr einfache Potenti-
alfelder zu idealisierten Systemen möglich. Bei der Untersuchung realer atomarer und nuklearer Systeme
muß man Näherungsverfahren zur Berechnung der Eigenwerte und der Eigenfunktionen der HAMILTON-
Operatoren verwenden.

Wir nehmen im Folgenden an, daß der HAMILTON-Operator eines quantenmechanischen Systems

$$H | \Psi_a \rangle = E_a | \Psi_a \rangle \quad (8.2)$$

in zwei Summanden zerlegt werden kann:

$$H = H_0 + \lambda U \quad (8.3)$$

H_0 soll der Hamilton-Operator eines idealisierten Problems mit bekannter exakter Lösung sein; U sei
hermitesch und zeitunabhängig wie H_0 und wird als **Störoperator** bezeichnet. λ ist ein Parameter für
die Stärke der angelegten Störung mit $0 \leq \lambda \leq 1$.

8.1 Störungstheorie ohne Entartung

Beginnen wir nun zunächst mit dem Fall, daß für das ungestörte Problem

$$H_0 | a, 0 \rangle = E_{a,0} | a, 0 \rangle \quad (8.4)$$

keine Entartung auftritt; das heißt, daß gilt $E_{a,0} \neq E_{b,0}$ für $a \neq b$.

Für Korrekturen der Ordnung n vereinbaren wir dann im Folgenden die Schreibweise $| a, n \rangle$.

Weiterhin fordern wir die Stetigkeit von $E_a(\lambda)$ und $| \Psi(\lambda) \rangle$ in λ .

Abbildung

Eigenfunktionen als auch die Eigenwerte des Operators (8.3) sollen stetig in die Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operator H_0 übergehen, wenn λ gegen Null geht:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_a(\lambda) = E_{a,0} \quad , \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} | \Psi_a(\lambda) \rangle = | a, 0 \rangle \quad (8.5)$$

Da H_0 eine vollständige, orthonormale Basis bietet, können wir nun die das vollständige, nicht exakt lösbare System von H nach diesem entwickeln. Dafür haben wir die Wellenfunktionen $| a, 0 \rangle, | b, 0 \rangle, \dots$ mit den Energieeigenwerten $E_{a,0}, E_{b,0}, \dots$ gegeben.

Entwickeln wir das System (8.2) nach Potenzen von λ , so bekommen wir:

$$E_a(\lambda) = E_{a,0} + \lambda E_{a,1} + \lambda^2 E_{a,2} + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E_{0,m} \quad (8.6)$$

$$| \Psi_a(\lambda) \rangle = | a, 0 \rangle + \lambda | a, 1 \rangle + \lambda^2 | a, 2 \rangle + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n | a, n \rangle$$

Diese Entwicklung erfüllt automatisch (8.5) und läßt sich in die SCHRÖDINGER-Gleichung einsetzen:

$$(H_0 + \lambda U) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n | a, n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} E_{a,m} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n | a, n \rangle \quad (8.7)$$

Damit läßt sich auch der exakt lösbare Anteil (8.4) abspalten als

$$H_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n | a, n \rangle + \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^{n+1} | a, n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+m} E_{a,m} | a, n \rangle \quad (8.8)$$

Berechnung der Störungsterme

Werten wir nun (8.7) für unterschiedliche Ordnungen n in λ aus:

$$\begin{aligned} \lambda^0 \quad & H_0 | a, 0 \rangle = E_{a,0} | a, 0 \rangle \\ \lambda^1 \quad & H_0 | a, 1 \rangle + U | a, 0 \rangle = E_{a,1} | a, 0 \rangle + E_{a,0} | a, 1 \rangle \\ & \Leftrightarrow (H_0 - E_{a,0}) | a, 1 \rangle + (U - E_{a,1}) | a, 0 \rangle = 0 \\ \lambda^2 \quad & (H_0 - E_{a,0}) | a, 2 \rangle + (U - E_{a,1}) | a, 1 \rangle - E_{a,2} | a, 0 \rangle = 0 \\ & \vdots \\ \lambda^n \quad & (H_0 - E_{a,0}) | a, n \rangle + (U - E_{a,1}) | a, n-1 \rangle - E_{a,2} | a, n-2 \rangle \dots - E_{a,n} | a, 0 \rangle = 0 \\ & \Leftrightarrow (H_0 - E_{a,0}) | a, n \rangle + U | a, n-1 \rangle - \sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} | a, n-\nu \rangle \end{aligned} \quad (8.10)$$

Somit haben wir eine Möglichkeit gefunden die Korrekturterme zu berechnen. Allerdings treten Wellenfunktionen und Energieeigenwerte noch gekoppelt auf, weshalb wir eine Nebenbedingung fordern:

$$\langle \Psi_a | a, 0 \rangle = 1 \quad (8.11)$$

Für verschiedene Wellenfunktionen ist dann

$$\langle a, n | a, 0 \rangle = \delta_{n,a} \quad (8.12)$$

Das heißt, daß die Wellenfunktionen der Korrekturterme orthogonal auf der Wellenfunktion des ungestörten Grundzustandes stehen.

(a) Korrekturen der Energieeigenwerte

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle a, 0 | (H_0 - E_{a,0}) | a, n \rangle}_{=0} + \langle a, 0 | U | a, n - 1 \rangle &= \underbrace{\sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} \langle a, 0 | a, n - \nu \rangle}_{\delta_{a,n-\nu}} \\ \sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} \delta_{a,n-\nu} &= \langle a, 0 | U | a, n - 1 \rangle \\ E_{a,n} &= \langle a, 0 | U | a, n - 1 \rangle \end{aligned} \quad (8.13)$$

Der Korrekturterm erster Ordnung ist demnach

$$E_{a,1} = \langle a, 0 | U | a, 0 \rangle$$

(b) Korrekturen der Wellenfunktionen

$$| a, n \rangle = \sum_{b=0}^{\infty} | b, 0 \rangle \langle 0, b | a, n \rangle = \sum_{b=0}^{\infty} C_{a,b}^{(n)} | b, 0 \rangle \quad (8.14)$$

Um die Entwicklungskoeffizienten

$$C_{a,b}^{(n)} = \langle 0, b | a, n \rangle$$

zu berechnen, multiplizieren wir (8.10) mit $\langle b, 0 |$

$$\begin{aligned} \langle b, 0 | (H_0 - E_{a,0}) | a, n \rangle + \langle b, 0 | U | a, n - 1 \rangle - \sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} \langle b, 0 | a, n - \nu \rangle &= 0 \\ (E_{b,0} - E_{a,0}) \underbrace{\langle b, 0 | a, n \rangle}_{C_{a,b}^{(n)}} + \langle b, 0 | U | a, n - 1 \rangle - \sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} \langle b, 0 | a, n - \nu \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{aligned} C_{a,b}^{(n)} &= \langle b, 0 | a, n \rangle \\ &= \frac{1}{E_{a,0} - E_{b,0}} \left(\langle b, 0 | U | a, n - 1 \rangle - \sum_{\nu=1}^n E_{a,\nu} \underbrace{\langle b, 0 | a, n - \nu \rangle}_{C_{a,b}^{(n-\nu)}} \right) \end{aligned} \quad (8.15)$$

Genaugenommen genügt es auch, in (8.15) nur bis zur Ordnung $n - 1$ zu summieren, da im Fall $\nu = n$

$$\langle b, 0 | a, 0 \rangle = 0$$

Störungstheorie 1. Ordnung

Mit der Energiekorrektur aus (8.13)

$$E_{a,1} = \langle a, 0 | U | a, 0 \rangle$$

wird die Energie in erster Näherung

$$E_a^{(1)} = E_{a,0} + \langle a, 0 | U | a, 0 \rangle \quad (8.16)$$

Für die Wellenfunktionen aus (8.14) und 8.15)

$$\begin{aligned} | a, 1 \rangle &= \sum_{b \neq a} C_{a,b}^{(1)} | b, 0 \rangle \\ &= \sum_{b \neq a} \left(\frac{1}{E_{a,0} - E_{b,0}} \left(\langle b, 0 | U | a, 0 \rangle - \underbrace{E_{a,1} \langle b, 0 | a, 0 \rangle}_{=0} \right) \right) | b, 0 \rangle \\ &= \sum_{b \neq a} \frac{\langle b, 0 | U | a, 0 \rangle}{E_{a,0} - E_{b,0}} | b, 0 \rangle \end{aligned} \quad (8.17)$$

bekommen wir

$$| \psi_a^{(n)} \rangle = | a, 0 \rangle + \sum_{b \neq a} \frac{\langle b, 0 | U | a, 0 \rangle}{E_{a,0} - E_{b,0}} | b, 0 \rangle \quad (8.18)$$

mit der Normierung

$$\langle \Psi_a^{(1)} | \Psi_a^{(1)} \rangle = 1 = \langle a, 0 | a, 0 \rangle + \underbrace{\sum_{b \neq a} \frac{\langle b, 0 | U | a, 0 \rangle}{E_{a,0} - E_{b,0}} \langle a, 0 | b, 0 \rangle}_{=0} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Störungstheorie 2. Ordnung

Da aufgrund von Symmetrien die Terme erster Ordnung häufig zu Null verschwinden, ist es wichtig die Terme zweiter Ordnung mit zu berücksichtigen.

$$E_{a,2} = \langle a, 0 | U | a, 1 \rangle \stackrel{8.18)}{=} \sum_{b \neq a} \frac{|\langle a, 0 | U | b, 0 \rangle|^2}{E_{a,0} - E_{b,0}}$$

Mit dieser Korrektur ist die Energie

$$E_a^{(2)} = E_{a,0} + \langle a, 0 | U | a, 0 \rangle + \sum_{b \neq a} \frac{|\langle a, 0 | U | b, 0 \rangle|^2}{E_{a,0} - E_{b,0}} \quad (8.19)$$

Entsprechend gilt für die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} | a, 2 \rangle &= \sum_{b \neq a} C_{a,b}^{(2)} | b, 0 \rangle \\ &= \sum_{b \neq a} \frac{1}{E_{a,0} - E_{b,0}} \left(\langle b, 0 | U | a, 1 \rangle - E_{a,1} \langle b, 0 | a, 1 \rangle \right) \end{aligned} \quad (8.20)$$

$$= \sum_{b \neq a} \frac{1}{E_{a,0} - E_{b,0}} \left(\langle b, 0 | U \sum_{b \neq a} C_{a,b}^{(1)} | b, 0 \rangle - E_{a,1} \langle b, 0 | \sum_{b \neq a} C_{a,b}^{(1)} | b, 0 \rangle \right) \quad (8.21)$$

Korrekturterme der Störungstheorie

$$\begin{aligned} \text{Energiekorrektur 1. Ordnung} & : \Delta E_a^{(1)} = \sum_a \langle a, 0 | V | a, 0 \rangle \\ \text{Energiekorrektur 2. Ordnung} & : \Delta E_a^{(2)} = \sum_{b \neq a} \frac{|\langle a, 0 | V | b, a \rangle|^2}{E_{a,0} - E_{b,0}} \end{aligned}$$

8.2 Der anharmonische Oszillator**(a) Vollständiges Problem**

$$H | \Psi_a \rangle = E_a | \Psi_a \rangle \quad \text{mit} \quad H = H_0 + \mu x^3 \quad (8.22)$$

(b) Exakt lösbares Problem

$$\hat{H}_0 | n \rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \right) | n \rangle = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) | n \rangle$$

Wir verwenden nun wieder den Erzeugungs- (3.21) und Vernichtungsoperator (3.22) sowie folgende Ergebnisse aus der Behandlung des harmonischen Operators:

$$\begin{aligned} H_0 &= \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\ | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n | 0 \rangle \\ \langle n' | n \rangle &= \delta_{n'n} \\ \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \end{aligned}$$

Dies führt auf die Auswahlregel

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n' | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \quad (8.23)$$

Die Energie in nullter Ordnung ist

$$E_n^{(0)} = E_{n,0} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (8.24)$$

(c) Korrekturen 1. Ordnung Mit Hilfe der Auswahlregel finden wir für die Korrektur der Energie

$$E_{n,1} = \lambda \langle n | \hat{x}^3 | n \rangle = 0$$

Dies läßt sich aber auch überprüfen durch die Berechnung von

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 x^3 dx$$

oder ohne Festlegung auf eine spezielle Darstellung ($|n\rangle = (\hat{b}^\dagger)^n |0\rangle$)

$$\langle n | (\hat{a}^3 + 3\hat{a}^2\hat{a}^\dagger + 3\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a}^\dagger)^3) | n \rangle = 0$$

Für die Wellenfunktionserhalten wird wegen

$$|n, 1\rangle = \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n' | \mu x^3 | n \rangle}{\hbar\omega(n' - n)} |n'\rangle$$

daß

$$\begin{aligned} |\Psi_a^{(1)}\rangle &= |n\rangle + \mu \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n-3\rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} |n+3\rangle + 3n^{3/2} |n-1\rangle - 3(n+1)^{3/2} |n+1\rangle \right) \end{aligned}$$

(d) Korrekturen 2. Ordnung

$$\begin{aligned} E_{n,2} &= \sum_{b \neq a} \frac{|\langle a, 0 | U | b, 0 \rangle|^2}{E_{a,0} - E_{b,0}} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^3 | n \rangle|^2}{\hbar\omega(n' - n)} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | \tilde{x}^3 | n \rangle|^2}{\hbar\omega(n' - n)} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \sum_{n' \neq n} \frac{1}{\hbar\omega(n' - n)} \left| \sum_{n_\alpha, n_\beta} \underbrace{\langle n' | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n_\alpha \rangle}_{n' = n+3} \underbrace{\langle n_\alpha | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n_\beta \rangle}_{n_\alpha = n+2} \underbrace{\langle n_\beta | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | n \rangle}_{n_\beta = n+1} \right|^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \sum_{n' \neq n} \frac{1}{\hbar\omega(n' - n)} \left| \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \delta_{n', n+3} + \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{n', n-3} \right. \\ &\quad \left. + 3n^{3/2} \delta_{n', n-1} + 3(n+1)^{3/2} \delta_{n', n+1} \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \left(\frac{n(n-1)(n-2)}{-3} + \frac{9n^3}{-1} + \frac{9(n+1)^3}{+1} + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{3} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \end{aligned}$$

Damit ist die Energie in Korrektur zweiter Ordnung

$$E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\mu^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \quad (8.25)$$

8.3 Grundzustand des Helium Atoms

Das Helium-Atom stellt das einfachste, nach außen hin neutrale Atom mit mehr als einem Elektron dar. Stellen wir für dieses System den HAMILTON-Operator auf, so ist folgendes zu beachten:

- (i) Jedes Elektron für sich betrachtet stellt zusammen mit dem Atomkern wieder ein COULOMB-Problem dar, wie wir es bereits für das Wasserstoff-Atom geöst haben:

$$H_{0,i} = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i|}$$

- (ii) Aus der COULOMB-Wechselwirkung der beiden Elektronen untereinander ergibt sich nun ein zusätzlicher Term

$$V = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

Setzen wir nun beide Anteile zusammen, dann bekommen wir also

$$H = \underbrace{\left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze}{r_1} \right) \left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze}{r_2} \right)}_{H_0} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = H_0 + V \tag{8.26}$$

Für ein vollständiges System von Eigenfunktionen $|\psi(1,2)\rangle$ haben wir also

$$H |\psi(1,2)\rangle = E |\psi(1,2)\rangle$$

mit einem exakt lösbaren, bekannten Anteil

$$H_0 |\psi_0(1,2)\rangle = E_0 |\psi_0(1,2)\rangle$$

wobei sich $|\psi_0(1,2)\rangle = |1\rangle |2\rangle$ aus einem HARTREE Ansatz gewinnen läßt. (HARTREE 1928)

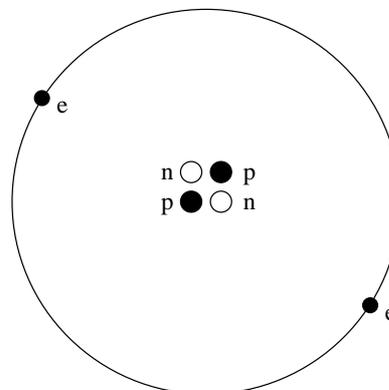
(a) Ungestörtes Problem. Verwenden wir, wie bereits angedeutet, das Wasserstoff-Atom als Grundmodell für das Helium-Atom, dann erhalten wir als Energie für den ungestörten Grundzustand

$$E_{0,0} = E_{0,0}^{(1)} + E_{0,0}^{(2)} = -2 \cdot 12.6 \cdot Z^2 \text{ [eV]} = -108.8 \text{ [eV]}$$

Experimentell findet man allerdings etwas anderes:

	$2E_{a,0}$	$2E_{a,0} + E_{a,1}$	Experiment
He	-108,8	-74,8	-78,4
Li ⁺	-243,8	-193	-197,1
Be ²⁺	-433	-365,5	-370

Aus diesen Werten ist unschwer zu erkennen, daß die alleinige mehrfache Aufsummierung von Lösungen des Wasserstoff-Atoms nicht ausreichend ist; wir benötigen also auf jeden Fall die Korrektur durch mit dem Störoperator eingebrachten Term.



(b) Energiekorrektur 1. Ordnung. Wie wir ja gesehen haben brauchen wir für die Energiekorrektur 1. Ordnung wieder die Wellenfunktion des ungestörten Grundzustandes; gehen wir also wieder vom Wasserstoff-Atom aus:

$$\langle \mathbf{r} | 1s \rangle = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Damit erhalten wir also für die reine Elektron-Kern Wechselwirkung beim Helium-Atom

$$\langle \mathbf{r} | 00 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | 1s \rangle \langle \mathbf{r}_2 | 1s \rangle = \frac{1}{\pi} \frac{Z^3}{a_0^3} \exp\left(-Z\frac{|\mathbf{r}_1| + |\mathbf{r}_2|}{a_0}\right)$$

Damit ist dann die Energiekorrektur erster Ordnung

$$\begin{aligned} E_{1s,1s,1} &= \langle 00 | V | 00 \rangle = \langle 1s | \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | 1s \rangle \\ &= \frac{e^2 Z^6}{\pi^2 a_0^6} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \exp\left(-\frac{2Z(|\mathbf{r}_1| + |\mathbf{r}_2|)}{a_0}\right) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \end{aligned}$$

Der letzte Term, welcher die Wechselwirkung der Elektronen beschreibt, läßt sich in geeigneter Weise nach einem vollständigen System orthogonaler Funktionen entwickeln; als solches bieten sich für diesen Ausdruck die Kugelflächenfunktionen an:¹

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^*(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\vartheta_2, \varphi_2) \quad (8.27)$$

wobei

$$r_{>} = \max\{|\mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_1|\} \quad , \quad r_{<} = \min\{|\mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_1|\} \quad , \quad d^3 r_1 = r_1^2 dr_1 d\Omega_1$$

Einsetzen gibt dann

$$\begin{aligned} E_{1s,1s,1} &= \frac{(4\pi)^2 e^2 Z^6}{\pi^2 a_0^6} \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 \int_0^{\infty} dr_2 r_2^2 \exp\left(-\frac{2Z(r_1 + r_2)}{a_0}\right) \\ &\quad \cdot \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \sum_{m=-l}^{+l} \sqrt{4\pi} \int \underbrace{d\Omega_1 Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1)}_{\delta_{l0} \delta_{m0}} \int \underbrace{d\Omega_2 Y_{00}^*(\theta_2, \varphi_2) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2)}_1 \\ &= \frac{16 e^2 Z^6}{a_0^6} \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 \exp\left(-\frac{2Zr_1}{a_0}\right) \left\{ \underbrace{\frac{1}{r_1} \int_0^{\infty} dr_2 r_2^2 \exp\left(-\frac{2Zr_2}{a_0}\right)}_{r_1 > r_2} + \underbrace{\int_0^{\infty} dr_2 \frac{r_2^2}{r_2} \exp\left(-\frac{2Zr_2}{a_0}\right)}_{r_2 > r_1} \right\} \\ &= \frac{5 e^2}{8 a_0} Z = 34 \text{ [eV]} \end{aligned}$$

Die Gesamtenergie ist dann

$$E_0^{(1)} = 2 \cdot E_{a,0} + E_{a,1} = -\frac{e^2}{a_0} \left(Z^2 - \frac{5}{8} Z \right) \quad (8.28)$$

¹ Die Behandlung exakt dieses Termes sollte auch aus der Elektrodynamik bekannt sein: Entwicklung des $1/r$ Potentials führt dort zum Auftreten der Multipolmomente.

8.4 Störungstheorie mit Entartung

Bisher hatten wir vorausgesetzt daß für

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

die Eigenwerte von \hat{H}_0 nicht entartet sind; davon kann in der Regel aber sicherlich nicht mehr ausgegangen werden. Gilt aber für zwei $a \neq b$ daß $E_{a,0} = E_{b,0}$ so läßt sich die Energiekorrektur zweiter Ordnung

$$E_a^{(2)} = \langle a, 0 | \hat{H}' | b, 0 \rangle = \sum_{a \neq b} \frac{|\langle a, 0 | \hat{H}' | b, 0 \rangle|^2}{E_{a,0} - E_{b,0}}$$

nicht mehr sinnvoll auswerten.

Zwei eng liegende Niveaus

Machen wir einen Zwischenschritt auf dem Weg störungstheoretischen Behandlung entarteter Energieeigenwerte.

Betrachten wir für zwei $a \neq b$ den Grenzprozeß $E_{b,0} \rightarrow E_{a,0}$.

In diesem Fall wird die Lösung für die Energiekorrektur zweiter Ordnung divergieren. Für Eigenfunktionen mit

$$\begin{aligned} H_0 | a, 0 \rangle &= \mathcal{E}_{a,0} | a, 0 \rangle \\ \langle a, 0 | b, 0 \rangle &= \delta_{ab} \end{aligned}$$

sei jetzt

$$E_{a,0} - E_{b,0} \ll |\langle a, 0 | H' | b, 0 \rangle| .$$

Wir definieren nun einen Mischzustand

$$| \psi_k \rangle = \alpha_k | a, 0 \rangle + \beta_k | b, 0 \rangle \quad , \quad k = 1, 2$$

mit der Eigenschaft

$$\langle \psi_1 | H' | \psi_2 \rangle = 0 .$$

Für den vollständigen HAMILTON-Operator \hat{H} ist dann

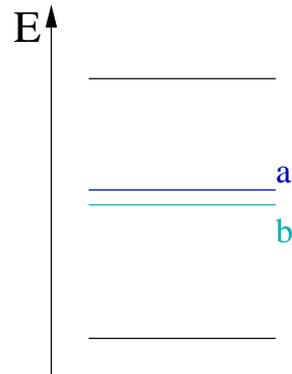
$$(H_0 + H') (\alpha | a, 0 \rangle + \beta | b, 0 \rangle) = E (\alpha | a, 0 \rangle + \beta | b, 0 \rangle) .$$

Multiplizieren wir dies nun einmal mit $\langle a, 0 |$ einmal und $| b, 0 \rangle$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \alpha \langle a, 0 | \hat{H} | a, 0 \rangle + \beta \langle a, 0 | \hat{H} | b, 0 \rangle &= \alpha E \langle a, 0 | a, 0 \rangle + \alpha E \langle a, 0 | b, 0 \rangle \\ \alpha H_{aa} + \beta H_{ab} &= \alpha E \\ \beta \langle b, 0 | \hat{H} | b, 0 \rangle + \alpha \langle b, 0 | \hat{H} | a, 0 \rangle &= \beta E \langle b, 0 | a, 0 \rangle + \beta E \langle b, 0 | b, 0 \rangle \\ \alpha H_{ba} + \beta H_{bb} &= \beta E \end{aligned}$$

Dies können wir nun in einer Matrixgleichung zusammenfassen:

$$\begin{pmatrix} H_{aa} - E & H_{ab} \\ H_{ba} & H_{bb} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$



Damit haben wir das Eigenwertproblem aber schon auf eine Form umgeschrieben, die wir direkt lösen können; mit der Determinante

$$\begin{aligned}(H_{aa} - E)(H_{bb} - E) - H_{ba}H_{ab} &= 0 \\ E^2 - (H_{aa} + H_{bb})E + H_{aa}H_{bb} - H_{ba}H_{ab} &= 0\end{aligned}$$

erhalten wir die Eigenwerte:

$$\begin{aligned}E_{1,2} &= \frac{H_{aa} + H_{bb}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H_{aa} + H_{bb}}{2}\right)^2 + H_{aa}H_{bb} - H_{ba}H_{ab}} \quad \curvearrowright \quad H_{ab} = (H_{ba})^* \\ &= \frac{H_{aa} + H_{bb}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(H_{aa}^2 + H_{bb}^2 + 2H_{aa}H_{bb})^2 - H_{aa}H_{bb} + |H_{ab}|^2} \\ &= \frac{H_{aa} + H_{bb}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(H_{aa} - H_{bb})^2 + |H_{ab}|^2} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm \sqrt{(H_{aa} - H_{bb})^2 + 4|H_{ab}|^2} \right\}\end{aligned}\tag{8.29}$$

Setzen wir dies jetzt wieder ein, so können wir die Wellenfunktion zu $E_{1,2}$ berechnen:

$$\begin{aligned}(H_{aa} - E_{1,2})\alpha_{1,2} &= -H_{ab}\beta_{1,2} \\ \alpha_{1,2}^2 &= \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - E_{1,2})^2} \beta_{1,2}^2 \quad \curvearrowright \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1 \\ &= \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - E_{1,2})^2} (1 + \alpha_{1,2}) \\ &= \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - E_{1,2})^2 + |H_{ab}|^2}\end{aligned}$$

Für die in (8.29) berechneten Energieeigenwerte gibt es jetzt zwei Grenzfälle:

- 1 Die Energieniveaus liegen weit auseinander:

$$|H_{aa} - H_{bb}| \gg |H_{ab}|$$

Dies ist der bereits behandelte Fall ohne Entartung.

- 2 Die Energieniveaus liegen nah beieinander:

$$|H_{aa} - H_{bb}| \ll |H_{ab}|$$

Im Falle des Verschwindens der linken Seite haben wir es also mit Entartung der Energieeigenwerte zu tun.

Behandeln wir jetzt beide Fälle der Reihe nach:

- 1 Schreiben wir (8.29) zunächst in geeigneter Weise um:

$$\begin{aligned}E_{1,2} &= \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm (H_{aa} - H_{bb}) \sqrt{1 + \frac{4|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})^2}} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm (H_{aa} - H_{bb}) \sqrt{1 + \zeta} \right\}\end{aligned}$$

Für $\zeta \ll 1$ läßt sich die Wurzel in eine TAYLOR-Reihe entwickeln:

$$\begin{aligned}
 E_{1,2} &= \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm (H_{aa} - H_{bb}) \left(1 + \frac{1}{2}\zeta - \frac{1}{8}\zeta^2 + \dots \right) \right\} \\
 &\simeq \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm (H_{aa} - H_{bb}) \left(1 + \frac{1}{2} \frac{4|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})^2} \right) \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ (H_{aa} + H_{bb}) \pm (H_{aa} - H_{bb}) \pm \frac{2|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})} \right\} \\
 E_1 &= H_{aa} + \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})} \\
 E_2 &= H_{bb} - \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})}
 \end{aligned}$$

Rückeinsetzen der vollständigen Ausdrücke für die Matrixelemente gibt:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \langle a, 0 | (\hat{H}_0 + \hat{H}') | a, 0 \rangle + \frac{|\langle a, 0 | (\hat{H}_0 + \hat{H}') | b, 0 \rangle|^2}{\langle a, 0 | (\hat{H}_0 + \hat{H}') | a, 0 \rangle - \langle b, 0 | (\hat{H}_0 + \hat{H}') | b, 0 \rangle} \\
 &= E_{a,0} + \langle a, 0 | \hat{H}' | a, 0 \rangle + \frac{|\langle a, 0 | \hat{H}' | b, 0 \rangle|^2}{\mathcal{E}_{a,0} - \mathcal{E}_{b,0}}
 \end{aligned}$$

Für kleine Störbeiträge \hat{H}' läßt sich der letzte Term vernachlässigen, so daß wir wieder die bereits bekannte Beziehung zwischen für die korrigierten Energieeigenwerte bekommen.

Mit E_i sind wir jetzt auch in der Lage die Koeffizienten α_1 für die Wellenfunktion zu berechnen:

$$\begin{aligned}
 |\alpha_1|^2 &= \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - E_1)^2 + |H_{ab}|^2} = \frac{|H_{ab}|^2}{\left(H_{aa} - H_{aa} - \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})} \right)^2 + |H_{ab}|^2} \\
 &= \frac{1}{\frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{bb})^2} + 1} \simeq 1 \\
 |\alpha_2|^2 &= 0
 \end{aligned}$$

Demnach haben wir die Wellenfunktionen

$$| \psi_1 \rangle \simeq | a, 0 \rangle \quad \text{und} \quad | \psi_2 \rangle \simeq | b, 0 \rangle ,$$

in Übereinstimmung mit der Störungstheorie ohne Entartung.

2 Für zwei eng beieinander liegende Niveaus ist

$$E_{1,2} \simeq H_{aa} \pm \frac{1}{2}(2H_{ab}) = H_{aa} \pm H_{ab} .$$

Damit sind die Koeffizienten:

$$\begin{aligned}
 |\alpha_{1,2}|^2 &= \frac{|H_{ab}|^2}{(H_{aa} - H_{aa} \pm H_{ab})^2 + |H_{ab}|^2} = \frac{1}{2} \\
 \alpha_{1,2} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}}
 \end{aligned}$$

Das bedeutet also, daß die Wellenfunktionen minimalen Überlapp haben:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a,0\rangle + |b,0\rangle) \quad \text{und} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a,0\rangle - |b,0\rangle)$$

Das zugehörige Matrixelement verschwindet dann folglich:

$$\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_2 \rangle = E_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle a,0 | + \langle b,0 | \right) \left(|a,0\rangle - |b,0\rangle \right) = 0$$

Allgemeiner Fall

8.5 Der STARK-Effekt

8.5.1 Linearer STARK-Effekt

Beim Wasserstoff-Atom tritt bei Einwirkung eines äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E} eine Aufspaltung der Niveaus proportional zur Feldstärke \mathbf{E} auf. Im allgemeinen tritt sogar eine Aufspaltung proportional E^2 auf – dies ist dann der *quadratische STARK-Effekt* (diesen werden wir im anschließenden Abschnitt behandeln).

Um zu sehen, daß wir dies als Störung behandeln können, vergleichen wir auftretende elektrische Felder. Im Bereich des Atoms haben wir es mit Feldstärken der Größe

$$\mathbf{E} = -\text{grad } U = \frac{C}{a_0^2} \simeq 5 \cdot 10^9 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$$

zu tun. Laborfelder dagegen liegen etwa in der Größenordnung $10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$. Dies läßt es sinnvoll erscheinen, daß äußere Feld als eine kleine Störung zu behandeln.

Wählen wir jetzt die Richtung des Feldes \mathbf{E} parallel zur \mathbf{z} -Achse ($\mathbf{E} = |\mathbf{E}| \mathbf{e}_z$). Da die Wechselwirkung des Atoms über dessen Dipolmoment $\mathbf{d} = e \mathbf{r}$ geschieht, bekommen wir mit der potentiellen Energie

$$U = \langle \mathbf{d}, \mathbf{E} \rangle = e |\mathbf{E}| e_z$$

den HAMILTON-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} - e |\mathbf{E}| e_z = H_0 + U$$

Energiekorrektur erster Ordnung Wir betrachten zunächst den Fall ohne Entartung des Drehimpulses ($l = 0$). Dann ist die Wellenfunktion

$$E_{nlm,1} = -eE_z \langle nlm | u | nlm \rangle = 0$$

Für $n \geq 2$ hingegen erhalten wir Entartung in l für H :

$$E_{n,1} \sim \langle nl'm' | z | nlm \rangle$$

Wir machen jetzt folgende Konvention für die Schreibweise:

$$|1\rangle = |2s0\rangle \quad |2\rangle = |2p0\rangle \quad |3\rangle = |2p1\rangle \quad |4\rangle = |2p-1\rangle$$

In Kugelkoordinaten ist in Richtung des elektrischen Feldes

$$z = \cos \vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \mathcal{Y}_{10} r$$

Damit ist das Potential

$$U = -eE_z \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \mathcal{Y}_{10}$$

Für die Wellenfunktion $|2\rangle$:

$$|z, \beta, 0\rangle_N = \sum_{\alpha=1}^4 M_{\alpha\beta}^{(2)} |z, \alpha, 0\rangle$$

$$\sum_{\alpha=1}^4 \langle z, \gamma, 0 | U | z, \alpha, 0 \rangle M_{\alpha\beta}^{(2)} = \mathcal{E}_z \gamma^{(N)} M_{\alpha\beta}^{(2)}$$

Es gibt aber nur ein $M, E \neq 0$:

$$\langle 2, l', m', 0 | r \mathcal{Y}_{10} | 2, l, m, 0 \rangle \quad \begin{cases} \delta_{min} & \text{wegen } \mathcal{Y}_{10} \\ l' = l \pm 1 & \text{wegen } \mathcal{Y}_{10} \end{cases}$$

Daraus folgt aber, daß das Matrixelement

$$U_{12} = U_{21}^* = \langle 2, 2s, 0, 0 | U | 2, 2p, 0, 0 \rangle$$

reelwertig ist. Weiter

$$\det(\dots) = 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} -\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)} & U_{12} & 0 & 0 \\ U_{21} & -\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)} \end{vmatrix} = \left(\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)}\right)^2 \left(\left(\mathcal{E}_{2,\gamma}^{(N)}\right)^2 - U_{12}^2\right) = 0$$

$$\mathcal{E}_{21} = U_{12} \quad \mathcal{E}_{22} = -U_{12} \quad \mathcal{E}_{23} = 0 \quad \mathcal{E}_{24} = 0$$

Zwar liegt noch immer Entartung vor, aber für die zugehörigen Matrixelemente ist $\langle \dots | V | \dots \rangle = 0$.

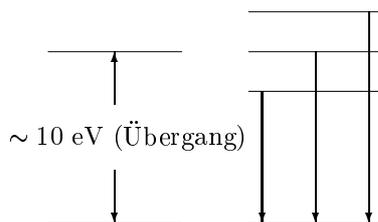


Abbildung 8.1: Linearer STARK-Effekt: Aufspaltung der Linien

Berechnung des Matrixelement $U_{12} \sim \langle 2s, 0 | r\mathcal{Y}_{10} | 2p, 0 \rangle$ **Auswahlregeln für l und m**

Die Tatsache, daß nur bestimmte Übergänge erlaubt sind, läßt zum einen auf die Paritätseigenschaften der Wellenfunktion zurückführen. Eine weitere Bedingung erhalten wir außerdem aus der Form des externen Störpotentials.

(a) Der Störoperator für das homogene elektrische Feld \mathbf{E} war

$$H' = -\langle \mathbf{E}, \mathbf{d} \rangle = e \langle \mathbf{E}, \mathbf{x} \rangle$$

Aus der Wirkung

$$P \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) = -\mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) = -\mathbf{x} P \psi(\mathbf{x}) \quad \rightarrow \quad P \mathbf{x} = -\mathbf{x} P$$

des Paritätsoperators P erhalten wir also, daß

$$P \mathbf{x} P^{-1} = -\mathbf{x} .$$

Damit ist aber auch für ein Matrixelement des Störoperators

$$\begin{aligned} \langle \psi | H' | \psi' \rangle &= \langle \psi | P^{-1} P H' P^{-1} P | \psi' \rangle = -\langle \psi | P^{-1} H' P | \psi' \rangle = \langle P \psi | H' | P \psi' \rangle \\ &= -\pi \pi' \langle \psi | H' | \psi' \rangle \\ \pi \pi' &= -1 \end{aligned}$$

Die Parität der Wasserstoff-Wellenfunktion war aber gerade gegeben durch $(-1)^l$, so daß also

$$(-1)^l (-1)^{l'} = -1 ,$$

was aber nur erfüllt sein kann, wenn $(l + l')$ eine ungerade Zahl ist; damit ist dann automatisch der Fall $\Delta l = 0$ ausgeschlossen.

(b) Für $\mathbf{E} = |\mathbf{E}| \mathbf{e}_z$ ist das Störpotential rotationssymmetrisch um die z -Achse, so daß wir erhalten:

$$[H', L_z] = 0$$

Aus der Eigenwertgleichung ergibt sich dann aber

$$\begin{aligned} \langle \psi | [H', L_z] | \psi \rangle = 0 &= \langle \psi | H' L_z | \psi \rangle - \langle \psi | L_z H' | \psi \rangle \\ &= m' \langle \psi | H' | \psi \rangle - m \langle \psi | H' | \psi \rangle \\ &= (m' - m) \langle \psi | H' | \psi \rangle \end{aligned}$$

Das kann aber nur erfüllt sein für $m \neq m'$, wenn

$$\langle \psi | H' | \psi \rangle = 0 .$$

Damit sind also nur Übergänge mit $\Delta m = 0$ erlaubt.

(Für die Fortführung der Argumentation siehe [13], Ausgabe H8.1.)

8.5.2 Der quadratische STARK-Effekt

Bei Wasserstoff-ähnlichen Atomen (${}_3\text{Li}_{11}$, ${}_{11}\text{Na}_{14}$, ${}_{19}\text{K}_{37}$, ${}_{37}\text{Rb}$) tritt an die Stelle der n^2 -Entartung für das $1/r$ Potential nur noch der $m = 2l + 1$ Anteil der Entartung, so daß

$$\varepsilon_{n,0} \rightarrow \varepsilon_{nl,0}$$

Im üblichen Ansatz $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ für den HAMILTONOPERATOR ist der ungestörte Anteil

$$\hat{H}_0 |nlm, 0\rangle = \varepsilon_{nlm} |nlm, 0\rangle$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$|nlm, 0\rangle_N = \sum_{m'=-l}^l M_{m,m'}^{(nl)} |nlm', 0\rangle$$

für die Wellenfunktion der N ten Ordnung. Der Störterm ist dann gegeben durch

$$U(\mathbf{r}) = -eE_Z Z = -eE_Z \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{10}.$$

(a) Energiekorrektur 1. Ordnung

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{nl,0} &= {}_N \langle nlm' | V | nlm \rangle_N \\ &= eE_Z {}_N \langle nlm' | V | nlm \rangle_N \\ &= eE_Z | \langle nlm \rangle |^2 Z \\ &= 0, \end{aligned}$$

da Z ungerade, das Quadrat der Wellenfunktion aber immer gerade ist; demnach verschwindet das Produkt bei Integration.

(b) Energiekorrektur 2. Ordnung

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{nl,2} &= \sum_{n',l' \neq n,l} \frac{|\langle n'l'm' | V | nlm \rangle|^2}{\mathcal{E}_{nl,0} - \mathcal{E}_{n'l',0}} \quad l' = l \pm 1 \\ &= e^2 E_Z^2 \frac{4\pi}{3} \sum_{\substack{n',l' \neq n,l \\ m=0}} \frac{|\langle n'l' | r Y_{10} | nl \rangle|^2}{\mathcal{E}_{nl,0} - \mathcal{E}_{n'l',0}} \\ &\sim E_Z^2 \end{aligned}$$

(c) Korrektur der Wellenfunktion in 1. Ordnung

$$|nlm, 1\rangle = |nlm, 0\rangle - eE_Z \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{n'l' \neq nl} \frac{\langle n'l', 0 | r Y_{10} | nl \rangle}{\mathcal{E}_{nl,0} - \mathcal{E}_{n'l',0}} |n'l', 0\rangle$$

(d) Induktives Dipolmoment

$$\begin{aligned} \langle D_Z \rangle &= -e \langle \psi_{n'l'm'}^{(1)} | z | \psi_{nlm}^{(1)} \rangle \\ &= -e \langle n'l'm', 1 | z | nlm, 1 \rangle \\ &= e^2 E_Z^2 \frac{4\pi}{3} \sum_{\substack{n' \neq n \\ l=\text{cont}}} \frac{|\langle n', l \pm 1, 0 | r Y_{10} | nl, 0 \rangle|^2}{\mathcal{E}_{nl,0} - \mathcal{E}_{n'(l \pm 1), 0}} \end{aligned}$$

□ SPEZIELLE LITERATUR

[8.1] D.R. HARTREE, Proc Cambridge philos. Soc. **24** 111 (1928)

Übungsaufgaben

[*]

Übung 8.1 – Der lineare STARK-Effekt. Das Energieniveau mit $n = 2$ des ungestörten Wasserstoffatoms ist vierfach entartet ($g_n = n^2$), so daß für die Energieeigenwerte gilt: $E_{10} = E_{01}$. Die Zustände werden durch Quantenzahlen ($l = m = 0$) und ($L = 1, m = 0, \pm 1$) beschrieben.

(a) Wie spaltet dieses im Falle des zusätzlichen elektrischen Potentials

$$V' = -\langle \mathbf{E}, \mathbf{d} \rangle = e \langle \mathbf{E}, \mathbf{x} \rangle = H' \quad \text{mit} \quad \mathbf{E} = |\mathbf{E}| \mathbf{e}_z$$

auf? Berechnen Sie die ungestörte Wellenfunktion ψ_α und ihre Energien in erster Ordnung durch Diagonalisieren der Matrix von H' .

(b) Berechnen Sie die Eigenwerte $\langle \psi_\alpha | d_z | \psi_\alpha \rangle$ des induzierten Dipolmomentes.

(c) Berechnen, skizzieren und diskutieren Sie die Wahrscheinlichkeit

$$W_\alpha(\vartheta) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi_\alpha(r, \vartheta, \varphi)|^2,$$

das Elektron mit Wellenfunktion ψ_α im Gebiet zwischen ϑ und $\vartheta + d\vartheta$ zu finden.

Übung 8.2 – Harmonischer Oszillator in elektrischem Feld. Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator mit Masse m und Ladung e befinde sich in einem konstanten elektrischen Feld E :

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

Bestimmen Sie das Energiespektrum dieses Systems (a) exakt (b) in 2. Ordnung Störungstheorie (mit $H' = -eEx$ als Störung) und vergleichen Sie die Resultate. Berechnen Sie die Korrekturen 1. Ordnung zur Wellenfunktion.

Übung 8.3 – Teilchen in einem eindimensionalen Potential. Betrachten Sie ein Teilchen in einem eindimensionalen Potential ($A > 0$):

$$V(x) = \begin{cases} Ax & x > 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases}$$

Berechnen Sie die Energie des Grundzustandes in Störungstheorie, unter Verwendung des harmonischen Oszillators als ungestörtes System.

1. Bestimmen Sie die Korrektur erster Ordnung zur Bindungsenergie.
2. Kann der harmonische Oszillator so gewählt werden, daß die Korrektur erster Ordnung verschwindet?

Übung 8.4 – Grundzustand eines wasserstoffartigen Atoms. Berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Korrektur zum Grundzustand eines wasserstoffartigen Atoms, die durch die endliche Ausdehnung des Kerns entsteht. Unter der Annahme, daß der Kern kugelförmig ist (mit Radius R) und die Ladung Ze gleichmäßig über das gesamte Volumen verteilt ist, ergibt sich folgende Wechselwirkung:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) & 0 \leq r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} & r \geq R \end{cases}$$

Hinweis: Beachten Sie, daß der BOHR'sche Radius $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ viel größer ist als der Kern, d.h. daß $a_0 \gg R$ gilt.

Übung 8.5 – Das Heliumatom. Die Energiekorrektur aufgrund der COULOMB-Wechselwirkung der beiden Elektronen in erster Ordnung Störungstheorie ist gegeben durch

$$\Delta E = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = I \pm J .$$

Falls sich eines der beiden Elektronen in einem angeregten Zustand, das zweite im Grundzustand befindet, gilt:

$$\begin{aligned} I_{10}^{nl} &= \int d^3x_1 \int d^3x_2 |\psi_{100}(\mathbf{x}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \\ J_{10}^{nl} &= \int d^3x_1 \int d^3x_2 \psi_{100}^*(\mathbf{x}_1) \psi_{nlm}^*(\mathbf{x}_2) \psi_{100}(\mathbf{x}_2) \psi_{nlm}(\mathbf{x}_1) \frac{e^2}{r_{12}} \end{aligned}$$

wobei

$$\psi_{nlm}(\mathbf{x}) = R_{nl}(x) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

mit

$$\begin{aligned} R_{10}(x) &= 2 \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zx}{a_B}} \\ R_{20}(x) &= 2 \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zx}{2a_B} \right) e^{-\frac{Zx}{2a_B}} \\ R_{21}(x) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{3/2} \frac{Zx}{a_B} e^{-\frac{Zx}{2a_B}} \\ R_{30}(x) &= 2 \left(\frac{Z}{3a_B} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zx}{3a_B} + \frac{2(Zx)^2}{27a_B^2} \right) e^{-\frac{Zx}{3a_B}} \end{aligned}$$

die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms ist.

(a) Berechnen Sie die Energieaufspaltung (1s)(2s) Zustandes, also die Aufspaltung zwischen Orthohelium (3S_1) und Parahelium (1S_0). Zeigen Sie dazu zunächst, daß sich die Austauschintegrale J_{10}^{nl} in der Form

$$J_{10}^{nl} = \frac{e^2}{2l+1} \int dx_1 x_1^2 \int dx_2 x_2^2 \frac{x_1^l}{x_2^{l+1}} R_{10}(x_1) R_{nl}(x_2) R_{10}(x_2) R_{nl}(x_1)$$

schreiben lassen.

Hinweis: Benutzen Sie die Beziehung

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \frac{4\pi}{x_>} \sum_l \sum_{m=-l}^{+l} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{x_<}{x_>}\right)^l Y_{lm}^*(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}(\theta_2, \phi_2)$$

mit $x_> = \max(x_1, x_2)$ und $x_< = \min(x_1, x_2)$.

(b) Zeigen Sie, daß für das COULOMBintegral I_{10}^{20} . Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Austauschintegral aus der vorherigen Aufgabe.

(c) Berechnen Sie die Energieverschiebung von Ortho- und Parahelium im Zustand (1s)(2p).

(d) Diskutieren Sie das Verhalten des COULOMBintegrals I_{10}^{nl} für steigende n und festes l .

9

Bewegung eines geladenen Teilchens im EM-Feld

9.1 Der HAMILTON-Operator

In der klassischen Theorie hat die HAMILTON-Funktion eines geladenen Teilchens in einem elektromagnetischen Feld die Gestalt

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e A_0(\mathbf{r}, t) \quad (9.1)$$

Die sich daraus ergebenden Bewegungsgleichungen sind die sogenannten HAMILTON'schen Bewegungsgleichungen (HBG)

$$m \ddot{\mathbf{r}}(t) = e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (9.2)$$

mit den Feldern¹

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla A_0(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (9.3)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (9.4)$$

Die so definierten Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} sind invariant unter den Eichtransformationen

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \Lambda(\mathbf{r}, t) \quad (9.5)$$

$$\tilde{A}_0(\mathbf{r}, t) = A_0(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\mathbf{r}, t)$$

was bedeutet, daß die HBGen (9.2) sich nicht unter einer solchen Transformation ändern.

Für den Fall eines Teilchens ohne Spin ist der Übergang zur Quantenmechanik einfach: wir müssen lediglich die Größen in der HAMILTONfunktion (9.1) durch die entsprechenden Operatoren ersetzen:

$$\hat{H}_{EM} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e A_0 \quad (9.6)$$

¹ Im Unterschied zu der Original-Notation der Vorlesung wird an dieser Stelle A_0 statt ϕ für das skalare Potential geschrieben, um an die Zusammenfassung im Rahmen der kovarianten Theorie zu erinnern, wo $\mathbf{A} = (A_0, \mathbf{A})$. Die Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} werden dann in dem *Feldstärketensor* $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ zusammengefaßt.

Siehe hierzu z.B. L.D. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Band II, *Klassische Feldtheorie*.

Eichinvarianz bedeutet dann, daß sich die Eigenwerte der SCHRÖDINGER-Gleichung und die physikalischen Größen – z.B. die Erwartungswerte – unter (9.5) nicht ändern.

Behauptung: Wenn die Potentiale A_0 und \mathbf{A} nach (9.5) transformieren, dann muß sich auch die Wellenfunktion ändern

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{r}, t)\right) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Damit muß als Identität gelten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \tilde{H}(t) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Beweis:

□

Minimale Kopplung

Die Berücksichtigung des elektromagnetischen Potentials A^μ läßt sich formal noch in einer anderen Weise realisieren: Gehen wir nämlich von der "normalen" partiellen Ableitung ∂^μ über zur sogenannten **kovarianten Ableitung** D^μ mit

$$\partial^\mu \rightarrow D^\mu = \partial^\mu + \frac{ie}{\hbar c} A^\mu, \quad (9.7)$$

so lassen sich die Operationen mit ∂^μ in einfacher Weise ersetzen. Diese Methode wird als **minimale Kopplung des elektromagnetischen Feldes** bezeichnet und ist vor allen Dingen in der relativistischen Quantenmechanik und Eichtheorien von Bedeutung (EBERT 1989).

HAMILTON-Operator in COULOMB-Eichung

Für die nichtrelativistische COULOMB-Eichung

$$\nabla \mathbf{A} = 0 \quad (9.8)$$

läßt sich (9.6) umschreiben

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} \mathbf{p} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right) + eA_0 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}^2 - \underbrace{\frac{e\hbar}{ci} \nabla \mathbf{A}}_{=0} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right) + eA_0 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}^2 - 2\frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right) + eA_0 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Hamilton-Operator in Coulomb-Eichung

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \mathbf{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + eA_0 + U \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = E\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (9.9)$$

Wie ändern sich jetzt Wahrscheinlichkeitsdichte und -strom unter Anwesenheit eines EM-Feldes?

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}, t) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= e^{-i\alpha\Lambda(\mathbf{r}, t)} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) e^{i\alpha\Lambda(\mathbf{r}, t)} \\ &= \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi) \\ &= \frac{1}{2cm} (\Psi^* \hat{\mathbf{p}} \Psi - (\hat{\mathbf{p}} \Psi^*) \Psi) \\ &\quad \downarrow \quad \hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \\ \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \Psi^* \Psi \end{aligned} \quad (9.10)$$

9.2 Der Eigendrehimpuls (Spin) der Elementarteilchen

Allgemeines

Es gibt zwei grundsätzlich verschiedene Arten von Teilchen:

1. **FERMIONEN:** gehorchen der FERMISTATISTIK und dem PAULI-Verbot

$$\begin{aligned} 1/2 &: e^\pm, p, n, \text{Quarks} \\ 3/2 &: \Delta - \text{Anregung des Nukleons: } (\uparrow\downarrow\uparrow) \rightarrow (\uparrow\uparrow\uparrow) \end{aligned}$$

2. **BOSONEN:** Kein PAULIVERBOT (beliebig viele Teilchen im gleichen Quantenzustand möglich)

$$\begin{aligned} 0 &: \text{pseudoskalare Mesonen } \pi^\pm, \pi^0, \kappa^\pm, \kappa^0 \\ 1 &: \text{Vektormesonen } \rho, \omega, \text{Gluonen, } \gamma, \omega^\pm, Z^0 \end{aligned}$$

Darstellung im Spinraum

Nach unseren bisherigen Überlegungen sollte für ein Wasserstoffatom im Grundzustand ($l = 0$) keine Entartung auftreten. Schickt man aber Wasserstoffatome im Grundzustand durch ein inhomogenes Magnetfeld, so findet eine Aufspaltung des Atomstrahls in zwei Komponenten statt – ein Vorgang, welcher sich mit unserer bisher entwickelten Theorie nicht erklären läßt. Wir benötigen daher eine Möglichkeit unser Bild vom Elektron an die – zuerst im Rahmen des berühmten STERN-GERLACH-Versuchs² gefundenen experimentellen Erkenntnisse – anzupassen.

² O.STERN, W. GERLACH, Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld, Z. Phys. **9**, 349 (1922). Das ursprüngliche Experiment wurde allerdings mit einem Strahl von Silberatomen vorgenommen.

Der Elektron-Spin läßt sich nicht durch Orts- oder Impulsoperatoren ausdrücken. Fassen wir das Elektron als ein Objekt mit Freiheitsgraden für Translation und Rotation auf, so ist der Spin eine den Rotationsfreiheitsgraden zuzurechnende Eigenschaft.

Mathematisch bedeutet dies, daß wir die Annahme fallenlassen müssen, daß die Ortsoperatoren \widehat{Q} den gesamten HILBERT-Raum \mathcal{H} aufspannen³: Der HILBERT-Raum \mathcal{H} zerfällt in zwei zueinander senkrechte Teilräume \mathcal{H}_r und \mathcal{H}_s

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_s \quad (9.11)$$

In selber Weise definieren wir auch die Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \Psi(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{s}) \quad (9.12)$$

so daß wir die bereits vom Drehimpuls bekannten Eigenwertgleichungen

$$\widehat{s}^2 |s m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s m_s\rangle \quad (9.13)$$

$$\widehat{s}_z |s m_s\rangle = \hbar m_s |s m_s\rangle \quad (9.14)$$

erhalten. Ebenso verwenden wir die analoge Schreibweise

$$\begin{aligned} \widehat{L}^2, \widehat{L}_z &\rightarrow |l m_l\rangle \quad \text{mit } Y_{lm}(\theta, \phi), Y_{lm}^*(\theta, \phi) \\ \widehat{S}^2, \widehat{S}_z &\rightarrow |s m_s\rangle \end{aligned}$$

Die Darstellung der Spinoperatoren im $(2n+1)$ -dimensionalen Spinraum erfolgt durch

$$\begin{aligned} \langle s m'_z | \widehat{s}^2 | s m_z \rangle &= \hbar^2 s(s+1) \delta_{m'_z m_z} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & & & & 0 \\ & a_{22} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & a_{nn} \end{pmatrix} \\ \langle s m'_s | \widehat{s}_z | s m_s \rangle &= \hbar m_s \delta_{m'_s m_s} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & & & & 0 \\ & a_{22} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & a_{nn} \end{pmatrix} \\ \langle s m'_s | s_{\pm} | s m_s \rangle &= \hbar \sqrt{(s \mp m_s)(s \pm m_s + 1)} \delta_{m'_s m_s \pm 1} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & & & 0 \\ a_{21} & 0 & a_{23} & & \\ & a_{32} & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

³ Für eine genauere mathematische Behandlung siehe [11], S. 207 sowie [3], S. 255.

Eigenschaften von Spin $1/2$ Teilchen

Die Eigenwertgleichungen für Spin $1/2$:

$$\begin{aligned}\hat{s}^2 |1/2 m_s\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |1/2 m_s\rangle \\ \hat{s}_z |1/2 m_s\rangle &= \hbar m_s |1/2 m_s\rangle\end{aligned}$$

Wir führen nun für die Zustandsvektoren folgende Notation ein:

$$|1/2 1/2\rangle \equiv |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \langle 1/2 1/2| \equiv (1 0) \quad (9.15)$$

$$|1/2 -1/2\rangle \equiv |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \langle 1/2 -1/2| \equiv (0 1) \quad (9.16)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.17)$$

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.18)$$

Weiterhin definieren wir die PAULI-Spin-Matrizen:

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (9.19)$$

$$\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.20)$$

mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}_2 \\ \sigma_x \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z &= i\mathbf{1}_2\end{aligned}$$

Zusätzlich zu dem bereits bekannten Kommutator

$$[A, B]_- \equiv [A, B] = AB - BA$$

führen wir jetzt noch den Anti-Kommutator

$$[A, B]_+ \equiv AB + BA \quad (9.21)$$

ein, mit dem wir schreiben können

$$[\sigma_x, \sigma_y]_+ = [\sigma_y, \sigma_z]_+ = [\sigma_z, \sigma_x]_+ = 0 \quad (9.22)$$

Die beiden Eigenzustände bilden ein orthonormiertes und vollständiges System:

$$\begin{aligned}\langle \pm | \pm \rangle &= 1 \quad \text{und} \quad \langle \pm | \mp \rangle = 0 \\ \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} |1/2 m_s\rangle \langle m_s 1/2| &= \mathbf{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 1)\end{aligned}$$

Damit kann jede beliebige Spin-Funktion für $s = 1/2$ nach diesem System entwickelt werden:

$$|\Psi(\mathbf{r}, 1/2)\rangle = \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} |1/2 m_s\rangle \underbrace{\langle m_s 1/2 | \Psi(\mathbf{r}, 1/2)\rangle}_{a_{m_s}} = \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} a_{m_s} |1/2 m_s\rangle \quad (9.23)$$

9.3 Die PAULI-Gleichung

Für ein Elektron mit Spin $1/2$ ist das magnetische Moment

$$\mathbf{M} = \mu_B \frac{g}{\hbar} \mathbf{s} = \mu_B \frac{2}{\hbar} \mathbf{s} \quad (9.24)$$

Die darin auftretende Größe

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad (9.25)$$

ist das BOHR'sche Magneton. Die Energie eines magnetischen Dipols im magnetischen Feld \mathbf{B} ist

$$V_m^{(s)} = \mathbf{M}\mathbf{B} = \mu_B 2 \frac{\mathbf{s}}{\hbar} \mathbf{B} \quad (9.26)$$

so daß wir für den HAMILTON-Operator erhalten:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\mu_B \frac{\mathbf{L}\mathbf{B}}{\hbar}}_{\text{Drehimpuls}} + \underbrace{\mu_B 2 \frac{\mathbf{s}\mathbf{B}}{\hbar}}_{\text{Spin}} + \frac{e^2}{8m_e c^2} \mathbf{B}^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (9.27)$$

Durch Zusammenfassen von Drehimpuls- und Spinanteil zu einem paramagnetischen Moment

$$\mu_{Para} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \quad (9.28)$$

bekommen wir den

PAULI-Operator (in COULOMB-Eichung)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_{Para} \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e c^2} B^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (9.29)$$

Die zu lösende SCHRÖDINGER-Gleichung ist jetzt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{1/2}(t)\rangle = \hat{H} |\Psi^{1/2}(t)\rangle \quad (9.30)$$

Wegen der beiden Spinrichtungen ist dabei die Wellenfunktion

$$\Psi^{1/2}(\mathbf{r}, t) = \left\{ \begin{array}{l} \Psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \quad (9.31)$$

so daß (9.30) die Form annimmt:

PAULI-Gleichung (ohne Spin-Bahn-WW)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{Bmatrix} \Psi_+^{1/2}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-^{1/2}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta U(\mathbf{r}) - eA_0(\mathbf{r}, t) + \mu_B \frac{\mathbf{L}\mathbf{B}}{\hbar} + H_{Dia} \right) \mathbb{1}_2 + 2\mu_B \frac{\mathbf{s}\mathbf{B}}{\hbar} \right] \begin{Bmatrix} \Psi_+^{1/2}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-^{1/2}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} \quad (9.32)$$

Der PASCHEN-BACK-Effekt

Dies ist die Aufspaltung der Spektrallinien beim Wasserstoff in einem starken, homogenen Magnetfeld (PASCHEN 1891); in diesem Fall ist die Spin-Bahn-WW vernachlässigbar klein

$$\mu_{Para} \mathbf{B} \gg \mathbf{L} - \mathbf{S} - WW$$

Wir wählen jetzt $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ und $\psi_{el} = 0$. Für das ungestörte Wasserstoff-Atom ohne Spin ist

$$H_0 \Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = E_{nl} \Psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Unter diesen Voraussetzungen wird die PAULI-Gleichung (9.32)⁴

$$\left[\left(H_0 + \mu_B \frac{B_z L_z}{\hbar} \right) \mathbb{1}_2 + 2\mu_B \frac{B_z S_z}{\hbar} \right] \begin{Bmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}) \\ \Psi_-(\mathbf{r}) \end{Bmatrix} = E_{nlm_s} \begin{Bmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}) \\ \Psi_-(\mathbf{r}) \end{Bmatrix} \quad (9.33)$$

Störungstheorie 1. Ordnung

$$\epsilon_{nlmm_s}^{(1)} = \frac{\mu_B B_z}{\hbar} \langle \Psi_{mlmm_s}^{1/2} | L_z \mathbb{1}_2 + \frac{2\hbar}{2} \mathbb{1}_2 | \Psi_{nlmm_s}^{1/2} \rangle \quad (9.34)$$

Die Wellenfunktion läßt sich schreiben

$$\begin{aligned} \Psi^{1/2} &= a_{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_{1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \\ \Psi_{nlmm_s}^{1/2}(\mathbf{r}) &= \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \right) = A_{nl} R_{nl} Y_{lm}(\theta, \phi) \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \right] \end{aligned}$$

Damit wird die Korrektur (beachte: $L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$)

$$\epsilon_{nlmm_s}^{(1)} = \frac{\mu_B B_z}{\hbar} (\hbar m \pm \hbar) = \mu_B (m \pm 1) \quad (9.35)$$

Die Energie spaltet also im Magnetfeld auf.

⁴ Der Zeitabhängige Anteil wurde mit dem Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) \Psi(\mathbf{r})$$

absepariert.

Abbildung 9.1: Aufspaltung der Wasserstoff Spektrallinien in einem starken homogenen Magnetfeld

9.4 Kopplung zweier Drehimpulse

Da sich in der Quantenmechanik im Gegensatz zur klassischen Mechanik keine vollständigen Vektoren der Drehimpulse addieren lassen – es lassen sich nur \hat{J}^2 und eine Komponente, in der Regel \hat{J}_z , messen – brauchen wir ein entsprechendes Verfahren, welches dies leistet.

Bevor wir nun Eigenfunktionen zu \hat{J}^2 und \hat{J}_z suchen, erinnern wir zunächst an

$$\begin{aligned}\hat{l}^2 | l l_z \rangle &= \hbar^2 l(l+1) | l l_z \rangle \\ \hat{l}_z | l l_z \rangle &= \hbar l_z | l l_z \rangle \\ \hat{s}^2 | s s_z \rangle &= \hbar^2 s(s+1) | s s_z \rangle \\ \hat{s}_z | s s_z \rangle &= \hbar s_z | s s_z \rangle\end{aligned}$$

Im Fall einer Mischung:

$$\begin{aligned}\hat{j}^2 | j m \rangle &= \hbar^2 j(j+1) | j m \rangle \\ \hat{j}_z | j m \rangle &= \hbar m | j m \rangle\end{aligned}$$

Wenn dabei $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$, dann muß \hat{j} wieder die Kommutatorrelationen des Drehimpulses erfüllen:

$$\begin{aligned}[j_i, j_j] &= [l_i + s_i, l_j + s_j] = [l_i, l_j] + [l_i, s_j] + [s_i, l_j] + [s_i, s_j] \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} l_k + i\hbar \epsilon_{ijk} s_k \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} (l_k + s_k) \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} j_k\end{aligned}$$

Zustandsvektoren von \hat{j}^2 und \hat{j}_z

Im einfachsten Fall könnte ein Produktansatz genügen:

$$| j, m \rangle = | l, l_z \rangle | s, s_z \rangle \quad (9.36)$$

Für die z -Komponente ist dann

$$\hat{j}_z | j, m \rangle = (\hat{l}_z + \hat{s}_z) | l, l_z \rangle | s, s_z \rangle = \hbar(l_z + s_z) | l, l_z \rangle | s, s_z \rangle = \hbar j_z | j, m \rangle \quad (9.37)$$

Ebenso überprüfen wir den Ansatz für das Betragsquadrat \hat{j}^2 :

$$\hat{j}^2 = (\hat{l} + \hat{s})^2 = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + \hat{l}\hat{s} = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2\hat{l}_z\hat{s}_z + \hat{l}_+\hat{s}_- + \hat{l}_-\hat{s}_+ \quad (9.38)$$

Der Anteil $(\hat{l}_-\hat{s}_+ + \hat{l}_+\hat{s}_-)$ ist dabei allerdings nicht mehr durch den Produktansatz erfaßt. Entwickeln wir jetzt $| j, m \rangle$ nach dem vollständigen System des Produktansatzes:

$$\sum_{l_z=-l}^{+l} \sum_{s_z=-s}^{+s} \left[| l, l_z \rangle | s, s_z \rangle \langle s, s_z | \langle l, l_z | \right] = \sum_{l_z, s_z} | l, l_z, s, s_z \rangle \langle l, l_z, s, s_z | = 1 \quad (9.39)$$

$$| j, m \rangle = \sum_{l_z, s_z} | l, l_z, s, s_z \rangle \underbrace{\langle l, l_z, s, s_z | j, m \rangle}_{\equiv C(l s j | l_z s_z m)} \quad (9.40)$$

Clebsch-Gorden-Koeffizienten

$$\langle l, l_z, s, s_z | j, m \rangle \equiv C(l s j | l_z s_z m) \quad (9.41)$$

Die Eigenfunktionen sind also damit

$$| j, m \rangle = \sum_{l_z, s_z} C(l s j | l_z s_z m) | l, l_z \rangle | s, s_z \rangle \quad (9.42)$$

Diese $| j, m \rangle$ sind Eigenzustände zu \hat{j}^2 und \hat{j}_z .

Behauptung: $| j m \rangle$ sind auch Eigenzustände zu \hat{l}^2 und \hat{s}^2 .

Beweis:

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 | j m \rangle &= \hat{l}^2 \sum_{l_z, s_z} C(l s j | l_z s_z m) | l l_z \rangle | s s_z \rangle = \hbar^2 l(l+1) | j m \rangle \\ \hat{s}^2 | j m \rangle &= \hat{s}^2 \sum_{l_z, s_z} C(l s j | l_z s_z m) | l l_z \rangle | s s_z \rangle = \hbar^2 s(s+1) | j m \rangle \end{aligned}$$

□

Auswahlregeln

$$m = l_z + s_z \quad (9.43)$$

$$|l - s| \leq j \leq |l + s| \quad (9.44)$$

Gleichung für Clebsch-Gorden-Koeffizienten

$$\sum_{l_z, s_z} \langle l l'_z s s_z | j^2 | l l_z s s_z \rangle C(l s j | l_z s_z m) = \hbar^2 j(j+1) C(l s j | l_z s_z m) \quad (9.45)$$

Wie bereits gesehen, läßt sich j^2 auch als folgende Zerlegung schreiben:

$$j^2 = l^2 + s^2 + 2l_z s_z + l_+ s_- + l_- s_+$$

Damit überprüfen wir jetzt die Normierung $\langle j m | j m \rangle = 1$

$$\sum_{l'_z, s'_z} \sum_{l_z, s_z} \underbrace{\langle s s'_z | \overbrace{\langle l l'_z | l l_z \rangle}^{\delta_{l'_z l_z}} | s s_z \rangle}_{\delta_{s'_z s_z}}$$

$$\begin{aligned}
 \cdot C(lsj|l'_z s'_z m)^* C(lsj|l_z s_z m) &= \sum_{l_z, s_z} C(lsj|l_z s_z m)^* C(lsj|l_z s_z m) \\
 &= \sum_{l_z, s_z} |C(lsj|l_z s_z m)|^2 \\
 &= 1, \text{ da ja } \langle jm | jm \rangle = 1
 \end{aligned}$$

Orthogonalitätsrelationen

$$\begin{aligned}
 \sum_{l_z, s_z} C(lsj|l_z s_z m)^* C(lsj'|l_z s_z m') &= \sum_{l_z, s_z} \langle jm | \underbrace{|ll_z s s_z\rangle}_{=1} \langle ll_z s s_z | j'm' \rangle \\
 &= \langle jm | j'm' \rangle \\
 &= \delta_{jj'} \delta_{mm'}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_m C(lsj|l'_z s'_z m) C(lsj|l_z s_z m)^* &= \sum_m \langle ll'_z s s'_z | \underbrace{|jm\rangle}_{=1} \langle jm | ll_z s s_z \rangle \\
 &= \langle ll'_z s s'_z | ll_z s s_z \rangle \\
 &= \langle ll'_z | \underbrace{\langle s s'_z | s s_z \rangle}_{\delta_{s_z s'_z}} | ll_z \rangle \\
 &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\delta_{l_z l'_z}} \\
 &= \delta_{l'_z l_z} \delta_{s'_z s_z}
 \end{aligned}$$

Spezialfall: Elektronen mit Spin $1/2$

In diesem Fall können nur zwei Terme auftreten, nämlich:

$$\begin{aligned}
 |jm\rangle &= |l(m-1/2)1/21/2\rangle C(l1/2j|(m-1/2)1/2m) \\
 &\quad + |l(m+1/2)1/2-1/2\rangle C(l1/2j|(m+1/2)-1/2m) \\
 C(l1/2(l+1/2)|(m\mp 1/2)\pm 1/2m) &= \sqrt{\frac{l+1/2\pm m}{2l+1}} \\
 C(l1/2(l-1/2)|(m\mp 1/2)\pm 1/2m) &= \pm\sqrt{\frac{l+1/2\mp m}{2l+1}}
 \end{aligned}$$

9.5 Die Spin-Bahn Wechselwirkung in der Atom- und Kernphysik

1. Wasserstoff-Atom

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} V(r) \mathbf{ls}$$

2. Atomkern

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2|\kappa|}{\hbar^2} \mathbf{ls}$$

Die Zustände im Kern werden sukzessive mit Nucleonen aufgefüllt. Bei den “magischen Zahlen” kommt es zu einer Abweichung von den Niveaus des harmonischen Oszillators.

Beide Fälle lassen sich in gleicher Weise lösen:

$$\begin{aligned}
 H_0 |nlm\rangle &= E_{nl} |nlm\rangle && \text{ungestörtes Wasserstoff-Atom} \\
 \tilde{H}_0 |\widetilde{nlm}\rangle &= \tilde{E}_{nl} |\widetilde{nlm}\rangle = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right) |\widetilde{nlm}\rangle && \text{harmonischer Oszillator}
 \end{aligned}$$

Wasserstoff-Atom

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2|\kappa|}{\hbar^2} \mathbf{ls} \tag{9.46}$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} \pm \frac{1}{2} \Rightarrow |nl^{1/2}jm\rangle = \sum_{l_z, s_z} C(l^{1/2}j|l_z s_z m) |nl l_z\rangle |1/2 s_z\rangle$$

Die Energiekorrektur 1. Ordnung ist:

$$\epsilon_{\mathbf{ls}}^{(1)} = \langle nl^{1/2}jm | V_{ls}(r) \mathbf{ls} | nl^{1/2}jm \rangle \tag{9.47}$$

Behauptung: Die Wellenfunktionen $|nl^{1/2}jm\rangle$ sind auch Eigenfunktionen zu \mathbf{ls} .

Beweis:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j}^2 &= (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 \quad l \neq 0 = \mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{ls} \\
 \mathbf{ls} &= \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2)
 \end{aligned}$$

□

Einsetzen dieser Beziehung in die Energiekorrektur:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{\mathbf{ls}}^{(1)} &= \epsilon_{nlsj}^{(1)} \\
 \mathbf{ls} |nl^{1/2}jm\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2) |nl^{1/2}jm\rangle \\
 &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) |nl^{1/2}jm\rangle
 \end{aligned}$$

Allerdings müssen wir jetzt noch die zwei Einstellmöglichkeiten

$$\begin{aligned}
 j_1 = l + \frac{1}{2} &\Rightarrow \mathbf{ls} |nl^{1/2}jm\rangle = \frac{\hbar^2}{2} l |nl^{1/2}jm\rangle \\
 j_2 = l - \frac{1}{2} &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2} (l+1) |nl^{1/2}, jm\rangle
 \end{aligned}$$

berücksichtigen:

$$\begin{aligned}\epsilon_{\mathbf{1s}}^{(1)} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left\{ \begin{array}{c} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \langle V_{ls}(r) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left\{ \begin{array}{c} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \langle nljm | \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} | nljm \rangle\end{aligned}$$

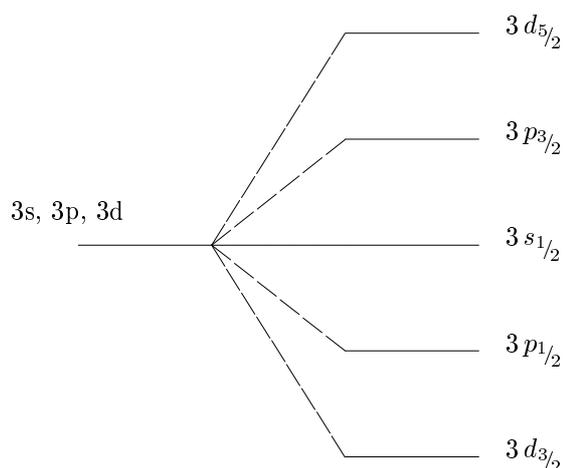


Abbildung 9.2: Hyperfeinstruktur-Aufspaltungen durch Spin-Bahn-Wechselwirkung

Schalenmodell des Atomkerns

$$\begin{aligned}\hat{H} &= H_0 - \frac{2|\kappa|}{\hbar^2} \mathbf{ls} \\ \epsilon_{nl}^{(1)} &= \hbar\omega(2m_s + l + \frac{3}{2})\end{aligned}$$

Energiekorrektur 1. Ordnung:

$$\epsilon_{nl}^{(1)} = -\frac{2|\kappa|}{\hbar^2} \langle \mathbf{ls} \rangle = |\kappa| \begin{cases} -l & j = l + \frac{1}{2} \\ l+1 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (9.48)$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{\mathbf{1s}}^{(1)} &= a \langle nl \frac{1}{2} jm | \hat{V}_{ls}(\mathbf{r}) \mathbf{ls} | nl \frac{1}{2} jm \rangle \\ &= \sum_{l'_z, s'_z} \sum_{l_z, s_z} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{4\pi} d\Omega C(l \frac{1}{2} j | l'_z s'_z m)^* R_{nl}^*(r) Y_{l'_z}^*(\Omega) \chi^{1/2}(s'_z) \\ &\quad V_{ls}(\mathbf{r}) \mathbf{ls} R_{nl}(r) Y_{l_z}(\Omega) \chi^{1/2}(s_z) C(l \frac{1}{2} j | l_z s_z m) \\ \mathbf{s} &\rightarrow \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{l'_z, s'_z} \sum_{l_z, s_z} \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 V_{ls}(\mathbf{r}) C(l' \frac{1}{2} j | l'_z s'_z m)^* C(l \frac{1}{2} j | l_z s_z m) \\
 &\quad \underbrace{\int_0^{4\pi} d\Omega Y_{l'l'_z}^*(\Omega) Y_{ll_z}(\Omega)}_{\delta_{l'_z l_z}} \underbrace{\chi^{1/2}(s'_z) \chi^{1/2}(s_z)}_{\delta_{s'_z s_z}} \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \\
 &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 V_{ls}(\mathbf{r}) \underbrace{\sum_{l_z, s_z} |C(l \frac{1}{2} j | l_z s_z m)|^2}_{=1} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \int_0^\infty r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 V_{ls}(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

Der ZEEMAN-Effekt

Der ZEEMAN-Effekt (ZEEMAN 1897) beschreibt die Aufspaltung der Spektrallinien in einem Magnetfeld.

Der HAMILTON-Operator in diesem Fall gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{ls}(\mathbf{r}) \mathbf{ls} + \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} \mathbf{B} + \mu_B 2 \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \mathbf{B} + (\text{Diamagnetismus}) \quad (9.49)$$

PASCHEN-BACK-Effekt (anormaler ZEEMAN-Effekt)

$$H_0 \Psi_{nl l_z s_z}^{1/2}(\mathbf{r}) = E_{nl l_z s_z} \Psi_{nl l_z s_z}^{1/2}(\mathbf{r})$$

Für die nicht gekoppelten Produktansatz von l und s :

$$E_{nl l_z s_z}^{(1)} = \frac{\mu_B B_z}{\hbar} \langle \Psi_{nl l_z s_z}^{1/2} | L_z + 2S_z | \Psi_{nl l_z s_z}^{1/2} \rangle = \mu_B B_z (l_z \pm 1)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{ls}(\mathbf{r}) \mathbf{ls} \quad (9.50)$$

$$\hat{H}_0 | n, j, m \rangle = \epsilon_{njm} | n, j, m \rangle \quad (9.51)$$

$$| n, j, m \rangle = \sum_{l_z, s_z} C(l \frac{1}{2}, j | l_z, s_z, m) | n, l, l_z \rangle | \frac{1}{2}, s_z \rangle \quad (9.52)$$

gilt nur bei Vernachlässigung der

Radialabhängigkeit der Spin-Bahn-WW

$$\epsilon_{njm}^{(0)} = -\frac{e^4 \mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n} + \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left\{ \begin{matrix} l \\ -(l+1) \end{matrix} \right\} \langle V_{ls}(r) \rangle \quad (9.53)$$

Energiekorrektur 1. Ordnung für $\mathbf{B} = B_z$

$$\begin{aligned} \epsilon_{njm}^{(1)} &= \frac{\mu_B B_z}{\hbar} \langle n, j, m | \underbrace{\widehat{j}_z + \widehat{s}_z}_{\widehat{j}_z | n, j, m \rangle = \hbar m | n, j, m \rangle} | n, j, m \rangle \\ &= \mu_B B_z \left[m + \langle n, j, m | \frac{\widehat{s}_z}{\hbar} | n, j, m \rangle \right] \end{aligned}$$

Berechnung des Matrixelementes von s_z (hierbei $\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} \langle n, j, m | \widehat{s}_z | n, j, m \rangle &= \sum_{s_z, s_z'} \sum_{l'_z, s'_z} C(l, 1/2, j | l'_z, s'_z, m)^* C(l, 1/2, j | l_z, s_z, m) \\ &\quad \cdot \underbrace{\langle l, l'_z | \underbrace{\langle 1/2, s'_z | \widehat{s}_z | 1/2, s_z \rangle}_{s_z \delta_{s'_z s_z}} | l, l_z \rangle}_{\delta_{l'_z l_z}} \\ &= \sum_{l_z, s_z} s_z |C(l, 1/2, j | l_z, s_z, m)|^2 \\ &= \sum_{l_z, s_z} (m - l_z) |C(l, 1/2, j | l_z, m - l_z, m)|^2 \\ &= m \sum_{l_z, s_z} \left(1 - \frac{l_z}{m}\right) \underbrace{|C(l, 1/2, j | l_z, m - l_z, m)|^2}_{=g} \\ &= gm \\ &= g \langle n, j, m | \widehat{j}_z | n, j, m \rangle \end{aligned}$$

9.6 Das Elektron im homogenen Magnetfeld

Quantisierung des magnetischen Flußes

Für ein Elektron im Potential $U(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0 = \begin{cases} \mathbf{A} &= 0 \\ \mathbf{A}' &= \nabla f(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (9.54)$$

Dabei geht \mathbf{A}' aus \mathbf{A} durch eine Eichtransformation hervor. Für die Bewegungsgleichung gilt:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = E \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (9.55)$$

↓ Eichung

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 + U(\mathbf{r}) \right] \Psi'(\mathbf{r}, t) = E \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (9.56)$$

Die Wellenfunktionen Ψ und Ψ' unterscheiden sich durch die Phase

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(i \frac{e}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t)\right) \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (9.57)$$

Berechnung des Phasenfaktors:

$$\mathbf{A}' = \nabla f(\mathbf{r}, t) \Rightarrow f(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbf{r}_0(C_1)}^{\mathbf{r}(C_1)} d\mathbf{r}' \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \quad (9.58)$$

Da die Phase im allgemeinen vom Weg anhängt, integrieren wir über den ganzen Umlauf des Elektrons:

$$1. \quad \oint d\mathbf{r}' \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int \int d\mathbf{f}' \underbrace{\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}_{\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)} = 0 \Rightarrow \text{Phasenfaktor} = 1$$

$$2. \quad \oint d\mathbf{r}' \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int \int d\mathbf{f}' \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int \int d\mathbf{f}' \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \Phi(t)$$

Die Phase ändert sich bei Umlauf um $f(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}_0) = \Phi$ und für die Wellenfunktion gilt

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-i \frac{e}{\hbar c} \Phi\right) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Das heißt aber, daß wegen $\Psi = \Psi'$ bei vollem Umlauf

$$\frac{e}{\hbar c} \Phi = 2\pi n \Leftrightarrow \Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n$$

Dies heißt aber, daß der magnetische Fluß gequantelt ist!

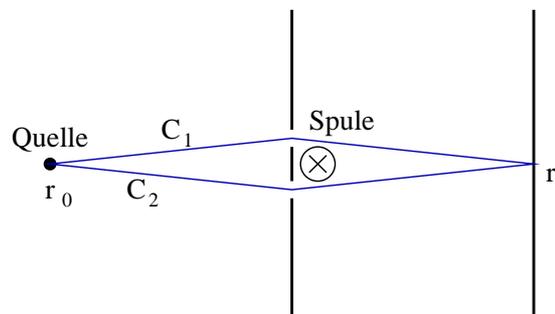
Quantelung des magnetischen Flußes

$$\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} n \quad (9.59)$$

(Messung durch Doll/Nähbaur)

AHARONOV-BOHM-Effekt

Betrachten wir einen Elektronenstrahl, der durch einen Doppelspalt in zwei Teilstrahlen zerlegt wird, die den Raum ober- und unterhalb einer sehr langen stromdurchflossenen Spule mit dem magnetischen Feld \mathbf{B} durchfliegen und danach auf einem Schirm zur Interferenz gebracht werden. Die Wahl der Spule bedingt, daß das Magnetfeld \mathbf{B} im Inneren eingeschlossen ist, also in den Raumbereichen, in denen die Teilchenbewegung stattfindet, verschwindet. Lediglich das Vektorpotential \mathbf{A} kann dort einen von Null verschiedenen Beitrag liefern.



Die Wellenfunktion an der Stelle \mathbf{r} ergibt sich nun als Überlagerung der beiden Teilzüge, d.h.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1 \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} \int_{c_1} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right\} + \Psi_2 \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} \int_{c_2} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right\}. \quad (9.60)$$

Wir erhalten also ein Interferenzmuster, welches von der Phasendifferenz der beiden Teilwellen Ψ_1 und Ψ_2 abhängt. Wählen wir, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, \mathbf{r} so, daß $|c_1| = |c_2|$, also die beiden Weglängen identisch sind, dann läßt sich die Phasendifferenz leicht berechnen:

$$\begin{aligned} \delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 &= \frac{e}{\hbar c} \int_{c_1} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \frac{e}{\hbar c} \int_{c_2} \mathbf{A} d\mathbf{r} = \frac{e}{\hbar c} \left\{ \int_{c_1} \mathbf{A} d\mathbf{r} - \int_{c_2} \mathbf{A} d\mathbf{r} \right\} \\ &= \frac{e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} d\mathbf{r} = \frac{e}{\hbar c} \int \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{f} = \frac{e}{\hbar c} \int \mathbf{B} d\mathbf{f} = \frac{e}{\hbar c} \phi_m \end{aligned}$$

Die Phasendifferenz ist also proportional zum magnetischen Fluß ϕ_m im Inneren der Spule. Obwohl also das \mathbf{B} -Feld im Inneren der Spule eingeschlossen ist, ergibt sich eine von Null verschiedene Phasendifferenz, welche ihre Ursache in dem Vektorpotential \mathbf{A} hat.

Damit zeigt sich ein wesentlicher Unterschied zur klassischen Mechanik/Elektrodynamik: während das Potential \mathbf{A} dort nur eine Hilfskonstruktion zur Berechnung der physikalischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} darstellt, selber aber keine Observable ist, bewirkt es im Rahmen der Quantenmechanik einen meßbaren Effekt. Die tiefere Ursache hierfür liegt in der Verknüpfung von lokaler Phase der Wellenfunktion an zwei Raum-Zeit Punkten mit dem Potential im Rahmen einer lokalen Eichtheorie.⁵

□ SPEZIELLE LITERATUR

-
- [9.1] Y. AHARONOV, D. BOHM, *Phys Rev* **115** (1959), 485
 - [9.2] V.M. BERRY, *Proc R. Soc. London* **A392** (1984), 45
 - [9.3] R.G. CHAMBERS, *Phys Rev Letters* **5** (1960), 3
 - [9.4] D. EBERT, *Eichtheorien: Grundlage der Elementarteilchenphysik*, VCH 1989
 - [9.5] A. A. MICHELSON, *Phil. Mag.* **31** (1891), 338; *ibid.* **34** (1892), 280
 - [9.6] F. PASCHEN, *Ann. Phys.* **50** (1916), 901
 - [9.7] P. ZEEMAN, *Doublets and triplets in the spectrum produced by external magnetic forces*, *Phil. Mag.* **44** (1897), 55—60, 255—259

⁵ Eine gut verständliche Einführung bieten die Kapitel 1–3 in EBERT (1989). Einen weniger mathematischer Zugang gibt Kapitel 12 von H. FRAUENFELDER, E.M. HENLEY, *Subatomic physics*, Prentice Hall 1991.

Übungsaufgaben

Übung 9.1 – Bewegung eines Elektrons im elektromagnetischen Feld. Die Bewegung eines Elektrons im elektromagnetischen Feld ist durch die LORENTZkraft bestimmt:

$$\mathbf{F}_L = \frac{d}{dt} m \mathbf{v} = ev \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right)$$

Bestimmen Sie den HAMILTON-Operator des Elektrons im elektromagnetischen Feld. Gehen Sie dazu in folgenden Schritten vor:

(a) Bringen Sie zunächst die Gleichung für die LORENTZ-Kraft auf die äußere Form der EULER-LAGRANGE Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{x}}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}} = 0.$$

Separieren Sie dazu die totalen Zeitableitungen und die Ortsableitungen. Nun können Sie die LAGRANGEfunktion für das Elektron im elektromagnetischen Feld angeben.

(b) Berechnen Sie den kanonischen konjugierten Impuls $\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{x}}}$ zur Ortsvariablen \mathbf{x} aus dieser LAGRANGEfunktion.

(c) Bestimmen Sie nun die HAMILTONfunktion und betrachten Sie den entsprechenden HAMILTONoperator, indem Sie für Ort und Impuls die entsprechenden Operatoren einsetzen.

(d) Wenden Sie nun diese HAMILTONfunktion auf eine allgemeine Wellenfunktion $\Psi(x)$ an und berechnen Sie die auftretenden Terme. Diskutieren Sie die Unterschiede zu dem Fall, in dem Sie zunächst die HAMILTONfunktion ausmultiplizieren, bevor Sie die Operatoren einführen. Welches ist der tiefere Grund für die Mehrdeutigkeit bei der Bestimmung des HAMILTONoperators?

Übung 9.2 – Paramagnetisches Ion in einem kristallinen Gitter. Die Zustände eines paramagnetischen Ions in einem kristallinen Gitter sind Eigenfunktionen eines “Spin-Operators”,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S = & a H S_z + b H I_z + \frac{1}{2} D (3 \cos^2 \theta - 1) \left(S_z^2 - \frac{1}{3} S^2 \right) + \frac{1}{2} D \sin 2\theta \left(S_+ (S_z + \frac{1}{2}) + S_- (S_z - \frac{1}{2}) \right) \\ & + \frac{1}{4} D \sin^2 \theta (S_+^2 + S_-^2) + A S_z I_z + \frac{A}{2} (S_+ I_- + S_- I_+), \end{aligned}$$

wobei \mathbf{S} und \mathbf{I} die Spinoperatoren des Elektrons bzw. des Kernes sind. a, b, A und D sind Konstanten ($a \gg b$) und θ ist der Winkel zwischen der Symmetrieachse des Kristalles und der Richtung des angelegten magnetischen Feldes H .

1.

$$\begin{aligned} | M_S M_I \rangle \quad , \quad M_S = -S, -S+1, \dots, S \\ M_I = -I, -I+1, \dots, I \end{aligned}$$

seien die Eigenvektoren des “ungestörten” HAMILTONoperators

$$\mathbf{H}_0 = a H \mathbf{S}_z + b H \mathbf{I}_z.$$

Berechnen Sie die Störung der Energieniveaus von \mathbf{H}_0 , welche durch die zusätzlichen Terme in \mathbf{H}_S auftritt, in zweiter Ordnung Störungstheorie.

2. Bestimmen Sie die Eigenvektoren des HAMILTONoperators \mathbf{H}_S in erster Ordnung Störungstheorie.

Übung 9.3 – Eigenwerte und Eigenvektoren. Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der Operatoren s_x , s_y und s_z in ihrer Darstellung durch PAULI-Matrizen.

Zeitabhängige Störungstheorie

10.1 Elementarer Zugang und “Goldene Regel”

In Kapitel 8 haben wir zunächst nur Lösungen der stationären Gleichung

$$H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle \quad (10.1)$$

betrachtet. Jetzt aber wollen wir nach Lösungen der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(t) \rangle = H | \Psi(t) \rangle \quad (10.2)$$

suchen. Mit der Aufspaltung $H = H_0 + V(t)$ erhalten wir die bereits bekannten Lösungen

$$H_0 | \Psi \rangle = \epsilon_n | \Psi \rangle \quad (10.3)$$

mit der Normierung

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn} \quad (10.4)$$

Dies führt auf die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | n(t) \rangle = H_0 | n(t) \rangle \quad (10.5)$$

mit den Wellenfunktionen

$$| n(t) \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) | n \rangle \quad (10.6)$$

Jetzt können wir $| \Psi(t) \rangle$ entwickeln

$$| \Psi(t) \rangle = \sum_n a_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) | n \rangle \quad (10.7)$$

und in (10.2) einsetzen

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) | n \rangle \\ + \sum_n a_n(t) \left(-\frac{i\epsilon_n}{\hbar} i\hbar\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) | n \rangle = \sum_n a_n(t) (H_0 + \lambda V(t)) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) | n \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) |n\rangle &= \sum_n a_n(t) \lambda V(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) |n\rangle \\
 \underbrace{\langle m | i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) |n\rangle}_{\delta_{mn}} &= \langle m | \sum_n a_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) \lambda V(t) |n\rangle \\
 i\hbar \dot{a}_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_m t\right) &= \sum_n a_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_n t\right) \underbrace{\langle m | \lambda V(t) |n\rangle}_{V_{mn}(t)} \\
 i\hbar \dot{a}_m(t) &= \sum_n a_n(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) \tag{10.8}
 \end{aligned}$$

Der in der letzten Zeile auftretende Faktor

$$\omega_{mn} = \frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{\hbar} \tag{10.9}$$

heißt BOHR'sche Frequenz.

(10.8) ist ein Differentialgleichungssystem der Art

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \\ \vdots \\ \dot{a}_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ V_{21} e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Wir entwickeln jetzt $a_n(t)$ nach dem Kopplungsparameter λ :

$$a_n(t) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \lambda^{\nu} a_n^{(\nu)}(t) \tag{10.10}$$

Einsetzen in (10.8):

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \lambda^{\nu} \dot{a}_m^{(\nu)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_n a_n^{(\nu)}(t) \lambda^{\nu+1} V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \tag{10.11}$$

Durch Koeffizientenvergleich

$$\dot{a}_m^{(\nu+1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n^{(\nu)}(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) \tag{10.12}$$

Für den Zeitpunkt $t = 0$ ist dann in 1. Ordnung

$$\dot{a}_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) \tag{10.13}$$

Die Lösung läßt sich damit direkt formal schreiben als

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{mn}t'} V_{mn}(t') \tag{10.14}$$

Dies ist aber gerade die Übergangsamplitude

$$|k, t = 0\rangle \rightarrow |k, t\rangle$$

10.1.1 Zeitlich konstante Störung

Mit dem Potential $V(t) = V$ wird (10.14) dann

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{V_{mk}}{i\hbar} \int_0^t dt' \exp(i\omega_{mk}t') = -\frac{1}{\hbar} V_{mk} \frac{\exp(i\omega_{mk}t) - 1}{\omega_{mk}} \quad (10.15)$$

Die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit ist

$$\begin{aligned} W_{mk}^{(1)} &= |a_m^{(1)}(t)|^2 \\ &= \left| \frac{V_{mk}}{\hbar\omega_{mk}} (1 - \exp(i\omega_{mk}t)) \right|^2 \\ &= \frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2\omega_{mk}^2} (1 - \exp(i\omega_{mk}t) - \exp(i\omega_{mk}t) + 1) \\ &= \frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2\omega_{mk}^2} (2 - (\cos\omega_{mk}t + i\sin\omega_{mk}t + \cos\omega_{mk}t - i\sin\omega_{mk}t)) \\ &= 2 \frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2\omega_{mk}^2} (1 - \cos\omega_{mk}t) \quad \curvearrowright \quad (1 - \cos\alpha) = 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \\ &= 4 \frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2\omega_{mk}^2} \sin^2 \frac{\omega_{mk}t}{2} \\ &\stackrel{10.9)}{=} \frac{4|V_{mk}|^2}{\epsilon_{mk}^2} \sin^2 \left(\frac{\epsilon_{mk}t}{2\hbar} \right) \end{aligned}$$

Für große Zeiten t ist

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(ax)}{ax^2} = \pi \delta(x)$$

eine Darstellung der δ -Funktion. Dementsprechend erhalten wir – unter Berücksichtigung, daß $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{4\hbar^2\epsilon_{mk}^2 / 4\hbar^2} \sin^2 \left(\frac{\epsilon_{mk}t}{2\hbar} \right) = \frac{\pi t}{4\hbar^2} \delta \left(\frac{\epsilon_{mk}}{2\hbar} \right) = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(\epsilon_m - \epsilon_k)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist demnach

$$W_{mk}^{(1)} = |a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t |V_{mk}|^2 \delta(\epsilon_m - \epsilon_k) \quad (10.16)$$

Zur Eliminierung der Zeit gehen wir jetzt noch über zu einer Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit und erhalten

FERMIS Goldene Regel

$$w_{mk}^{(1)}(t) = \frac{1}{t} |a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 \delta(\epsilon_m - \epsilon_k) \quad (10.17)$$

Der Ausdruck $\delta(\epsilon_m - \epsilon_k)$ fordert Energieerhaltung, so daß es in diesem Fall nur Übergänge zwischen entarteten Zuständen gibt.

10.1.2 Periodische Störung

Mit dem Potential

$$V(t) = 2V \cos \omega t = V (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

wird (10.14)

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{V_{mk}}{i\hbar} \int_0^t dt' (e^{i(\omega_{mk} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{mk} - \omega)t'}) \quad (10.18)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit ist dann

$$w_{mk}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 (\delta(\epsilon_m - \epsilon_k + \hbar\omega) + \delta(\epsilon_m - \epsilon_k - \hbar\omega)) \quad (10.19)$$

Es gibt also nur Übergänge, wenn

- $\epsilon_m = \epsilon_k - \hbar\omega$ – stimulierte Emission
- $\epsilon_m = \epsilon_k + \hbar\omega$ – Absorption

10.1.3 Verallgemeinerung

1. Entartete Systeme

(a) Mittel über Anfangszustände

Für einen Atomkern ohne den Einfluß eines äußeren Magnetfeldes

$$\frac{1}{2l_i + 1} \sum_m$$

(b) Summation über Endzustände

2. Kontinuierliche Zustände

Für den Übergang $|k\rangle \rightarrow |m\rangle$ mit α Zuständen $\epsilon_m \simeq \epsilon_k$ Summation

$$\sum_{m=1}^{\alpha} |a_m^{(1)}|^2$$

Mit der Zustandsdichte

$$(E, E + dE) \rightarrow \rho(E) dE$$

ist die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit

$$w_{mk}^{(1)} = \int dE \rho(E) |a_m^{(1)}|^2$$

Für eine konstante Störung also

$$w_{mk}^{(1)} = 4 \int \sin^2 \left(\frac{\omega_{mk} t}{2} \right) \frac{|V_{mk}|^2}{\omega_{mk}^2} \rho(\epsilon_m) d\epsilon_m$$

Für den Grenzübergang $t \rightarrow \infty$ ist dies

$$w_{mk}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mk}|^2 \rho(\epsilon_m)$$

wobei $\rho(\epsilon_m)$ die Dichte der Endzustände bezeichnet.

10.2 Formaler Zugang: DYSON-Reihe

Im Wechselwirkungsbild sind HAMILTON-Operator, Störoperator und SCHRÖDINGER-Gleichung gegeben durch¹

$$\begin{aligned} H_I &= H_{0I} + V_I \\ V_I &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t\right) V_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right) \\ H_I | i, t_0, t \rangle &= E_I | i, t_i, t \rangle \end{aligned}$$

Die Lösung der zeitabhängigen Gleichung läßt sich dann mittels des Zeitentwicklungsoperators schreiben

$$| i, t_0, t \rangle_I = U(t, t_0) | i, t_0, t_0 \rangle_I = U(t, t_0) | i \rangle_S ,$$

wobei $| i \rangle$ die zeitabhängige Lösung von H_0 ist. Die bestimmende Gleichung für den Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = V_I(t) U(t, t_0) \quad (10.20)$$

wird dabei gelöst durch die DYSON-Reihe

$$U(t, t_0) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt^{(1)} V_I(t^{(1)}) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt^{(1)} \int_{t_0}^{t^{(1)}} dt^{(2)} V_I(t^{(1)}) V_I(t^{(2)}) + \dots \quad (10.21)$$

Wir können jetzt weiter umformen

$$| i, t_0, t \rangle = U(t, t_0) | i \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{| n \rangle \langle n | U(t, t_0) | i \rangle}_{C_n(t)} = \sum_n C_n(t) | n \rangle$$

Mit der DYSON-Reihe läßt sich dieses Matrixelement schreiben

$$\begin{aligned} \langle n | U(t, t_0) | i \rangle &= \langle n | i \rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' \langle n | V_I | i \rangle + \dots \\ &= \langle n | i \rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' \underbrace{\langle n | \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) V_S}_{\epsilon_n} \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t'\right) | i \rangle}_{\epsilon_i} \end{aligned}$$

In nullter Ordnung (Anfangszustand) der Entwicklung ist

$$C_n^{(0)} = \langle n | i \rangle = \delta_{ni} .$$

In erster Ordnung

$$C_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \exp(i\omega_{ni}t') V_{ni}(t')$$

¹ Vergleiche hierzu auch: [14], 68–73.

In zweiter Ordnung ergibt sich:

$$C_n^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \exp(i\omega_{nm}t') V_{nm}(t') V_{mi}(t'') \exp(i\omega_{mi}t'')$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist

$$W(i \rightarrow n) = |C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots|^2$$

Anmerkung zur Notation: In vorhergehenden Abschnitt hatten wir die Zustände k, n , jetzt die Zustände i, m

$$C_n^{(\nu)} = a_m^{(\nu)}$$

10.3 Pfadintegrale – Vektorpotentiale

10.3.1 Vorbetrachtung

Betrachten wir zunächst das Integral

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda f(t)) dt \quad (10.22)$$

Ersetzen wir darin die Funktion $f(t)$ durch ihre TAYLOR-Entwicklung

$$f(t) = f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}f''(t_0)(t - t_0)^2 \quad (10.23)$$

so wird

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i\lambda f(t_0) + i\lambda f'(t_0)(t - t_0) + \frac{i\lambda}{2}(t - t_0)^2 + \dots\right) dt \quad (10.24)$$

Unter der Bedingung $f'(t) = 0$ läßt sich nun weiter schreiben:

$$\begin{aligned} F(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda f(t_0)) \exp\left(\frac{i\lambda}{2}f''(t_0)(t - t_0)^2\right) dt \\ &= \exp(i\lambda f(t_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i\lambda}{2}f''(t_0)(t - t_0)^2\right) dt \\ &= \frac{2\pi i}{\lambda f''(t_0)} \exp(i\lambda f(t_0)) \\ &\quad \text{falls noch } z = f(t) \text{ und } \varphi(z) = \frac{1}{f'(t_0)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \end{aligned}$$

Zur Berücksichtigung Terme höherer Ordnung, $(t - t_0)^3, (t - t_0)^4$, setzen wir

$$K(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda t^2) \exp(ia\lambda t^3) \exp(ib\lambda t^4) dt, \quad (10.25)$$

wobei $\lambda t^3, \lambda t^4 \ll 1$. Mit der TAYLOR-Entwicklung der komplexen Exponentialfunktion

$$e^{ix} = 1 + ix - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{6}ix^3 + \dots \quad (10.26)$$

ist dann

$$\begin{aligned} K(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda t^2) \exp(ia\lambda t^3 + ib\lambda t^4) dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + ia\lambda t^3 + ib\lambda t^4 - \frac{1}{2}a^2\lambda^2 t^6 - \frac{1}{6}b^2\lambda^2 t^8 + \dots \right) dt \end{aligned}$$

Benutzen wir dafür jetzt, daß

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y^4 e^{-ay^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{3}{4a^2} \right) \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} y^6 e^{-ay^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{15}{8a^3} \right) \quad (10.27)$$

so ergibt sich nach dem Einsetzen

$$K(\lambda) \simeq \sqrt{\frac{i\pi}{\lambda}} \left(1 - \frac{3ib}{4\lambda} + \frac{15ia}{16\lambda^2} + \dots \right) \quad (10.28)$$

Anmerkung

Obige Rechnung läßt sich teilweise noch ein wenig besser verstehen. Dazu schreiben wir mit der TAYLOR-Entwicklung

$$f(x) = f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}f''(t_0)(t - t_0)^2 + \dots$$

nochmals das Integral um:

$$\begin{aligned} K(\lambda, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda f(t)) dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(i\lambda \left[f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}f''(t_0)(t - t_0)^2 \right] \right) dt \\ &= \exp(i\lambda f(t_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda f'(t_0)(t - t_0)) \exp \left(\frac{i\lambda}{2} f''(t_0)(t - t_0)^2 \right) dt \end{aligned}$$

Wenn $f(t)$ nun bei $t = t_0$ ein Extremum besitzt, so folgt $f'(t_0) = 0$; in diesem Fall ist dann

$$\begin{aligned} K(\lambda, t) &= \exp(i\lambda f(t_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i\lambda}{2} f''(t_0)(t-t_0)^2\right) dt \\ &= \frac{1}{\frac{i\lambda}{2} f''(t_0)} \exp(i\lambda f(t_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp((t-t_0)^2) dt \\ &= -\frac{2i}{\lambda f''(t_0)} \exp(i\lambda f(t_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(t^2 + t_0^2 - 2tt_0) dt \end{aligned}$$

10.3.2 Einbeziehung des magnetischen Feldes

10.3.3 Eichinvarianz und ITO Integral

10.4 Elektrische Streuung

Hamilton-Operator:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}) \quad \text{mit } H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Da die Zeit für die Wechselwirkung nur sehr kurz ist, sind die Lösungen für H_0 – einlaufendes und auslaufendes Teilchen – ebene Wellen $|\mathbf{k}_a\rangle$, $|\mathbf{k}_b\rangle$.

(1) Stationärer, monochromatischer (d.h. monoenergetischer) Eingangsstrom

$$H_0 |\mathbf{k}_a\rangle = \epsilon_a |\mathbf{k}_a\rangle \quad (10.29)$$

$$\mathbf{j}_a = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi_a(\mathbf{r}) \nabla \Psi_a(\mathbf{r}) - (\nabla \Psi_a(\mathbf{r})) \Psi_a(\mathbf{r})) \quad (10.30)$$

Im Ortsraum haben die Wellen die Form

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_a \rangle = N \cdot \exp(i\mathbf{k}_a \mathbf{r}) \quad (10.31)$$

Durch Einsetzen in den Eingangsstrom (10.30) bekommen wir

$$\mathbf{j}_a = \frac{\hbar}{m} |\mathbf{k}_a| = \frac{|\mathbf{p}_a|}{m} \quad (10.32)$$

(2) Übergangsrate $|\mathbf{k}_a\rangle \rightarrow |\mathbf{k}_b\rangle$ – dies entspricht der Übergangsrate pro Zeiteinheit w_{ab}

Da wir das Teilchen vor und nach den Wechselwirkung als frei betrachten, ergibt sich ein Kontinuum von Zuständen, so daß wir über alle Endzustände zwischen

$$(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_b + d^3k) \sim \rho_b(E)$$

integrieren. Für diesen Fall ist die Zahl der Zustände im Phasenraumelement – im Eindimensionalen – $P_x, P_x + dP_x$ und $x, x + dx$

$$dN_x = \frac{dP_x dx}{\hbar} \quad (10.33)$$

und im Dreidimensionalen

$$dN = dN_x dN_y dN_z = \frac{d^3 P d^3 x}{\hbar^3} = \frac{d^3 P dV}{\hbar^3} \quad (10.34)$$

Die Anzahl der Zustände pro Volumen ist dann

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dV} &= \frac{P^2 dP d\Omega}{\hbar^3} \quad \curvearrowright \quad E = \frac{P^2}{2m} \quad \leftrightarrow \quad dE = \frac{P}{m} dP \\ &= \frac{m P}{\hbar^3} dE d\Omega \end{aligned}$$

Zustandsdichte:

$$\rho_b(E) = \frac{m P_b}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{m |\mathbf{p}_b|}{(2\pi\hbar)^3} \quad (10.35)$$

Übergangsrate (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit):

$$w_{ab} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_E |\langle \mathbf{k}_k | V | \mathbf{k}_a \rangle|^2 \rho_b(E) \delta(E - E_b) dE d\Omega \quad (10.36)$$

Für elastische Streuung gilt Energieerhaltung, also $E_b = E_a$

$$w_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}_k | V | \mathbf{k}_a \rangle|^2 \rho_b(E_{kb}) d\Omega \quad (10.37)$$

Differentieller Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma_{a \rightarrow b} = \frac{\text{Anzahl der } |\mathbf{k}_b \rangle \text{ gestreuten Teilchen pro Zeit}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche}} \quad (10.38)$$

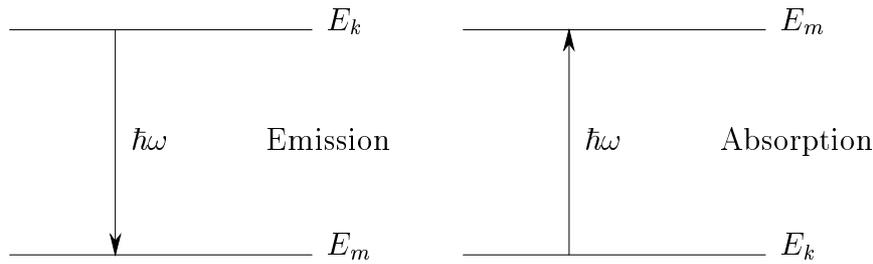
In unserem Fall also

$$d\sigma_{a \rightarrow b} = \frac{w_{ba}}{|\mathbf{j}_a|} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}_b | V | \mathbf{k}_a \rangle|^2 \frac{m^2 |\mathbf{p}_b|}{|\mathbf{p}_a| (2\pi\hbar)^3} d\Omega \quad (10.39)$$

Berücksichtigen wir nun wieder die elastische Streuung, so ist $|\mathbf{p}_a| = |\mathbf{p}_b|$ und wir bekommen als Lösung die

1. Born'sche Näherung

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |\langle \mathbf{k}_b | V | \mathbf{k}_a \rangle|^2 \quad (10.40)$$



Durch weiteres Umformen erhalten wir die Darstellung im Ortsraum

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r \int d^3 r' \langle \mathbf{k}_b | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | V | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k}_a \rangle \right|^2 \\
 &\downarrow \text{lokales Potential } \langle \mathbf{r} | V | \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
 &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r \int d^3 r' \langle \mathbf{k}_b | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | \mathbf{r}' \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k}_a \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r \int d^3 r' \exp(-i\mathbf{k}_b \mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | \mathbf{r}' \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}_a \mathbf{r}') \right|^2 \\
 &\downarrow \text{Integration über } \mathbf{r}' \text{ entspricht Fouriertransf.} \\
 &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r V(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b) \mathbf{r}) \right|^2
 \end{aligned}$$

oder mit dem Impulsübertrag $\mathbf{q} = \mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a$

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |V(\mathbf{q})|^2 \quad (10.41)$$

10.5 Induzierte Emission und Absorption von Licht

Hamilton-Operator für die Wechselwirkung eines klassischen EM-Feldes mit einem Atom

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \quad (10.42)$$

Verwenden wir die Coulomb-Eichung

$$\hat{p} \mathbf{A} = \nabla \mathbf{A} = 0$$

und vernachlässigen wir Terme mit \mathbf{A}^2 , so bleibt

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})}_{H_0} - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{p} \quad (10.43)$$

Ausgehend von dem EM-Potential

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A(\omega) \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) \quad (10.44)$$

betrachten wir Wellenpakete mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) d\omega$$

und fordern Hermitizität von \mathbf{A} , um sicherzustellen, daß auch \hat{H} hermitisch bleibt:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\omega) \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) + \mathbf{A}^*(\omega) \exp(-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) \quad (10.45)$$

Aus der Transversalität der Welle folgt

$$\mathbf{k}\mathbf{A} = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{p}\mathbf{A} = 0$$

Das Störpotential ist dann

$$V(t) = -\frac{e}{mc} \left(\mathbf{A}(\omega) \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) + \mathbf{A}^*(\omega) \exp(-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) \right) \quad (10.46)$$

mit der Übergangsrate

$$w_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2 c^2} \left(\underbrace{|\langle b | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{A}(\omega) \mathbf{p} | a \rangle|^2}_{\text{Absorption}} \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) + \underbrace{|\langle b | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{A}^*(\omega) \mathbf{p} | a \rangle|^2}_{\text{Emission}} \delta(E_b - E_a + \hbar\omega) \right) \quad (10.47)$$

1. Induzierte Emission $E_a > E_b$

$$\begin{aligned} \omega_{ab} &= \frac{E_a - E_b}{\hbar} \\ W_{ba}^E &= 2\pi \left(\frac{e}{\hbar mc} \right)^2 |\langle b | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{A}^*(\omega_{ab}) \mathbf{p} | a \rangle|^2 \end{aligned}$$

2. Induzierte Absorption $E_b > E_a$

$$\begin{aligned} \omega_{ba} &= \frac{E_b - E_a}{\hbar} \\ W_{ba}^A &= 2\pi \left(\frac{e}{\hbar mc} \right)^2 |\langle b | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{A}(\omega_{ba}) \mathbf{p} | a \rangle|^2 \end{aligned}$$

10.5.1 Dipolnäherung

Wir entwickeln nun die Exponentialfunktion

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 1 + \underbrace{i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{k}\mathbf{r})^2 + \dots}_{\rightarrow 0}$$

und berücksichtigen nur den ersten Term der Entwicklung. Das geht aber nur, wenn die Produkte $\mathbf{k}\mathbf{r}$ vernachlässigbar klein werden – wir schätzen daher ab

$$\begin{aligned} \text{Atom} &: |\mathbf{r}| \sim a_B \sim 10^{-8} \text{ cm} \\ \text{Licht}_{UV} &: |\mathbf{k}| \sim 10^5 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

Für das Produkt ist also: $|\mathbf{k}\mathbf{r}| \sim 10^{-3}$

Führen wir jetzt noch den Polarisationsvektor $\mathbf{A} = A_0 \epsilon$ ein, so vereinfacht sich das Matrixelement zu

$$|\langle b | \mathbf{A}(\omega_{ba}) \mathbf{p} | a \rangle|^2 = |A_0|^2 \cdot |\langle b | \epsilon \mathbf{p} | a \rangle|^2$$

In dieser Näherung sind jetzt die Übergangswahrscheinlichkeiten für Emission und Absorption gleich. Vertauscht – wie in diesem Fall – das Potential mit dem Ortsvektor $[V(\mathbf{r}), \mathbf{r}] = 0$ dann benutzen wir

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{im}{\hbar} [H_0, \mathbf{r}] \\ \frac{p^2}{2m} \mathbf{r} - \mathbf{r} \frac{p^2}{2m} &= \frac{\mathbf{p}}{2m} (\mathbf{r}\mathbf{p} - i\hbar) - \mathbf{r} \frac{p^2}{2m} \\ &= (\mathbf{r}\mathbf{p} - i\hbar) \frac{\mathbf{p}}{2m} - \frac{i\hbar}{2m} \mathbf{p} - \mathbf{r} \frac{p^2}{2m} \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \mathbf{p} \\ &= \frac{\hbar}{im} \mathbf{p} \end{aligned}$$

Damit schreibt sich W_{ba} als

$$\begin{aligned} W_{ba} &= 2\pi \left(\frac{e}{\hbar mc} \right)^2 |A_0|^2 \frac{m^2}{\hbar^2} \left| \underbrace{\langle b | H_0 \epsilon \mathbf{r} | a \rangle}_{E_b} - \underbrace{\epsilon \mathbf{r} H_0 | a \rangle}_{E_a} \right|^2 \\ &= \frac{2\pi m^2}{\hbar^2} \left(\frac{e}{\hbar mc} \right)^2 |A_0|^2 (E_b - E_a) |\langle b | \epsilon \mathbf{r} | a \rangle|^2 \end{aligned}$$

Weiter können wir nun $|A_0|^2$ durch die gemittelte Intensität ausdrücken

$$|\bar{\mathbf{S}}| = I(\omega) = \frac{|A_0|^2 \omega^2}{2\pi c} \Leftrightarrow |A_0|^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} I(\omega) \quad (10.48)$$

Damit erhalten wir

$$W_{ba} = \left(\frac{2\pi e}{\hbar c} \right)^2 c I(\omega_{ba}) |\langle b | \epsilon \mathbf{r} | a \rangle|^2 \quad (10.49)$$

Oder aber mit dem Absorptionsquerschnitt

$$d\sigma = \frac{\text{Anzahl der absorbierten Quanten / Fläche und Zeit in } d\Omega}{\text{Anzahl der einfallenden Quanten / Fläche und Zeit}} = \frac{-\dot{I}}{I(\omega)/\hbar\omega}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \omega_{ba} |\langle b | \epsilon \mathbf{r} | a \rangle|^2 \quad (10.50)$$

Um den Übergang zum totalen Wirkungsquerschnitt zu erleichtern, wählen wir $\epsilon \parallel \mathbf{x}$ und bekommen

$$\sigma_{abs} = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \omega_{ba} |\langle b | x | a \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{ba})$$

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \sum_b \omega_{ba} |\langle b | x | a \rangle|^2$$

Mit der Oszillatorfläche

$$f_{ba} = \frac{2m\omega_{ba}}{\hbar} |\langle b | x | a \rangle|^2 \quad \sum_b f_{ba} = 1 \quad (10.51)$$

folgt dann die

Thomas-Reihe-Kuhn Summenregel

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = 4\pi^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{\hbar}{2m} = 2\pi^2 c \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \quad (10.52)$$

Dabei ist zu beachten, daß der endgültige Ausdruck kein \hbar mehr enthält – diese Regel wurde bereits im Rahmen der klassischen Elektrodynamik gefunden.

Wir wollen nun noch die Vollständigkeit

$$\sum_b f_{ba} = 1$$

der Oszillatorfläche zeigen. Dafür bemerken wir zunächst

$$\frac{1}{2} [[x, H_0], x] = xH_0x - \frac{1}{2}H_0x^2 - \frac{1}{2}x^2H_0$$

so daß wir für die Eigenwerte schreiben können

$$\begin{aligned} \langle a | [[x, H_0], x] | a \rangle &= \langle a | xH_0x | a \rangle - E_a \langle b | x^2 | a \rangle \\ &= \sum_b \left(\langle b | x | b \rangle E_b \langle b | x | a \rangle - E_a \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle \right) \\ &= \sum_b (E_b - E_a) |\langle b | x | a \rangle|^2 \end{aligned}$$

Außerdem

$$\frac{1}{2} [[x, H_0], x] = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbb{1}$$

da

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Damit ist dann

$$\begin{aligned} \langle b | [[x, H_0], x] | a \rangle &= \frac{2m}{\hbar} \sum_b (E_b - E_a) |\langle b | x | a \rangle|^2 = 1 \\ &= \frac{2m}{\hbar} \sum_b \omega_{ba} |\langle b | x | a \rangle|^2 \end{aligned}$$

10.6 Spontane Emission

Eine genaue Behandlung dieses Phänomens ist eigentlich erst im Rahmen einer Quantenfeld-Theorie möglich (wir haben bis jetzt immer mit einem klassischen EM-Feld gerechnet). Dennoch gibt es – wie Einstein gefunden hat – eine Erklärungsmöglichkeit über das Strahlungsgleichgewicht eines schwarzen Körpers.

Für diesen ist das Verhältnis der Besetzungszahlen zweier Zustände

$$\frac{N_b}{N_a} = \frac{\exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right)}{\exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)} = \exp\left(-\frac{E_b - E_a}{kT}\right) \quad (10.53)$$

Grundlegende Annahme ist jetzt, daß die Zahl der Übergänge $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ gleich der Anzahl der Übergänge $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$ ist – das System befindet sich also im Gleichgewicht.

$$\begin{aligned} \frac{dN_{b \rightarrow a}}{dt} &= (W_{ab}^{E_{ind}} + W_{ab}^{E_{spont}}) N \exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right) \\ \frac{dN_{a \rightarrow b}}{dt} &= W_{ba}^A N \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \end{aligned}$$

Berücksichtigen wir wieder nur den Anteil der Dipolstrahlung, so ist

$$\begin{aligned} W_{ab}^{E_{spont}} &= W_{ab} \left(\exp\left(\frac{E_b - E_a}{kT}\right) - 1 \right) \\ &= \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} u(\omega) |\langle b | \mathbf{r} | a \rangle|^2 \left(\exp\left(\frac{E_b - E_a}{kT}\right) - 1 \right) \end{aligned}$$

PLANCK'sches Strahlungsgesetz

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad (10.54)$$

Spontane Emission

$$W_{ab}^{E_{spont}} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\langle b | \mathbf{r} | a \rangle|^2 \quad (10.55)$$

- nur $E_b > E_a$
- $\sim \omega^3$ nur für Dipolstrahlung

Übungsaufgaben

10.1 – Prinzip der Atomuhr Betrachten Sie folgende Versuchsanordnung: Ein Strahl von Elektronen, deren Spins zur Zeit $t < 0$ alle in positiver z -Richtung polarisiert seien, wird durch zwei Resonatoren geführt. Zur Zeit $t = 0$ tritt der Strahl in den Resonator 1 ein, aus dem er schließlich zur Zeit $t = l + T$ wieder austritt. Die Elektronen sind dabei in Moleküle eingebaut, in denen sie ein konstantes Magnetfeld in z -Richtung mit der Stärke \mathcal{H}_0 spüren, was dem HAMILTON-Operator

$$H_0 = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H}_0 \sigma_z$$

entspricht. Innerhalb der Resonatoren sind sie einem magnetischen Wechselfeld in x -Richtung der Form $\mathcal{H}'(t) = \mathcal{H}_1 \cos(\omega t)$ ausgesetzt, was dem HAMILTON-Operator

$$H_1 = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H}'(t) \sigma_x$$

entspricht.

1. Benutzen Sie die stationären Eigenzustände von H_0 und berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich der Spin des Elektrons zur Zeit $t = l + T$ im umgeklappten Zustand mit Spin in negativer z -Richtung befindet.
2. Es sei $\omega \approx \omega_0 = \frac{e\mathcal{H}_0}{mc} \gg 1$ mit $|\omega - \omega_0| \ll \omega + \omega_0$. Vernachlässigen Sie kleine Terme in dem Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit und fertigen Sie eine schematische Zeichnung dieser Wahrscheinlichkeit als Funktion der Frequenz ω an (Annahme: $T \ll l$).
3. Gehen Sie davon aus, daß man die eben berechnete Wahrscheinlichkeit gut messen kann. Erklären Sie dann das Funktionsprinzip der Atomuhr.

10.2 Ein 3-dimensionaler harmonischer Oszillator mit Eigenfrequenz ω befinde sich im Grundzustand. Zur Zeit $t = 0$ wird ein rotierendes elektrisches Feld mit Kreisfrequenz ω' eingeschaltet. Für das zeitabhängige Störpotential gilt dann

$$\begin{aligned} V(t) &= 0, & t < 0 \\ V(t) &= e E_0 (x \cos(\omega' t) + y \sin(\omega' t)), & t > 0 \end{aligned} \quad (10.56)$$

1. Warum ist Gleichung (10.56) eine sinnvolle Darstellung für das Potential?

2. Finden Sie die Übergangswahrscheinlichkeit als eine Funktion der Zeit dafür, daß der Oszillator vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand übergegangen ist.
3. Was passiert für den Grenzwert $\omega' \rightarrow \omega$?

Die Streutheorie ist das vielleicht wichtigste Hilfsmittel der Kern- und Teilchenphysik. Über die Veränderung der zur Streuung verwendeten Teilchen lassen sich Rückschlüsse auf die zu untersuchende Probe – das Streuzentrum – ziehen.

11.1 Labor- und Schwerpunktsystem

11.1.1 Laborsystem

Aus der Impulserhaltung folgt

$$p'_{1\parallel} + p'_{2\parallel} = p_1 \quad \text{und} \quad p'_{1\perp} + p'_{2\perp} = 0$$

Die klassische HAMILTON-Funktion für diese Streuung ist

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (11.1)$$

Die Dynamik des Systems läßt sich in Schwerpunkt- und Relativbewegung separieren

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_S &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \\ \mathbf{P}_S &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{p} &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \\ M &= m_1 + m_2 \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 m_2}{M} \end{aligned}$$

Mit den so festgelegten Größen kann die Hamilton-Funktion zerlegt werden

$$H_{Ges} = \underbrace{\frac{\mathbf{P}_S^2}{2M}}_{H_S} + \underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}}_H + V(\mathbf{r}) = H_S + H \quad (11.2)$$

Für die Quantenmechanik machen wir jetzt den Übergang $H \rightarrow \hat{H}$ mit der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung und der Wellenfunktion

$$\tilde{\Psi} = \Psi_S(\mathbf{R}_S, t) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

11.1.2 Schwerpunkt

Für die Bewegung des Schwerpunktes gilt $H_S = \frac{\mathbf{P}'_S}{2M}$ – es handelt sich also um eine freie Bewegung, die sich durch eine ebene Welle beschreiben läßt.

Die zugehörige SCHRÖDINGER-Gleichung ist

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_S(\mathbf{R}_S, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi_S(\mathbf{R}_S, t) \quad (11.3)$$

mit der Wellenfunktion

$$\Psi_S(\mathbf{R}_S, t) = \mathcal{C} \cdot \exp\left(i(\mathbf{k}_S \mathbf{r} - \omega_k^{(S)} t)\right) \quad (11.4)$$

und der Dispersionsrelation

$$\frac{\hbar^2 k_S^2}{2M} = \hbar \omega_k^{(S)} = E_k^{(S)} \quad (11.5)$$

11.1.3 Relativbewegung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(|\mathbf{r}|) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (11.6)$$

Auch wenn wir an diese Stelle nicht darauf eingehen, so ist es auch möglich, daß das Potential nicht nur vom Ort, sondern auch noch vom Impuls \mathbf{p} des einlaufenden Teilchens abhängt – also $V = V(\mathbf{p}, \mathbf{r})$.

Für die Rechnung im cms gilt jetzt, daß

- Schwerpunkt = Koordinatenursprung
- $|\mathbf{P}_S| = 0$
- $\mathbf{P}_{1,cms} = -\mathbf{P}_{2,cms}$

11.1.4 Streuung als stationäres Problem

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (11.7)$$

Die Streuzustände sind stationär in dem Sinne, als das weder an einlaufendem Strahl noch an dem Target eine Veränderung vorgenommen wird. Die Energie E – Impuls der einlaufenden Teilchen – ist vorgebener Parameter.

11.2 Differentieller und Totaler Wirkungsquerschnitt

Differentieller Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma(\Omega) = \frac{\text{Anzahl der Teilchen pro Zeiteinheit in } d\Omega}{\mathbf{j} \text{ der einlaufenden Teilchen}} \quad (11.8)$$

$$= \frac{\mathbf{j}_r d\mathbf{f}}{|\mathbf{j}_a|} = \frac{j_r r^2 d\Omega}{j_a} \quad (11.9)$$

$$[d\sigma] = \frac{[\text{Zahl} / \Delta t]}{[\text{Zahl} / \text{Fläche} \Delta t]} = [\text{Fläche}]$$

Totaler Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{total} = \int_{\Omega} d\sigma(\Omega) = \int_{\Omega} \frac{j_r r^2}{j_a} d\Omega \quad (11.10)$$

$$[\sigma_{total}] = [\text{Fläche}]$$

Wirkungsquerschnitte in der Kern- und Teilchenphysik werden typischerweise in Einheiten von *Barn* angegeben. Dabei ist $1 \text{ barn} = 1b = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

11.3 Quantenmechanische Berechnung

Gehen wir davon aus, daß wir es mit elastischer Streuung zu tun haben – der Betrag des Wellenvektors also unverändert bleibt

$$|\mathbf{k}_e| = |\mathbf{k}_a| = k$$

und die Wellenfunktion innerhalb des Volumens V – in dem sich die Versuchsanordnung befindet – normieren läßt

$$\Psi_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikz}$$

dann wir der einlaufende Strom durch den Stromoperator 9.10)

$$\mathbf{j}_0 = \frac{\hbar}{2\mu i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{\mu V}$$

dargestellt. Da der Abstand zwischen Streuzentrum und Detektor, verglichen mit der Ausdehnung des Streupotentials, sich in guter Näherung als Unendlich betrachten läßt, brauchen wir nur den asymptotischen Anteil der auslaufenden Welle betrachten:

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{V}} \left(e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \quad |\mathbf{r}| \rightarrow \infty \quad (11.11)$$

Für die Streuung an einem Coloumbfeld ist die φ -Abhängigkeit wegen der Kugelsymmetrie des Potentials vernachlässigbar – es bleibt nur $f = f(\theta)$. Desweiteren wollen wir nur auslaufende Wellen mit $\theta \neq 0$ betrachten, um durch Interferenz mit dem ungestörten Teilchenstrahl entstandene Anteile zu eliminieren:

$$\mathbf{j}_e = \mathbf{j}_a \sim e^{ikr}$$

Mit diesen Überlegungen können wir den Strom jetzt schreiben

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_r &= \frac{\hbar}{2\mu iV} \left(f_k^*(\theta) \frac{e^{-ikr}}{r} (ik) f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} - f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} (-ik) f_k^*(\theta) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^3}\right) \\ &= \frac{\hbar k}{\mu V} \frac{|f_k(\theta)|^2}{r^2} \hat{e}_r \end{aligned}$$

Einsetzen in den Wirkungsquerschnitt ergibt

$$d\sigma(\Omega) = \frac{\frac{\hbar k}{\mu V} \frac{|f_k(\theta)|^2}{r^2} r^2 d\Omega}{\frac{\hbar k}{\mu V}} = |f_k(\theta)|^2 d\Omega$$

Formfaktor

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2 = |\text{Streuamplitude}|^2 \quad (11.12)$$

Da diese Rechnung im cms gemacht wurde, die experimentellen Messungen aber im Laborsystem stattfinden, benötigen wir eine Transformationsvorschrift für diesen Wirkungsquerschnitt.

11.4 Transformation zwischen CMS und Labor-System

Da die in der Definition (11.8) auftretende Anzahl der Teilchen invariant ist, brauchen wir lediglich eine Transformationsvorschrift für den (Raum-) Winkel:

$$N_D = \left(\frac{d\sigma(\Omega_L)}{d\Omega_L} \right) d\Omega_L = \left(\frac{d\sigma(\Omega_{cms})}{d\Omega_{cms}} \right) d\Omega_{cms}$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_L = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{cms} \frac{\sin \theta_{cms} d\theta_{cms} d\varphi_{cms}}{\sin \theta_L d\theta_L d\varphi_L}$$

Mit den Vereinbarungen

- daß wir kugelsymmetrische Probleme betrachten: $\frac{d\varphi_L}{d\varphi_{cms}} = 1$
- der einlaufende Teilchenstrahl sich in \hat{z} -Richtung bewegt, und
- das Potential nur vom Abstandsquadrat abhängt: $V = V(|\mathbf{r}|)$

können wir den Winkelanteil schreiben

$$\frac{\sin \theta_{cms} d\theta_{cms}}{\sin \theta_L d\theta_L} = \frac{d(\cos \theta_{cms})}{d(\cos \theta_L)}$$

Durch Umformen folgt dann

$$\cos \theta_L = \frac{\gamma + \cos \theta_{cms}}{\sqrt{1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos \theta_{cms}}}, \quad \gamma = \frac{m_1}{m_2} \quad (11.13)$$

Die gesuchte Beziehung ist also schließlich

Differenzieller Wirkungsquerschnitt CMS-Labor

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cms} \frac{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos \theta_{cms})^{3/2}}{1 + \gamma \cos \theta_{cms}}, \quad \theta_{cms} \in (0, 2\pi) \quad (11.14)$$

Für den allgemeinen Fall einer Zweiteilchenreaktion ist

$$\begin{aligned} m_1 + m_2 &\rightarrow m_3 + m_4 + Q \\ \gamma &= \left(\frac{m_1 m_3}{m_2 m_4} \frac{E}{E + \gamma}\right)^{1/2} \\ E &= \frac{m_1 m_2 v^2}{2(m_1 + m_2)} \end{aligned}$$

Mit der Transformationsformel (11.14) läßt sich jetzt auch abschätzen, welche Streuwinkel im Laborsystem auftreten können – eine wichtige Information auch für den Aufbau des Detektors in einem Experiment.

$$\begin{aligned} \gamma < 1 &\rightarrow m_1 < m_2 \quad \text{und} \quad \theta_L \in (0, \pi) \\ \gamma = 1 &\rightarrow m_1 = m_2 \quad \text{und} \quad \theta_L = \frac{\theta_{cms}}{2} \\ \gamma > 1 &\rightarrow m_1 > m_2 \quad \text{und} \quad \theta_L < \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

11.5 BORN'sche Näherung

Für die *elastische* Streuung an einem *kugelsymmetrischen* Potential mit $E_{kin} \gg \langle V(r) \rangle$ läßt sich der Formfaktor (11.12) auch aus der Störungstheorie berechnen.

Wir wir bereits aus dem asymptotischen Verhalten der Wellenfunktion wissen ist

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \right) \quad |\mathbf{r}| \rightarrow \infty$$

Da sich das Streuzentrum als Ausgangspunkt von Elementarwellen auffassen läßt, liegt der Gedanke nahe, die SCHRÖDINGER-Gleichung auf eine Gestalt zu bringen, in der sich Analogieschlüsse aus der Elektrodynamik verwenden lassen – es sei an das Problem der Fernfeldnäherung erinnert.

$$\begin{aligned}
 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}) &= E \Psi(\mathbf{r}) \\
 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - E\right) \Psi(\mathbf{r}) &= -V(\mathbf{r}) \\
 \left(\Delta + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) \Psi(\mathbf{r}) &= \underbrace{\frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2}} \Psi(\mathbf{r}) \\
 (\Delta + k^2) \Psi(\mathbf{r}) &= U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

Entwickeln wir nun die Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) &= \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} \\
 \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) &= \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} + \chi^{(1)}(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\begin{aligned}
 (\Delta + k^2) \left(\frac{1}{\sqrt{V}}e^{ikz} + \chi^{(1)}(\mathbf{r})\right) &= U(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\sqrt{V}}e^{ikz} + \chi^{(1)}(\mathbf{r})\right) \\
 (\Delta + k^2) \chi^{(1)}(\mathbf{r}) &= U(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

Ein ähnlicher Ausdruck

$$\left(\Delta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right) \phi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r})$$

ist aber bereits aus der Elektrodynamik bekannt: Es handelt sich um eine Wellengleichung mit der Lösung

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}') \exp\left(\frac{i\omega}{c}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Analog können wir deshalb an dieser Stelle ansetzen

$$\chi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{U(\mathbf{r}') \Psi_0(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (11.15)$$

Für das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion entwickeln wir den Abstand

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{\mathbf{r}^2 + \mathbf{r}'^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}'} = r\sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \frac{\mathbf{r}'^2}{r^2}} \simeq r\left(1 - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \dots\right) \quad (11.16)$$

Berücksichtigen wir die Ausbreitungsrichtung der einlaufenden Teilchen

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} \quad , \quad \mathbf{k}_0 = k\hat{e}_z$$

dann ist

$$\begin{aligned}
 \chi^{(1)}(\mathbf{r} \rightarrow \infty) &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{U(r') e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}'} \exp(ikr(1 - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \dots))}{r(1 - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2} + \dots)} \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{U(r') e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}'} e^{ikr}}{r}
 \end{aligned}$$

Für den Impuls in Richtung von \mathbf{r} läßt sich noch weiter vereinfachen

$$\chi^{(1)}(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3 r' U(r') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \quad , \quad k \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r} = \mathbf{k}\mathbf{r} \quad (11.17)$$

Wobei $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ der Impulsübertrag der gestreuten Teilchen ist.

Da wir nur an den Lösungen für ebene Wellen interessiert sind, eliminieren wir den Exponentialanteil e^{ikr}/r der Kugelwelle.

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r' V(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \quad (11.18)$$

Wir erhalten also eine Fouriertransformation des Formfaktors aus dem Ortsraum in den Impulsraum, so daß der differentielle Wirkungsquerschnitt in 1. Born'scher Näherung geschrieben werden kann als

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{q})|^2 \quad (11.19)$$

11.5.1 Beispiel: Elastische Streuung schneller Teilchen am Kern

Potentielle Energie:

$$V(\mathbf{r}) = e_P \phi(\mathbf{r}) = \frac{2e e_P}{r} - e e_P \int d^3 r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (11.20)$$

Formfaktor:

$$f(\theta) = -\frac{2m e e_P}{4\pi\hbar^2} \left(\underbrace{\int d^3 r' \frac{Z}{r'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}}_I - \underbrace{\int d^3 r' e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \int d^3 r'' \frac{\rho(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|}}_{II} \right) \quad (11.21)$$

Der Term I läßt sich analog zur Elektrodynamik berechnen

$$\begin{aligned} \Delta\phi(\mathbf{r}) = -4\pi e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad \Rightarrow \quad \phi(\mathbf{r}) &= \int d^3 r' \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{4\pi}{q^2} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \\ \int d^3 r' \frac{Z}{r'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} &= Z \phi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=0} = \frac{4\pi}{q^2} Z \end{aligned} \quad (11.22)$$

Dies entspricht einer FOURIER-Transformation von $\frac{Z}{q^2}$.

Um II berechnen zu können, vertauschen wir zunächst die Reihenfolge der beiden Integrationen und bekommen dann

$$\int d^3 r' e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \int d^3 r'' \frac{\rho(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|} = \int d^3 r'' \rho(\mathbf{r}'') \int d^3 r' \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{4\pi}{q^2} \underbrace{\int d^3 r'' \rho(\mathbf{r}'') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}''}}_{F(\mathbf{q})} \quad ; \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \\
 &= \frac{4\pi}{q^2} F(\mathbf{q})
 \end{aligned}$$

11.6 Phasenanalyse

11.7 Resonanzen

11.8 Unitarität

Betrachten wir die zeitunabhängige Formulierung

$$-\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (11.23)$$

so bedeutet dies Wahrscheinlichkeitserhaltung, daß die Zahl der Teilchen im Experiment erhalten bleibt. Denken wir uns also ein Volumen, welches durch die Oberfläche Γ begrenzt wird, dann gilt

$$\int_{\Gamma} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (\text{Gauß}) .$$

Dies muß für jede Partialwelle separat gelten, wenn der Drehimpuls – wie hier durch die Rotationssymmetrie des Potentials – erhalten bleibt. Damit ergibt sich die folgende

Unitaritätsrelation für l^k -Partialwelle

$$\begin{aligned}
 S_l(k) &= 1 + 2ikt_l(k) & (11.24) \\
 &= \text{ungehinderter Durchgang} + \text{Kugelwelle durch Streuung} \\
 |S_l(k)| &= 1 \quad , \text{ Normierung}
 \end{aligned}$$

Bei der Streuung ändert sich nur die Phase

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad , \quad \delta_l \text{ reel} .$$

Auflösen gibt

$$t_l = \frac{1}{2ik}(S_l - 1) = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik}$$

so daß wir also erhalten:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (11.25)$$

Da wir hierfür lediglich vorausgesetzt hatten, daß das Potential Rotationsinvariant ist und Wahrscheinlichkeitserhaltung gilt, ist diese Form allgemeiner als die bereits gezeigte Ableitung aus der SCHRÖDINGER-Gleichung.

Übungsaufgaben

Übung 11.1 – Eigenfunktionen eines freien Teilchens. Bestimmen Sie die Eigenfunktionen eines freien Teilchens der Masse m in 3 Raumdimensionen

1. in kartesischen Koordinaten
2. in Kugelkoordinaten
3. und stellen Sie den Zusammenhang zwischen den beiden Lösungen dar.

Übung 11.2 – Streuung an einer schweren Kugel. Eine ruhende schwere Kugel wird durch das Potential

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r < R \\ 0 & \text{für } r > R \end{cases}$$

approximiert. Für den Parameter R soll dabei gelten $R \ll \lambda$, wobei λ der Materiewellenlänge eines einlaufenden Teilchenstrahls entspricht, der längs der z -Achse auf eine Kugel trifft.

- (a) Berechnen Sie die resultierende Intensität und Richtungsverteilung der Streuwelle sowie den Wirkungsquerschnitt der Kugel.
- (b) Führen Sie obige Rechnung durch nun unter der Annahme, daß das Potential im Inneren der Kugel den endlichen Wert $V_0 > 0$ hat. Diskutieren Sie auch den Fall $V_0 < 0$.
- (c) Skizzieren Sie den zuletzt berechneten Wirkungsquerschnitt für den Fall einlaufender niederenergetischer Neutronen, die mit einem "Atomkern" mit Radius 7 fm und Potentialparameter $V_0 = 4$ MeV bzw. $V_0 = 40$ MeV wechselwirken und diskutieren Sie das Ergebnis.

Übung 11.3 – Streuung an einer Potentialbarriere. Ein Teilchenstrom der Energie $0 < E < V_0$ trifft, von $x = -\infty$ kommend, auf eine rechteckige Potentialbarriere

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

- (a) Geben sie die SCHRÖDINGER-Gleichung und den allgemeinen Ansatz für die Wellenfunktion in den Bereichen I ($x < -a$), II ($-a < x < a$) und III ($x > a$) an. Setzen Sie die Amplitude der einlaufenden Welle gleich 1.
- (b) Wie lauten die Randbedingungen für die Wellenfunktion?
- (c) Berechnen Sie den "Transmissionskoeffizienten" T und den "Reflexionskoeffizienten" R . Verifizieren Sie die Wahrscheinlichkeitserhaltung $R + T = 1$.
- (d) Skizzieren Sie die Wellenfunktion.
- (e) Betrachten Sie die "Wirkungsfunktion" in Einheiten von \hbar

$$S' = \frac{1}{\hbar} S_0 = \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a \sqrt{2m(V(x) - E)} dx.$$

Zeigen Sie, daß für $S' \gg 1$ gilt

$$T \approx \left(\frac{4k\chi}{k^2 + \chi^2} \right) e^{-2S'} \quad \text{mit} \quad \chi^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

- (f) Berechnen Sie T für ein Elektron, welches mit der Energie $E = 1 \text{ eV}$ eine Potentialbarriere mit $V_0 = 2 \text{ eV}$ und $a = 0.1 \text{ nm}$ durchdringt. Wie groß ist die Tunnelwahrscheinlichkeit T für ein Proton mit der gleichen Energie und der gleichen Barriere?

Übung 11.4 – Streuung an einer Potentialbarriere. Betrachten Sie weiterhin das eindimensionale Potential aus vorherigen Aufgabe, jedoch mit dem Fall $E > V_0$.

- (a) Wie lautet jetzt der physikalisch sinnvolle Ansatz für die Wellenfunktion in den drei Bereichen?
 (b) Lösen Sie das Gleichungssystem. Welche Änderungen ergeben sich für den Transmissions- und den Reflexionskoeffizienten?
 (c) Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit dem Fall des Potentialtopfs ($V_0 < 0$) und $E > 0$. Stellen Sie T als Funktion von E graphisch dar für

$$\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} = \frac{13}{4}\pi.$$

- (d) Die Wellenfunktion im Bereich III ($x > a$) kann man auch in der Form

$$\Psi_{\text{III}} = C e^{ikx} e^{i\delta}$$

schreiben, wobei C reell ist und δ als Streuphase bezeichnet wird. Berechnen Sie die Streuphase.

- (e) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich II ($|x| < a$) für $V_0 < 0$ und diskutieren Sie deren Abhängigkeit von der Energie.

Übung 11.5 – Streuung von Punktteilchen. Im Laborsystem bewegt sich ein Teilchen mit der Masse m_1 und der Geschwindigkeit \mathbf{v}_1 und trifft auf ein ruhendes Teilchen der Masse m_2 . Nehmen sie an, daß es sich hier nicht um idealisierte "Punktteilchen" handelt, sondern um Objekte mit "kleiner" endlicher Ausdehnung. Die Teilchen können daher nach dem Stoß einen Winkel Θ_L zueinander einnehmen.

- (a) Zerlegen sie die Impulse im Endzustand in Parallel- und Transversalbeiträge relativ zur Richtung \hat{v}_1 . Welche Bedingungen gelten für die transversalen, parallelen Impulse, bzw. die Energien?
 (b) Betrachten Sie nun den Stoß zwischen Teilchen 1 und 2 im Schwerpunktsystem. Stellen Sie wieder die entsprechenden Bedingungen für Energie und Impulse auf.
 (c) Stellen Sie nun eine Beziehung zwischen dem Winkel Θ_L im Laborsystem und dem Winkel Θ_S im Schwerpunktsystem her.

12

Aspekte der formalen Streutheorie

Im folgenden wollen wir nun eine Verallgemeinerung des bisherigen Zugangs vornehmen, ohne unbedingt immer mathematisch rigoros vorzugehen.

12.1 LIPPMAN-SCHWINGER-Gleichung

12.1.1 Ableitung und Resolvente

Sei $H = H_0 + V$ wieder der HAMILTON-Operator mit

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad H_0 | \phi \rangle = E | \phi \rangle$$

Für $V \rightarrow 0$ soll die Wellenfunktion in

$$(H_0 + V) | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle$$

übergehen $| \Psi \rangle \rightarrow | \phi \rangle$, da sonst eine Entwicklung nach ϕ nicht möglich ist. Um dies zu gewährleisten, machen wir für die Wellenfunktion den Ansatz

$$| \Psi \rangle = \frac{1}{E - H_0} V | \Psi \rangle + | \phi \rangle \quad (12.1)$$

Einsetzen gibt dann

$$(E - H_0) | \Psi \rangle = V | \Psi \rangle + \underbrace{(E - H_0) | \phi \rangle}_{\rightarrow 0}$$

Allerdings ist der darin auftretende Ausdruck $\frac{1}{E - H_0}$ singularär und führt damit aus dem HILBERT-Raum \mathcal{H} hinaus.

Um dies zu korrigieren bedienen wir uns eines Tricks: Wir betrachten stattdessen die **Resolvente** von H_0 , also

$$G_0(z) = \frac{1}{\epsilon - H_0} \quad \epsilon \in \mathbb{C} \quad (12.2)$$

Dann läßt sich zeigen, daß die Vorschrift

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \quad \epsilon > 0 \quad (12.3)$$

wieder zu einem Zustand innerhalb des HILBERT-Raumes \mathcal{H} führt: Die Wellenfunktion gibt die

LIPPMAN-SCHWINGER-Gleichung

$$|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H \pm i\epsilon} V |\Psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + G_0^{(\pm)} |\Psi^{(\pm)}\rangle \quad (12.4)$$

Diese Formulierung hat den Vorteil, daß sie darstellungsunabhängig ist und sich die Wellenfunktion $|\Psi^{(\pm)}\rangle$ wieder aus dem Verhalten für große $|\mathbf{x}|$ ableiten läßt.

12.1.2 LIPPMAN-SCHWINGER-Gleichung im Ortsraum

Zu Berechnung von (12.4) im Ortsraum gehen wir nun folgendermaßen vor:

$$\langle \mathbf{x} | \Psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | V | \Psi^{(\pm)} \rangle$$

Für den eigentlichen Kern dieser Integralgleichung ist

$$\begin{aligned} G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\hbar^2}{2m} \langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle \end{aligned}$$

Ausführen der Skalarprodukte

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}'' \rangle = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

und Einsetzen

$$\begin{aligned} G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \langle \mathbf{p}' | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{p}'' \rangle \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') \frac{1}{E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \pm i\epsilon} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')\right)}{E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \pm i\epsilon} \end{aligned}$$

Mit den Ersetzungen

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \mathbf{p}' = \hbar \mathbf{k}$$

und dem Übergang zu Kugelkoordinaten wird dies

$$\begin{aligned} G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} dq q^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \frac{\exp(i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \cos\theta)}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \\ &= -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq q \frac{e^{iq|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - e^{-iq|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} \end{aligned}$$

Unter Beachtung der Residuen bei

$$q = \pm k \sqrt{1 \pm \frac{i\epsilon}{k^2}} \simeq (\pm k \pm i\epsilon)$$

ergibt sich dann durch Integration in der komplexen Ebene

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (12.5)$$

Die G_{\pm} sind die GREEN'schen Funktionen der HELMHOLTZ-Gleichung

$$(\nabla^2 + k^2) G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (12.6)$$

Die LIPPMAN-SCHWINGER-Gleichung im Ortsraum ist damit also schließlich

$$\langle \mathbf{x} | \Psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \Psi^{(\pm)} \rangle}_{\text{Streuung}} \quad (12.7)$$

und setzt sich aus einem Anteil $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ für die einlaufende Welle und einem Term für die Streuung zusammen.

12.1.3 Asymptotisches Verhalten von $\langle \mathbf{x} | \Psi^{(\pm)} \rangle$

Betrachten wir nun ein lokales Potential V mit einer endlichen Reichweite

$$\langle \mathbf{x}' | V | \Psi^{(\pm)} \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

so wird das Übergangsmatrixelement

$$\langle \mathbf{x}' | V | \Psi^{(\pm)} \rangle = \int d^3x'' \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \Psi^{(\pm)} \rangle = V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi^{(\pm)} \rangle$$

und damit die Darstellung im Ortsraum

$$\langle \mathbf{x} | \Psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi^{(\pm)} \rangle \quad (12.8)$$

12.2 Die T -Matrix

12.2.1 Gleichung für die T -Matrix

12.2.2 Iterative Lösung

12.3 Das Optische Theorem

12.4 Identische Teilchen

Die in diesem Abschnitt wiedergegebene Darstellung ist fast identisch mit [14], Kapitel 6.

12.4.1 Austauschentartung

Die klassische Physik erlaubt es, selbst bei einem System, welches aus identischen Teilchen aufgebaut ist, das Verhalten einzelner Teilchen separat zu studieren. Betrachten wir z.B. ein System welches aus Teilchen 1 und Teilchen 2 aufgebaut ist, so ist es zu jedem Zeitpunkt möglich, die Bewegung von 1 und 2 auf unterschiedlichen Bahnen getrennt zu verfolgen (ein Beispiel wäre hier das KEPLER-Problem für zwei Körper mit identischer Masse).

In der Quantenmechanik hingegen sind identische Teilchen nicht mehr unterscheidbar. Dies liegt daran, daß ein System lediglich durch einen vollständigen Satz kommutierender Observablen beschrieben werden kann.

12.4.2 Permutationsoperatoren

Sei $|k'\rangle |k''\rangle$ ein Zwei-Teilchen-Zustand. Die Wirkung des Permutationsoperators P wird dann in folgender Weise definiert:

$$P_{12} |k'\rangle |k''\rangle = |k''\rangle |k'\rangle \quad (12.9)$$

Der so definierte Operator hat die Eigenschaften:

$$(1) \quad P_{12}^2 = \mathbb{1} :$$

$$P_{12}P_{12} |k'\rangle |k''\rangle = P_{12} |k''\rangle |k'\rangle = |k'\rangle |k''\rangle$$

$$(2) \quad P_{12} = P_{21} :$$

$$P_{21} |k''\rangle |k'\rangle = |k'\rangle |k''\rangle = P_{12} |k''\rangle |k'\rangle$$

Aus der ersten dieser beiden Eigenschaften ergibt sich für die Eigenwerte, daß $P = \pm 1$. Für einen Zwei-Teilchen-Zustand ergeben sich also die Möglichkeiten

$$\begin{aligned} P_{12} \psi_S(x_1, x_2) &= \psi_S(x_1, x_2) && \text{symmetrischer Zustand} \\ P_{12} \psi_A(x_1, x_2) &= -\psi_A(x_1, x_2) && \text{antisymmetrischer Zustand} \end{aligned}$$

Solche Zustände lassen sich konstruieren durch:

$$\begin{aligned} \text{symmetrischer Zustand} \quad | \psi_1 \psi_2 \rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle) \\ \text{antisymmetrischer Zustand} \quad | \psi_1 \psi_2 \rangle_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle) \end{aligned}$$

Wie sich durch einfaches Multiplizieren zeigen läßt sind diese Zustände orthonormal.

Für eine Observable gilt folgendes: Seien A_1 und A_2 Operatoren mit simultaner Eigenfunktion $|k'\rangle |k''\rangle$

$$A_1 |k'\rangle |k''\rangle = a_1 |k'\rangle |k''\rangle \quad \text{und} \quad A_2 |k'\rangle |k''\rangle = a_2 |k'\rangle |k''\rangle$$

Anwendung des Permutationsoperators P ergibt dann

$$P_{12} A_1 |k'\rangle |k''\rangle = \underbrace{P_{12} A_1}_{A_2} \underbrace{P_{12}^{-1} P_{12}}_1 |k'\rangle |k''\rangle = a_1 P_{12} |k'\rangle |k''\rangle = a_1 |k''\rangle |k'\rangle ,$$

also

$$P_{12} A_1 P_{12}^{-1} = A_2 .$$

Zur Untersuchung der zeitlichen Entwicklung betrachten wir den folgenden HAMILTON-Operator eines Zwei-Teilchen-Systems:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_{\text{paar}}(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_1) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_2)$$

Anwendung des Permutationsoperators ergibt

$$P_{12} H P_{12}^{-1} = H \quad \Leftrightarrow \quad P_{12} H = H P_{12} ,$$

was also nichts anderes bedeutet, als daß P_{12} eine Konstante der Bewegung ist:

$$[H, P_{12}] = 0 \quad (12.10)$$

Für ein Mehrteilchensystem ist es durchaus denkbar, kein reiner Symmetrie-Zustand vorliegt. Daher definieren wir die Operatoren

$$\begin{aligned} S_{12} &= \frac{1}{2} (\mathbb{1} + P_{12}) && \text{zur Symmetrisierung,} \\ A_{12} &= \frac{1}{2} (\mathbb{1} - P_{12}) && \text{zur Antisymmetrisierung.} \end{aligned}$$

Die Vollständigkeit wird gegeben durch

$$A_{12} + S_{12} = \mathbb{1} .$$

Die so definierten Operatoren bewirken also in der Tat

$$\left\{ \begin{array}{c} S_{12} \\ A_{12} \end{array} \right\} | \text{beliebige Linearkombination} \rangle \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \text{symmetrischer} \\ \text{antisymmetrischer} \end{array} \right\} | \text{Zustand} \rangle$$

Das bedeutet also:

$$\begin{aligned} &\left\{ \begin{array}{c} S_{12} \\ A_{12} \end{array} \right\} \left(c_1 | k' \rangle | k'' \rangle + c_2 | k'' \rangle | k' \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(c_1 | k' \rangle | k'' \rangle + c_2 | k'' \rangle | k' \rangle \right) \pm \frac{1}{2} \left(c_1 | k' \rangle | k'' \rangle + c_2 | k'' \rangle | k' \rangle \right) \\ &= \frac{c_1 \pm c_2}{2} \left(| k' \rangle | k'' \rangle \pm | k'' \rangle | k' \rangle \right) \end{aligned}$$

Die Wirkung des Permutationsoperators läßt sich ohne weiteres von dem Fall eines Zwei-Teilchen-Systems auf den Fall eines N -Teilchen-Systems ($N > 2$) übertragen: wir setzen dazu einfach

$$P_{ij} | \psi^{(1)} \rangle | \psi^{(2)} \rangle \dots | \psi^{(i)} \rangle \dots | \psi^{(j)} \rangle \dots | \psi^{(N)} \rangle = | \psi^{(1)} \rangle | \psi^{(2)} \rangle \dots | \psi^{(j)} \rangle \dots | \psi^{(i)} \rangle \dots | \psi^{(N)} \rangle \quad (12.11)$$

wobei wir wegen $P_{ij}^2 = \mathbb{1}$ wieder die Eigenwerte ± 1 erhalten.

Zu beachten ist hierbei allerdings, daß für die Hintereinanderausführung von zwei Permutationen P_{ij} und P_{kl} gilt

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0 \quad \text{für } i \in \{k, l\} \text{ oder } j \in \{k, l\} ,$$

was sich ja an einem einfachen Beispiel klarmachen läßt:

$$\begin{aligned} P_{12} P_{13} | 1, 2, 3, \dots, N \rangle &= P_{12} | 3, 2, 1, \dots, N \rangle = | 3, 1, 2, \dots, N \rangle \\ P_{13} P_{12} | 1, 2, 3, \dots, N \rangle &= P_{13} | 2, 1, 3, \dots, N \rangle = | 2, 3, 1, \dots, N \rangle \end{aligned}$$

Anmerkung: Mathematisch exakter und allgemeiner läßt sich die Aktion des Permutationsoperators in folgender Weise definieren: Sei $\psi(x_1, \dots, x_N)$ die Wellenfunktion eines Systems von N Teilchen und σ eine Permutation der Zahlen $1, \dots, N$, dann gilt

$$P_\sigma \psi(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}) .$$

Die Permutation bewirkt also eine Vertauschung der Teilchenkoordinaten.

Drei identische Teilchen Es ist durchaus sinnvoll, das bisher besprochene explizit für ein System von drei identischen Teilchen anzugeben. Als Motivation hiervon kann angesehen werden, daß die Untersuchung der Hadronenstruktur auf die Zusammensetzung von Hadronen aus Quarks führt. Besondere Bedeutung kommt dabei Systemen wie dem $\Delta(qqq)$ zu: die beiden Zustände $\Delta^{++}(uuu)$ und $\Delta^-(ddd)$ setzen sich aus drei identischen Teilchen mit gleichem Spin zusammensammen. Um dennoch einen Verstoß gegen das PAULI-Verbot zu verhindern, muß es noch einen weiteren inneren Freiheitsgrad geben, welcher die Antisymmetrie der Wellenfunktion gewährleistet. Diesen Freiheitsgrad gibt es in der Tat: es handelt sich hierbei um die **Farbladung**, welche für jedes Quark drei zusätzliche Freiheitsgrade ergibt. Die zugehörige Theorie ist die **Quantenchromodynamik** (QCD).

Insgesamt gibt es $3! = 6$ Möglichkeiten für Zustandvektoren der Form

$$| k' \rangle | k'' \rangle | k''' \rangle .$$

Fordern wir für den daraus zusammengesetzten Zustand entweder vollständige Symmetrie oder Antisymmetrie, lassen sich für beide Fälle jeweils nur eine Linearkombination finden; diese sind

$$\begin{aligned} | k'k''k''' \rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ & | k' \rangle | k'' \rangle | k''' \rangle \pm | k'' \rangle | k' \rangle | k''' \rangle \\ & + | k'' \rangle | k''' \rangle | k' \rangle \pm | k''' \rangle | k'' \rangle | k' \rangle \\ & + | k''' \rangle | k' \rangle | k'' \rangle \pm | k' \rangle | k''' \rangle | k'' \rangle \} \end{aligned}$$

und ergeben simultane Eigenzustände zu P_{12} , P_{13} und P_{23} . Die noch verbleibenden vier möglichen Kombinationen ergeben Zustände mit einer gemischten Symmetrie (d.h. sind weder vollständig symmetrisch noch antisymmetrisch).

12.4.3 Symmetrisierungs-Theorem

Symmetrien in einem N -Teilchen System

Systeme mit N identischen Teilchen sind entweder total symmetrisch oder total antisymmetrisch unter der Vertauschung jedes Paare.

$$\begin{aligned} \text{symmetrisch} &= \text{Bosonen} \\ \text{antisymmetrisch} &= \text{Fermionen} \end{aligned}$$

Für die Permutation von zwei Teilchen gilt dann

$$\begin{aligned} P_{ij} | N \text{ identische Bosonen} \rangle &= + | N \text{ identische Bosonen} \rangle \\ P_{ij} | N \text{ identische FERMIONEN} \rangle &= - | N \text{ identische FERMIONEN} \rangle \end{aligned}$$

Beispiele für diese verschiedenen Arten von Teilchen sind:

- **Bosonen:** Pionen, Photonen, W-Bosonen, ^4He
- **Fermionen:** Quarks, Nukleonen, Leptonen, ^3He

Spinstatistik-Theorem

(Elementar)Teilchen lassen sich entsprechend ihrem Spin in zwei Klassen einteilen:

- FERMionen haben ganzzahligen Spin

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\right) \hbar$$

- Bosonen haben ganzzahligen Spin

$$(0, 1, 2, \dots) \hbar$$

12.4.4 Das 2-Elektronen-System

Beschränken wir uns auf die Untersuchung eines nach außen elektrisch neutralen atomaren System, so haben wir es in diesem Fall mit einem Helium-Atom mit Kernladung $Q = Ze$ und $N_e = Z = 2$ zu tun. In der Wellenfunktion zu berücksichtigen sind dann die Ortskoordinaten \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 der Elektronen, sowie deren Spin-Zustände m_{s_1} und m_{s_2} . Da die einzigmögliche Permutation in der Vertauschung ($1 \leftrightarrow 2$) besteht, gilt für den Permutationsoperator $P_{12} = -1$.

Damit können wir die Wellenfunktion jetzt schreiben also¹

$$\psi = \sum_{m_{s_1}} \sum_{m_{s_2}} C(m_{s_1}, m_{s_2}) \langle \mathbf{x}_1, m_{s_1}; \mathbf{x}_2, m_{s_2} \mid \alpha \rangle \quad (12.12)$$

Unter der Voraussetzung, daß die Energieeigenfunktion simultane Eigenfunktion zu \mathbf{S}^2 ist

$$[H, \mathbf{S}^2] = 0$$

läßt sich die Wellenfunktion ψ in Ortsraum- und Spinraumanteil zerlegen:

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \chi(m_{s_1}, m_{s_2}) \quad (12.13)$$

Da wir es hier ja mit Fermionen zu tun haben gibt ferner

$$\langle \mathbf{x}_1, m_{s_1}; \mathbf{x}_2, m_{s_2} \mid \alpha \rangle = - \langle \mathbf{x}_2, m_{s_2}; \mathbf{x}_1, m_{s_1} \mid \alpha \rangle = \langle \mathbf{x}_1, m_{s_1}; \mathbf{x}_2, m_{s_2} \mid P_{12} \mid \alpha \rangle$$

Analog zur Zerlegung (12.13) der Wellenfunktion machen wir für den Permutationsoperator den Produktansatz

$$P_{12} = P_{12}^\phi \cdot P_{12}^\chi \quad (12.14)$$

¹ Eine mathematisch präzisere Darstellung findet sich in [13], Kapitel 5.

Demnach läßt sich die Bedingung $P_{12} \psi = -\psi$ auf zweierlei Weise realisieren:

$$P_{12}^{\phi} P_{12}^{\chi} (\phi \chi) = \underbrace{(P_{12}^{\phi} \phi)}_{\pm 1} \underbrace{(P_{12} \chi)}_{\mp 1} = -\phi \chi$$

Folglich:

- Ist die Ortsraumfunktion ϕ symmetrisch, so muß die Spinraumfunktion χ antisymmetrisch sein.
- Ist die Spinraumfunktion χ symmetrisch, so muß die Ortsraumfunktion ϕ antisymmetrisch sein.

Für die Spinraumwellenfunktion lassen sich jetzt folgende Kombinationen realisieren:

$$\chi(m_{s_1}, m_{s_2}) = \begin{cases} \chi_{++} & \text{symmetrisch} \\ \chi_{--} & \text{symmetrisch} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) & \text{symmetrisch} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+}) & \text{antisymmetrisch} \end{cases} \quad (12.15)$$

Die symmetrischen Spinraum-Wellenfunktionen bilden also ein Triplett, während es nur eine einzige antisymmetrische Spinraum-Wellenfunktion gibt (Singulett).

Für die Ortsraum-Wellenfunktion haben wir wieder die bekannte Wahrscheinlichkeitsinterpretation: ist $|\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, dann ist

$$P = \int d^3 x_1 d^3 x_2 |\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2$$

die Wahrscheinlichkeit dafür das Elektron 1 im Volumen $d^3 x_1$ um \mathbf{x}_1 und das Elektron 2 im Volumen $d^3 x_2$ um \mathbf{x}_2 zu finden.

12.5 Beispiele

12.5.1 Angeregte Zustände im He-Atom

12.5.2 Streuung identischer Teilchen

(a) Streuung von Teilchen mit Spin 0 (Bosonen) an einem zentralsymmetrischen Potential V .

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta) f^*(\pi - \theta)] \end{aligned}$$

Für $\theta = \frac{\pi}{2}$ ergibt sich also eine konstruktive Interferenz, der Wirkungsquerschnitt wird erhöht.

(b) Streuung von Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ (FERMIONEN) an einem zentralsymmetrischen Potential V . Die einlaufenden Strahlen seien nicht polarisiert und das Potential V hänge nicht vom Spin ab.

Dann ergibt sich aus den Eigenschaften der Wellenfunktion im Ortsraum, daß

Spin-Singlett symmetrisch \rightarrow stat. Gewicht $\frac{1}{4}$

Spin-Triplett antisymmetrisch \rightarrow stat. Gewicht $\frac{3}{4}$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\theta - \pi)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re} [f(\theta) f^*(\pi - \theta)] \end{aligned}$$

hat dann bei $\theta = \frac{\pi}{2}$ ein Minimum.

12.5.3 Die Farbquantenzahl der QCD

Wir betrachten hier das Δ^{++} , Ruhemasse 1232 MeV, welches aus drei Up-Quarks mit Spin \uparrow zusammengesetzt ist. Seine Quantenzahlen sind

$$\begin{aligned} \text{Spin } \frac{3}{2}\hbar &\rightarrow \text{FERMION} \\ e_{\mu} = \frac{3}{2}e &\rightarrow 3 \cdot \frac{3}{2}e = 2e = e_{\Delta^{++}} \end{aligned}$$

Da Quarks FERMIONEN sind dürfte es das Δ^{++} mit der Zusammensetzung

$$|\Delta^{++}\rangle = |u\uparrow\rangle |u\uparrow\rangle |u\uparrow\rangle$$

nach dem PAULI-Verbot gar nicht geben, da sich alle Quarks, scheinbar, im gleichen Quantenzustand befinden: Es muß also noch eine weitere, bisher noch nicht behandelte Quantenzahl geben, die dennoch eine Unterscheidung möglich macht. Diese zusätzliche Quantenzahl heißt **Farbladung** u_{α} mit

$$\alpha = \text{rot, grün, blau}$$

Es gilt jetzt noch eine geeignete Kombination zu finden, da sich in der Natur nur farbneutrale Zustände beobachten lassen. Unter dieser Bedingung können wir uns das Δ^{++} folgendermaßen zusammengesetzt denken:

$$\begin{aligned} |\Delta^{++}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|u\uparrow r\rangle |u\uparrow g\rangle |u\uparrow b\rangle - |u\uparrow g\rangle |u\uparrow r\rangle |u\uparrow b\rangle \right. \\ &\quad \left. + |u\uparrow g\rangle |u\uparrow b\rangle |u\uparrow r\rangle - |u\uparrow b\rangle |u\uparrow g\rangle |u\uparrow r\rangle \right. \\ &\quad \left. + |u\uparrow b\rangle |u\uparrow r\rangle |u\uparrow g\rangle - |u\uparrow r\rangle |u\uparrow b\rangle |u\uparrow g\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha, \beta, \gamma} \left(|u\uparrow \alpha\rangle |u\uparrow \beta\rangle |u\uparrow \gamma\rangle \right) \quad \text{wobei } \alpha, \beta, \gamma = r, g, b \end{aligned}$$

12.6 Der FOCK-Raum

Übungsaufgaben

12.1 – Das Pionische Atom Das Pion ist ein skalares Meson ($I J^P = 10^-$) dessen relativistische Beschreibung durch die KLEIN-GORDON-Gleichung erfolgt. Ähnlich wie beim "normalen" Atom, kann auch

ein negativ geladenes Pion im elektromagnetischen Feld eines Z -fach positiv geladenen Kerns gebunden sein. Dieses gebundene System nennt man pionisches Atom.

1. Stellen Sie aus der KLEIN-GORDON-Gleichung mit elektromagnetischem Feld

$$\mathbf{A} = 0, \quad \Phi = -\frac{Ze}{r}$$

und stationärer Lösung

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

eine zeitunabhängige Differentialgleichung für das pionische Atom auf. Dies entspricht der Situation eines unendlich schweren Kerns.

2. Leiten Sie mit Hilfe eines Produktansatzes aus Radial- und Winkelanteil die Radialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} + \frac{2Z\alpha E}{\hbar cr} - \frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2}\right) R_l(r) = 0 \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

ab.

3. Vergleichen Sie diese Radialgleichung mit der Radialgleichung des Wasserstoffatoms und definieren Sie nun geeignete Variablen, um die Radialgleichung in folgende Form zu überführen:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\gamma}{\rho} - \frac{k(k+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4}\right) R_l(\rho) = 0.$$

Welche Bedingung muß dabei die Energie E erfüllen, um einen gebundenen Zustand zu erhalten?

4. Berechnen Sie nun die Energieniveaus des pionischen Atoms. Gehen Sie dabei analog zur Lösungsmethode beim Wasserstoffatom vor, um aus der Abbruchbedingung des Potenzreihenansatzes die Eigenwerte zu bestimmen.

Welche Bedingung muß an die Kernladungszahl Z gestellt werden, um reelle Eigenwerte zu erhalten?

Entwickeln Sie den Ausdruck für die Energieeigenwerte bis zur vierten Ordnung in $Z\alpha$ und zeigen Sie daß gilt:

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{1+1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right],$$

wobei n die Hauptquantenzahl des pionischen Atoms ist.

Vergleichen Sie die Energieniveaus des pionischen Atoms mit dem Termschema des Wasserstoffatoms und diskutieren Sie die Unterschiede.

Grundzüge der relativistischen Quantenmechanik

Der hier dargestellte Teil basiert auf der Vorlesungsausarbeitung von U.-G. Meißner. Alternative Darstellungen finden sich ab Seite 218 im Anhang.

13.1 Prinzipien der nichtrelativistischen Theorie

In der bisher behandelten Quantenmechanik haben wir den Übergang zur klassischen Mechanik immer durch den formalen Übergang $\hbar \rightarrow 0$ durchgeführt, also $v/c \equiv \beta \ll 1$. Für höhere Geschwindigkeiten $v \simeq c$ allerdings werden die Beschreibungen im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie relevant: die bisherigen quantenmechanischen Wellen müssen also äquivalent den Bewegungsgleichungen der Punktmechanik modifiziert werden.

<u>klassische Mechanik</u>	<u>nicht-relativistische Quantenmechanik</u>
----------------------------	--

freie Teilchen: Energie E , Impuls \mathbf{p}	Ebene Welle: $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ Frequenz ω , Wellenvektor \mathbf{k}
--	--

$$E = \hbar\omega \quad , \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad \quad \omega = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$$

Ersetzen wir nach dem Korrespondenz-Prinzip

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad p^j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (j = 1, 2, 3) \quad (13.1)$$

so erhalten wir damit die

Freie SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (13.2)$$

Aber: Die Ableitungen nach Zeit (1. Ordnung) und Ort (2. Ordnung) sind nicht symmetrisch!

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte und Wahrscheinlichkeitsstromdichte sind

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \geq 0 \quad (13.3)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (13.4)$$

und geben die

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.5)$$

Dies bedeutet die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit.

13.2 Übergang zur relativistischen Theorie

Grundlegend für die Struktur der relativistischen Gleichungen ist deren Verhalten gegenüber den zugehörigen Transformationen:

Forderung: Die Form der Grundgesetze muß invariant sein gegenüber Lorentztransformationen \Rightarrow LORENTZ-Kovarianz

LORENTZtransformationen beschreiben den Übergang von einem Raum-Zeit-Bezugssystem zu einem anderen - die Physik darf nicht von der Wahl eines bestimmten Bezugssystems anhängen. Einschränkung im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie: nur Inertialsysteme.

Für die Lorentztransformation benutzen wir folgende Größen:

$$x^\mu = (ct, \mathbf{r}) = (ct, x, y, z) = (x^0, x^1, x^2, x^3) \quad (\text{kontravarianter Vierer - Vektor})$$

$$x_\nu = (ct, -x, -y, -z) = (x_0, x_1, x_2, x_3) \quad (\text{kovarianter Vierer - Vektor})$$

$$x^\nu = \Lambda^\nu_\mu x^\mu \quad ; \quad \Lambda^{\lambda\mu} \Lambda^\nu_\lambda = g^{\mu\nu} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Metrischer Tensor}} = g_{\mu\nu}$$

Für die Vierer-Vektoren verwenden wir die EINSTEIN'sche Summenkonvention

$$a_\mu b^\mu = \sum_{\mu=0}^3 a_\mu b^\mu = a_0 b^0 + a_1 b^1 + a_2 b^2 + a_3 b^3 = a_0 b^0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

wobei die griechischen Indizes von $0, \dots, 3$ zählen und die Dreiervektoren mit lateinischen Buchstaben bezeichnet werden.

Wir wissen:

1. Die Größen

$$P^\mu \equiv \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right) \quad k^\mu \equiv \left(\frac{\omega}{c}, \mathbf{k}\right)$$

sind Vierervektoren und wir können schreiben $\hbar k^\mu = p^\mu$ – Die Beziehung Teilchen-Welle ist also kovariant.

- 2.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} = e^{-ik_\mu x^\mu} \equiv e^{-ikx}$$

Die Phase ist ein Lorentz-Skalar und somit Lorentz-invariant.

3. Die Operatorzuordnung

$$p^\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

ist kovariant.

4. Der Viererstrom
- $j^\mu = (c\rho, \mathbf{j})$
- ist ein Vierer-Vektor und es gilt die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = 0$$

5. Die SCHRÖDINGER-Gleichung ist
- nicht
- kovariant wegen der Raum-Zeit-Asymmetrie (Raum-Zeit-Symmetrie ist notwendig, aber nicht hinreichend).

Ziel

Gesucht ist eine Gleichung, die LORENTZ-invariant (forminvariant) ist und die für $v \ll c$ in die SCHRÖDINGER-Gleichung übergeht.

13.3 KLEIN-GORDON-Gleichung

13.3.1 Heuristische Ableitung

Aus der relativistischen Impulsbeziehung

$$P_\mu P^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2$$

bekommen wir für das Ruhesystem $\mathbf{p} = 0$, daß $E = mc^2$

Wegen $P^\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ können wir schreiben

$$\left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \right] \varphi(\mathbf{r}, t) = m^2 c^2 \varphi(\mathbf{r}, t)$$

Mit dem D'ALEMBERT-Operator

$$\square \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (13.6)$$

läßt sich dies vereinfachen zu

$$\left[\square + \underbrace{\frac{m^2 c^2}{\hbar^2}}_{\equiv \xi^2} \right] \varphi = 0 \quad \text{oder} \quad [\square + \xi^2] \varphi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.7)$$

- \square ist Lorentz-Skalar, ebenso ξ^2 – Die KLEIN-GORDON-Gleichung ist kovariant (unabhängig vom Transformationsverhalten von φ).
- φ ist eine einkomponentige Größe – Die KLEIN-GORDON-Gleichung kann nur Teilchen ohne innere Freiheitsgrade (Spin) beschreiben, also z.B. skalare oder pseudoskalare Mesonen (π^0, π^\pm). Ein Teilchen mit Spin $\frac{\hbar}{2}$ hat bereits zwei Komponenten, $|+\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|-\rangle = |\downarrow\rangle$.

13.3.2 Lösung der KLEIN-GORDON-Gleichung

Für die Wellengleichung machen wir den Ansatz (\mathcal{N} ist Normierungsfaktor – z.B. für δ oder Box)

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{N} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \mathcal{N} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}$$

Mit

$$-k^2 + \xi^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad -\frac{\omega^2}{c^2} + \mathbf{k}^2 + \xi^2 = 0$$

erhalten wir die

Relativistische Dispersionsformel

$$\omega_{\pm} = \pm c \sqrt{\mathbf{k}^2 + \xi^2} \quad (13.8)$$

Das bedeutet aber auch, daß es Lösungen mit negativer Energie gibt: diese sind nicht unphysikalisch, sondern beschreiben die Anti-Teilchen, z.B. $\omega_+ \rightarrow \pi^+, \omega_- \rightarrow \pi^-$.

13.3.3 Nicht-relativistischer Grenzfall

Wir formen dafür um:

$$\begin{aligned} (-\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu - m^2 c^2) \varphi(x) &= 0 & x &= x^\mu \\ -\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu \varphi &= m^2 c^2 \varphi \\ -\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi + \hbar^2 \Delta \varphi &= m^2 c^2 \varphi \end{aligned}$$

Wir spalten noch die Ruhemasse ab: $\varphi(\mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} m c^2 t}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}\varphi &= e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \left(-\frac{i}{\hbar}mc^2\Psi + \frac{\partial}{\partial t}\Psi \right) \\
 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi &= e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \left(-\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\Psi - 2\frac{i}{\hbar}mc^2\frac{\partial}{\partial t}\Psi + \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi \right) \\
 m^2c^2\Psi + 2i\hbar m\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \frac{\hbar^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi + \hbar^2\Delta\Psi &= m^2c^2\Psi \\
 2i\hbar m\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \frac{\hbar^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi + \hbar^2\Delta\Psi &= 0
 \end{aligned}$$

Für den nichtrelativistischen Grenzfall können wir die Terme $\sim \frac{1}{mc^2}$ weglassen und wir erhalten die

SCHRÖDINGER-Gleichung für Ψ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \quad (13.9)$$

Dies läßt sich auch auf den Fall eines EM-Feldes verallgemeinern.

13.3.4 Wahrscheinlichkeitsinterpretation?

Für den Vierer-Strom

$$j^\mu(x) \equiv \frac{i\hbar}{2m} (\varphi^* \partial^\mu \varphi - \varphi \partial^\mu \varphi^*)$$

gilt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} &= \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_\mu \varphi^*) (\partial^\mu \varphi) + \varphi^* \square \varphi - (\partial_\mu \varphi) (\partial^\mu \varphi^*) - \varphi \square \varphi^*] \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} [-\xi^2 \varphi^* \varphi + \xi^2 \varphi \varphi^*] \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

also die Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$ mit

$$\rho = \frac{1}{c} j^0 = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\varphi^* \frac{\partial}{\partial t} \varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial t} \varphi^* \right] \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} \quad (13.10)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} [\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*] \quad \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte} \quad (13.11)$$

Für die freien Lösungen sind die Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned}
 \varphi = e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\varphi = -i\omega\varphi \\
 \varphi^* = e^{+i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\varphi^* = +i\omega\varphi \\
 \Rightarrow \rho \frac{i\hbar}{2mc^2} (-2i\omega) &= \frac{\hbar\omega}{mc^2}
 \end{aligned}$$

Folgerungen:

- Für Lösungen negativer Energie $\hbar\omega_-$ ist ρ , die Wahrscheinlichkeitsdichte negativ!
- Die Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte ist nicht haltbar! Ausweg: $|e|\rho$ als Ladungsdichte (PAULI-WEISSKOPF).

□

Zur Aufrechterhaltung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist eine Gleichung 1. Ordnung in der Zeitableitung erforderlich. Die Lorentz-Kovarianz erfordert dann auch eine räumliche Ableitung 1. Ordnung.

13.3.5 Ankopplung des EM-Feldes

Als minimale Substitution ersetzen wir in der KLEIN-GORDON-Gleichung den Impuls durch den

Kovarianten Kinetischen Impuls

$$\Pi^\mu = p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu \quad (13.12)$$

so daß

$$(P^\mu P_\mu - m^2 c^2) \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad (\Pi^\mu \Pi_\mu - m^2 c^2) \varphi(x) = 0$$

Unter Anwendung der lokalen Eichtransformation – wobei $\chi(x)$ beliebig, aber nicht-singular ist

$$\begin{aligned} \varphi'(x) &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \cdot \varphi(x) \\ A'^\mu(x) &= A^\mu(x) - \partial^\mu \chi(x) \end{aligned}$$

wird dann

$$\begin{aligned} \Pi^\mu &\rightarrow \Pi'^\mu = p^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu \\ \Pi'^\mu \varphi'(x) &= \left(i\hbar\partial^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu \right) e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \varphi(x) \\ &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \left(i\hbar\partial^\mu - \frac{e}{c}\partial^\mu \chi(x) - \frac{e}{c}A^\mu + \frac{e}{c}\partial^\mu \chi(x) \right) \varphi(x) \\ &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \Pi^\mu \varphi(x) \\ \Pi'^\mu \Pi'_\mu \varphi'(x) &= \Pi'^\mu \left(e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \left(\Pi_\mu \varphi(x) \right) \right) \\ &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} \Pi^\mu \left(\Pi_\mu \varphi(x) \right) \\ &= e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi(x)} m^2 c^2 \varphi(x) \\ &= m^2 c^2 \varphi'(x) \end{aligned}$$

Die KLEIN-GORDON-Gleichung mit Ankopplung eines EM-Feldes ist also invariant gegenüber lokalen Eichtransformationen.

- A^μ : Eichfeld \rightarrow Spin -1; Photonen¹
- Ebenfalls invariant unter Eichtransformation

$$\begin{aligned} \square A'^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A'^\nu &= \square A^\mu - \square \partial^\mu \chi(x) - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu + \partial^\mu \square \chi(x) \\ &= \square A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu \\ &= 0 \end{aligned}$$

Eichtheorien

- Quantenelektrodynamik (QED)
- Quantenchromodynamik (QCD)
- Starke WW – Eichfelder: Gluonen (Spin 1)

13.4 Die DIRAC-Gleichung

13.4.1 Heuristischen Ableitung

Ansatz:

$$\left(i \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \xi \right) \varphi(x) = 0$$

Die Lösung soll auch die relativistischen Beziehungen zwischen \mathbf{E} und \mathbf{p} erfüllen; das heißt, daß $\varphi(x)$ abenfalls die KLEIN-GORDON-Gleichung

$$(\square + \xi^2) \varphi(x) = 0$$

erfüllen. Also

$$0 = (i\gamma^\nu \partial_\nu + \xi) (i\gamma^\mu \partial_\mu - \xi) \varphi(x) = (-\gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\nu \partial_\mu - \xi^2) \varphi(x) \stackrel{!}{=} (-\partial^\mu \partial_\mu - \xi^2) \varphi(x) \quad (13.13)$$

1. Wir versuchen den Ansatz:

$$\gamma^\nu \gamma^\mu = g^{\nu\mu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow (\gamma^0)^2 = 1 \Rightarrow \gamma^0 = \pm 1$$

$$(\gamma^i)^2 = -1 \Rightarrow \gamma^i = \pm i$$

\Rightarrow keine Lösung, die γ^μ können keine \mathcal{C} -wertigen Zahlen sein!

¹ Wir verfolgen die Quantisierung des EM-Feldes an dieser Stelle nicht weiter; dies ist Stoff der sich anschließenden Vorlesung zur Quantenfeldtheorie.

2. Nächst-schwächere Bedingung:

$$\left[-\frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) \partial_\nu \partial_\mu - \xi^2 \right] \varphi(x) \stackrel{!}{=} [-\partial^\mu \partial_\mu - \xi^2] \varphi(x)$$

so daß

$$\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$$

⇒ Lösung nur für nichtkommutierende Objekte γ^μ : das sind Matrizen ($\dim \mathcal{N}$), wobei \mathcal{N} gerade, mit gleicher Zahl positiver und negativer Eigenwerte, ist.

$$\{\gamma^\nu, \gamma^\mu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}_N$$

wobei $\mathbb{1}_N$ Einheitsmatrix in $D = \mathcal{N}$.

13.4.2 Die γ -Matrizen

Frage: Gibt es derartige γ^μ 's und sind diese eindeutig?

1. $N = 2$: Geht nicht, nur 3 nicht kommutierende Matrizen, die PAULI-Spinmatrizen $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$.
2. $N \geq 4$: Eine mögliche Lösung mit $N = 4$ (minimaler Satz)

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

mit

$$\sigma^i \sigma^j = \delta^{ij} \mathbb{1}_2 + i \epsilon^{ijk} \sigma_k, \quad \{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta^{ij} \mathbb{1}_2$$

Bei diesem Ansatz ist der Spin automatisch eingeschlossen!

$$(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}_4$$

$$\begin{aligned} \{\gamma^0, \gamma^k\} &= \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \{\gamma^i, \gamma^k\} &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\sigma^i \sigma^k & 0 \\ 0 & -\sigma^i \sigma^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sigma^k \sigma^i & 0 \\ 0 & -\sigma^k \sigma^i \end{pmatrix} \\ &= -2\delta^{ik} \mathbb{1}_4 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}_4$$

3. Anderer Satz mit $N = 4$:

$$\gamma'^\mu = S^{-1} \gamma^\mu S$$

wobei S quadratisch und S^{-1} existiert, ansonsten aber beliebig. Hierfür

$$\{\gamma'^\mu, \gamma'^\nu\} = \{S^{-1} \gamma^\mu S, S^{-1} \gamma^\nu S\} = S^{-1} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} S = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}_4$$

4. $N \gg 4$, $N = 4n$ ($n = 1, 2, \dots$) : Block-diagonale Einbettung (wird hier nicht weiter verfolgt).

13.4.3 Kovarianz der DIRAC-Gleichung

DIRAC-Gleichung

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc\mathbb{1}_4 \right) \Psi(x) = 0$$

Da die γ^μ 4×4 -Matrizen sind hat $\Psi(x)$ ebenfalls 4 Komponenten.

1. PAULI-Theorem: Gegeben $\gamma^\mu, \tilde{\gamma}^\mu$ mit

$$\{\tilde{\gamma}^\mu, \tilde{\gamma}^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}_4$$

Es gibt eine Matrix S , so daß

$$\tilde{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S$$

2. Lorentz-Transformation auf γ^μ :

$$\begin{aligned} x'^\mu &= \Lambda_\mu^{\mu'} x^\mu \\ \Lambda_\mu^{\mu'} \Lambda^{\nu'\mu} &= g^{\mu'\nu'} \\ \gamma'^{\mu'} &\equiv \Lambda_\mu^{\mu'} \gamma^\mu \end{aligned}$$

Also

$$\{\gamma'^{\mu'}, \gamma'^{\nu'}\} = \Lambda_\mu^{\mu'} \Lambda_\nu^{\nu'} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \Lambda_\mu^{\mu'} \Lambda_\nu^{\nu'} 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}_4 = 2\Lambda_\mu^{\mu'} \Lambda^{\nu'\mu} \mathbb{1}_4 = 2g^{\mu'\nu'} \mathbb{1}_4$$

3. Gegeben sei eine Lorentz-Transformation $\Lambda_\mu^{\mu'}$ und ein erlaubter Satz γ^μ ; es gibt immer eine Matrix S , so daß

$$\gamma'^{\mu'} = \Lambda_\mu^{\mu'} \gamma^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S$$

Also:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc\mathbb{1}_4 \right) \Psi(x) = \left(i\Lambda_\mu^{\mu'} \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^{\mu'}} - mc\mathbb{1}_4 \right) \Psi(x) \\ &\quad \text{da } \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \Lambda_\mu^{\mu'} \frac{\partial}{\partial x'^{\mu'}} \\ &= \left(iS^{-1}\gamma^\mu S \frac{\partial}{\partial x'^{\mu'}} - mc\mathbb{1}_4 \right) \Psi(x) \\ \Rightarrow \left(i\gamma'^{\mu'} \frac{\partial}{\partial x'^{\mu'}} - mc\mathbb{1}_4 \right) S \Psi(x) &= 0 \\ \Rightarrow \left(i\gamma'^{\mu'} \frac{\partial}{\partial x'^{\mu'}} - mc\mathbb{1}_4 \right) \Psi'(x') &= 0 \end{aligned}$$

DIRAC-Gleichung

Die DIRAC-Gleichung ist Lorentz-kovariant (forminvariant), wenn sich $\Psi(x)$ bei einer Lorentz-Transformation $\Lambda_\mu^{\mu'}$ wie $\Psi'(x') = S \Psi(x)$ transformiert.

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \vdots \\ \Psi_4(x) \end{pmatrix} \quad \text{“DIRAC-Spinor”} \quad (\text{wegen harmonischer Einbeziehung des Spins})$$

$$S = S(\Lambda_{\mu}^{\mu'}) \quad \text{Spinor-Transformation} \quad 4 \times 4 \text{ Matrix}$$

Daher gilt:

$$S^{-1} = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \quad \rightarrow \quad S^\dagger = \gamma^0 S^{-1} \gamma^0$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mu}^{\mu'} \gamma^{\mu} &= S^{-1} \gamma^{\mu'} S && \leftarrow S^{-1} \\ \Lambda_{\mu}^{\mu'} \gamma^{\mu} S^{-1} &= S^{-1} \gamma^{\mu'} \end{aligned}$$

Es gilt aber auch

$$\Lambda_{\mu}^{\mu'} S \gamma^{\mu} = \gamma^{\mu'} S \quad \rightarrow \quad \Lambda_{\mu}^{\mu'} (\gamma^{\mu'})^\dagger S^\dagger \quad (*)$$

Unsere γ 's erfüllen:

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i \quad (i = 1, 2, 3)$$

und damit

$$\gamma^0 (\gamma^{\mu})^\dagger = \gamma^{\mu} \gamma^0 \quad \text{oder} \quad (\gamma^{\mu})^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^{\mu} \quad (**)$$

Multiplizieren wir nun (*) von links und rechts mit γ^0 , so erhalten wir

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mu}^{\mu'} \gamma^0 (\gamma^{\mu})^\dagger S^\dagger \gamma^0 &= \gamma^0 S^\dagger (\gamma^{\mu'})^\dagger \gamma^0 \\ \stackrel{(**)}{\rightarrow} \Lambda_{\mu}^{\mu'} \gamma^{\mu} \underbrace{\gamma^0 S^\dagger \gamma^0}_{S^{-1}} &= \underbrace{\gamma^0 S^\dagger \gamma^0}_{S^{-1}} \gamma^{\mu'} \\ S^{-1} &= \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \end{aligned}$$

q.e.d.

13.4.4 Struktur der Spinortransformation

- **Eigentliche Lorentz-Transformation:** $\det(\Lambda_{\mu}^{\mu'}) = 1$, aus infinitesimaler Transformation um $g_{\mu}^{\mu'}$ erzeugbar (Rotation, Boosts)
- **Uneigentliche Lorentz-Transformation:** $\det(\Lambda_{\mu}^{\mu'}) = -1$, nicht aus infinitesimaler Transformation um $g_{\mu}^{\mu'}$ erzeugbar (Raumspiegelung)

Betrachten wir zunächst die infinitesimale (eigentliche) Lorentz-Transformation:

□

$$\Lambda^{\mu' \mu} = g^{\mu' \mu} + \varepsilon^{\mu' \mu}$$

wobei $\varepsilon^{\lambda\nu} = -\varepsilon^{\nu\lambda}$, also anti-symmetrisch unter der Vertauschung $\nu \leftrightarrow \lambda$

Beweis:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mu\nu} \Lambda_{\lambda}^{\nu} = g_{\mu\lambda} &\rightarrow (g_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu})(g_{\lambda}^{\nu} + \varepsilon_{\lambda}^{\nu}) \\ &= g_{\mu\lambda} + \varepsilon_{\lambda\mu} \varepsilon_{\mu\lambda} + \varepsilon^2 \\ &\stackrel{!}{=} g_{\mu\lambda} \end{aligned}$$

Das heißt also, daß $\varepsilon_{\lambda\mu} = -\varepsilon_{\mu\lambda}$

q.e.d.

S hat die Form

$$S = \mathbb{1}_4 + \frac{1}{4} \varepsilon^{\alpha\beta} \gamma_{\alpha} \gamma_{\beta}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \Lambda^{\mu' \mu} S \gamma_{\mu} &= \gamma^{\mu'} S \\ \rightarrow (g^{\mu' \mu} \Lambda^{\mu' \mu}) (\mathbb{1}_4 + \frac{1}{4} \varepsilon^{\alpha\beta} \gamma_{\alpha} \gamma_{\beta}) \gamma^{\mu} &= \gamma^{\mu'} (\mathbb{1}_4 + \frac{1}{4} \varepsilon^{\alpha\beta} \gamma_{\alpha} \gamma_{\beta}) \\ \stackrel{\text{bis } \mathcal{O}(\varepsilon)}{\rightarrow} \gamma^{\mu'} + \varepsilon^{\mu' \mu} \gamma_{\mu} + \frac{1}{4} \varepsilon_{\alpha\beta} \gamma^{\alpha} \gamma^{\beta} \gamma^{\mu'} &= \gamma^{\mu'} + \frac{1}{4} \varepsilon_{\alpha\beta} \gamma^{\mu'} \gamma^{\alpha} \gamma^{\beta} \end{aligned}$$

Es gilt aber ebenfalls

$$\begin{aligned} \gamma^{\alpha} \gamma^{\beta} \gamma^{\mu'} &= \gamma^{\alpha} (2g^{\beta\mu'} - \gamma^{\mu'} \gamma^{\beta}) \\ &= 2g^{\beta\mu'} \gamma^{\alpha} - (2g^{\alpha\mu'} - \gamma^{\mu'} \gamma^{\alpha}) \gamma^{\beta} \\ &= 2g^{\beta\mu'} \gamma^{\alpha} - 2g^{\alpha\mu'} \gamma^{\beta} + \gamma^{\mu'} \gamma^{\alpha} \gamma^{\beta} \end{aligned}$$

Daraus folgt, daß

$$\varepsilon^{\mu' \mu} \gamma_{\mu} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta} (g^{\beta\mu'} \gamma^{\alpha} - \gamma^{\alpha\mu'}) = 0$$

Durch Umstellen und Umbenennen der Indizes wird daraus

$$\begin{aligned} \varepsilon^{\mu' \mu} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha}^{\mu'} \gamma^{\alpha} - \frac{1}{2} \varepsilon_{\beta}^{\mu'} \gamma^{\beta} &\stackrel{!}{=} 0 \\ \varepsilon^{\mu' \mu} \gamma_{\mu} + \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\mu'} \gamma_{\alpha} - \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu'\beta} \gamma_{\beta} &= 0 \\ &\alpha, \beta \text{ werden nun umbenannt nach } \mu \\ \varepsilon^{\mu' \mu} \gamma_{\mu} + \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\mu'} \gamma_{\mu} - \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu'\mu} \gamma_{\mu} &= 0 \\ \frac{1}{2} (\varepsilon^{\mu' \mu} + \varepsilon^{\mu\mu'}) \gamma_{\mu} &= 0 \quad \text{da ja } \varepsilon_{\mu\mu'} = -\varepsilon^{\mu'\mu} \end{aligned}$$

q.e.d.

Beispiele:

 1. Rotation um die z -Achse

 (a) infinitesimal, Winkel $\delta\omega$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12} = -\delta\omega = \varepsilon_{21} \quad \rightarrow \quad S_R^{inf} &= \mathbb{1}_4 + \frac{1}{4}\varepsilon_{12}(\gamma^1\gamma^2 - \gamma^2\gamma^1) \\ &= \mathbb{1}_4 + \frac{i}{2}\delta\omega\Sigma^3 \quad , \quad \Sigma^3 \equiv \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

denn

$$\begin{aligned} \gamma^1\gamma^2 - \gamma^2\gamma^1 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -(\sigma^1\sigma^2 - \sigma^2\sigma^1) & 0 \\ 0 & -(\sigma^1\sigma^2 - \sigma^2\sigma^1) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mit

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3 \quad \Rightarrow \quad \gamma^1\gamma^2 - \gamma^2\gamma^1 = \begin{pmatrix} -2i\sigma_3 & 0 \\ 0 & -2i\sigma_3 \end{pmatrix}$$

 (b) unendlich, Winkel ω

$$S_R = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1}_4 + \frac{i}{2}\sigma^{12}\frac{\omega}{n} \right)^n \quad , \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$$

 Es gibt nur gerade ($\sim \mathbb{1}_4$) und ungerade ($\sim \Sigma^3$) Beiträge², so daß

$$S_R = \mathbb{1}_4 \cos \frac{\omega}{2} + i\Sigma_3 \sin \frac{\omega}{2} = \exp\left(\frac{i}{2}\omega\sigma^{12}\right)$$

$$S_R^\dagger = S_R^{-1} \quad \leftrightarrow \quad S_R \text{ ist unitär.}$$

 2. Lorentz-Boost in x -Richtung mit Geschwindigkeit v

$$\begin{aligned} S_L &= \mathbb{1}_4 \cosh \frac{\omega}{2} + i\sigma^{01} \sinh \frac{\omega}{2} \quad \tanh \omega \equiv \frac{v}{c} = \beta \\ &= \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma^{01}\right) \\ \Rightarrow \quad S_L^1 &\neq S_L^\dagger \text{ da } \sigma^{01} \text{ nicht hermitesch} \end{aligned}$$

3. Raumspiegelung (uneigentliche Lorentz-Transformation, diskret)

Dies ist der Fall für

$$(ct, x, y, z) \rightarrow (ct, -x, -y, -z)$$

Dann

$$x'^{\mu'} = \Lambda_{\mu}^{\mu'} x^\mu \quad \text{mit} \quad \Lambda_{\mu}^{\mu'} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix} = g_{\mu'\mu}$$

² Dies wurde an früherer Stelle bereits für $\mathbb{1}_4 + i\sigma_3\delta\omega$ gezeigt.

also:

$$S_P^{-1} \gamma^{\mu'} S_P = g_{\mu'\mu} \gamma^\mu = \gamma_{\mu'} \quad \rightarrow \quad S_P = e^{i\alpha} \gamma^0$$

$$\rightarrow \quad S_P^\dagger = (\gamma^0)^\dagger e^{-i\alpha} = e^{-i\alpha} \gamma^0 = S_P^{-1}$$

S ist also unitär.

Allgemein gilt:

- Uneigentliche Lorentz-Transformationen haben gerade Anzahl von γ 's (1) in S
- Eigentliche Lorentz-Transformationen haben gerade Anzahl von γ 's (0, 2) in S

Adjungierter DIRAC-Spinor

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \Psi(x) = 0$$

$$\xrightarrow{\text{herm.konj.}} \quad -i \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^\dagger \right) (\gamma^\mu)^\dagger - mc \Psi^\dagger = 0 \quad \leftarrow -\gamma^0$$

$$\rightarrow \quad i \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^\dagger \right) (g^\mu)^\dagger \gamma^0 + mc \Psi^\dagger \gamma^0 = 0 \quad (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^\mu$$

$$\Rightarrow \quad i \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^\dagger \right) \gamma^0 \gamma^\mu + mc \Psi^\dagger \gamma^0 = 0$$

Adjungierter Spinor

$$\Psi^\dagger \gamma^0 \equiv \bar{\Psi} = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, -\Psi_3^*, -\Psi_4^*)$$

Damit schreiben wir jetzt die

Adjungierte DIRAC-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \bar{\Psi} \gamma^\mu + mc \bar{\Psi} = 0$$

$$\bar{\Psi} \left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + mc \right) = 0$$

Spinor-Transformation von $\bar{\Psi}$:

$$\begin{aligned} \Psi'(x') = S \Psi(x) &\rightarrow (\Psi')^\dagger = \Psi^\dagger S^\dagger = \Psi^\dagger \gamma^0 S^{-1} \gamma^0 = \bar{\Psi} S^{-1} \gamma^0 \\ \text{von rechts mit } \gamma^0 & \quad (\Psi')^\dagger(x') \gamma^0 = \bar{\Psi}(x) S^{-1} (\gamma^0)^2 \end{aligned}$$

$$\bar{\Psi}'(x') \gamma^0 = \bar{\Psi}(x) S^{-1}$$

13.4.5 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Viererstrom

$$j^\mu(x) = \bar{\Psi}(x) \gamma^\mu \Psi(x)$$

1. j^μ ist ein Vierervektor:

$$j'^{\mu'}(x') = \bar{\Psi}'(x') \gamma^{\mu'} \Psi'(x') = \bar{\Psi}(x) S^{-1} \gamma^{\mu'} S \Psi(x) = \Lambda_{\mu'}^{\mu} \bar{\Psi}(x) \gamma^{\mu} \Psi(x) = \Lambda_{\mu'}^{\mu} j^{\mu}(x) \quad (13.14)$$

2. Die Komponenten des Vierervektor sind $j^\mu \equiv (\rho, \mathbf{j})$

$$\rho = \Psi \gamma^0 \Psi = \Psi^\dagger (\gamma^0)^2 \Psi = \Psi^\dagger \Psi = \sum_{\alpha=0}^3 (\Psi_\alpha)^2 \geq 0$$

Daher kann ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte im üblichen Sinne interpretiert werden.

3. Es gilt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \mathbf{j} = 0$$

denn:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu &= \frac{\partial \bar{\Psi}(x)}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \Psi(x) + \bar{\Psi}(x) \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi(x) \\ &= \frac{imc}{\hbar} \bar{\Psi} \Psi - \frac{imc}{\hbar} \bar{\Psi} \Psi \\ &= 0 \end{aligned}$$

Bilineare Kovarianten

Aus Produkten von γ 's lassen sich 16 linear unabhängige 4×4 Matrizen Γ konstruieren, die oft vorkommen. Diese sind linear unabhängig und vollständig.

$$\Gamma = \{ \Gamma^S = \mathbf{1}_4, \Gamma_\mu^V = \gamma_\mu, \Gamma^P = \gamma_5, \Gamma_{\mu\nu}^T = \sigma_{\mu\nu}, \Gamma_\mu^A = \gamma_5 \gamma_\mu \}$$

Daraus ergeben sich Eigenschaften und Anzahl der Γ Matrizen wie folgt:

<u>Matrix</u>	<u>Typ</u>	<u>Zahl</u>
Γ^S	Skalar	1
Γ_μ^V	Vektor	4
Γ^P	Pseudoskalar	1
$\Gamma_{\mu\nu}^T$	Tensor 2 ^{ter} Stufe	6
Γ_μ^A	Axialvektor	4
		<u>16</u>

13.4.6 Nichtrelativistischer Grenzfall

Anschluß des EM-Feldes

Hamilton'sche Form der DIRAC-Gleichung

Nichtrelativistischer Grenzfall

13.4.7 Lösung der freien DIRAC-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi = -i\hbar c \left[\alpha \nabla + i\beta \frac{m_0 c}{\hbar} \right] \Psi$$

Da wir erwarten können, das wir in diesem Fall – ähnlich der nichtrelativistischen Behandlung – ebene Wellen behandeln müssen, machen wir den Ansatz

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = N u(\mathbf{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \frac{i}{\hbar} E t\right) = N u(\mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p^\mu x_\mu\right) \quad (13.15)$$

Setzen wir dies ein, so erhalten wir

$$E u(\mathbf{p}) = (c \alpha \mathbf{p} + m_0 c^2 \beta) u(\mathbf{p}) \quad (13.16)$$

Da nach wie vor die KLEIN-GORDON-Gleichung erfüllt sein muß, auch

$$E^2 u(\mathbf{p}) = (c^2 \mathbf{p}^2 + m_0^2 c^4) u(\mathbf{p}) \quad (13.17)$$

so daß die Energie

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

Um die weitere Rechnung zu vereinfachen, betrachten wir zunächst ein sich in Ruhe befindliches Teilchen – der Anteil für die kinetische Energie verschwindet also zu Null. Die Lösungen für ein bewegtes Teilchen lassen sich dann durch Lorentztransformationen ermitteln.

13.4.8 Teilchen in Ruhe

Mit dem Verschwinden des Terms für die kinetische Energie bleibt jetzt nur noch

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = m_0 c^2 \beta \Psi(t) &\Rightarrow \Psi(t) = N u(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) \\ E = \pm m_0 c^2 &\Rightarrow \Psi(t) = N u(0) \exp\left(\mp \frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t\right) \\ \Leftrightarrow \Psi^{(\nu)}(t) = N u^{(\nu)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_\nu m_0 c^2 t\right) &\quad \mathcal{E}_\nu = \begin{cases} +1 & \nu = 1, 2 \\ -1 & \nu = 3, 4 \end{cases} \end{aligned}$$

Somit können wir jetzt Wellenfunktion und Spinoren bestimmen

$$\pm m_0 c^2 u^{(\nu)}(0) = m_0 c^2 \beta u^{(\nu)}(0) \quad \Leftrightarrow \quad \pm u^{(\nu)}(0) = \beta u^{(\nu)}(0)$$

Verwenden wir wieder die PAULI-Darstellung von α und β aus (A.37) so sind die Spinoren und Wellenfunktionen in Abhängigkeit von der Energie

$E > 0$	$u^{(1)}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\Psi^{(1)}(t) = u^{(1)}(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t\right)$
	$u^{(2)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\Psi^{(2)}(t) = u^{(3)}(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t\right)$
$E < 0$	$u^{(3)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\Psi^{(3)}(t) = u^{(3)}(0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t\right)$
	$u^{(4)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\Psi^{(4)}(t) = u^{(4)}(0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t\right)$

Als neue Größe führen wir noch den Spinoperator Σ ein:

$$\frac{\hbar}{2}\Sigma^3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad (13.18)$$

13.4.9 Teilchen in Bewegung

Wir zerlegen zunächst den Spinor $u(\mathbf{p})$ in zwei Komponenten

$$u^{(\nu)}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} u_A^{(\nu)}(\mathbf{p}) \\ u_B^{(\nu)}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \quad (13.19)$$

Dies führt zu den beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} E u_A(\mathbf{p}) &= c \sigma \mathbf{p} u_B(\mathbf{p}) + m_0 c^2 \mathbf{1}_2 u_A(\mathbf{p}) \\ E u_B(\mathbf{p}) &= c \sigma \mathbf{p} u_A(\mathbf{p}) - m_0 c^2 \mathbf{1}_2 u_B(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

oder geschrieben als Matrix-Gleichung

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 \mathbf{1}_2 & c \sigma \mathbf{p} \\ c \sigma \mathbf{p} & -m_0 c^2 \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}$$

Lösen wir dies auf nach

$$u_A(\mathbf{p}) = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E - m_0 c^2} u_B(\mathbf{p}) \quad \text{und} \quad u_B(\mathbf{p}) = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E + m_0 c^2} u_A(\mathbf{p})$$

so können wir dies wieder in das gekoppelte Gleichungssystem einsetzen

$$c^2 (\sigma \mathbf{p})^2 \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = c^2 p^2 \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = E^2 - m_0^2 c^4 \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}$$

$$E^2 = m_0^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2 \quad \Leftrightarrow \quad E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

Obere und untere Komponenten hängen über die Beziehung

$$u_B(\mathbf{p}) = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E + m_0 c^2} u_A(\mathbf{p})$$

zusammen, so daß wir mit

$$u_A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_A^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

die jeweils zueinandergehörigen Spinoren berechnen können:

$$\begin{aligned} u_B^{(1)}(\mathbf{p}) &= \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E + m_0 c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E + m_0 c^2} \begin{pmatrix} P_3 \\ P_1 + iP_2 \end{pmatrix} \\ u_B^{(2)}(\mathbf{p}) &= \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E + m_0 c^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c}{E + m_0 c^2} \begin{pmatrix} P_1 - iP_2 \\ -P_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Abhängig von der Energie ist dann

$E > 0$	$u^{(1)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c P_3}{E+m_0 c^2} \\ \frac{c(P_1+iP_2)}{E+m_0 c^2} \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 \\ \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E+m_0 c^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $u^{(2)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(P_1+iP_2)}{E+m_0 c^2} \\ -\frac{c P_3}{E+m_0 c^2} \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 \\ \frac{c \sigma \mathbf{p}}{E+m_0 c^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
$E < 0$	$u^{(3)} = N \begin{pmatrix} -\frac{c P_3}{ E +m_0 c^2} \\ -\frac{c(P_1+iP_2)}{ E +m_0 c^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} -\frac{c \sigma \mathbf{p}}{ E +m_0 c^2} \\ \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $u^{(4)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} -\frac{c(P_1-iP_2)}{ E +m_0 c^2} \\ \frac{c P_3}{ E +m_0 c^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} -\frac{c \sigma \mathbf{p}}{ E +m_0 c^2} \\ \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

13.4.10 Normierung der Spinoren

Bis jetzt haben wir noch keine Aussage über den willkürlich eingeführten Faktor N gemacht. Diesen können wir jetzt aber benutzen, um die Spinoren $u(\mathbf{p})$ zu normieren. Dafür haben wir zwei Möglichkeiten:

- i) $u^\dagger u = 1$
- ii) $\bar{u} u = 1$

Wir entscheiden uns für die erste Möglichkeit und erhalten durch Einsetzen

$$u^\dagger u = 1$$

$$N^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{c P_z}{\hat{E}} & \frac{c(P_x - iP_y)}{\hat{E}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c P_z}{\hat{E}} \\ \frac{c(P_x + iP_y)}{\hat{E}} \end{pmatrix} = 1 \quad \hat{E} = E + m_0 c^2$$

$$N^2 \left(1 + \frac{c^2 P^2}{\hat{E}^2} \right) = 1$$

$$N = \frac{\hat{E}}{\sqrt{\hat{E}^2 + c^2 \mathbf{p}^2}}$$

Demzufolge gibt es 4 linear unabhängige Lösungen der DIRAC-Gleichung:

$$\Psi^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) = N u^{(\nu)} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(E^{(\nu)} t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right) \right] \quad \nu = 1, 2, 3, 4 \quad (13.20)$$

Je nach Wert von ν bekommen wir dann

$$\begin{aligned} \nu = 1, 2 & \quad E = +\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} & \quad \text{Teilchen} \\ \nu = 3, 4 & \quad E = -\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} & \quad \text{Anti-Teilchen} \end{aligned}$$

13.5 Erhaltungsgrößen

Analog zur nichtrelativistischen Quantenmechanik suchen wir jetzt Größen, die mit dem DIRAC-Operator H_D vertauschen.

13.5.1 Impuls

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{P}} \right] = \left[c \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + m_0 c^2 \beta, \hat{\mathbf{P}} \right] = 0 \quad (13.21)$$

Es existieren also simultane Eigenfunktionen zu \hat{H}_D und $\hat{\mathbf{P}}$

13.5.2 Drehimpuls

Ausgehend vom Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}$$

wissen wir, daß

$$\left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{J}} \right] = 0$$

Mit den Ergebnissen aus Übungsaufgabe (13.5)

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{L}} \right] &= i\hbar c [\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}] \\ \left[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{S}} \right] &= -i\hbar c [\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}] \end{aligned}$$

wissen wir dann, daß \hat{H}_D , J^2 und J_z simultane Eigenfunktionen sind.

13.5.3 Parität

Nach Wirkung

$$R \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x} \quad R \nabla \rightarrow -\nabla$$

auf die Ortskoordinaten ist

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(-\mathbf{x}, t) = \left(-c \alpha \frac{\hbar}{i} \nabla + m_0 c^2 \beta \right) \Psi(\mathbf{x}, t)$$

Da dies aber nicht zu dem gewünschten Erfolg führt, wählen wir stattdessen den Operator $P = \beta R$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \beta \Psi(-\mathbf{x}, t) &= \left(-\beta c \alpha \beta \frac{\hbar}{i} \nabla + m_0 c^2 \beta \right) \beta \Psi(-\mathbf{x}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \beta \Psi(-\mathbf{x}, t) &= \left(c \alpha \frac{\hbar}{i} \nabla + m_0 c^2 \beta \right) \beta \Psi(-\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion verändert sich also gemäß

$$P \Psi(\mathbf{x}, t) = \beta \Psi(-\mathbf{x}, t)$$

Für die so gewählte Transformation gilt dann

$$[\hat{H}_D, \hat{P}] = 0$$

mit den simultanen Eigenfunktionen $\Psi(\mathbf{x}, t)$ und $P \Psi(\mathbf{x}, t)$

13.6 DIRAC-Teilchen in äußeren Potentialen

Wir behandeln nun das Verhalten eines DIRAC-Teilchens unter dem Einfluß äußerer Kräfte d.h. Potentiale. Diese können allerdings unterschiedliches Transformationsverhalten bezüglich Lorentz-Transformationen besitzen. Wir betrachten skalare Potentiale $U(x)$ mit

$$\beta m_0 c^2 \rightarrow \beta (m_0 c^2 + U(x))$$

und Vektorpotentiale V^μ , welche sich verhalten wie A^μ . Betrachten wir nur den skalaren Anteil ($V^j = 0$) dann bleibt lediglich $V^\mu = (V^0, \mathbf{0})$ und wir können in der DIRAC-Gleichung das elektrische Potential $\phi \leftrightarrow V_0$ ersetzen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \left[c \alpha \mathbf{p} + \beta (m_0 c^2 + U(x)) + V_0(x) \mathbb{1}_4 \right] \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (13.22)$$

Wir erhalten die

Statische DIRAC-Funktion mit externem Potential

$$E \mathbb{1}_4 \Psi(\mathbf{x}) = \left[c \alpha \mathbf{p} + \beta (m_0 c^2 + U(\mathbf{x})) + V_0(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}) \quad (13.23)$$

$V(x)$ und $U(x)$ haben wir als zeitunabhängig vorausgesetzt.

Im Folgenden wollen wir jetzt nur noch radialsymmetrische Potentiale

$$U(\mathbf{x}) \rightarrow U(r) \quad V_0(\mathbf{x}) \rightarrow V_0(r)$$

Dann können wir simultane Eigenzustände zu J^2 , J_z und P finden und die entsprechende Winkelabhängigkeit abspalten: wir haben dann nur noch die Radialgleichung zu lösen.³

Passen wir zunächst Spin-, Drehimpuls- und Paritätsoperator an die PAULI-Darstellung (A.37) von α und β an:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\sigma & 0 \\ 0 & \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\sigma \end{pmatrix} \quad P = \beta R = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & -R \end{pmatrix}$$

Da in dieser Darstellung \mathbf{J} die großen und kleinen Komponenten nicht mischen, können wir die nichtrelativistische Wellenfunktion benutzen

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}) \\ \xi(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

Abhängig vom Gesamtdrehimpuls wissen wir dann bereits, daß

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}(j, m_j, l) &= \sqrt{\frac{l+1/2+m_j}{2l+1}} Y_l^{m_j-1/2}(\Omega) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l+1/2-m_j}{2l+1}} Y_l^{m_j+1/2}(\Omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & j = l + \frac{1}{2} \\ \Psi^{(-)}(j, m_j, l) &= \sqrt{\frac{l+1/2-m_j}{2l+1}} Y_l^{m_j-1/2}(\Omega) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{l+1/2+m_j}{2l+1}} Y_l^{m_j+1/2}(\Omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & j = l - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Mit $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\sigma$ sind das Eigenfunktionen zu \mathbf{J}^2 , J_z und R mit

$$R\phi(j, m_j, l) = (-1)^l \phi(j, m, l)$$

Für ein gegebenes j haben $\phi^{(+)}$ und $\phi^{(-)}$ entgegengesetzte Parität. Da die großen und kleinen Komponenten verschiedene Paritäten haben lautet der Ansatz für die 4-komponentigen DIRAC-Spinoren

$$\begin{aligned} l_{\text{oben}} > l_{\text{unten}} &\rightarrow \Psi(j, m_j, (-)^l) = \begin{Bmatrix} f_1(r) \phi^{(+)}(j, m_j, j - \frac{1}{2}) \\ g_1(r) \phi^{(-)}(j, m_j, j + \frac{1}{2}) \end{Bmatrix} \\ l_{\text{oben}} < l_{\text{unten}} &\rightarrow \Psi(j, m_j, (-)^{j-\frac{1}{2}}) = \begin{Bmatrix} f_2(r) \phi^{(+)}(j, m_j, j + \frac{1}{2}) \\ g_2(r) \phi^{(-)}(j, m_j, j - \frac{1}{2}) \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

Die Parität ist durch die obere Komponente definiert; obere und untere Komponente unterscheiden sich durch ± 1 .

Wir schreiben jetzt die stationäre DIRAC-Gleichung in zweikomponentiger Form

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 + U(r) + V_0(r) & c\sigma \mathbf{p} \\ c\sigma \mathbf{p} & -(m_0 c^2 + U(r)) + V_0(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\text{oben}} \\ \Psi_{\text{unten}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{\text{oben}} \\ \Psi_{\text{unten}} \end{pmatrix} \quad (13.24)$$

oder explizit als gekoppeltes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} (m_0 c^2 + U + V_0) \Psi_{\text{oben}} + c\sigma \mathbf{p} \Psi_{\text{unten}} &= E \Psi_{\text{oben}} \\ c\sigma \mathbf{p} \Psi_{\text{oben}} - (m_0 c^2 + U + V_0) \Psi_{\text{unten}} &= E \Psi_{\text{unten}} \end{aligned}$$

³ Das Verfahren wird sich allerdings als ein wenig komplizierter als im nichtrelativistischen Fall herausstellen, wo wir es mit einer Wellenfunktion der Form

$$\Psi(\mathbf{x}) = f_l(r) Y_{lm}(\Omega)$$

zutun hatten.

Für die Lösung benötigen wir also Terme der Form

$$\sigma \mathbf{p} f(r) \phi(j, m_j, l)$$

Es gilt folgende Zerlegung:

$$\frac{\hbar}{i} \sigma \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \sigma \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{i} \sigma \mathbf{r} \frac{\sigma \mathbf{L}}{r^2}$$

Für den ersten Term⁴

$$\frac{\hbar \sigma \mathbf{r}}{i r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\hbar}{i} \frac{d f}{d r} \frac{\sigma \mathbf{r}}{r} \phi(j, m_j, l)$$

Für den zweiten Term formen wir zunächst das Produkt $(\sigma \mathbf{r})(\sigma \mathbf{L})$ um:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{L}] &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r^2} [\mathbf{r} \times [\mathbf{r} \times \nabla]] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\mathbf{r}}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \nabla) \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{r}^2}{r^2} \nabla \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{r}^2}{r^2} \nabla \right) \\ \frac{\hbar}{i} \sigma \nabla &= \frac{\hbar \sigma \mathbf{r}}{i r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sigma}{r^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{L}] \end{aligned}$$

Das darin auftretende Vektorprodukt läßt sich mittels (A.51) umformen, so daß wir schreiben können

$$(\sigma \mathbf{r})(\sigma \mathbf{L}) = \underbrace{\mathbf{r} \mathbf{L}}_{=0} + i \sigma [\mathbf{r} \times \mathbf{L}] = i \sigma [\mathbf{r} \times \mathbf{L}] \quad (13.25)$$

Mit

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{S} + \mathbf{L})^2 = \sigma^2 + \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \Leftrightarrow \mathbf{S} \mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \sigma^2 - \mathbf{L}^2)$$

$$\sigma \cdot \mathbf{L} \phi(j, m_j, l) = (\mathbf{J}^2 - \sigma^2 - \mathbf{L}^2) \phi(j, m_j, l) = \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \phi(j, m_j, l)$$

läßt sich schreiben

$$\begin{aligned} \sigma \mathbf{r} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\sigma \mathbf{L}}{r^2} \phi(j, m_j, l) &= -\frac{\hbar}{i} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \frac{\sigma \mathbf{r}}{r^2} \phi(j, m_j, l) \\ \sigma \mathbf{p} f(r) \phi(j, m_j, l) &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{d f(r)}{d r} - \frac{1}{r} f(r) \right] \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \frac{\sigma \mathbf{r}}{r^2} \phi(j, m_j, l) \end{aligned}$$

Außerdem gilt (zum Beweis siehe [9], S. 169.)

$$\frac{\sigma \mathbf{r}}{r} \phi(j, m_j, j - 1/2) = \phi(j, m_j, j + 1/2) \quad (1)$$

$$\frac{\sigma \mathbf{r}}{r} \phi(j, m_j, j + 1/2) = \phi(j, m_j, j - 1/2) \quad (2)$$

Mit

$$\frac{(\sigma \mathbf{r})^2}{r^2} = \frac{\mathbf{r}^2}{r^2} = 1$$

folgt dann weiter aus (1) die Gleichung (2). Da $\frac{\mathbf{r}}{r} \propto Y_{1m}$ kann man nun l um ± 1 ändern. Außerdem ändert aber auch \mathbf{r} die Parität, was einem Wechsel $l \pm 1$ entspricht.

⁴ Für den vollständigen Beweis – durch Zerlegung in Radial- und Winkelanteil – sei verwiesen auf [9], S. 168

Wir können schreiben

$$j(j+1) - l(l+1) - 3/4 = \begin{cases} j(j+1) - (j-1/2)(j+1/2) - 3/4 = j-1/2 & \text{für } l = j-1/2 \\ j(j+1) - (j+1/2)(j+3/2) - 3/4 = -j-3/2 & \text{für } l = j+1/2 \end{cases}$$

Damit ergibt sich endlich

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{r}} f(r) \phi(j, m_j, j-1/2) &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{df(r)}{dr} - \frac{j-1/2}{r} f(r) \right] \phi(j, m_j, j+1/2) \\ \sigma_{\mathbf{r}} f(r) \phi(j, m_j, j+1/2) &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{df(r)}{dr} + \frac{j+3/2}{r} f(r) \right] \phi(j, m_j, j-1/2) \end{aligned}$$

so daß sich die Winkelanteile aus dem gekoppelten Gleichungssystem von (13.24) herauskürzen lassen – es bleibt nur noch die radiale Anhängigkeit!

13.6.1 Beispiel: $j = 1/2$

Für $l = j - 1/2$ erhalten wir nun mit den vorangegangenen Rechnungen

$$\begin{aligned} (E - m_0 c^2 - U - V_0) f_1(r) \phi(j, m_j, j - 1/2) &= \sigma_{\mathbf{p}} g_1(r) \phi(j, m_j, j - 1/2) \\ &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{\partial g_1(r)}{\partial r} + \frac{j+3/2}{r} g_1(r) \right] \phi(j, m_j, j - 1/2) \end{aligned}$$

Da wir es durch das vorangegangene Umstellen geschafft haben, daß jetzt nur noch identische Winkelanteile auftreten, lassen sich diese aus der Gleichung abseparieren und wir erhalten – abhängig von der Parität – folgende Lösungen:

$$\begin{aligned} P = (-)^{j-1/2} \quad & [E - (m_0 c^2 + U) - V_0] f(r) = \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{\partial g(r)}{\partial r} + \frac{j+3/2}{r} g(r) \right] \\ & [E + (m_0 c^2 + U) - V_0] g(r) = \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{\partial f(r)}{\partial r} - \frac{j-1/2}{r} f(r) \right] \\ P = (-)^{j+1/2} \quad & [E - (m_0 c^2 + U) - V_0] f(r) = \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{\partial g(r)}{\partial r} - \frac{j-1/2}{r} f(r) \right] \\ & [E + (m_0 c^2 + U) - V_0] g(r) = \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{\partial f(r)}{\partial r} + \frac{j+3/2}{r} f(r) \right] \end{aligned}$$

Um die Radialgleichungen lassen sich zu einer allgemeinen Form zusammenzufassen, wenn wir eine neue Quantenzahl k anstelle der Parität P einführen:

$$k = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \begin{cases} + \quad l = j + \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad k = l & \Leftrightarrow \quad l = k \\ - \quad l = j - \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad k = -(l+1) & \Leftrightarrow \quad l = -k - 1 \end{cases} \quad (13.26)$$

Wir bekommen demnach die Substitutionen

$$\left. \begin{aligned} j + \frac{3}{2} &= -(k-1) \\ j - \frac{1}{2} &= -(k+1) \end{aligned} \right\} \quad P = (-)^{j-1/2}$$

$$\left. \begin{aligned} j - \frac{1}{2} &= k - 1 \\ j + \frac{3}{2} &= k + 1 \end{aligned} \right\} P = (-)^{j+1/2}$$

die auf folgendes Gleichungssystem führen:

$$\begin{aligned} [E - (m_0c^2 + U) - V_0] f_k(r) &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{d g_k(r)}{dr} - \frac{k-1}{r} g_k(r) \right] \\ [E + (m_0c^2 + U) - V_0] g_k(r) &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{d f_k(r)}{dr} + \frac{k+1}{r} f_k(r) \right] \end{aligned} \tag{13.27}$$

Mit dieser einheitlichen Schreibweise haben wir folgenden Zusammenhang zwischen j , k und P

j	k	l	P
$\frac{1}{2}$	+1	1	-
	-1	0	+
$\frac{3}{2}$	+2	2	+
	-2	1	-
$\frac{5}{2}$	+3	3	-
	-3	2	+

13.7 Beispiele

13.7.1 Wasserstoff-Atom

Das Potential ist in diesem Fall gegeben durch

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A} &= 0 \\ V(r) &= -\frac{Ze^2}{r} = V_0 \end{aligned} \right\} A^\mu = \left(-\frac{Ze^2}{r}, 0 \right)$$

Erinnerung:

Im nichtrelativistischen Grenzfall der SCHRÖDINGER-Gleichung war

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} & a_0 &= \frac{\hbar^2}{m_e c^2} \\ & & n &= n_r + l + 1 \end{aligned}$$

Radiale DIRAC-Gleichung für das Wasserstoff-Atom

Ausgehend von (13.27) gehen wir analog zu der Rechnung für den nichtrelativistischen Fall vor. Dafür machen wir zunächst die Substitutionen

$$f_k(r) = \frac{F_k(r)}{r} \quad g_k(r) = \frac{G_k(r)}{ir}$$

Damit erhalten wir aus (13.27)

$$\begin{aligned} \left[E - m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] \frac{F_k(r)}{r} &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{G_k(r)}{ir} \right) - \frac{k-1}{r} \frac{G_k(r)}{ir} \right] \\ \left[E - m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] \frac{F_k(r)}{r} &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{1}{ir} \frac{dG_k(r)}{dr} - i G_k(r) \frac{1}{ir^2} - \frac{k-1}{ir^2} G_k(r) \right] \\ \frac{dG_k(r)}{dr} - \frac{1}{r} [i+k-1] G_k(r) &= -\frac{1}{\hbar c} \left[E - m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] F_k(r) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \left[E + m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] \frac{G_k(r)}{ir} &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{d}{dr} \left(\frac{F_k(r)}{r} \right) + \frac{k+1}{r} \frac{F_k(r)}{r} \right] \\ \left[E + m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] \frac{G_k(r)}{ir} &= \frac{\hbar c}{i} \left[\frac{1}{r} \frac{dF_k(r)}{dr} - F_k(r) \frac{1}{r^2} + \frac{k+1}{r^2} F_k(r) \right] \\ \frac{dF_k(r)}{dr} + \frac{k}{r} F_k(r) &= \frac{1}{\hbar c} \left[E + m_e c^2 + \frac{Z e^2}{r} \right] G_k(r) \end{aligned}$$

Da wir von den Wellenfunktionen wieder Normierbarkeit erwarten untersuchen wir zunächst ihr asymptotisches Verhalten für $r \rightarrow \infty$. Dann bleibt

$$\begin{aligned} \frac{dG_k(r)}{dr} &= \frac{m_e c}{\hbar} \left[1 - \frac{E}{m_e c^2} \right] F_k(r) \\ \frac{dF_k(r)}{dr} &= \frac{m_e c}{\hbar} \left[1 + \frac{E}{m_e c^2} \right] G_k(r) \end{aligned}$$

Durch nochmaliges Ableiten nach r

$$\begin{aligned} \frac{d^2 G_k(r)}{dr^2} &= \frac{m_e c}{\hbar} \left[1 - \frac{E}{m_e c^2} \right] \frac{dF_k(r)}{dr} \\ \frac{d^2 F_k(r)}{dr^2} &= \frac{m_e c}{\hbar} \left[1 + \frac{E}{m_e c^2} \right] \frac{dG_k(r)}{dr} \end{aligned}$$

und anschließendes Einsetzen ist es nun möglich die beiden Gleichungen zu entkoppeln

$$\begin{aligned} \frac{d^2 G_k(r)}{dr^2} &= \underbrace{\frac{m_e^2 c^2}{\hbar^2} \left[1 - \frac{E^2}{m_e^2 c^4} \right]}_{\lambda} G_k(r) = \lambda G_k(r) \\ \frac{d^2 F_k(r)}{dr^2} &= \frac{m_e^2 c^2}{\hbar^2} \left[1 - \frac{E^2}{m_e^2 c^4} \right] F_k(r) = \lambda G_k(r) \end{aligned}$$

Für diesen bereits gut bekannten Typ von Differentialgleichungen machen wir den Ansatz

$$F_k(r) = a_1 e^{-\lambda r} \quad G_k(r) = a_2 e^{-\lambda r} \quad (13.28)$$

mit den Koeffizienten

$$a_1 = +\sqrt{1 + \frac{E}{m_e c^2}} a \quad a_2 = -\sqrt{1 - \frac{E}{m_e c^2}} a$$

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{E}{m_e c^2} \\ \lambda &= \frac{m_e c}{\hbar} \sqrt{1 - \frac{E^2}{m_e^2 c^4}} = \frac{m_e c}{\hbar} \sqrt{1 - \mathcal{E}^2} \\ \rho &= 2\lambda r \end{aligned}$$

haben wir dann

$$\begin{aligned} F_k(r) &= \sqrt{1 + \mathcal{E}} e^{-\lambda r} [u_k(r) + v_k(r)] \\ G_k(r) &= \sqrt{1 - \mathcal{E}} e^{-\lambda r} [-u_k(r) + v_k(r)] \end{aligned}$$

so daß bei Rückeinsetzen in die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d u_k}{d \rho} &= \left[\frac{Z \alpha \mathcal{E}}{\sqrt{1 - \mathcal{E}^2}} \frac{1}{\rho} \right] u_k + \left[-\frac{k}{\rho} + \frac{Z \alpha}{\sqrt{1 - \mathcal{E}^2}} \frac{1}{\rho} \right] v_k \\ \frac{d v_k}{d \rho} &= \left[-\frac{k}{\rho} - \frac{Z \alpha}{\sqrt{1 - \mathcal{E}^2}} \frac{1}{\rho} \right] u_k + \left[1 - \frac{Z \alpha \mathcal{E}}{\sqrt{1 - \mathcal{E}^2}} \frac{1}{\rho} \right] v_k \end{aligned}$$

An dieser Stelle machen wir – wie schon im nichtrelativistischen Fall – einen Reihenentwicklungsansatz für u_k und v_k

$$u_k = \rho^\gamma \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \quad v_k = \rho^\gamma \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu \rho^\nu \quad (13.29)$$

Rekursionsformel für a_ν und b_ν

13.7.2 Potentialtopf

□ SPEZIELLE LITERATUR

- [13.1] C.G. DARWIN, Proc. Roy. Soc. **A118** (1928), 654; *ibid.*, **A129** (1928), 621
- [13.2] W. GORDON, Z. f. Phys. **40** (1926), 117
- [13.3] W. GORDON, Z. f. Phys. **48** (1928), 11
- [13.4] O. KLEIN, Z. f. Phys. **37** (1926), 895

Übungsaufgaben

Übung 13.1 – Nichtrelativistischen Grenzfall der KLEIN-GORDON-Gleichung. Bestimmen Sie den nichtrelativistischen Grenzfall der KLEIN-GORDON-Gleichung unter Ankopplung eines elektromagnetischen Feldes.

Übung 13.2 – Das pionische Atom. Das Pion ist ein skalares Meson ($IJ^P = 10^-$) dessen relativistische Beschreibung durch die KLEIN-GORDON-Gleichung erfolgt. Ähnlich wie beim “normalen”, kann auch ein negativ geladenes Pion im elektromagnetischen Feld eines Z -fach positiv geladenen Kerns gebunden sein. Dieses gebundene System nennt man ein pionisches Atom.

- (a) Stellen Sie aus der KLEIN-GORDON-Gleichung mit elektromagnetischem Feld

$$A_0 = -\frac{Ze}{r}, \quad \mathbf{A} = 0$$

und stationärer Lösung $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$ eine zeitunabhängige Differentialgleichung für das pionische Atom auf. Dies entspricht der Situation eines unendlich schweren Kerns.

- (b) Leiten Sie mit Hilfe eines Potentialansatzes aus Radial- und Winkelanteil die Radialgleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} + \frac{2Z\alpha E}{\hbar cr} - \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right) R_l(r) = 0 \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

ab.

- (c) Vergleichen Sie diese Radialgleichung mit der Radialgleichung des Wasserstoffatoms und definieren Sie nun geeignete Variablen, um die Radialgleichung in folgende Form zu überführen:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\gamma}{\rho} - \frac{k(k+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right) R_l(\rho) = 0.$$

Welche Bedingung muß dabei die Energie E erfüllen, um ein gebundenes System zu erhalten?

- (d) Berechnen Sie nun die Energieniveaus des pionischen Atoms. Gehen Sie dabei analog zur Lösungsmethode beim Wasserstoffatom vor, um aus der Abbruchbedingung des Potenzreihenansatzes die Eigenwerte zu bestimmen.

Welche Bedingung muß an die Kernladung Z gestellt werden, um reelle Eigenwerte zu erhalten?

Entwickeln Sie den Ausdruck für die Energieeigenwerte bis zur vierten Ordnung in $Z\alpha$ und zeigen Sie daß gilt:

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right],$$

wobei n die Hauptquantenzahl des pionischen Atoms ist.

Vergleichen Sie die Energieniveaus des pionischen Atoms mit dem Termschema des Wasserstoffatoms und diskutieren Sie die Unterschiede.

Übung 13.3 – Die Ladungskonjugation.

- (a) Bestimmen Sie den Operator der Ladungskonjugation der die Lösung Ψ der DIRAC-Gleichung für eine negative Ladung $-e$,

$$\left[\gamma_\mu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{e}{c} A^\mu \right) - m c \mathbb{1}_4 \right] \Psi(x) = 0$$

in die Lösung Ψ_C für eine positive Ladung $+e$ transformiert.

- (b) Ψ beschreibe einen stationären Zustand positiver Energie:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad , \quad E > 0$$

Zeigen Sie, daß dann Ψ_C einen stationären Zustand mit negativer Energie beschreibt.

- (c) Berechnen Sie die Beziehung zwischen den adjungierten Lösungen $\bar{\Psi}$ und $\bar{\Psi}_C$.

Übung 13.4 – Bewegung in einem elektrostatischen Feld. Zeigen Sie, daß die Bewegung eines geladenen und spinlosen relativistischen Teilchens in einem elektrostatischen Feld durch die Gleichung

$$\left[\square + \kappa^2 - \frac{e^2 \Phi^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{2ie\Phi}{\hbar^2 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{x}, t) = 0$$

beschrieben wird. Bestimmen Sie die Gleichung für stationäre Zustände. Geben Sie die Ladungsdichte an.

Übung 13.5 – Energieniveaus in einem konstanten magnetischen Feld. Die DIRAC-Gleichung mit Ankopplung eines elektromagnetischen Feldes lautet:

$$\left[\gamma_\mu \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{e}{c} A^\mu \right) - m c \mathbb{1}_4 \right] \Psi(x) = 0$$

Berechnen Sie die Energieniveaus eines Elektrons in einem konstanten magnetischen Feld \mathbf{H} und die dazugehörige Wellenfunktion.

Übung 13.6 – Kommutatorrelationen für ein freies DIRAC-Elektron. Berechnen Sie für ein freies DIRAC-Elektron die Kommutatoren

$$[\mathbf{S}, H_D] \quad , \quad [\mathbf{L}, H_D] \quad \text{und} \quad [\mathbf{J}, H_D]$$

wobei \mathbf{S} der DIRAC-Spinoperator

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}$$

und \mathbf{L} der Bahndrehimpulsoperator sind und $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ der Gesamtdrehimpulsoperator.

Übung 13.7 – Die Γ -Matrizen. Mithilfe der γ -Matrizen lassen sich folgende 16 Matrizen konstruieren:

$$\mathbb{1} \quad , \quad \gamma^\mu \quad , \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \quad , \quad \gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad , \quad \gamma_5\gamma^\mu$$

Zeigen Sie, daß für diese Matrizen (sie seien mit Γ_i ($i = 1, \dots, 16$) bezeichnet) folgende Relationen gelten:

$$\begin{aligned} \Gamma_i^2 &= \pm \mathbb{1} \\ \Gamma_i \Gamma_j &= \lambda \Gamma_k \quad , \quad \text{wobei } \lambda = \pm 1 \text{ oder } \pm i. \end{aligned}$$

Anhang

A

Ergänzungen zur Vorlesung

A.1 Alternativer Einstieg in die relativistische Quantenmechanik

Die hier wiedergegebene Einführung entspricht den beiden Vorlesungen durch Prof. H.R. PETRY in Vertretung für die Dozenten MEISSNER und SPETH. Die von ihm präsentierte Einführung hält eng an die Darstellung seiner eigenen Vorlesung zur Quantenmechanik [13].

A.1.1 Transformationen und Invarianz-Gruppen

Im kräftefreien Fall ist schreibt sich die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \quad (\text{A.1})$$

wobei wir den Erwartungswert $|\Psi(x, t)|^2$ als die Wahrscheinlichkeit interpretieren, das Teilchen zur Zeit t am Ort x vorzufinden.

GALILEI-Invarianz

Wie wir ja wissen, sind die Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik invariant unter den GALILEI-Transformationen. Daher erwarten wir, daß auch die nichtrelativistische SCHRÖDINGER-Gleichung – invariant unter einer solchen Transformation bleibt, da diese ja die quantenmechanische Bewegungsgleichung darstellt.

Aus der nichtrelativistischen Punktmechanik kenne wir bereits die

Galilei-Transformation

Eine Abbildung $\phi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit

$$\phi_t(\mathbf{x}) = \mathcal{O}\mathbf{x} + \mathbf{a} + \mathbf{b}t \quad (\text{A.2})$$

heißt GALILEI-Transformation. Sie setzt sich zusammen aus einer Drehung \mathcal{O} , einer Translation \mathbf{a} und einem Boost \mathbf{b} .

Machen wir dies als Ansatz für unsere Wellenfunktion

$$\Psi \rightarrow \Psi'(x, t) = \Psi(Ax + b + vt) \quad (\text{A.3})$$

und setzen dies in (A.1) ein, so finden wir

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(x, t) &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi(Ax + b + vt) + \underbrace{\langle v, \nabla \rangle \Psi(Ax + b + vt)}_{(I)} \right) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi'(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(Ax + b + vt) \end{aligned}$$

Durch den zusätzlich auftretenden Term (I) sehen wir also, daß dieser Ansatz die Forderung der GALILEI-Invarianz nicht erfüllt.

Als Ausweg nutzen wir die Tatsache aus, daß die Erwartungswerte einer Wellenfunktion unverändert unter dem Hinzufügen eines zusätzlichen Phasenfaktors bleiben. Setzen wir, ohne Verletzung der Allgemeinheit, $A = 1$ und $b = 0$ so ist

$$\Psi'(x, t) = \Psi(x + vt) e^{-i\lambda(x)} \quad (\text{A.4})$$

mit dem Phasenfaktor

$$\lambda(x) = \frac{\frac{m}{2}v^2t - \langle v, x \rangle m}{\hbar} \quad (\text{A.5})$$

Durch Einsetzen in (A.1) zeigt sich dann

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(x, t) &= e^{-i\lambda(x)} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x + vt, t) + i\langle v, \nabla \rangle \Psi(x + vt, t) + \frac{m}{2}v^2 \Psi(x + vt, t) \right) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi'(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - i\frac{mv}{\hbar} \right)^2 \Psi(x + vt, t) e^{-i\lambda(x)} \end{aligned}$$

Durch Ausmultiplizieren und Gleichsetzen erhalten wir dann

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi'(x, t)$$

Wir folgern daraus:

GALILEI-Invarianz der SCHRÖDINGER-Gleichung

Die Wellenfunktion $\Psi'(x, t)$ definiert durch

$$\Psi'(x, t) = \Psi(Ax + b + vt) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2}v^2t - m\langle v, x \rangle \right) \right)$$

erfüllt bei einem Boost $x \rightarrow x + vt$ wieder die SCHRÖDINGER-Gleichung. Die Phase ist absolut notwendig. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ ist

$$\rho(\Psi')(x, t) = |\Psi'(x, t)|^2 = |\Psi(x + vt)|^2$$

MINKOWSKI-Raum

In der relativistischen Physik wird die GALILEI-Gruppe ersetzt durch die POINCARÉ-Gruppe.

Dafür führen wir mit $x^0 = ct$ zunächst eine neue Zeitkoordinate so ein, daß wir dimensionsmäßig wieder eine Länge erhalten: wir erhalten damit Vektoren $(x^0, \mathbf{x}) \rightarrow \underline{x} \in \mathbb{R}^4$, die sich aus den Koordinaten x^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$, zusammensetzen.¹

Durch die Einführung eines Skalarproduktes für zwei Vektoren $\underline{h}, \underline{k} \in \mathbb{R}^4$ (Koordinaten h^μ, k^μ)

$$\begin{aligned}\eta(\underline{h}, \underline{k}) &= \eta_{\mu\nu} h^\mu k^\nu \\ \eta_{\mu\nu} &= \epsilon_\mu \delta_{\mu\nu} \quad \epsilon^0 = 1, \epsilon^i = -1\end{aligned}\tag{A.6}$$

wird der \mathbb{R}^4 zum MINKOWSKI-Raum.

LORENTZ-Gruppe**LORENTZ-Transformation**

Eine lineare Abbildung $\Lambda : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$ welche das Skalarprodukt im MINKOWSKI-Raum invariant läßt

$$\eta(\Lambda \underline{h}, \Lambda \underline{k}) = \eta(\underline{h}, \underline{k})$$

heißt LORENTZ-Transformation. In Komponentenschreibweise gilt

$$(\Lambda \underline{x})^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu$$

Insbesondere bleibt unter einer solchen Transformation die Metrik erhalten:

$$\eta_{\mu\nu} = \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta \eta_{\alpha\beta}\tag{A.7}$$

Die Gesamtheit der LORENTZtransformationen bilden wieder eine Gruppe: die LORENTZ-Gruppe. Diese zerfällt in vier Komponenten

$$\Lambda = P_i \Lambda_0$$

$$P_i : \begin{cases} \text{Zeitspiegelung} \\ \text{Raumspiegelung} \\ \text{Raum - Zeitspiegelung} \\ \text{Identität} \end{cases}$$

$$\Lambda_0 : \text{eigentliche orthochrone Lorentztransformation}$$

Die Menge der eigentlichen orthochronen LORENTZtransformationen bildet wieder eine Gruppe L_+ .

Eine spezielle LORENTZtransformation $\Lambda(\alpha)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}x^0 \rightarrow x'^0 &= \cosh \alpha x^0 + \sinh \alpha x^1 \\ x^1 \rightarrow x'^1 &= \sinh \alpha x^1 + \cosh \alpha x^0 \\ x^2 &= x^2 \\ x^3 &= x^3\end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \cosh \alpha & \sinh \alpha & 0 & 0 \\ \sinh \alpha & \cosh \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

¹ Zur Unterscheidung von Vektoren \mathbf{v} im \mathbb{R}^3 werden die Vierervektoren im MINKOWSKI-Raum mit einem Unterstrich \underline{u} gekennzeichnet. LORENTZtransformationen werden gemäß der in den PETRY-Skripten eingehaltenen Notation mit Λ gekennzeichnet.

Daraus ergibt sich die Eigenschaft

$$\Lambda \in L_+ \quad \Rightarrow \quad \Lambda = \mathcal{O}_1 \Lambda(\alpha) \mathcal{O}_2$$

wobei $\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2$ gewöhnliche Drehungen sind.

Zusätzlich zu den LORENTZtransformationen treten in der relativistischen Physik noch die allgemeinen Raum-Zeit-Translationen hinzu:

POINCARÉ-Transformation

Eine Abbildung $P(\Lambda, \underline{a})$

$$P(\underline{x}) = \Lambda \underline{x} + \underline{a}$$

mit einer LORENTZtransformation Λ und einer Raum-Zeit-Verschiebung \underline{a} heißt POINCARÉ-Transformation. Die Menge der Paare $P(\Lambda, \underline{x})$ bilden die POINCARÉ-Gruppe.

Klassische Elektrodynamik

Die Komponenten E^i, B^i des elektrischen bzw. magnetischen Feldes lassen sich zusammenfassen in dem elektromagnetischen Feldstärketensor, derart daß

$$F_{0i} = E^i \quad F_{il} = \sum_k \epsilon_{ilk} B^k \quad (\text{A.8})$$

Die Komponenten $F_{\mu\nu}$ lassen sich aber auch direkt aus den Potentialen A^μ gewinnen:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \quad (\text{A.9})$$

Die $F_{\mu\nu}$ bilden die Komponenten eines schiefen kovarianten Tensors 2^{ter} Stufe: $F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$.

Mit dem Feldstärketensor lassen sich die Maxwellgleichungen jetzt schreiben als

inhom. Gleichungen:

$$\eta^{\mu\gamma} \eta^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} F_{\beta\gamma}(\underline{x}) = j^\mu(\underline{x}) \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \end{array} \right\}$$

hom. Gleichungen:

$$(dF)_{\mu\nu\kappa} = 0 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \end{array} \right\}$$

wobei

$$\begin{aligned} \underline{j} &= (j^0 = c\rho, \mathbf{j}) \quad \text{Viererstromdichte} \\ (dF)_{\mu\nu\kappa} &= \frac{\partial}{\partial x^\mu} F^{\nu\kappa} - \frac{\partial}{\partial x^\nu} F^{\mu\kappa} + \frac{\partial}{\partial x^\kappa} F^{\mu\nu} \end{aligned}$$

Die Teilchenbahnen sind Mengen von Punkten $\underline{x}(\tau) \in \mathbb{R}^4$ mit der bevorzugten Parametrisierung durch die Bogenlänge mit $\eta(\dot{\underline{x}}, \dot{\underline{x}}) = 1$.

Es gilt: die MAXWELLGleichungen und Bewegungsgleichungen für Teilchen sind invariant unter der Transformation

$$F_{\mu\nu} \rightarrow (p^*F)_{\mu\nu}(\underline{x}) = F_{\alpha\beta}(\Lambda\underline{x} + \underline{a}) \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta \quad (\text{A.10})$$

$$\underline{x}(\tau) \rightarrow p_*(\underline{x}(\tau)) = p^{-1}(\underline{x}(\tau)) \quad (\text{A.11})$$

Für zwei POINCARÉ-Transformationen gilt dabei

$$p_1^* \circ p_2^* = (p_1 \cdot p_2)^* \quad (\text{A.12})$$

Durch die Forderung der Poincaré-Invarianz wird nun eine Redefinition von Energie und Impuls notwendig, die neuen Größen sind

$$cp^0 = E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}}} \quad \text{und} \quad \mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}}} \quad (\text{A.13})$$

und lassen sich daher wieder zu einem Vierervektor $\underline{p} = (\frac{E}{c}, \mathbf{p})$ zusammenfassen. Für das Skalarprodukt ist gerade $\eta(\underline{p}, \underline{p}) = mc^2$.

Durch Umschreiben obiger Ausdrücke für Energie und Impuls bekommen wir

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = c \sqrt{p^2 + m^2 c^2} \quad (\text{A.14})$$

was allerdings nicht mehr mit der Beziehung

$$E = \frac{1}{2m} p^2$$

aus der NEWTON'schen Mechanik übereinstimmt. Betrachten wir allerdings den nichtrelativistischen Grenzfall $\frac{|\mathbf{p}|}{mc} \ll 1$, so ist

$$\frac{E}{c} = mc \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} = mc + \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m^2 c^2} + \dots \right) = mc + \frac{1}{2mc} p^2$$

und damit

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (\text{A.15})$$

A.1.2 Relativistische SCHRÖDINGER-Gleichung

Für die allgemeine Lösung von (A.1) setzen wir folgende Elementarwelle mit Wellenvektor \mathbf{k} und Frequenz ω an:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \Psi(k) \exp(-i\omega(k)t + i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle) \quad (\text{A.16})$$

Damit Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung vorliegen, muß gelten

$$\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Leftrightarrow \quad \omega(k) = \hbar \frac{k^2}{2m}. \quad (\text{A.17})$$

Weiterhin

$$\left. \begin{array}{l} E = \hbar\omega \\ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{array} \right\} \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m}$$

Im Orts- und Impulsraum gilt das Korrespondenzprinzip

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \simeq E \quad - \quad i\hbar \nabla \simeq \mathbf{p}$$

Da die Quantisierungsbedingungen invariant unter LORENTZtransformationen sein sollen, bleibt lediglich eine Änderung des Dispersionsgesetzes für ω . In Anlehnung an die klassische Physik schreiben wir daher

$$\begin{aligned} \frac{E}{c} &= \sqrt{p^2 + m^2 c^2} = \sqrt{\hbar^2 k^2 + m^2 c^2} = \hbar \sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}} \\ \Rightarrow \frac{E}{c} &= \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar \sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}} \\ \Leftrightarrow \omega &= c \sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung gibt dann

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \Psi(k) \exp \left(-i \sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}} ct + i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle \right)$$

was sich mit dem Vierervektor

$$\underline{k} = (k^0, \mathbf{k}) \quad k^0 = \sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}}$$

vereinfachen läßt zu

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \Psi(k) \exp(-i\eta(\underline{k}, \underline{x})) \quad (\text{A.18})$$

Genügt dieses $\Psi(x, t)$ jetzt aber einer vernünftigen Wellengleichung? – Ja, aber die Gleichung enthält jetzt zusätzlich eine zeitliche Ableitung zweiter Ordnung:

$$\square \Psi(\underline{x}) = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi(\underline{x}) \quad (\text{A.19})$$

Der darin auftretende Differentialoperator heißt

D'ALEMBERT-Operator

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \eta^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \quad (\text{A.20})$$

Das Korrespondenzprinzip läßt sich nun schreiben

$$p^\mu = \hbar k^\mu \simeq i\hbar \eta^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \quad \text{mit den Komponenten} \quad p^0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^0} = i\hbar \frac{\partial}{c \partial t}$$

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

Transformationsverhalten von Tensorfeldern

Für einen Vektor erfolgt das Verschieben des Indizes durch

$$p^\mu = \eta^{\mu\nu} p_\nu$$

Ein Tensorfeld T mit den Komponenten $T_{\nu_1 \dots \nu_l}^{\mu_1 \dots \mu_k}$ verhält sich dann unter einer POINCARÉ-Transformation

$$p(\underline{x}) = \Lambda \underline{x} + \underline{a}$$

gemäß

$$(p^* T)_{\nu_1 \dots \nu_l}^{\mu_1 \dots \mu_k}(\underline{x}) = T_{\nu'_1 \dots \nu'_l}^{\mu'_1 \dots \mu'_k}(\Lambda \underline{x} + \underline{a}) \Lambda_{\nu'_1}^{\nu_1} \dots \Lambda_{\nu'_l}^{\nu_l} (\Lambda^{-1})_{\mu'_1}^{\mu_1} \dots (\Lambda^{-1})_{\mu'_k}^{\mu_k} \quad (\text{A.21})$$

Für den Feldstärketensor des EM-Feldes gilt dann also

$$p^* F_{\mu\nu}(\underline{x}) = F_{\mu'\nu'}(\Lambda \underline{x} + \underline{a}) \Lambda_{\mu'}^{\mu} \Lambda_{\nu'}^{\nu} \quad (\text{A.22})$$

$$(p^* F)^{\mu\nu}(\underline{x}) = F^{\mu'\nu'}(\Lambda \underline{x} + \underline{a}) (\Lambda^{-1})_{\mu'}^{\mu} (\Lambda^{-1})_{\nu'}^{\nu} \quad (\text{A.23})$$

wobei

$$F^{\mu'\nu'}(\underline{x}) = \eta^{\mu\mu'} \eta^{\nu\nu'} F_{\mu\nu}(\underline{x})$$

Angewandt auf den Phasenfaktor läßt sich das Skalarprodukt dann auch schreiben als

$$\eta(\underline{k}, \underline{x}) = k_\mu x^\mu = k^\mu x_\mu$$

Wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation

Frage: Ist jetzt $\Psi^*(\underline{x}) \Psi(\underline{x})$ die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen am Ort x zur Zeit t zu finden?

Angenommen, dies sei richtig, dann ist

$$\int d^3x \Psi^*(\underline{x}) \Psi(\underline{x}) \Big|_{x_0=ct}$$

die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu einer festen Zeit im ganzen Raum zu finden – dies sollte erwartungsgemäß 1 sein.

Die POINCARÉ-transformierte Wellenfunktion ist

$$(p^* \Psi)(\underline{x}) = \Psi(\Lambda \underline{x} + \underline{a})$$

und sollte wieder eine Lösung der Wellengleichung sein. Transformationen $(\Lambda, \underline{a} = 0)$ dürfen daran nichts ändern.

Frage: Ist die so gewählte Wahrscheinlichkeit unabhängig von der Wahl des Beobachters, d.h. invariant unter Poincaré-Transformationen? – Dies muß mit **nein** beantwortet werden.

Die korrekte Definition ist stattdessen:

POINCARÉ-invariante Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^* \right) \Psi \right] = c\rho = j^0 \quad (\text{A.24})$$

$$\rho = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

$$j = \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte}$$

Wir wollen nun diese Festsetzung motivieren: Für den kovarianten Tensor erster Stufe

$$j_\mu(\underline{x}) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^* \right) \Psi \right] \quad (\text{A.25})$$

gilt nach Konstruktion

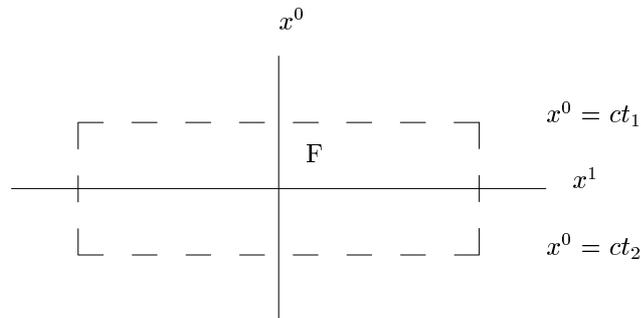
$$p^* j_\mu(\Psi) = j_\mu(p^* \Psi)$$

mit der Divergenz

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \square \Psi - (\square \Psi^*) \Psi]$$

Behauptung 1: Falls Ψ im räumlich Unendlichen genügend schnell verschwindet, so ist das Integral

$$\int d^3x j^0(\underline{x})|_{x^0=ct_1} = \int d^3x j^0(\underline{x})|_{x^0=ct_2}$$



Für eine geschlossene Fläche F im \mathbb{R}^4 gilt der Gauß'sche Satz

$$\int_F j = \int_{\partial F} \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu \right) d^4x$$

Auswerten des Integrals

$$\int_F j = \int d^3x j^0(\underline{x})|_{x^0=ct_1} - \int d^3x j^0(\underline{x})|_{x^0=ct_2} = 0$$

Das Integral über j^0 ist also unabhängig von der Zeit.

Behauptung 2: Die Aussage von Behauptung 1 gilt auch unter Poincare-Transformationen.

Setze $F_2 = p(F_1)$ mit einer Fläche $F = \{\underline{x}, x^0 = ct_1\}$ Ergänze nun wieder F_1, F_2 durch Randflächen im räumlich Unendlichen, so daß eine geschlossene Fläche entsteht. Dann ergibt sich mit dem Gauß'schen Satz

$$\int_F j = \int_{\partial F} \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu \right) d^4x = 0$$

daß

$$\int j^0(\Psi)(\underline{x})|_{x^0=ct_1} = \int_{p(F_1)} j = \int_{F_1} p^{*-1} j = \int_{F_1} j(p^*\Psi) = \int d^3x j^0(p^*\Psi)(\underline{x})|_{x^0=ct_1}$$

Somit ist also

$$\int d^3x j^0(\Psi)(\underline{x})_{x^0=ct_1} = \int d^3x j^0(p^*\Psi)(\underline{x})_{x^0=ct_1}$$

invariant unter Poincare-Transformationen.

Weiterhin wichtig für (A.24) ist, ob die sich daraus ergebende Wahrscheinlichkeit zu jedem Zeitpunkt positiv ist:

$$\begin{aligned} \int d^3x j &= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3x \left[\Psi^* \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi - \left(\frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^* \right) \Psi \right] \\ &\stackrel{\text{(FT)}}{=} \frac{\hbar}{m} \int d^3k \Psi^*(k) \Psi(k) \sqrt{k^2 + \chi^2} \quad , \chi = \frac{mc}{\hbar} \\ &> 0 \end{aligned}$$

Aber: Die Lösungsgesamtheit der Wellenfunktionen ist nicht gleich der Gesamtheit der Lösungen der Wellengleichung! Wir nehmen daher eine weitere Veränderung vor

$$\Psi' = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \exp \left[i\sqrt{k^2 + \chi^2} x^0 + i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle \right] \Psi'(k) \quad (\text{A.26})$$

Bilden wir daraus jetzt wieder

$$\int d^3x j^0(\Psi') = -\frac{\hbar}{m} \int d^3k \Psi^*(k) \Psi(k) \sqrt{k^2 + \chi^2}$$

bedeutet das aber, daß auch negative Wahrscheinlichkeiten auftreten können!

Für ein freies Teilchen sind aber zunächst nur Lösungen mit positiver Amplitude

$$\omega(k) = c\sqrt{k^2 + \chi^2}$$

d.h. positiver Energie, zugelassen.

Um mögliche Veränderung zu untersuchen, soll sich das Teilchen jetzt in einem elektromagnetischen Feld bewegen.

Durch Ableitung des Feldstärketensors aus den Potentialen

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial}{\partial x^\mu} A_\nu - \frac{\partial}{\partial x^\nu} A_\mu \quad (\text{A.27})$$

lassen sich die Grundgleichungen umschreiben

$$\begin{aligned} p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} &\rightarrow p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{q}{c} A_\mu \\ \frac{\partial}{\partial x^{\mu\nu}} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{iq}{\hbar c} A_\mu = \nabla_\mu \end{aligned}$$

Eingesetzt in die Wellengleichung bedeutet das

$$\eta^{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{iq}{\hbar c} A_\mu \right) \left(\frac{\partial}{\partial x^\nu} + \frac{iq}{\hbar c} A_\nu \right) \Psi = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi \quad (\text{A.28})$$

Die Wesentliche Eigenschaft dieser Gleichung ist ihre Eichinvarianz: Die Eichtransformation

$$A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \frac{\partial \lambda}{\partial x^\mu} \quad (\text{A.29})$$

zusammen mit der Phasentransformation

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \Psi \exp \left(-\frac{iq}{\hbar c} \lambda \right) \quad (\text{A.30})$$

lassen die Wellengleichung invariant!

Es gibt aber noch eine Neuheit: Sei nämlich Ψ eine Lösung der Wellengleichung im Feld mit positiver Energie, dann ist das komplex konjugierte Ψ^* eine Lösung mit negativer Energie. Diese komplex konjugierte Lösung genügt aber wieder der Wellengleichung, wenn wir die zusätzliche Ersetzung $q \rightarrow -q$ vornehmen. Allerdings kann dies dann nicht mehr das Teilchen sein, von dem wir ursprünglich ausgegangen sind.

Interpretation der negativen Energiezustände

Welche Schwierigkeiten die Interpretation dieses Ergebnisses machte, zeigt zum Beispiel der Aufsatz "A Theory of Electrons and Protons" von P.A.M. DIRAC:

"This difficulty is connected with the fact that the wave equation, which is of the form

$$\left[\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 + \rho_1 \left(\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \rho_3 mc \right] \Psi = 0$$

has, in addition to the wanted solutions for which the kinetic energy of the electron is positive, an equal number of unwanted solutions with negative kinetic energy for the electron, which appear to have no physical meaning."

Seine Lösung: "We are therefore led to the assumption that the holes in the distribution of negative-energy electrons are protons."

Mehr zu Interpretationsversuchen der negativen Energiezustände findet sich an folgenden Stellen:

- P.A.M. DIRAC, Proc. R. Soc. (London) **A126** (1930), 360
- E.C.G. STUECKELBERG, Helv. Phys. Acta **14** (1941), 588
- R.P. FEYNMAN, Phys. Rev. **74** (1948), 939

A.2 α, β -Formalismus

Nicht nur die zuletzt vorgenommene Interpretation für die negativen Wahrscheinlichkeiten stellen eine Neuerung gegenüber unseren ersten Ansätzen für eine SCHRÖDINGER-Gleichung dar. Aufgrund unserer Forderung nach Eichinvarianz haben wir auch eine Gleichung erhalten, die jetzt eine Ableitung zweiter Ordnung in der Zeit enthält.

Wollen wir aber versuchen eine lineare Zeitabhängigkeit herzustellen, so ist klar, daß dann sowohl Zeit- als auch Ortsableitung nur noch linear auftreten dürfen, da dieser im Falle der Kovarianz ja symmetrisch auftreten.

Ausgehend vom relativistischen Energiesatz

$$P_\mu P^\mu = p_0 p^0 - p_i p^i = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m_0^2 c^2 \quad \Leftrightarrow \quad E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4 = \hat{H}^2 \quad (\text{A.31})$$

mit der kanonischen Quantisierung

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (\text{A.32})$$

ergibt sich eine Gleichung der Form

$$E^2 \Psi = \hat{H}^2 \Psi$$

Um daraus aber wieder eine Gleichung zu machen, welche linear sowohl in \hat{H} als auch in E ist, machen wir folgenden

Ansatz für die DIRAC-Gleichung

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - C \alpha \mathbf{p} + \beta m_0 c^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{A.33})$$

mit dem HAMILTONoperator

$$\hat{H} = C \alpha \mathbf{p} - \beta m c^2$$

A.2.1 Bestimmung von α und β

Durch Einsetzen des neuen HAMILTONoperators in den relativistischen Energiesatz bekommen wir

$$E^2 - H^2 = E^2 - c^2 \left[\sum_{k=1}^3 (\alpha_k)^2 p_k^2 - \sum_{k < l} (\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k) p_k p_l - \beta^2 m_0^2 c^4 - mc \sum_k (\alpha_k \beta + \beta \alpha_k) p_k \right]$$

Vergleich mit (A.31) liefert dann also die Bedingungen

$$\alpha^2 = 1 \Leftrightarrow \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 0 \quad k \neq l \quad (\text{A.34})$$

$$\beta^2 = 1 \Leftrightarrow \alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0 \quad (\text{A.35})$$

was sich aber auch durch Kommutatorrelationen ausdrücken läßt:

$$\{\alpha_k, \alpha_l\} = 0 \quad \{\alpha_k, \beta\} = 0 \quad (\text{A.36})$$

A.2.2 Darstellung von α und β

Mit Hilfe der PAULI'schen Spin-Matrizen ist

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

Diese 4×4 -Matrizen sind die kleinstmöglichen Matrizen, welche die Gleichungen (A.34) und (A.35) erfüllen: Einsetzen in (A.34) liefert nämlich

$$\begin{aligned} \{\alpha_k, \alpha_l\} &= \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_k \sigma_l & 0 \\ 0 & \sigma_k \sigma_l \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_l \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_l \sigma_k \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \sigma_l + \sigma_l \sigma_k \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \{\sigma_k, \sigma_l\} & 0 \\ 0 & \{\sigma_k, \sigma_l\} \end{pmatrix} \quad \curvearrowright \quad (9.22) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Analoges gilt für (A.35)

$$\begin{aligned} \{\alpha_k, \beta\} &= \alpha_k \beta + \beta \alpha_k \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Die DIRAC-Gleichung hat damit die Gestalt:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2 \right] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{A.38})$$

Setzen wir jetzt noch die Vorschrift (A.32) ein, so erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[-i\hbar c \left(\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \beta m_0 c^2 \right] \Psi \quad \curvearrowright \quad \kappa = \frac{m_0 c}{\hbar}$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = - \left(\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi - i\beta \kappa \Psi$$

Ebenso können wir die adjungierte Form dieser Gleichung hinschreiben

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger = - \frac{\partial}{\partial x_k} \Psi^\dagger \alpha_k^\dagger + i\kappa \beta \Psi^\dagger$$

wobei die Wellenfunktion gegeben ist durch

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \Psi^\dagger = (\Psi_1^\dagger, \Psi_2^\dagger, \Psi_3^\dagger, \Psi_4^\dagger)$$

A.2.3 Kontinuitätsgleichung

Wir können jetzt die Wahrscheinlichkeitsdichte schreiben als

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi = \sum_{\sigma=1}^4 \Psi_\sigma^* \Psi_\sigma \quad (\text{A.39})$$

Auf diese Weise ist jetzt auch sichergestellt, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte immer positiv ist. Entsprechend ist für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho &= \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \Psi \\ &= -c \left[\Psi^\dagger \left(\alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + i\kappa \beta \Psi \right) + \left(\frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x_k} \alpha_k^\dagger - i\kappa \Psi^\dagger \beta^\dagger \right) \Psi \right] \\ &= -c \left[\Psi^\dagger \alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x_k} \alpha_k^\dagger \Psi + i\kappa \underbrace{(\Psi^\dagger \beta \Psi - \Psi^\dagger \beta^\dagger \Psi)}_{=0} \right] \\ &\quad \alpha, \beta \text{ sind hermitesch: } \alpha_k^\dagger = \alpha \quad \beta^\dagger = \beta \\ &= -c (\nabla \Psi^\dagger \alpha \Psi) \\ &= -\text{div } \mathbf{j} \end{aligned}$$

so daß wir also beide Größen zur Kontinuitätsgleichung zusammenfassen können

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div } \mathbf{j} = 0 \quad (\text{A.40})$$

A.2.4 Kovariante Form

Um unsere bisherigen Ergebnisse in einheitlicher, kovarianter Form zu formulieren, definieren wir zunächst die Größen

$$\gamma^\mu = (\gamma, \gamma) \quad \text{mit} \quad \gamma^0 = \beta, \quad \gamma^k = \beta \alpha_k \quad (\text{A.41})$$

Für die einzelnen Komponenten gilt

$$\begin{aligned} \gamma^0 \text{ ist hermitesch : } (\gamma^0)^\dagger &= \beta^\dagger = \beta = \gamma^0 \\ \gamma^k \text{ sind antihermitesch : } \gamma^k &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \\ (\gamma^k)^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k^\dagger \\ \sigma_k^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k^\dagger \\ \sigma_k^\dagger & 0 \end{pmatrix} = -\gamma^k \end{aligned}$$

Die so gewählten γ hängen in folgender Weise mit der Metrik zusammen:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{A.42})$$

$$(i) \quad \mu = \nu = 0 \quad \begin{aligned} \gamma^0 \gamma^0 &= \beta^2 = 1 = g^{00} \\ 2\gamma^0 \gamma^0 &= 2 = 2g^{00} \end{aligned}$$

$$(ii) \quad k \neq l \quad \begin{aligned} \beta\alpha_k\alpha_l\beta + \beta\alpha_l\alpha_k\beta &= 0 \\ \alpha_k\beta + \beta\alpha_k &= 0 \\ \Leftrightarrow \alpha_k\beta &= -\beta\alpha_k \\ \Rightarrow \gamma^k\gamma^l + \gamma^l\gamma^k &= 0 \end{aligned}$$

$$(iii) \quad k = l \quad \begin{aligned} \beta\alpha_k\alpha_l\beta + \beta\alpha_l\alpha_k\beta &= 0 \\ \Leftrightarrow -\gamma^k\gamma^l - \gamma^l\gamma^k &= -2 \end{aligned}$$

Demnach erfüllt γ die Eigenschaften einer CLIFFORD-Algebra.

Formen wir nun also um:

$$\begin{aligned} \left[i\hbar\beta \frac{\partial}{\partial(ct)} - \beta\alpha_k \nabla \frac{\hbar}{i} - \beta^2 m_0 c^2 \right] \Psi &= 0 \\ i\hbar \left[\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x_0} + \gamma^k \frac{\partial}{\partial x_k} - m_0 c^2 \right] \Psi &= 0 \\ i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi - m_0 c^2 \mathbb{1}_4 \Psi &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Alternative Darstellung

Die zuletzt ausgeführte Rechnung läßt sich auch in folgender Weise darstellen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\hbar c \left\{ \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right\} \Psi - \beta m c^2 \Psi &= 0 \\ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\hbar c \left\{ \alpha_1 \partial_1 + \alpha_2 \partial_2 + \alpha_3 \partial_3 \right\} \Psi - \beta m c^2 \Psi &= 0 \\ i\hbar \left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \alpha_1 \partial_1 - \alpha_2 \partial_2 - \alpha_3 \partial_3 \right\} \Psi - \beta m c \Psi &= 0 \\ i\hbar \left\{ \beta \partial_0 - \beta \alpha_1 \partial_1 - \beta \alpha_2 \partial_2 - \beta \alpha_3 \partial_3 \right\} \Psi - m c \Psi &= 0 \\ i\hbar \left\{ \gamma^0 \partial_0 - \gamma^1 \partial_1 - \gamma^2 \partial_2 - \gamma^3 \partial_3 \right\} \Psi - m c \Psi &= 0 \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich durch Summenkonvention wieder die kompakte Form

$$\left\{ i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - mc \right\} \Psi = 0$$

A.2.5 FEYNMAN-Notation

Durch die Einführung der Symbole

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (\text{A.44})$$

läßt sich (A.43) auch in kompakter Form schreiben:

$$i\hbar\bar{\partial}\Psi - m_0c^2\Psi = 0 \quad (\text{A.45})$$

A.2.6 DIRAC-Stromdichte

Mit $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger\gamma^0$ lassen sich Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho = \Psi^\dagger\beta^2\Psi = \bar{\Psi}\gamma^0\Psi$$

und Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\mathbf{j} = c\Psi^\dagger\beta\boldsymbol{\alpha}\Psi = c\bar{\Psi}\boldsymbol{\gamma}\Psi = c\bar{\Psi}\boldsymbol{\gamma}\Psi$$

zur Vierstromdichte

$$j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}) = c\bar{\Psi}\boldsymbol{\gamma}^\mu\Psi \quad (\text{A.46})$$

zusammenfassen, so daß sich auch die Kontinuitätsgleichung in kompakter Form schreiben läßt:

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{A.47})$$

A.2.7 Kovarianz der DIRAC-Gleichung

Liegt die DIRAC-Gleichung in kovarianter Form vor, so erwarten wir, daß sie unter Lorentz-Transformationen forminvariant bleibt: für einen Beobachter A in System K und einen Beobachter B im dazu gleichförmig bewegten System K' ist dann

$$\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi + \kappa \Psi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \gamma'^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \Psi' + \kappa \Psi' = 0 \quad (\text{A.48})$$

Um dies zu überprüfen müssen wir wissen, wie sich die in der Gleichung auftretenden Größen transformieren. Dies ist aber bereits aus der Elektrodynamik bekannt:

$$x'^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu \quad p'^\mu = \Lambda_\nu^\mu p^\nu \quad F'^{\mu\nu} = \Lambda_\alpha^\mu \Lambda_\beta^\nu F^{\alpha\beta} \quad (\text{A.49})$$

Gehen wir jetzt schrittweise vor:²

² Eine ausführlichere Beschreibung findet sich in dem Buch von BJÖRKEN/DRELL [1].

1. Ohne den Beweis hier anzugeben, stellen fest, daß für die zeitliche Komponente gilt³

$$\gamma'^{\mu} = \gamma^{\mu}$$

2. Mit den Koordinaten transformieren sich auch die Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} = \Lambda_{\mu}^{\nu} \frac{\partial}{\partial x'^{\nu}}$$

3. Da wir es ja nicht nur mit Objekten aus dem Ortsraum zu tun haben, sondern die Spinoren ja im Spinraum wirken, müssen wir sagen, wie sich diese unter einer Lorentztransformation verhalten.

Dafür führen wir zunächst die Transformations-Matrix $S(\Lambda)$

$$\Psi'(x') = \Psi'(\Lambda x) = S(\Lambda) \Psi(x) = S(\Lambda) \Psi(\Lambda^{-1} x')$$

ein, zu der wegen Λ^{-1} auch die inverse Abbildung

$$\Psi(x) = S^{-1}(\Lambda) \Psi'(x')$$

existiert. $S(\Lambda)$ ist eine 4×4 -Matrix im Spinorraum.

4. Einsetzen in die DIRAC-Gleichung (A.43)

$$\begin{aligned} i\hbar \gamma^{\mu} \Lambda_{\mu}^{\nu} \frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} S^{-1}(\Lambda) \underbrace{S(\Lambda) \Psi(x)}_{\Psi'(x')} - m_0 c S^{-1}(\Lambda) \underbrace{S(\Lambda) \Psi(x)}_{\Psi'(x')} &= 0 \\ i\hbar S(\Lambda) \gamma^{\mu} \Lambda_{\mu}^{\nu} S^{-1}(\Lambda) \frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} \Psi'(x') - m_0 c \Psi'(x') &= 0 \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir die folgende Definitionsgleichung

$$S(\Lambda) \gamma^{\mu} \Lambda_{\mu}^{\nu} S^{-1}(\Lambda) = \gamma^{\nu} \quad \Leftrightarrow \quad S^{-1}(\Lambda) \gamma^{\mu} S(\Lambda) = \Lambda_{\nu}^{\mu} \gamma^{\nu} \quad (\text{A.50})$$

A.2.8 Beispiel: Linearer Boost

Wir legen unser Koordinatensystem so, daß die Bewegung in der ξ -Richtung stattfindet, so daß

$$\xi \propto \mathbf{v} \quad \hat{\xi} = \frac{\xi}{|\xi|} \propto \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} = \hat{v}$$

Die im vorherigen Abschnitt eingeführte Matrix $S(\Lambda)$ wird dann

$$S(L\xi) = \mathbb{1}_4 \cosh \frac{\xi}{2} + \hat{\xi} \alpha \sinh \frac{\xi}{2}$$

mit

$$\begin{aligned} \cosh \xi = \frac{E}{m_0 c^2} \quad \Rightarrow \quad \cosh \frac{\xi}{2} &= \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}} \\ \sinh \frac{\xi}{2} &= \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}} \left(\frac{c \mathbf{p}}{E + m_0 c^2} \right) \end{aligned}$$

³ Rev Mod Phys 27 (1955) 187

also bei Einsetzen

$$\begin{aligned}
 S(L\xi) &= \mathbb{1}_4 \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}} + \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}} \left(\frac{c \mathbf{p} \alpha}{E + m_0 c^2} \right) \\
 &\quad \text{Reihenentwicklung} \\
 &= \exp\left(\frac{1}{2} \xi \alpha\right)
 \end{aligned}$$

Die Matrix S ist

1. hermitesch

$$S^\dagger(L\xi) = S(L\xi) \quad \text{da } \xi^\dagger = \xi$$

2. nicht unitär

$$\xi \rightarrow -\xi \quad \Rightarrow \quad S^{-1} = \exp\left(-\frac{1}{2} \xi \alpha\right) \quad \Rightarrow \quad S^{-1} \neq S^\dagger$$

Dies zeigt sich auch durch

$$\gamma_0 S^\dagger(L\xi) \gamma_0 = S^{-1}(L\xi) \quad \Rightarrow \quad \gamma_0 \alpha \gamma_0 = -\alpha$$

A.2.9 Kovarianz der Kontinuitätsgleichung

A.2.10 Paritätsoperation

A.2.11 Bilineare Kovarianten

Bilineare Kovarianten

Jede 4×4 -Matrix hat 16 Elemente, die durch 16 linear unabhängige Matrizen dargestellt werden:

		Elemente
(1)	$I = \mathbb{1}_4$	1
(2)	γ^μ	4
(3)	$\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] = \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu)$	6
(4)	$\gamma^5 = \gamma_5 = i\gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 \gamma^4$	1
(5)	$\gamma^5 \gamma_\mu$	3

Für I und σ^{ij} gilt, daß

$$I = \mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma^{ij} = \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix}$$

Eigenschaften von γ^5

$$\left. \begin{aligned} \gamma^0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \gamma &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ -\sigma & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \gamma^5 = \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A.3 Vektor- und Operatorbeziehungen

A.3.1 Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten

Ausgehend von den Ausdrücken für die Projektion des Drehimpulsoperators in kartesischen Koordinaten

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

wollen wir uns diese Operatoren in Kugelkoordinaten verschaffen. Zu den Transformationen

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad , \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad , \quad z = r \cos \theta$$

gehören die inversen Transformationen

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad , \quad \cos \theta = \frac{z}{r} \quad , \quad \tan \varphi = \frac{y}{x}$$

Demnach ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \theta & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi & \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0 & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} & \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \end{aligned}$$

Mit diesen Beziehungen finden wir

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= -i\hbar \left[r \sin \theta \cos \varphi \left(\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \sin \theta \sin \varphi \left(\frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

bzw. analog

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \varphi + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

Das Quadrat des Drehimpulsoperators läßt sich dann schreiben als

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

A.3.2 Kombination von Produkten der Spinmatrizen

Mit den PAULI-Spin-Matrizen (9.20) und den Operatoren A, B mit

$$[\sigma, \mathbf{A}] = [\sigma, \mathbf{B}] = 0$$

Dann aus den Skalarprodukten

$$\begin{aligned} \sigma\mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \\ \sigma\mathbf{B} &= \begin{pmatrix} 0 & B_x \\ B_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iB_y \\ iB_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Durch Multiplikation

$$\begin{aligned} (\sigma\mathbf{A})(\sigma\mathbf{B}) &= \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & B_x \\ B_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -iB_y \\ iB_y & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & B_x \\ B_x & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -iB_y \\ iB_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & B_x \\ B_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -iB_y \\ iB_y & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A_x B_x & 0 \\ 0 & A_x B_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} iA_x B_y & 0 \\ 0 & -iA_x B_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -A_x B_z \\ A_x B_z & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} -iA_y B_x & 0 \\ 0 & iA_y B_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_y B_y & 0 \\ 0 & A_y B_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & iA_y B_z \\ iA_y B_z & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} 0 & A_z B_x \\ -A_z B_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_z B_y \\ -iA_z B_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_z B_z & 0 \\ 0 & A_z B_z \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{AB}\mathbb{1}_2 + i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_z + i \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_y + i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_x \\ &= \mathbf{AB}\mathbb{1}_2 + i\sigma [\mathbf{A} \times \mathbf{B}] \end{aligned}$$

Wir halten fest:

$$(\sigma\mathbf{A})(\sigma\mathbf{B}) = \mathbf{AB}\mathbb{1}_2 + i\sigma [\mathbf{A} \times \mathbf{B}] \quad (\text{A.51})$$

B

Klausuraufgaben

B.1 Erste Klausur zur Quantenmechanik I WS 1997/98

1. Berechnen sie:

$$[\hat{x}^{-1}, \hat{p}] \quad \text{und} \quad [\hat{p}^{-1}, \hat{x}]$$

(8 Punkte)

2. Gegeben seien drei Operatoren \hat{A} , \hat{B} und \hat{C} . Drücken sie den Kommutator des Produktes $\hat{A}\hat{B}$ mit \hat{C} mit Hilfe der Kommutatoren $[\hat{A}, \hat{B}]$ und $[\hat{B}, \hat{C}]$ aus.

(4 Punkte)

3. Ein Operator \hat{O} wird als *hermitesch* bezeichnet, wenn er für quadratintegrale Wellenfunktionen folgende Bedingung erfüllt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{O} \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{O} \Psi(\mathbf{r}))^* \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Untersuche Sie, ob die Operatoren

$$\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{z}^3\hat{p}_z \quad \hat{x}^{-1} \quad i\hbar$$

hermitesch sind.

(10 Punkte)

4. Im eindimensionalen Fall ist die Hermitizität des Impulsoperators $\hat{p} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x}$ gleichbedeutend mit

$$\int_a^b u_k^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u_l}{\partial x} dx = \int_a^b \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u_k}{\partial x} \right)^* u_l dx$$

wobei die Grenzen a und b im allgemeinen $\pm\infty$ sind. Welche Anforderungen sind an das Funktionensystem u_k, u_l zu stellen, wenn die Integrationsgrenzen a und b im Endlichen liegen?

(10 Punkte)

5. Ein Teilchen der Masse m befindet sich in einem dreidimensionalen, sphärischen symmetrischen Potential der Form

$$V(\mathbf{r}) = -c \delta(|\mathbf{r}| - a)$$

Mit anderen Worten, das Potential ist eine Delta-Funktion, die verschwindet außer wenn das Teilchen sich genau im Abstand a vom Zentrum des Potentials befindet. c sei eine positive, reelle Konstante.

Bestimmen Sie den Minimalwert von c für den noch ein gebundener Zustand existiert.

[Hinweis: Der niedrigste gebundene Zustand hat immer den Bahndrehimpuls $l = 0$.]

(15 Punkte)

6. Zeigen Sie: wenn das Potential $V(\mathbf{r})$ als Summe von Funktionen der einzelnen Koordinaten geschrieben werden kann

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

dann kann man die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung zerlegen in drei eindimensionale Gleichungen der Form

$$\frac{d^2 \Psi_i(x_i)}{dx_i^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_i - V_i(x_i)) \Psi_i(x_i) = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

mit $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1(x_1) \Psi_2(x_2) \Psi_3(x_3)$ und $E = E_1 + E_2 + E_3$.

(6 Punkte)

7. Bestimmen Sie die Energien und normierten Wellenfunktionen eines Teilchens im unendlich hohen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

Zeigen Sie, daß folgende Relationen erfüllt sind:

$$\bar{x} \equiv \langle \Psi_n | \hat{x} | \Psi_n \rangle = \frac{1}{2}a$$

$$(x - \bar{x})^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right)$$

Hinweis:

$$\begin{aligned} \int \sin^2 kx \, dx &= \frac{x}{2} - \frac{1}{4k} \sin 2kx \\ \int x \sin^2 kx \, dx &= \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4k} \sin 2kx - \frac{1}{8k^2} \cos 2kx \\ \int x^2 \sin^2 kx \, dx &= \frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{4k} \sin 2kx - \frac{x}{4k^2} \cos 2kx + \frac{1}{8k^3} \sin 2kx \end{aligned}$$

(10 Punkte)

8. Berechnen Sie die Matrixdarstellung des Rotationsoperators

$$\hat{R}(\beta) \equiv \exp(i\beta \hat{J}_y)$$

im Raum der $j = \frac{1}{2}$ Zustände. In diesem Unterraum lautet die Matrixdarstellung von \hat{J}_y

$$\hat{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(10 Punkte)

9. Zeigen Sie, daß die Energie eines eindimensionalen harmonischen Oszillators im Zustand mit der Quantenzahl n in der Form

$$E_n = m\omega^2 \langle x^2 \rangle_n$$

dargestellt werden kann.

Benutzen Sie:

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n! b \sqrt{\pi}}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}\right)^2\right) \\ b &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ H_{n+1}(z) &= 2zH_n(z) - 2nH_{n-1}(z) \end{aligned}$$

(12 Punkte)

10. Bestimmen Sie näherungsweise die gebundenen Energiezustände eines Teilchens im folgenden Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_0 & a < x < a + b \\ 0 & a + b < x < 2a + b \\ \infty & 2a + b < x \end{cases}$$

für den Fall, daß $E \ll V_0$ ist und daß die Penetrabilität der Barriere klein ist

$$\frac{2mV_0 b^2}{\hbar^2} \gg 1$$

(15 Punkte)

B.2 Zweite Klausur zur Quantenmechanik I WS 1997/98

1. \mathbf{A} sei ein Operator im SCHRÖDINGERbild, der nicht explizit von der Zeit abhängt. Zeigen Sie, daß dann im HEISENBERGBild folgende Relation gilt:

$$\frac{d(\mathbf{A}^2)_H}{dt} = \frac{d(\mathbf{A}_H)^2}{dt} = 2\mathbf{A}_H \frac{d\mathbf{A}_H}{dt} + \left[\frac{d\mathbf{A}_H}{dt}, \mathbf{A}_H \right].$$

(7 Punkte)

2. Betrachten Sie den HAMILTONoperator

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

mit $V = V_0 \exp(-x^2/\epsilon)$ und $V = V_0 \delta(x)$. Berechnen Sie die Grundzustandsenergie dieser Systeme in erster Ordnung Störungstheorie.

Hinweis:

$$H_0 \phi_0 = \epsilon_0 \phi_0 \quad , \quad \phi_0 = \sqrt{\frac{1}{b\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \quad ; \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

(8 Punkte)

3. Berechnen Sie für den Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung, $\mathbf{H}_{ls} = \kappa \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$, die Kommutatoren

$$[\mathbf{H}_{ls}, \mathbf{l}] \quad [\mathbf{H}_{ls}, \mathbf{s}] \quad [\mathbf{H}_{ls}, \mathbf{l}^2] \quad [\mathbf{H}_{ls}, \mathbf{s}^2] \quad [\mathbf{H}_{ls}, \mathbf{j}^2]$$

wobei $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ ist.

(7 Punkte)

4. \mathbf{s}_1 und \mathbf{s}_2 seien die Spinoperatoren zweier Spin $1/2$ -Teilchen. Zeigen Sie, daß der Operator

$$P = \frac{3}{4} + \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

ein Projektionsoperator im Raum der Spinzustände ist. Auf welchen Unterraum projiziert P ?

(8 Punkte)

5. Der HAMILTONoperator zweier Spin- $1/2$ -Teilchen sei

$$H = -j \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + \mu(s_{1z} + s_{2z}).$$

Berechnen Sie die Eigenwerte und geben Sie die Eigenzustände in der Basis

$$\{ |s_1, s_{1z}; s_2, s_{2z}\rangle = |s_1, s_{1z}\rangle |s_2, s_{2z}\rangle \}$$

an.

(7 Punkte)

6. Der HAMILTONoperator eines eindimensionalen anharmonischen Oszillators sei durch

$$H = H_0 + H_1 \quad , \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad , \quad H_1 = \alpha \frac{m^2 \omega^2 x^4}{\hbar}, \quad \alpha > 0$$

gegeben. Welche Energiekorrekturen ergeben sich in erster Ordnung Störungstheorie bzgl. H_1 ?

Bemerkung: Benützen Sie zur Lösung die Auf- und Absteigeoperatoren, d.h. die Beziehung

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

(15 Punkte)

7. Zeigen Sie, daß

$$K(x_2, x_1, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(-\frac{i}{12} \left(\frac{kt}{\hbar \alpha}\right)^3 + \frac{ikt}{2\hbar}(x_1 + x_2) + \frac{im}{2\hbar t}(x_1 - x_2)^2\right)$$

$$\alpha = \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

die Greensche Funktion für ein Teilchen ist, welches sich in einem Potential $V = -kx$ bewegt.

(15 Punkte)

8. Bestimmen Sie die Wellenfunktion eines Spin- $1/2$ -Teilchens, welches ungeladen ist aber ein magnetisches Moment μ besitzt und sich in einem homogenen Magnetfeld $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0 \sin \omega t$ bewegt ($H = -\mu \cdot \mathbf{B}$).

(8 Punkte)

9. Die Operatoren \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} erfüllen im SCHRÖDINGERbild die Vertauschungsrelation $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = i\mathbf{C}$. Zeigen Sie, daß dann diese Relation auch im HEISENBERGBild erfüllt ist.

(4 Punkte)

10. $|\Psi_n\rangle$ sei ein vollständiges normiertes System von Eigenzuständen zum HAMILTONoperator H , d.h.

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle. \quad (1)$$

Zeigen Sie, daß für beliebige normierte Funktionen

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\Psi_n\rangle$$

der Erwartungswert des HAMILTONoperators, $E = \langle \phi | H | \phi \rangle$, immer größer oder höchstens gleich der Grundzustandsenergie E_0 in Gleichung (1) ist.

(4 Punkte)

11. Der HAMILTONoperator für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld ist

$$H = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} + e\phi \quad ; \quad \mathbf{\Pi} = m \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c}.$$

- Welche Größe ist eichinvariant, der kanonische Impuls \mathbf{p} oder der kinetische Impuls $\mathbf{\Pi}$?
- Berechnen Sie den Kommutator $[\Pi_i, \Pi_j]$ und drücken Sie das Resultat durch das magnetische Feld \mathbf{B} aus.
- Bestimmen Sie die quantenmechanische Version der LORENTZkraft. Beachten Sie dabei, daß das Kreuzprodukt zweier Operatoren nicht notwendigerweise hermitesch ist.

(12 Punkte)

12. (a) Warum ist der Zeitentwicklungsoperator U unitär?
 (b) Worauf basiert die "zufällige" Entartung im Wasserstoffatom?
 (c) Warum gibt es im Wasserstoffatom den linearen STARK-Effekt?
 (d) Welche Eigenschaften definieren einen Projektionsoperator?
 (e) Warum betrachtet man hermitesche Operatoren?

(5 Punkte)

B.3 Erste Klausur zur Quantenmechanik I WS 1989/90

1. Geben Sie die Dispersionsbeziehung $\omega = \omega(k)$ für ein freies, relativistisches Teilchen an.

(3 Punkte)

2. Gegeben sei die reelle eindimensionale Wellenfunktion

$$\Psi(x) = C x e^{-\alpha|x|}$$

- (a) Bestimmen Sie C so, daß Ψ normiert ist¹.
 (b) Berechnen Sie die Erwartungswerte der Operatoren x, p, x^2 und p^2 .
 (c) Berechnen sie $\Delta x \Delta p$.

(18 Punkte)

3. Gegeben sein ein folgendes eindimensionales Potential ($V_0 > 0$):

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x \leq 0 \\ -V_0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{für } a \leq x \end{cases}$$

Von rechts komme ein auf eins normierter Teilchenstrom mit der Energie $E > 0$ in Form einer ebenen Welle e^{-ikr} .

- (a) Geben sie den Ansatz für die Wellenfunktion in den drei Bereichen des Potentials an. Wie lauten die Anschlußbedingungen?
 (b) Berechnen sie den Reflexionskoeffizienten.

(13 Punkte)

4. Betrachten Sie die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung für das Potential ($V_0 > 0$):

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x)$$

- (a) Geben sie den Ansatz für die Wellenfunktion im Fall $E < 0$ und die Anschlußbedingungen für die Wellenfunktion und deren Ableitungen an.
 (b) Bestimmen Sie die Energien aller gebundenen Zustände.

(18 Punkte)

5. Ein Teilchen bewege sich in einem Potential der Form $V(x) = F_0 x$. Lösen Sie die SCHRÖDINGER-Gleichung für dieses Problem in der Schrödingerdarstellung und bestimmen Sie die Normierungskonstante der Wellenfunktion $\Phi(p, E)$ gemäß:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, E) \Phi(p, E') dp = \delta(E - E')$$

(10 Punkte)

6. Welches sind die Energieeigenwerte eines Teilchens, das sich in einem Potential der folgenden Form bewegt:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & \text{für } x \geq 0 \end{cases}$$

(8 Punkte)

¹ Lösung auf Seite 263.

7. Die orthonormierten Vektoren $|1\rangle$ und $|2\rangle$ spannen einen zweidimensionalen Zustandsraum auf. Der Operator M sei in der Matrixdarstellung ($M_{ij} = \langle i | M | j \rangle$) gegeben durch die Matrix

$$M = \begin{pmatrix} -3 & 4 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}$$

- (a) Berechnen Sie die Eigenwerte von M und geben Sie die Eigenvektoren von M als Linearkombinationen von $|1\rangle$ und $|2\rangle$ an.
 (b) Geben Sie die Projektionsoperatoren auf die Eigenvektoren in der Matrixdarstellung an.
 (c) Zeigen Sie, daß die Matrix

$$U = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

unitär ist.

- (d) Bestimmen Sie φ so, daß $U^\dagger M U$ diagonal ist.

(15 Punkte)

8. $|\Psi(t)\rangle$ sei eine normierte Lösung der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle.$$

Der Dichteoperator $\rho(t)$ ist definiert als:

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|.$$

- (a) Zeigen Sie, daß:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H, \rho(t)].$$

Betrachten Sie die Operatoren in der Matrixdarstellung eines diskreten, normierten und vollständigen Basissystems ($|u_n\rangle, n = 1, \dots, \infty$). Zeigen Sie

- (b) $\text{Spur}(\rho) = 1$.

- (c)

$$\langle A \rangle (t) \equiv \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \text{Spur}(\rho A)$$

für einen beliebigen zeitunabhängigen Operator A .

(15 Punkte)

B.4 Zweite Klausur zur Quantenmechanik I WS 1989/90

1. Das quantenmechanische Gegenstück des Lenz'schen Vektors ist gegeben durch

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\kappa}{r} \mathbf{r}.$$

\mathbf{L} ist der Operator des Bahndrehimpulses. Beweisen Sie die Kommutatorrelation

$$[M_k, L_l] = i\hbar \sum_m \epsilon_{klm} M_m.$$

Hinweis: Es ist sinnvoll, zuerst die Kommutatorrelation zwischen L_k und p_k bzw. r_k zu bestimmen.

(15 Punkte)

2. Bestimmen Sie durch Rückführung auf das Wasserstoffproblem die Energieniveaus eines Teilchens in dem Potential

$$V(\mathbf{r}) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r},$$

wobei A und B positive Konstanten sind.

(15 Punkte)

3. Die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r})$, die den gebundenen Zustand eines spinlosen Teilchens in einem kurzreichweitigen Zentralpotential $V(\mathbf{r})$ beschreibt, sei in sphärischen Polarkoordinaten (r, θ, φ) gegeben durch:

$$\Psi(\mathbf{r}) = A \frac{e^{-\alpha r} - e^{\beta r}}{r}$$

A , α und β sind Konstanten mit $\alpha < \beta$.

- (a) Welche Werte haben die Drehimpulszahlen l und m ?
 (b) Bestimmen Sie mit Hilfe der SCHRÖDINGER-Gleichung das Potential und die Energie des Teilchens.

Hinweis zu b): Im Grenzfalle $r \rightarrow \infty$ verschwindet $V(\mathbf{r})$.

(17 Punkte)

4. Betrachten Sie einen Hamiltonoperator der Form (α ist eine positive Konstante.):

$$H = \ln \left(1 + \frac{\alpha}{\hbar^2} (L_x^2 + L_y^2) \right).$$

- (a) Welche Eigenfunktionen hat H ? Zeigen Sie, daß die zu H gehörenden Energieniveaus durch $E = \ln(1 + \alpha n)$ gegeben sind. Geben Sie eine explizite Formel für n an.
 (b) Geben Sie den Entartungsgrad der Energie für $n = 0, \dots, 4$ an.

(14 Punkte)

5. Bewegt sich ein Teilchen mit Spin $1/2$ in einem kugelsymmetrischen Potential, lassen sich die Eigenfunktionen durch die Quantenzahlen n, l, j und m kennzeichnen. Dabei ist $j = l \pm \frac{1}{2}$ die dem Operator des Gesamtdrehimpulses \mathbf{J} entsprechende Quantenzahl. Beweisen Sie, daß die Operatoren

$$P_{l, l+\frac{1}{2}} = \frac{l+1 + \frac{1}{\hbar} \sigma \cdot \mathbf{L}}{2l+1} \quad ; \quad P_{l, l-\frac{1}{2}} = \frac{l - \frac{1}{\hbar} \sigma \cdot \mathbf{L}}{2l+1}$$

Projektionsoperatoren auf die Eigenfunktionen mit den Quantenzahlen $l, j = l + \frac{1}{2}$ bzw. $l, j = l - \frac{1}{2}$ sind. (Die Komponenten des Vektors σ sind die PAULI'schen Spinmatrizen.) Zeigen Sie zu diesem Zweck:

- (a)

$$P_{l, l \pm \frac{1}{2}} |n, l, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle = |n, l, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle$$

$$P_{l, l \pm \frac{1}{2}} |n, l, l \mp \frac{1}{2}, m\rangle = 0$$

- (b)

$$P_{l, l \pm \frac{1}{2}}^2 = P_{l, l \pm \frac{1}{2}}$$

Hinweis zu a):

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \left(\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)^2 = \mathbf{L}^2 + \hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \frac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\sigma}^2$$

(20 Punkte)

6. Betrachten Sie ein Teilchen der Masse μ in dem Potential (A ist eine positive Konstante):

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0 \\ A \cdot x & \text{für } x \geq 0 \end{cases}$$

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie störungstheoretisch.

(a) Bestimmen Sie die Beiträge zu E_0 nullter ($\epsilon_{0,0}$) und erster ($\epsilon_{0,1}$) Ordnung. Wählen Sie dazu als ungestörten Hamiltonoperator den des 'halben' harmonischen Oszillators

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0 \\ \frac{\mu\omega^2}{2}x^2 & \text{für } x \geq 0 \end{cases}$$

Dessen Grundzustandswellenfunktion lautet für $x \geq 0$:

$$\Phi_0(x) = \frac{2}{\sqrt{b}\sqrt{\pi}} \frac{x}{b} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{b^2}\right) \quad ; \quad b^2 = \frac{\hbar}{\mu\omega}$$

Hinweis:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \cdot \left(2a^{\frac{n+1}{2}}\right)^{-1} \quad \text{für } a > 0$$

$$\Gamma(2) = 1 \quad , \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

(b) Wählen Sie den freien Parameter in dieser Rechnung nun so, daß $\epsilon_{0,1}$ verschwindet. Was erhält man nun für $\epsilon_{0,0}$?

(19 Punkte)

C

Rechnungen zu den Übungsaufgaben

Achtung: Die hier aufgeführten Aufgaben stellen keinesfalls einen Anspruch auf Vollständigkeit und sollten lediglich als Lösungsvorschläge behandelt werden. Dennoch wäre es schön weitere Aufgaben mit Lösungen in dieser Sammlung aufnehmen zu können.

1. FOURIERtransformierte einer GAUSSverteilung

Statt das FOURIERintegral

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

direkt zu lösen, differenzieren wir zunächst nach p :

$$\frac{d}{dp} \tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx (-ix) e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx} \left(x e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \right)$$

Diese Gleichung läßt sich jetzt partiell integrieren:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp} \tilde{f}(p) &= \frac{-1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} \left(-a^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{i}{\sqrt{2\pi}} (-ip) e^{-ipx} \left(-a^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \right) \\ &= \frac{ia^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{pa^2}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \\ &= \frac{ia^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - pa^2 \tilde{f}(p) \end{aligned}$$

In dem ersten Summanden dominiert für $x \rightarrow \infty$ die mit $-x^2$ abklingende Exponentialfunktion, so daß

$$\frac{ia^2}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} e^{-ipx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

und damit nur noch

$$\frac{d}{dp} \tilde{f}(p) = -pa^2 \tilde{f}(p) \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dp} \tilde{f}(p) + pa^2 \tilde{f}(p) = 0 .$$

Wir haben somit also eine Differentialgleichung erster Ordnung für $\tilde{f}(p)$ erhalten. Untersuchen wir jetzt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp} \left(\tilde{f}(p) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \right) &= \left(\frac{d}{dp} \tilde{f}(p) \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} + \tilde{f}(p) p a^2 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \\ &= \left(-p a^2 \tilde{f}(p) + \tilde{f}(p) p a^2 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \\ &= 0 \end{aligned}$$

so folgt, daß

$$\tilde{f}(p) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \text{const} \quad \rightarrow \quad \tilde{f}(p) = c e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

Da dies aber mit unserem Ausgangsintegral identisch sein muß, brauchen wir zur vollständigen Bestimmung nur noch den Koeffizienten c berechnen: Auswertung für $p = 0$ ergibt zunächst

$$\tilde{f}(p) = c \quad \text{und} \quad \tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2a^2}} .$$

Mit den Ersetzungen

$$y = \sqrt{\frac{x^2}{2a^2}} = \frac{x}{\sqrt{2}a} \quad \rightarrow \quad \frac{dy}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2}a} \quad \Leftrightarrow \quad dx = \sqrt{2}a dy$$

ist dann

$$\tilde{f}(0) = \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2} = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} = a .$$

Wir erhalten also abschließend als gesuchte FOURIERtransformierte der GAUSSverteilung

$$\tilde{f}(p) = a e^{-\frac{a^2 p^2}{2}}$$

Daraus ergibt sich die wichtige Folgerung: Die FOURIERtransformierte einer GAUSSverteilung ist wieder eine GAUSSverteilung. \square

2. Eindimensionale Bewegung in einem δ -Potential

Betrachte die eindimensionale Bewegung eines Teilchens der Masse m in einem δ -Potential:

$$V(x) = -V_0 \delta(x); \quad V_0 > 0$$

Berechnen Sie die normierten Eigenfunktionen der gebundenen Zustände. Wie viele gebundene Zustände gibt es in Abhängigkeit von V_0 ? Setzen sie bei der Lösung voraus, daß die gesuchte Wellenfunktion $\Psi(x)$ sich überall *physikalisch sinnvoll* verhält, d.h. insbesondere eine statische Interpretation zuläßt.

Lösungsvorschlag:

Mit dem gegebenen Potential lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V_0 \delta(x) \Psi(x) + E \Psi(x) = 0$$

Für $x \neq 0$ existieren Ψ , Ψ' und Ψ'' und sind stetig. Integration der Schrödingergleichung über ein kleines Intervall um den Nullpunkt gibt:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi''(x) dx + V_0 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) \Psi(x) dx + E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi(x) dx = 0 \quad \epsilon > 0$$

Nach Voraussetzung $|\Psi(x)|$ ist als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretierbar. Daraus folgt $\Psi(x) < \infty$ für alle x :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi(x) dx = 0$$

da $\Psi(x)$ höchstens eine endliche Unstetigkeit an $x = 0$ haben kann

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)) \right) + V_0 \Psi(0) = 0 \quad (\text{C.1})$$

Also ist die Ableitung von Ψ an $x = 0$ unstetig, Ψ selbst aber stetig. Dies motiviert den Lösungsansatz:

$$\begin{aligned} \Psi_+(x) &= a_+ e^{-\chi_+ x} \quad \text{für } x > 0 \\ \Psi_-(x) &= a_- e^{+\chi_- x} \quad \text{für } x < 0 \end{aligned}$$

Für $x \neq 0$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \chi_{\pm}^2 \Psi_{\pm}(x) + E \Psi_{\pm}(x) = 0 \quad \text{mit} \quad \chi_{\pm} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \chi$$

Da $\chi_+ = \chi_-$ folgt, daß $a_+ = a_-$, also

$$\Psi(x) = a e^{-\chi|x|}$$

Normierung:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 = |a|^2 \int_{-\infty}^0 dx e^{2\chi x} + |a|^2 \int_0^{\infty} dx e^{-2\chi x} = |a|^2 \frac{1}{\chi} \\ \Psi(x) &= \sqrt{\chi} e^{-\chi|x|} \end{aligned}$$

Um festzustellen, ob es gebundene Zustände gibt, verwendet man nun (C.1):

$$\begin{aligned} \Psi'(x) &= \chi^{\frac{3}{2}} e^{\chi x} \quad x > 0 \\ \Psi'(x) &= -\chi^{\frac{3}{2}} e^{-\chi x} \quad x < 0 \end{aligned}$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)) = +\frac{\hbar^2}{2m} (-2\chi^{\frac{3}{2}}) = -V_0 \sqrt{\chi}$$

Also

$$\chi = \frac{mV_0}{\hbar^2} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

D.h. es gibt nur einen Bindungszustand und zwar für

$$E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

□

3. Rotationssymmetrisches Potential

Durch Einführung von Zylinderkoordinaten ρ, φ, z mit

$$x = \rho \cos \varphi \quad y = \rho \sin \varphi \quad z = z$$

geht die SCHRÖDINGER-Gleichung über in

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) = 0 \quad (\text{C.2})$$

Da das Potential nur von ρ und z , jedoch nicht von φ abhängen soll, können wir folgenden Ansatz machen:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = F(\rho, z) \chi(\varphi)$$

Wir erhalten damit

$$\left\{ \frac{\rho^2}{F} \left[\frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \rho^2 \right\} + \frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \varphi^2} = 0$$

Der Ausdruck in den geschweiften Klammern hängt nur von ρ und z ab, der andere Summand nur von φ . Soll die Summe beider für jeden Koordinatenwert stets Null ergeben, so muß jeder für sich konstant und entgegengesetzt gleich den anderen sein. Wir können also die Differentialgleichung in zwei separieren, nämlich:

$$\begin{aligned} \frac{\rho^2}{F} \left[\frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \rho^2 &= \lambda \\ \frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \varphi^2} &= -\lambda \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung ist eine gewöhnliche Differentialgleichung für $\chi(\varphi)$ mit der vollständigen Lösung

$$\chi(\varphi) = A \cos \sqrt{\lambda} \varphi + B \sin \sqrt{\lambda} \varphi$$

Die letzte Gleichung ist nur dann eine eindeutige Funktion des Ortes, wenn sie invariant gegen eine Ersetzung von φ durch $\varphi + 2\pi$ ist. Es muß also $\sqrt{\lambda}$ eine ganze Zahl sein:

$$\sqrt{\lambda} = \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Man kann die Wellenfunktion also nach der Quantenzahl μ klassifizieren und erhält

$$\chi_\mu(\varphi) = C \cdot e^{i\mu\varphi}$$

Diese Wellenfunktion ist gleichzeitig eine Eigenfunktion des Drehimpulsoperators

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Die Gleichung für ρ und z schreiben wir noch etwas um; wir spalten nämlich einem Faktor ab und setzen

$$F(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} f(\rho, z)$$

Damit ergibt sich

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) - \frac{\lambda - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right] f = 0$$

Das ist eine zweidimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung mit dem Ersatzpotential

$$U(\rho, z) = V(\rho, z) + \frac{\hbar}{2m} \frac{\lambda - \frac{1}{4}}{\rho^2}$$

Ist V auch noch von z unabhängig, so kann man auch noch die z -Komponente der Wellenfunktion abspalten:

$$f(\rho, z) = u(\rho) g(z)$$

und erhält als Lösungen für $g(z)$ ebene Wellen in z -Richtung. \square

4. Zweidimensionales KEPLER-Problem

Behandeln Sie das zweidimensionale KEPLER-Problem, d.h. geben Sie die Eigenwerte (für $E < 0$) und Eigenfunktionen im Potential

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

an, wobei angenommen sei, daß die Lösung nicht von z abhängt.

Lösungsvorschlag:

Wir schließen an die Lösung der vorhergehenden Aufgabe an und beginnen mit dem Ansatz

$$\psi(\rho, \varphi) = e^{i\mu\varphi} \frac{1}{\sqrt{\rho}} f(\rho).$$

Mit den Abkürzungen

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} = \gamma^2 \quad , \quad \frac{2mZe^2}{\hbar^2} = 2\gamma\kappa$$

ergibt sich die folgende Gleichung für $f(\rho)$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} + \left(-\gamma^2 + \frac{2\gamma\kappa}{\rho} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right) f = 0.$$

Für $\rho \rightarrow \infty$ geht diese Gleichung asymptotisch in $f'' - \gamma^2 f = 0$ über mit den Lösungen

$$f(\rho) = e^{\pm\gamma\rho}.$$

Wir müssen von den Eigenfunktionen verlangen, daß sie im Unendlichen exponentiell wie $e^{-\gamma\rho}$ abfallen.

Für $\rho \approx 0$ überwiegt das letzte Glied in der Klammer und es gilt annähernd

$$f'' = \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} f$$

Der Ansatz $f \propto \rho^n$ führt zur charakteristischen Gleichung

$$n(n-1) = \mu^2 - \frac{1}{4}$$

mit den Lösungen $n = \mu + \frac{1}{2}$ und $n = -(\mu - \frac{1}{2})$. Wir setzen speziell an:

$$f(\rho) = \rho^{\mu + \frac{1}{2}} e^{-\gamma\rho} v(\rho)$$

Die Funktion v genügt der Differentialgleichung

$$\rho \frac{\partial^2 v}{\partial \rho^2} + (2\mu + 1 - 2\gamma\mu\rho) \frac{\partial v}{\partial \rho} - 2\gamma \left(\mu + \frac{1}{2} - \kappa \right) v = 0 ,$$

oder bei Einführung der neuen Variablen $z = 2\gamma\rho$ der Differentialgleichung

$$z \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + (2\mu + 1 - z) \frac{\partial v}{\partial z} - \left(\mu + \frac{1}{2} - \kappa \right) v = 0 .$$

Wir machen den Potenzreihenansatz für v in der Form

$$v(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$$

und erhalten durch Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} (2\mu + 1) a_1 - \left(\mu + \frac{1}{2} - \kappa \right) a_0 &= 0 \\ a_{n+1} (n + 1) (n + 2\mu + 1) &= a_n \left(n + \mu + \frac{1}{2} - \kappa \right) \end{aligned}$$

Die Potenzreihe bleibt nur dann endlich, wenn sie bei irgendeinem n abbricht, woraus sich ergibt:

$$\mu + \frac{1}{2} - \kappa = -n \quad , \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Damit ergeben sich die folgenden Eigenwerte:

$$E_{n,\mu} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mZe^2}{\hbar^2\kappa} \right)^2 = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 \left(n + \mu + \frac{1}{2} \right)^2}$$

5. Orthogonalität der Eigenfunktionen des harm. Oszillators

Zeigen Sie die Orthogonalität der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des harmonischen Oszillators ohne die explizite Form der Eigenfunktionen aus Aufgabe 2 zu verwenden. Benutzen Sie ausschließlich die Differentialgleichungen.

Lösungsvorschlag:

Die SCHRÖDINGER-Gleichung für den harmonischen Oszillator ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n''(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_n(x) = E_n \psi_n(x) .$$

Mit den Hilfsgrößen

$$\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad , \quad K_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

läßt sich dies schreiben als

$$\psi_n''(x) - \frac{x^2}{\alpha^4} \psi_n(x) = -k_n^2 \psi_n(x)$$

Multiplikation mit ψ_m von rechts und Integration

$$\int \psi_n'' \psi_m dx - \int \frac{x^2}{\alpha^4} \psi_n \psi_m dx = -k_n^2 \int \psi_n \psi_m dx$$

2× partiell integrieren gibt

$$\int \psi_n \psi_m^4 dx - \int \frac{x^2}{\alpha^4} \psi_n \psi_m dx = -k_n^2 \int \psi_n \psi_m dx$$

mit

$$\psi_m^4 - \frac{x^2}{\alpha^4} \psi_m = -k_m^2 \psi_m$$

Dann hat man

$$\begin{aligned} -k_m^2 \int \psi_n \psi_m dx &= -k_n^2 \int \psi_n \psi_m dx \\ (k_n^2 - k_m^2) \int \psi_n \psi_m dx &= 0 \end{aligned}$$

Für $n \neq m$ gilt $k_n \neq k_m$ (Zustände nicht entartet), also

$$\int \psi_n \psi_m dx = 0 \quad n \neq m$$

□

Erzeugende Funktion der hermiteschen Polynome

Lösung:

(a)

$$S(z, s) = e^{-s^2 + 2sz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n \quad (\text{C.3})$$

Idee: Definiere folgende in s und t analytische Funktion

$$\begin{aligned} \varphi(s, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(z) S(z, t) e^{z^2} dz \\ &\quad \text{Einsetzen von (C.3)} \\ &= \sum_{n, m=0}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} f(z) H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} dz}_{\alpha_{nm}} \frac{s^n t^m}{n! m!} \\ &= \sum_{n, m=0}^{\infty} \alpha_{nm} \frac{s^n t^m}{n! m!} \end{aligned}$$

Andererseits:

$$\varphi(s, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(z) e^{-s^2 + 2sz} e^{-t^2 + 2tz} e^{-z^2} dz = e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} f(z) e^{-(z-(s+t))^2} dz \quad (\text{C.4})$$

Für

$$f(z) = \begin{cases} 1 \\ z \\ z^2 \end{cases}$$

ist die Integration trivial, und wir können $\varphi(s, t)$ analytisch bestimmen. Man entwickelt dann wieder

$$\varphi(s, t) = \sum_{m, n=0}^{\infty} \alpha_{nm} \frac{s^n t^m}{n! m!}$$

und kann so auf einfache Weise die α_{nm} , also die komplizierten Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} \begin{cases} 1 \\ z \\ z^2 \end{cases} H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} dz$$

gewinnen. Wir suchen nun die Matrixelemente

$$\langle n | f(x) | m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) f(x) \Psi_m(x) dx$$

Dabei ist

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \quad \text{und} \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Jetzt Berechnung für $f(x) = 1$:

$$\langle n | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{2^n 2^m n! m!}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} dz$$

Berechne (C.4) mit $f(z) = 1$:

$$\begin{aligned} \varphi(s, t) &= e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z-(s+t))^2} dz \\ &= \sqrt{\pi} e^{2st} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n, m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^n 2^m}{n! m!}} s^n t^m \delta_{nm} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n, m=0}^{\infty} \sqrt{2^n 2^m n! m!} \frac{s^n t^m}{n! m!} \delta_{nm} \\ \alpha_{nm} &= \sqrt{\pi} \sqrt{2^n 2^m n! m!} \delta_{nm} \\ &= \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \end{aligned}$$

und somit

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z)H_m(z)e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_{nm}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

$$\langle n | x | m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x H_n(\alpha x) H_m(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2} dx \frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \sqrt{2^n 2^m n! m!}}$$

$$= \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n 2^m n! m!}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_m(z) z e^{-z^2} dz$$

(b) $f(z) = z$

$$\begin{aligned} \varphi(s, t) &= e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} z e^{-(z-(s+t))^2} dz \quad \curvearrowright \quad y = z - (s+t) \\ &= e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} (y + (s+t)) e^{-y^2} dy \\ &= e^{2st} \left(\int_{-\infty}^{\infty} y e^{-y^2} dy + (s+t) \sqrt{\pi} \right) \\ &= \sqrt{\pi} (s+t) e^{2st} \\ &\quad \text{Reihenentwicklung der Exponentialfunktion} \\ &= \sqrt{\pi} (s+t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n t^n 2^n}{n!} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} (s^{n+1} t^n + s^n t^{n+1}) \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{2^n 2^m n! m!} \frac{s^n t^m}{n! m!} \left(\delta_{n+1, m} \sqrt{\frac{n+1}{2}} + \delta_{n, m+1} \sqrt{\frac{m+1}{2}} \right) \\ \langle n | x | n+1 \rangle &= \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \\ \langle n+1 | x | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \end{aligned}$$

$$\langle n | x^2 | m \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} dz$$

(c) $f(z) = z^2$

$$\begin{aligned} \varphi(s, t) &= e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-(z-(s+t))^2} dz \\ &= e^{2st} \left((s+t)^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz + \int_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-z^2} dz \right) \\ &= \sqrt{\pi} e^{2st} \left((s+t)^2 + \frac{1}{2} \right) \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} (s^{n+2} t^n + s^n t^{n+2}) + \underbrace{\sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} \left(2t^{n+1} s^{n+1} + \frac{s^n t^n}{2} \right)}_{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} s^n t^n (n + \frac{1}{2})} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{n,m} \sqrt{2^n 2^m n! m!} \frac{s^n t^m}{n! m!} \left(\delta_{n,m+2} \sqrt{\frac{(m+1)(m+2)}{2 \cdot 2}} \right. \\ &\quad \left. + \delta_{m,n+2} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{2 \cdot 2}} + \delta_{nm} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \end{aligned}$$

$$\langle n | x^2 | n \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\langle n+2 | x^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)}$$

$$\langle n | x^2 | n+2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)}$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \alpha \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad \curvearrowright \quad \text{Quadrierung}$$

$$p^2 = -\alpha^2 \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Für

$$\Psi_m(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^m m!}} H_m(z) e^{-\frac{z^2}{2}}$$

erhält man mit Hilfe von

$$H'_m = 2m H_{m-1}$$

und der Differentialgleichung der HERMITE-Polynome:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_m(z) &= \sqrt{2m} \Psi_{m-1}(z) - z \Psi_m(z) \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_m(z) &= (z^2 - 1 - 2m) \Psi_m(z) \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned}\langle n+1 | p | n \rangle &= -i\sqrt{\hbar m\omega} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \\ \langle n | p | n+1 \rangle &= i\sqrt{\hbar m\omega} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \\ \langle n | p^2 | n \rangle &= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \langle n | p^2 | n+2 \rangle &= \langle n+2 | p^2 | n \rangle = -m\hbar\omega \sqrt{(n+1)(n+2)}\end{aligned}$$

Für das Produkt $\Delta x \cdot \Delta p_x$ erhält man

$$\begin{aligned}(\Delta p)^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \\ (\Delta x)^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &\downarrow \\ \Delta p \cdot \Delta x &= \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

Für $n = 0$ ist dies der kleinste mit der Unschärferelation verträgliche Wert!

(d)

$$\begin{aligned}V(x) &= \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &\downarrow \\ \langle V(x) \rangle &= \langle n | V(x) | n \rangle = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2}E_n\end{aligned}$$

Kommutatorrelationen

(a)

$$\begin{aligned}[A, (B+C)] &= A(B+C) - (B+C)A = AB + AC - BA - CA = AB - BA + AC - CA \\ &= [A, B] + [A, C]\end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}[A, BC] &= ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= [A, B]C + B[A, C]\end{aligned}$$

(c)

$$\left. \begin{aligned}[A, [B, C]] &= ABC - ACB - BCA + CBA \\ [B, [C, A]] &= BCA - BAC - CAB + ACB \\ [C, [A, B]] &= CAB - CBA - ABC + BAC\end{aligned} \right\} \sum = 0$$

Fouriertransformierte der Wellenfunktion

Lösung:

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

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x)e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx$$

Fouriertransformation der Wellenfunktion

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi''(x)e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx + \int V(x)\Psi(x)e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[E \int \Psi(x)e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \right]$$

2× partiell integrieren

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \bar{V}(p')e^{-\frac{ip'x}{\hbar}} dp' \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \phi(p'')e^{-\frac{ip''x}{\hbar}} dp'' \right] e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx = E\phi(p)$$

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^3 \int \int \bar{V}(p')\phi(p'') \underbrace{\int e^{i\frac{(p'+p''-p)x}{\hbar}} dx}_{2\pi\hbar\delta(p'+p''-p)} dp' dp'' = E\phi(p)$$

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \int \bar{V}(p')\phi(p'')\delta(p'+p''-p) dp' dp'' = E\phi(p)$$

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \bar{V}(p-p')\phi(p'') dp'' = E\phi(p)$$

(a) $V(x) = V_0 \cos(ax)$

$$\bar{V}(p-p'') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{V_0}{2} \left[\int e^{iax} e^{-\frac{i(p-p'')x}{\hbar}} dx + \int e^{-iax} e^{-\frac{i(p-p'')x}{\hbar}} dx \right]$$

$$= \sqrt{2\pi\hbar} \frac{V_0}{2} [\delta(p-p''-a\hbar) + \delta(p-p''+a\hbar)]$$

Die zugehörige Schrödinger-Gleichung ist

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \frac{V_0}{2} [\phi(p-a\hbar) - \phi(p+a\hbar)] = E\phi(p)$$

(b) $V(x+b) = V(x)$

Da dies ein periodisches Potential ist, Entwicklung

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{-\frac{i2\pi n}{b}x} \quad \text{mit} \quad a_n = \frac{1}{b} \int V(x) e^{-\frac{i2\pi n}{b}x} dx$$

Daraus dann

$$\bar{V}(p-p'') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \int e^{i\left(\frac{2\pi n\hbar}{b} - p + p''\right)\frac{x}{\hbar}} dx = \sqrt{2\pi\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \delta\left(\frac{2\pi n\hbar}{b} - p + p''\right)$$

Die zugehörige SCHRÖDINGER-Gleichung ist

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \phi\left(p - \frac{2\pi n}{b}\hbar\right) = E\phi(p)$$

Virialsatz

Lösung:

(a)

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^*(x)[A, H]\Psi_n(x) dx &= \int (\Psi_n^* A H \Psi_n - \Psi_n^* H A \Psi_n) dx \\ &= \int \Psi_n^* A (H \Psi_n) dx - \int (H \Psi_n^*) A \Psi_n dx \\ &= E_n \int (\Psi_n^* A \Psi_n - \Psi_n^* A \Psi_n) dx \\ &= C \end{aligned}$$

(b)

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

1.

$$\begin{aligned} [H, P]\Psi &= \left(\frac{p^2}{2m}P - P\frac{p^2}{2m} + V(x)P - PV(x)\right)\Psi \\ &= [V(x), P]\Psi \\ &= -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}V(x)\Psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [H, X]\Psi &= \left(\frac{p^2}{2m}X - X\frac{p^2}{2m} + V(x)X - XV(x)\right)\Psi \\ &= \left(\frac{p^2}{2m}X - X\frac{p^2}{2m}\right)\Psi \\ &= -\frac{1}{2m}([P, X]P + P[P, X])\Psi \\ &= \frac{2\hbar}{i}\frac{1}{2m}P\Psi \\ &= -i\hbar\frac{P}{m}\Psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[H, XP] \Psi &= (X[H, P] + [H, X]P) \Psi \\
&= -\frac{\hbar}{i} \left(X \frac{\partial}{\partial x} V(x) - \frac{p^2}{m} \right) \Psi
\end{aligned}$$

2.

$$\langle P \rangle = \frac{im}{\hbar} \langle [H, X] \rangle = 0$$

3.

$$\begin{aligned}
\langle [H, XP] \rangle &= 0 \quad \text{aus (a)} \\
T_n = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle &= \frac{1}{2} \langle X \frac{\partial}{\partial x} V(x) \rangle \quad \text{aus 1.}
\end{aligned}$$

4.

$$T_n = \frac{1}{2} \langle X \frac{\partial}{\partial x} V_0 x^\lambda \rangle = \frac{1}{2} V_0 \langle X \lambda X^{\lambda-1} \rangle = \frac{\lambda V_0}{2} \langle X^\lambda \rangle$$

Dies führt auf den Virialsatz

$$T_n = \frac{\lambda}{2} V_n$$

Hermitesche Operatoren

Zu zeigen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) A \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (A \Psi(x))^* \Psi(x) dx$$

1. $A = \frac{\hbar}{i} \nabla_x$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla_x \Psi dx = \underbrace{\frac{\hbar}{i} \Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{i} (\nabla_x \Psi^*) \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_x \Psi \right)^* \Psi dx$$

Dieser Operator ist hermitesch.

2. $A = \hbar \nabla_x$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hbar \nabla_x \Psi dx = \underbrace{\hbar \Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \hbar \nabla_x \Psi^* \Psi dx = - \int_{-\infty}^{\infty} (\hbar \nabla_x \Psi)^* \Psi dx$$

Dieser Operator ist nicht hermitesch.

Kugelflächenfunktionen

Die Kugelflächenfunktionen niedrigster Ordnung sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta & Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\phi} \\
Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1) & Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\phi} & Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\phi}
\end{aligned}$$

mit $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{l,m}^*$.

Zeigen Sie, daß diese Kugelflächenfunktionen die Orthonormalitätsbedingung

$$\int Y_{l',m'}^*(\vartheta, \phi) Y_{l,m}(\vartheta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

erfüllen, und zwar für die Spezialfälle $Y_{l,m}$, $m = -1, 0, 1$ und $Y_{l,0}$, $l = 0, 1, 2$.

Lösung:

$$\int Y_{l',m'}^* Y_{l,m} d\Omega = \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l',m'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

(a) $Y_{1,m}$

Orthogonalität folgt schon aus der φ -Integration:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im'\varphi} e^{im\varphi} &= \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-m')\varphi} \quad m \neq m' \\
&= -\frac{i}{m-m'} e^{i(m-m')\varphi} \Big|_0^{2\pi} \\
&= -\frac{i}{m-m'} (e^{i(m-m')2\pi} - 1) \\
&= 0 \quad \text{für } |m-m'| = 1, 2, \dots
\end{aligned}$$

Normierung:

$$\begin{aligned}
\int Y_{1,0}^* Y_{1,0} d\Omega &= \frac{3}{4\pi} \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&\quad x = \cos \vartheta \\
&\quad dx = -\sin \vartheta d\vartheta \\
&\quad \vartheta = 0 \Rightarrow x = 1 \\
&\quad \vartheta = \pi \Rightarrow x = -1 \\
&= \frac{3}{2} \int_{-1}^1 x^2 dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} x^3 \Big|_{-1}^1 \\
&= 1 \\
\int Y_{1,1}^* Y_{1,1} d\Omega &= \frac{3}{8\pi} \int \sin^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&= \frac{3}{4} \int_{-1}^1 (1-x^2) dx \\
&= \frac{3}{4} \left(x - \frac{x^3}{3} \right) \Big|_{-1}^1 \\
&= \frac{3}{4} 2 \left(1 - \frac{1}{3} \right) \\
&= 1 \\
&= \int Y_{1,-1}^* Y_{1,-1} d\Omega
\end{aligned}$$

(b) $Y_{l,0}$

$$\begin{aligned}
\int Y_{1,0}^* d\Omega &= \frac{3}{8\pi} \sin^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \\
&= \frac{1}{2} x \Big|_{-1}^1 \\
&= 1 \\
\int Y_{1,0}^* Y_{0,0}^* d\Omega &= \sqrt{\frac{1}{4\pi} - \frac{3}{4\pi}} \int_0^\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&= 0 \\
\int Y_{2,0}^* Y_{0,0}^* d\Omega &= \sqrt{\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{5}{16\pi}} \underbrace{\int_0^\pi (3 \cos^2 \vartheta - 1) \sin \vartheta d\vartheta}_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \\
&\quad \int_{-1}^1 (3x^2 - 1) dx = (x^3 - x) \Big|_{-1}^1 = 0 \\
&= 0 \\
\int Y_{1,0}^* Y_{1,0} d\Omega &= 1 \text{ bereits gezeigt}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int Y_{2,0}^* Y_{1,0} d\Omega &= \sqrt{\frac{3}{4\pi} \cdot \frac{5}{16\pi}} \int_0^\pi \underbrace{\cos \vartheta (3 \cos^2 \vartheta - 1) \sin \vartheta}_{\int_{-1}^1 (3x^2 - 1) dx = 0} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
\int Y_{2,0}^* Y_{2,0} d\Omega &= \frac{5}{16\pi} \int_0^\pi \underbrace{(3 \cos^2 \vartheta - 1)^2 \sin \vartheta}_{\int_{-1}^1 (3x^2 - 1)^2 dx} d\vartheta \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \\
&= \frac{5}{16\pi} \int_{-1}^1 (3x^2 - 1)^2 dx \int_{-1}^1 (9x^4 - 6x^2 + 1) dx \\
&= \left. \left(\frac{9}{5}x^5 - 2x^3 - x \right) \right|_{-1}^1 \\
&= 2 \left(\frac{9}{5} - \frac{10}{5} + \frac{5}{5} \right) \\
&= \frac{8}{5} \\
&= \frac{5}{16\pi} \cdot \frac{8}{5} \cdot 2\pi \\
&= 1
\end{aligned}$$

Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator

Mit Hilfe der Beziehungen

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 |jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \\
\hat{J}_z |jm\rangle &= \hbar m |jm\rangle \\
J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\
J_y &= \frac{1}{2}(J_+ - J_-) \\
\text{sowie} \\
J_x^2 &= \frac{1}{4}(J_+^2 + J_-^2 + J_+ J_- + J_- J_+) \\
J_y^2 &= \frac{1}{4}(J_+^2 + J_-^2 - J_+ J_- + J_- J_+)
\end{aligned}$$

berechnet man

$$\begin{aligned}
\Delta \hat{J}_i &= \sqrt{\langle jm | \hat{J}_i^2 | jm \rangle - \langle jm | \hat{J}_i | jm \rangle^2} \\
\Delta \hat{J}_z &= \sqrt{\hbar^2 m^2 \langle jm | jm \rangle - (\hbar m \langle jm | jm \rangle)^2}
\end{aligned}$$

Normierung von $\Psi(x) = C x e^{-a|x|}$ Bestimmen sie C so, daß

$$\Psi(x) = C x e^{-a|x|}$$

normiert ist.¹**Lösung:**

Zunächst Zerlegung der Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \begin{cases} C x e^{ax} & x \leq 0 \\ C x e^{-ax} & x \geq 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^0 \Psi^*(x) \Psi(x) dx - \int_{\infty}^0 \Psi^*(x) \Psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^0 C^2 x^2 e^{2ax} dx - \int_{\infty}^0 C^2 x^2 e^{-2ax} dx \\ &= \frac{C^2 x^2}{2a} e^{2ax} \Big|_{-\infty}^0 - \int_{-\infty}^0 \frac{C^2 x}{a} e^{2ax} dx + \frac{C^2 x^2}{2a} e^{-2ax} \Big|_{\infty}^0 - \int_{\infty}^0 \frac{C^2 x}{a} e^{-2ax} dx \\ &= \frac{C^2}{a} \left\{ -\frac{x}{2a} e^{2ax} \Big|_{-\infty}^0 + \int_{-\infty}^0 \frac{1}{2a} e^{2ax} dx + \frac{x}{2a} e^{-2ax} \Big|_{\infty}^0 - \int_{\infty}^0 \frac{1}{2a} e^{-2ax} dx \right\} \\ &= \frac{C^2}{2a^2} \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{2ax} dx - \int_{\infty}^0 e^{-2ax} dx \right\} \\ &= \frac{C^2}{2a^2} \left\{ \frac{1}{2a} e^{2ax} \Big|_{-\infty}^0 + \frac{1}{2a} e^{-2ax} \Big|_{\infty}^0 \right\} \\ &= \frac{C^2}{2a^2} \left\{ \frac{1}{2a} + \frac{1}{2a} \right\} \\ &= \frac{C^2}{2a^3} \\ &\downarrow \\ C &= \sqrt{2a^3} \\ &\downarrow \\ \Psi(x) &= \sqrt{2a^3} x e^{-a|x|} \end{aligned}$$

¹ Aufgabe 2 der 1. Klausur zur Quantenmechanik I – WS 1989/90

Anisotroper harmonischer Oszillator

Ein System, welches durch den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \quad (\text{C.5})$$

beschrieben wird, heißt *anisotroper harmonischer Oszillator*.

(a) Bestimmen Sie die möglichen Energieeigenwerte dieses Systems.

(b) Berechnen Sie für den isotropen Fall ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$) die Entartung des Zustandes mit der Energie E_n .

Lösung:

(a) Mit

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

wird C.5)

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m}{\hbar^2} (E - \omega_1^2 x^2 - \omega_2^2 y^2 - \omega_3^2 z^2) \right\} \Psi(x, y, z) = 0$$

D

Prüfungsprotokolle

Protokoll zur Diplomprüfung im Fach Theoretische Physik bei Prof. Meissner

Bonn, den 24. Mai 2001

Fight 1, UGM vs VH: Was-will-ich-in-Jülich?

Meine erste Prüfung bei Meissner fand am 10. April in Jülich. Die Note war 3+ und ich machte vom Freiversuch Gebrauch. Die Prüfung dauert ca. 35 Minuten. Hier das Protokoll des Beisitzers:

Diracgleichung; Diracspinoren; Impulsraumgleichung; Teilchen- und Antiteilchenlösung; Klein-Gordon-Gleichung; Klein-Gordon-Strom; Zustände negativer Energie; Schrödingergleichung; Wellenfunktionen; Wahrscheinlichkeitsdichte; Harmonischer Oszillator (darstellungsfrei); Erzeuger, Vernichter; Besetzungszahlen; Coulombproblem; Spektrum; Separationsansatz; radiale Schrödingergleichung; Drehimpulseigenwerte; asymptotische Lösungen; allgemeine Lösung; Entartung; mechanisches Analogon: Keplerproblem; Runge-Lenz-Vektor; Dipolübergänge; Boltzmann-Verteilung; Pauliprinzip; Bose-Einstein-Kondensation; Fermi-Impuls

Fight 2, UGM vs VH: Rematch in Bonn

Die Prüfung dauerte ca. eine Stunde, er gab mir eine 1,0.

er: Schreiben Sie mal die Schrödingergleichung des H-Atoms hin.

ich: (das war natürlich nach den Erfahrungen der ersten Prüfung ein Geschenk)

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

Zeit abseparieren, Δ umschreiben führt auf

$$E\Psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2} \Psi,$$

Separationsansatz für die Winkel

$$\Psi = \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{ml}(\theta, \phi)$$

führt auf die radiale Schrödingergleichung (musste ich auch hinschreiben), nun betrachtet man das asymptotische Verhalten gegen 0 und unendlich, dies ergibt jeweils zwei Lösungen, von denen jeweils eine wegen Normierbarkeit verworfen wird, also Ansatz:

$$U_{nl}(r) = F_{nl}(r) r^{l+1} e^{-\kappa r}$$

Einsetzen ergibt Kummer'sche Diff.gleichung (musste ich weder ausrechnen, noch hinschreiben), jetzt Potenzreihenansatz, führt auf Rekursionsformel für die Exponenten, Abbruchbedingung der Reihe ergibt Energieeigenwerte

$$E_N = -\frac{m e^4}{2(n+l+1)^2 \hbar^2}$$

er: Was ist das da für eine Masse?

ich: eigentlich die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$, aber in guter Näherung Masse des Elektrons

er: Was gibt es für Entartungen?

ich: l- und m-Entartung, insgesamt N^2 -viele Ketts für eine bestimmte Hauptquantenzahl N

- er: Ja, ja, aber was steckt da für eine Symmetrie hinter.
- ich: Rotationssymmetrie und das Pendant aus der klassischen Physik für die m -Entartung ist der Runge-Lenzvektor, liegt am $\frac{1}{r}$ -Potential (da hatte er wohl vergessen, dass er mich auch dieses Detail in der ersten Prüfung gefragt hat)
- er: Wie sieht das denn beim Helium aus?
- ich: (Hamiltonoperator hingeschrieben, Wechselwirkungsterm der beiden Elektronen als Störung aufgefasst), auf Grund des Pauliprinzips gibt es Kombinationen von symm. bzw. antisymm. Ortswellenfkt. und antisymm. bzw. symm. Spinwellenfkt., führt auf Para- und Orthohelium, Grundzustand in Zahlen mit und ohne Störung, Termschema (ich habe die Ausführungen im Sakurai fast wortwörtlich wiederholt, das reicht; dann fügte ich noch hinzu, dass man die Energieniveaushiftung Hundtsche Regel nennt)
- er: Wie das heisst, ist mir egal. Wie sieht denn der differentielle Streuwirkungsquerschnitt von Bosonen im Vergleich zu Fermionen aus?
- ich: (auch hier haargenau wie im Sakurai) bei Bosonen
- $$|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2,$$
- bei unpolarisierten Fermionen
- $$\frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)| + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|$$
- er: Wie sieht dann allgemein die Streuung einer ebenen Welle an einem Potential aus?
- ich: $\Psi = \Phi + f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{k}}) \frac{e^{ikr}}{r}$, $f(\mathbf{k}, \hat{\mathbf{k}})$ ist in erster Bornscher Näherung die Fouriertransformierte vom Potential an der Stelle $\mathbf{k} - \hat{\mathbf{k}}$
- er: Wie sieht denn der Wirkungsquerschnitt im Vergleich zur klass. Mechanik für das Coulombproblem aus?
- ich: (das behagte mir nicht so, da die Coulombstreuung recht kompliziert ist, siehe letzten Seiten Sakurai, irgendwie habe ich ihn zur harten Sphäre gebracht, damit war er zufrieden) bei der harten Sphäre ist der Wirkungsquerschnitt $2\pi r^2$ gegenüber den klassisch erwarteten πr^2 , die Hälfte wird nach dem optischen Theorem $Im(f(\theta = 0)) = \frac{k\sigma_{tot}}{4\pi}$ zur Schattenbildung sozusagen gebraucht
- er: Wie wirkt sich der Paritätsoperator auf Wellenfunktionen aus?
- ich: wird eingeführt über $PxP = -x$ ist hermitesch und unitär, Eigenwerte sind $+1$ und -1 , Eigenfunktionen transformieren sich zu $\pm\Psi(-x)$
- er: Was macht der Zeitumkehroperator und wie sieht der explizit aus?
- ich: er sorgt für eine Bewegungsumkehr und ist antiunitär (die Bildung der Zeitumkehr wusste ich nicht, entscheidend war hier, dass man die Wellenfunktion komplex konjugieren muss, dann hat er mir noch bei Bildung von Matrixelementen etwas geholfen, die ändern sich bei Parität nicht, bei Zeitumkehr gibt es ein Minus)
- er: Was gibt es für Lösungen beim Doppelkastenproblem (siehe Sakurai)
- ich: bei endlichem Wall gibt es keine Entartung, also sind Eigenfunktionen gerade oder ungerade (Lösungen skizziert)
- er: Wo hält sich das Teilchen denn nun auf?
- ich: es gibt Wahrscheinlichkeiten für linke und rechte Seite (er wollte Tunneln hören), wenn der mittlere Wall unendlich hoch ist, gibt es auch stationäre nicht symmetrische Lösungen, da jetzt Entartung auftritt
- er: Was gibt es für 2 Teilchen bei 2 Einteilchenzuständen für Mehrteilchenzustände im klassischen, Bosonen- und Fermionenfall
- ich: klassisch 4, Bose-Einstein 3 und bei Fermionen wegen des Pauliprinzips nur einen (die Lösungen hingeschrieben)
- er: (zum Besitzer, der unbedingt elendig klein schreiben musste) wir haben ja noch Platz
- Beisitzer: Wir müssen das Ding nicht vollkriegen.
- er: Schreiben Sie mal die Dirac-Gleichung hin.
- ich: $(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\Psi = 0$ (Antikommutatorgleichung hingeschrieben, die wegen Energie-Impulsbeziehung gelten muss)
- er: Wie gross ist denn die Dimension?
- ich: Sie ist gerade, da Spur 0 und Eigenwerte ± 1 bzw. $\pm i$, 2 scheidet aus, da man hier 3 nicht kommutierende Matrizen finden kann, also mindestens 4.
- er: Wie sehen die freien Lösungen aus?

ich: (einen Spinor zu positiver Energie hatte ich auswendig gelernt, man kommt zu ihm über den Ansatz $\Psi = Nu(p)e^{-\frac{i}{\hbar}x^\mu p_\mu}$ und die daraus folgende Impulsraumdarstellung)

er: Und wozu sind das jetzt Eigenfunktionen?

ich: (Er wollte wohl auf den Spin hinaus, das sieht man aber besser im ruhenden Fall) Im ruhenden Fall kann man 4 linear unabhängige Lösungen konstruieren, die Eigenfunktionen zu den 4 Kombinationen von Spin up, down und pos., neg. Energie (also Masse) sind.

Kommentar

Er ist schon ein sehr seltsamer Vogel, dieser UGM. Seine Beschreibung reicht von supercool bis zum Kotzen arrogant, mit eindeutiger Tendenz zum letzteren. Er hatte bei meiner ersten Prüfung wohl schlechte Laune und versuchte mich während der Prüfung mit Sprüchen wie "stimmt sogar" und "das ist ja wohl nicht Ihr Ernst" aufzumuntern. Insgesamt hat er eine schlechte Art, mit Leuten umzugehen. So bestätigte er mir meinen zweiten Prüfungstermin zwei Tage vorher und äusserte sich nie völlig verbindlich zu dem Stoffrahmen seiner Prüfung. Hatte ich in den Prüfungen auch etwas völlig korrekt beantwortet, erntete ich meistens nur ein verstörtes Stirnrunzeln, so dass ich in der zweiten Prüfung hauptsächlich aus dem Fenster gestarrt habe.

Diese Eigenarten haben sich neben meiner nichtoptimalen Vorbereitung zur ersten Prüfung als äusserst nervend erwiesen. Ich hatte vor der ersten Prüfung keine Protokolle zur Verfügung und habe nicht seine Quanten-Vorlesung gehört. Die Fragen waren jedoch, wie sich später herausstellte straight entlang seiner Vorlesung, und nicht immer in den Büchern, die wir vereinbart hatten, beantwortet. Für ihn spricht, dass er mich während der Prüfungen nachdenken und ausreden liess. Allerdings sind seine Fragen meines Erachtens oft seltsam unscharf und schwer zu beantworten, wenn man nicht weiss, worauf er hinaus will. Er ist aber durchaus bereit, seine Fragen neu zu formulieren und Hilfestellungen zu geben. Ich hatte den Eindruck, dass man ihn manchmal in eine etwas günstigere Richtung lenken kann. Allerdings greift er sich während der Prüfung oft sehr spezielle Gebiete heraus und will diese haarklein beantwortet haben, ohne das man Verständnis der Zusam-

menhänge anbringen kann. Seine Benotung war beide Male durchaus wohlwollend, über eine halbe Note schlechter hätte ich mich nicht beklagen können.

Zusammenfassend kann ich offensichtlich UGM nicht uneingeschränkt als Prüfer empfehlen. Wichtig ist es, seine Quantenmechanik-Vorlesung und Lieblingsthemen zu kennen, wozu dieses Protokoll hoffentlich beiträgt.

Auszüge aus weiteren Protokollen

E-Dynamik Maxwellgleichungen, auch kovariante Form; Feldstärketensor, auch dualer; Eichinvarianz; Maxwellscher Spannungstensor

Quanten I unitäre Trafos; Bilder der Quantenmechanik: Schrödinger, Heisenberg, Ww; Translationsoperator; Noether-Theorem der Quantenmechanik; elementare Kommutatoren; harmonischer Oszi; H-Atom; Darstellung der Wellenfunktion im Orts- und Impulsraum, Zusammenhang über Fouriertrafo; Potentialtopf; Dipoloperator; Auswahlregeln; Lippman-Schwinger-Gleichung; Resonanzen; Hilbertraum mit Trafo zwischen verschiedenen Basen

Statistik statistische Verteilungen: Zustandssummen, Besetzungszahlen; Bose-Einstein-Kondensation; Fermi-Kante; Quantisierung des Phasenraumes

Literatur

Hier noch die Bücher, mit denen ich hauptsächlich gelernt habe:

- E-Dynamik: Fliessbach
- Quanten I: Sakurai, Schwabl, Feynman: Lectures Band III (für das Verständnis, nicht für die Prüfung); Greiner, Nolting, Dawydow (für das H-Atom)
- Quanten II: Björken-Drell, Schwabl 2, Messiah 2 (hat Meissner mir empfohlen, ist aber scheisse)
- Statistik: Reif, Pathria

Literaturverzeichnis

- [1] J.D. BJORKEN, S.D. DRELL, *Relativistische Quantenmechanik*, Spektrum 1998
- [2] G. BAYM, *Lectures on Quantum mechanics*, 3rd ed., Addison-Wesley 1990
- [3] A. BOHM, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 3rd ed., New York; Berlin; Heidelberg, Springer (1993)
- [4] C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU, F. LALOË, *Quantum Mechanics*, Wiley & Sons (1977)
- [5] R. COURANT, D. HILBERT, *Methoden der Mathematischen Physik*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York 1968
- [6] A.S. DAVYDOV, *Quantenmechanik*, 8. Aufl., Barth, Berlin 1992
Amerikanische Ausgabe: *Quantum Mechanics*, Pergamon Press
- [7] R.P. FEYNMAN, R.B. LEIGHTON, M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. III (Quantum Mechanics), Addison-Wesley, 1971
Deutsche Übersetzung: *Vorlesungen über Physik*, Band III: Quantenmechanik, Oldenburg Verlag, München 1989
- [8] T. FLIESSBACH, *Quantenmechanik*, Mannheim; Leipzig; Zürich; Wien, BI Wissenschaftsverlag, 1992
- [9] F. GROSS, *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*, John Wiley & Sons, 1993
- [10] L. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Band III: *Quantenmechanik*
- [11] G. LUDWIG, *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik*, Band III: *Quantentheorie*, Braunschweig, Vieweg (1976)
- [12] A. MESSIAH, *Quantenmechanik I, II*, deGruyter, 1976
- [13] H.R. PETRY, *Quantentheorie I*
- [14] J.J. SAKURAI, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley 1985
- [15] L.I. SCHIFF, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1968
- [16] S. WEINBERG, *The Quantum Theory of fields, Volume I-III*, Cambridge University Press