

# Quantenmechanik

## Skript

Nach Vorlesungen von Prof. Dr. Herbert Mütter:  
Quantenmechanik I, im Wintersemester 1997/98  
Quantenmechanik II, im Sommersemester 1998

Vorlesungsmitschriebe von  
Susanne Uhl  
Sven Ganzenmüller  
Frank Heuser

Ergänzt durch die nicht in Kreide gesetzten Worte von  
Sven Ganzenmüller  
Frank Heuser

Mit  $\text{\LaTeX}$  und  $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}\text{-}\text{\LaTeX}$  in Szene gesetzt, bearbeitet und ergänzt von  
Sven Ganzenmüller  
Frank Heuser

Korrigierte Fassung vom 5.8.1999

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>xv</b>
<b>Danksagung</b>	<b>xvi</b>
<b>QM I - Wintersemester 1997/98</b>	<b>1</b>
<b>0 Einleitung</b>	<b>3</b>
0.1 Vorbemerkung . . . . .	3
0.2 Warum ist die Quantenmechanik so revolutionär? . . . . .	4
Bewegungsbeschreibung des Systems . . . . .	4
„Weltbild“ der Wellen und Teilchen . . . . .	4
Messwerte . . . . .	4
Einfluss des Experiments auf das System . . . . .	4
0.3 Klassische Unterscheidung von Teilchen und Welle . . . . .	5
0.3.1 Gedankenexperiment: Der Doppelspalt . . . . .	5
0.3.2 Versuch mit makroskopischen Kugeln . . . . .	5
Versuchsablauf . . . . .	5
Ergebnis für makroskopische Teilchen . . . . .	6
0.3.3 Versuch mit Lichtwellen . . . . .	6
Versuchsablauf . . . . .	6
Ergebnis für Wellen . . . . .	7
0.3.4 Fazit unseres Gedankenexperiments . . . . .	7
0.4 Quantenmechanischer Dualismus . . . . .	8
0.4.1 Teilcheneigenschaften des Lichts . . . . .	8
Energiequanten . . . . .	8
Fazit . . . . .	8
0.4.2 Welleneigenschaften von Teilchen . . . . .	8
Interferenzen von Teilchen . . . . .	8
0.4.3 Quantenmechanische Deutung des Doppelspalts . . . . .	9
Kohärente Überlagerung . . . . .	9
Inkohärente Überlagerung . . . . .	10
0.4.4 Welle-Teilchen-Dualismus . . . . .	10
Teilchen in der Quantenmechanik . . . . .	10
Wellen in der Quantenmechanik . . . . .	10
Zusammenfassung . . . . .	11
Wo sind die makroskopischen Quanten? . . . . .	11
Größenordnungsvergleich . . . . .	11

0.4.5	Historische Hinweise zur Dualität . . . . .	12
	Welleneigenschaften von Teilchen . . . . .	12
	Teilcheneigenschaften von Wellen . . . . .	12
<b>1</b>	<b>Wellenmechanik eindimensionaler Systeme</b>	<b>15</b>
1.1	Lokalisierung von Wellen und Erwartungswerte . . . . .	15
1.1.1	Vorbemerkungen . . . . .	15
	Einstein-de-Broglie-Beziehungen . . . . .	15
1.1.2	Ebene Wellen . . . . .	16
	Wahrscheinlichkeit . . . . .	16
1.1.3	Observable . . . . .	18
1.1.4	Erwartungswert . . . . .	18
	Beispiele für Erwartungswerte . . . . .	19
1.1.5	Abweichung vom Mittelwert . . . . .	21
1.1.6	Die Dirac'sche Deltafunktion . . . . .	23
	Eigenschaften der $\delta$ -Funktion . . . . .	23
	Fouriertransformation und $\delta$ -Funktion . . . . .	24
1.1.7	Wellenpakete und Impulsverteilung . . . . .	25
	Impulsverteilung . . . . .	26
	Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses . . . . .	28
1.1.8	Die Heisenberg'sche Unschärferelation . . . . .	29
	Zusammenfassung am verwendeten Beispiel . . . . .	29
	Konsequenz für den Experimentator . . . . .	30
	Allgemeingültigkeit der Unschärfe . . . . .	30
1.1.9	Berechnung von Erwartungswerten des Impulses . . . . .	31
	Der Impulsoperator . . . . .	31
	Operatorreihenfolge . . . . .	33
1.1.10	Zusammenfassung . . . . .	33
	Zustand eines Systems . . . . .	33
	Der Wahrscheinlichkeitsbegriff . . . . .	34
	Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeit . . . . .	34
	„Dichte“ einer Wahrscheinlichkeit . . . . .	35
	Operatoren für Ort und Impuls . . . . .	35
	Berechnung von Erwartungswerten . . . . .	35
	Zeitverhalten . . . . .	36
	Herleitung der Quantenmechanik . . . . .	36
1.2	Schrödinger-Gleichung und Klassische Mechanik . . . . .	37
1.2.1	Poisson-Klammern . . . . .	37
1.2.2	Entwicklung von Observablen . . . . .	37
	Ortsentwicklung . . . . .	37
	Zeitentwicklung . . . . .	38
1.2.3	Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung . . . . .	39
	Hamilton-Operator und Bewegungsgleichung . . . . .	39
	Spezialfälle . . . . .	40
1.2.4	Ehrenfest'sches Theorem . . . . .	41
	Fazit . . . . .	44
1.3	Kontinuitätsgleichung . . . . .	45
1.3.1	Vorbemerkungen . . . . .	45
1.3.2	Kontinuitätsgleichung . . . . .	45
1.3.3	Wahrscheinlichkeitsdichtestromung . . . . .	47

1.3.4	Beispiel der ebenen Welle . . . . .	48
1.4	Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung . . . . .	50
1.4.1	Schrödinger-Gleichung und Zeitunabhängigkeit . . . . .	50
1.4.2	Energie . . . . .	52
	Erwartungswert des Hamilton-Operators . . . . .	52
	Eigenschaften der Energie . . . . .	52
1.4.3	Energie und Bewegung . . . . .	53
1.4.4	Beispiele . . . . .	54
	Konstantes Potential . . . . .	54
	Stückweise konstantes Potential . . . . .	56
	Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden . . . . .	57
1.4.5	Zusammenfassung . . . . .	59
1.5	Harmonischer Oszillator I . . . . .	62
1.5.1	Der klassische Harmonische Oszillator . . . . .	62
1.5.2	Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik . . . . .	62
1.5.3	Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung . . . . .	63
	Einleitung . . . . .	63
	Variablensubstitution . . . . .	63
	Ansatz für die Differentialgleichung . . . . .	65
	Ansatz in Schrödinger-Gleichung einsetzen . . . . .	67
	Diskretisierung . . . . .	68
	Zusammenfassung . . . . .	69
1.5.4	Lösungen mit diskreten Energien . . . . .	69
1.5.5	Parität . . . . .	71
1.5.6	Zusammenfassung . . . . .	73
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Quantenmechanik</b> . . . . .	<b>77</b>
2.1	Zustand, Observable und Hilbertraum . . . . .	77
2.1.1	Notation der Systembeschreibung . . . . .	77
	Klassische Beschreibung . . . . .	77
	Darstellungsäquivalenz in der Quantenmechanik . . . . .	77
	Bezugssystem-unabhängige Darstellung . . . . .	78
2.1.2	Hilbertraum und Dirac-Schreibweise . . . . .	78
	Wellenfunktion und Vektorraum . . . . .	78
	Eigenschaften des Hilbertraums . . . . .	79
	Eigenschaften des Skalarprodukts . . . . .	79
	Basis und Entwicklungskoeffizienten . . . . .	82
	Vektordarstellung der Zustände . . . . .	85
	Basistransformation . . . . .	85
2.1.3	Systembeschreibung mit dem neuen Formalismus . . . . .	88
	Orts- und Impulsdarstellung . . . . .	88
	Bemerkungen zu kontinuierlichen Basen . . . . .	90
	Zusammenfassung der Darstellungsarten . . . . .	91
	Messung von Observablen . . . . .	91
	Hilfsmittel: Adjungierte und hermitesche Operatoren . . . . .	94
2.2	Eigenzustände und Matrixdarstellung . . . . .	99
2.2.1	Eigenzustände . . . . .	99
2.2.2	Eigenzustände und die Basis des Zustandsraums . . . . .	100
2.2.3	Beispiele für Eigenwertprobleme in der Quantenmechanik . . . . .	102
2.2.4	Matrixdarstellung von linearen Operatoren . . . . .	104

	Bestimmung der Eigenwerte $a_i$ und Eigenzustände $ \alpha_i\rangle$	106
2.2.5	Hermitizität in Matrixdarstellung	106
2.3	Messung von Observablen	108
2.3.1	Zwei einleitende Beispiele	108
2.3.2	Wichtige Definitionen	108
2.3.3	Messung	109
2.3.4	Gleichzeitige Meßbarkeit	110
2.3.5	Beispiele zu Kommutatoren	113
	Anmerkung zu Eigenfunktionssysteme	113
2.3.6	Zusammenfassung	114
2.3.7	Heisenberg'sche Unschärferelation	115
	Beispiele	119
2.4	Kommutatorrelation und Poisson-Klammer	120
2.4.1	Quantisierungsbedingung	120
	Quantisierungsbedingung und Ehrenfest'sches Theorem	121
	Weitere Beispiele	122
2.4.2	Symmetrien und Erhaltungsgrößen	123
2.5	Harmonischer Oszillator II	127
2.5.1	Einleitung	127
2.5.2	Eigenschaften von $\hat{b}$	127
2.5.3	Der Hamilton-Operator durch $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$ dargestellt	129
2.5.4	Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung	130
	Einige mathematische Beziehungen	131
	Berechnung der Eigenwerte von $\hat{N}$	133
	Diskretisierung	134
	Grundzustand	134
	Angeregte Zustände	135
	Zusammenfassung	136
2.5.5	Die Bedeutung von $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$	137
2.5.6	Übergangsmatrix	137
	Übergangsmatrix für $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$	137
	Übergangsmatrix für $\hat{x}$ und $\hat{p}$	138
	Übergangsmatrix für $\hat{x}^2$	139
2.5.7	Berechnung der Wellenfunktionen	140
2.6	Variationsmethode in der Quantenmechanik	142
2.6.1	Energieminimum	142
2.6.2	Vorgehensweise anhand eines Beispiels	143
2.6.3	Allgemeine Vorgehensweise	144
<b>3</b>	<b>Der Drehimpuls in der Quantenmechanik</b>	<b>146</b>
3.1	Definition und grundlegende Eigenschaften	146
3.1.1	Der Drehimpuls in der Klassischen Mechanik	146
	Definition	146
	Eigenschaften des Drehimpulses	146
3.1.2	Der Drehimpuls in der Quantenmechanik	147
	Konstruktion	147
	Das Problem der Drehimpulserhaltung	150
	Der Operator $\hat{L}^2$	151
	Zusammenfassung	152
3.2	Algebraische Behandlung des Drehimpulses	153

3.2.1	Einleitung . . . . .	153
	Eigenschaften des $\hat{J}$ -Kommutators: . . . . .	153
	Der Operator $\hat{J}^2$ . . . . .	153
3.2.2	Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ . . . . .	154
	Das Eigenwertgleichungssystem . . . . .	154
	Eigenschaften der Operatoren $\hat{J}^+$ und $\hat{J}^-$ . . . . .	154
	Wirkung der Operatoren $\hat{J}^+$ und $\hat{J}^-$ . . . . .	155
	Eigenschaften der Eigenwerte $\hbar^2 a$ und $\hbar b$ . . . . .	156
3.3	Drehimpuls in Ortsdarstellung . . . . .	163
3.3.1	Einleitung . . . . .	163
3.3.2	$\hat{L}$ in Kugelkoordinaten . . . . .	165
3.3.3	Berechnung der Kugelflächenfunktionen . . . . .	166
	Bestimmung von $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ . . . . .	167
	Bestimmung von $\chi_{lm}(\vartheta)$ - Legendre-Polynome $P_{lm}(\xi)$ . . . . .	168
	Bestimmung der Legendre-Polynome $P_{lm}$ . . . . .	169
3.3.4	Beispiele . . . . .	171
	Bestimmung der $Y_{lm}$ für $m = 0$ . . . . .	171
	Bestimmung der $Y_{lm}$ für $m \neq 0$ . . . . .	172
3.3.5	Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ . . . . .	173
3.4	Die Schrödinger-Gleichung für das Zentralfeld . . . . .	175
3.4.1	Einleitung . . . . .	175
3.4.2	Die Kommutatoren von $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ mit $\hat{H}$ . . . . .	175
3.4.3	Die Lösungsfunktionen $\psi_{Elm}$ im Zentralfeld . . . . .	176
	Bestimmung der $R_{Elm}(r)$ . . . . .	176
	Bestimmung der $R_{El}(r)$ bzw. $u_{El}(r)$ . . . . .	177
3.4.4	Parität von Zuständen . . . . .	181
3.4.5	Normierung der $\psi_{Elm}$ . . . . .	183
3.5	Dreidimensionaler Harmonischer Oszillator . . . . .	184
3.5.1	Einleitung . . . . .	184
3.5.2	Bestimmung der $u_{El}$ . . . . .	184
3.5.3	Konsequenzen - Beispiel . . . . .	187
3.6	Wasserstoffatom . . . . .	189
3.6.1	Einleitung . . . . .	189
3.6.2	Hamilton-Operator und Schwerpunktskoordinaten . . . . .	189
	Schwerpunktskoordinaten . . . . .	189
3.6.3	Separation der Wellenfunktion . . . . .	191
3.6.4	Separierte Schrödinger-Gleichungen für das H-Atom . . . . .	193
3.6.5	Wasserstoffatom . . . . .	194
	Lösung der Schrödinger-Gleichung . . . . .	194
	Diskussion der verschiedenen Lösungen . . . . .	196
3.7	Numerische Lösung I . . . . .	198
3.7.1	Einleitung . . . . .	198
3.7.2	Numerische Lösung . . . . .	198
	Eine Möglichkeit zur numerischen Lösung . . . . .	199
3.8	Numerische Lösung II . . . . .	202
3.8.1	Einleitung . . . . .	202
3.8.2	Numerische Lösung . . . . .	202
	Berechnung der $C_{ia}, E_a$ : . . . . .	202
3.8.3	Beispiele . . . . .	203

<b>4</b>	<b>Spin und Rotation</b>	<b>206</b>
4.1	Der Teilchen-Spin . . . . .	206
4.1.1	Stern-Gerlach-Experiment . . . . .	206
	Versuchsanordnung . . . . .	207
	Wirkung eines $\vec{B}$ -Felds . . . . .	207
	Experimentelle Befunde . . . . .	207
	Magnetisches Moment . . . . .	208
	Energie und Kraft durch das Magnetfeld . . . . .	208
	Atome im inhomogenen Magnetfeld . . . . .	209
	Vorhersage für Silberatome . . . . .	210
4.1.2	Der Elektronenspin . . . . .	211
	Definition . . . . .	211
	Weitere Schreibweisen für den Spin . . . . .	212
	Eigenschaften des Spins . . . . .	213
	Spinoperatoren . . . . .	213
	Eigenschaften der Spin-Matrizen . . . . .	216
	Deutung des Stern-Gerlach-Versuchs . . . . .	217
4.2	Translation und Rotation . . . . .	218
4.2.1	Translation von Zuständen . . . . .	218
	Vorüberlegungen . . . . .	218
	Aufstellen des Translationsoperators . . . . .	219
	Eigenschaften des Translationsoperators . . . . .	221
4.2.2	Rotation von Zuständen . . . . .	222
	Vorüberlegungen . . . . .	222
	Aufstellen des Rotationsoperators . . . . .	223
	Vergleich von Rotations- und Translationsoperator . . . . .	226
4.2.3	Allgemeine Rotationen . . . . .	226
	Euler'sche Winkel . . . . .	227
	Eigenschaften des Rotationsoperators . . . . .	227
	Drehungen und Basisdarstellung . . . . .	229
	Drehung und Spin . . . . .	230
4.3	Experimente mit dem Stern-Gerlach-Magnet . . . . .	233
4.3.1	Einmalige Versuchsdurchführung und Operator $\hat{O}_{\text{App}}$ . . . . .	233
4.3.2	Sequenzielle Versuchsdurchführung . . . . .	234
	Zwei Filter hintereinandergeschaltet . . . . .	234
	Drei Filter hintereinandergeschaltet . . . . .	236
4.4	Kopplung von zwei Drehimpulsen . . . . .	238
4.4.1	Einleitung . . . . .	238
4.4.2	Drehimpulskopplung . . . . .	238
	Gekoppelter Drehimpuls . . . . .	238
	Eigenschaften des gekoppelten Drehimpulses . . . . .	239
	Gekoppelte Zustände . . . . .	241
	Clebsch-Gordon-Koeffizienten . . . . .	242
4.4.3	Zur Berechnung der Clebsch-Gordon-Koeffizienten . . . . .	243
4.5	Beispiele für Drehimpulskopplung . . . . .	246
4.5.1	Spin-Bahn-Wechselwirkung in der Atomphysik . . . . .	246
4.5.2	Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen $p$ und $n$ . . . . .	247
4.5.3	Quarkmodell . . . . .	248

<b>5</b>	<b>Zeitunabhängige Störungstheorie</b>	<b>250</b>
5.1	Störungstheorie ohne Entartung . . . . .	250
5.1.1	Grundlagen . . . . .	250
5.1.2	Ansatz . . . . .	251
	Grundüberlegungen zum gestörten Zustand . . . . .	251
	„Korrekturen“ am ungestörten Zustand . . . . .	253
5.1.3	„Störungstheorie“ 0. Ordnung . . . . .	254
5.1.4	Störungstheorie 1. Ordnung . . . . .	254
	Energiekorrektur in 1. Ordnung . . . . .	254
	Zustandskorrektur in 1. Ordnung . . . . .	255
5.1.5	Störungstheorie $n$ -ter Ordnung . . . . .	256
	Energiekorrektur in $n$ -ter Ordnung . . . . .	256
	Zustandskorrektur in $n$ -ter Ordnung . . . . .	256
5.2	Störungstheorie mit Entartung . . . . .	259
5.2.1	Grundlagen . . . . .	259
	Übergangsmatrix . . . . .	259
	Projektionsoperatoren . . . . .	260
5.2.2	Herleitung des effektiven Hamilton-Operators . . . . .	261
	Ansatz . . . . .	261
	Feshbach-Formalismus . . . . .	262
5.2.3	Anwendung . . . . .	264
5.3	Atome im elektrostatischen Feld . . . . .	266
5.3.1	Grundlagen . . . . .	266
	Das Wasserstoffatom im elektrostatischen Feld . . . . .	266
	Energiebeiträge der Matrixelemente . . . . .	267
5.3.2	Der Stark-Effekt . . . . .	268
	Quadratischer Stark-Effekt . . . . .	268
	Linearer Stark-Effekt . . . . .	268
5.4	Atome im Magnetfeld . . . . .	270
5.4.1	Der Zeeman-Effekt . . . . .	271
5.4.2	Der Paschen-Back-Effekt . . . . .	273
	Berechnung von $\hat{V}_I$ mit der Störungstheorie . . . . .	273
5.4.3	Zusammenfassung (zur Vorgehensweise) . . . . .	275
5.5	Pauli-Prinzip . . . . .	276
5.5.1	Unterscheidungskriterien für Teilchen . . . . .	276
5.5.2	Teilchen-Vertauschung . . . . .	278
	Der Teilchen-Vertauschungsoperator . . . . .	278
	Gemeinsames Eigenfunktionssystem zu $\hat{P}$ und $\hat{H}$ . . . . .	279
	Fermionen und Bosonen . . . . .	280
5.5.3	Pauli-Prinzip . . . . .	281
	Beispiele zum Pauli-Prinzip . . . . .	281
5.6	Modell des Festkörpers I . . . . .	285
5.6.1	Beschreibungsgrundlage . . . . .	285
5.6.2	Zweiatomiger Festkörper . . . . .	285
	Hamilton-Operator der Atomkette . . . . .	285
	Energieeigenwerte der Elektronen . . . . .	286
	Bestimmung der Eigenzustände . . . . .	286
5.6.3	Dreiatomiger Festkörper . . . . .	288
5.6.4	$N$ -atomiger Festkörper . . . . .	288
5.6.5	Festkörper im elektrostatischen Feld . . . . .	289



5.7	Modell des Festkörpers II . . . . .	291
5.7.1	Ansatz: Periodisches Potential . . . . .	291
5.7.2	Lösungen des periodischen Potentials . . . . .	291
	Impulswellenfunktion im periodischen Potential . . . . .	291
	Bestimmung der Wellenfunktion; Bloch-Funktion . . . . .	293
5.8	Das Mesonen-Austausch-Modell . . . . .	295
5.8.1	Hamilton-Operator des Zweikörperproblems . . . . .	295
	Schwerpunktsystem . . . . .	295
	Mesonenaustausch . . . . .	296
5.8.2	Yukawa-Potential . . . . .	296
	Ansatz für das Wechselwirkungspotential . . . . .	296
	Wechselwirkungspotential im Ortsraum . . . . .	297
	Eigenschaften des Yukawa-Potentials . . . . .	298
5.9	Die Bell'sche Ungleichung . . . . .	300
5.9.1	Nicht-lokale Korrelation im Zweiteilchensystem . . . . .	300
	Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon . . . . .	300
	Verborgene Parameter . . . . .	301
5.9.2	Die Bell'sche Ungleichung . . . . .	301
	Allgemeines Zweiteilchensystem mit Spin . . . . .	301
	Vorhersage für verborgene Parameter . . . . .	301
	Vorhersage der Quantenmechanik . . . . .	302
	Fazit des Widerspruchs . . . . .	303

**QM II - Sommersemester 1998 304**

<b>6</b>	<b>Quantendynamik</b>	<b>306</b>
6.1	Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild . . . . .	306
6.1.1	Einleitung . . . . .	306
6.1.2	Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$ . . . . .	307
	Gewünschte Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators	307
	Bestimmung des infinitesimalen Zeitentwicklungsoperators	308
	Bestimmung von $\hat{\Omega}$ . . . . .	309
	Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$ für $\hat{H}(\mathcal{X})$ . . . . .	310
	Entwicklung der Erwartungswerte mit der Zeit . . . . .	312
6.2	Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild . . . . .	313
6.2.1	Einleitung . . . . .	313
6.2.2	Operator mit Zeitabhängigkeit . . . . .	313
6.2.3	Heisenberg'sche Bewegungsgleichung . . . . .	313
6.2.4	Analogie der Poisson-Klammern . . . . .	314
6.3	Wechselwirkungsdarstellung . . . . .	316
6.3.1	Einleitung . . . . .	316
6.3.2	Zeitentwicklung in den verschiedenen Bildern . . . . .	316
6.3.3	Das Wechselwirkungsbild . . . . .	317
6.3.4	Bewegungsgleichung im Wechselwirkungsbild . . . . .	318
	Zustandsgleichung . . . . .	318
	Observablengleichung . . . . .	318
6.3.5	Zustände im Wechselwirkungsbild . . . . .	319
6.4	Zeitabhängige Störungstheorie . . . . .	322
6.4.1	Einleitung . . . . .	322

6.4.2	Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild . . . . .	322
6.4.3	Übergangswahrscheinlichkeit . . . . .	324
	Beispiel einer konstanten Störung . . . . .	325
	Fermis goldene Regel . . . . .	326
	Beispiel einer oszillierenden Störung . . . . .	327
6.5	Green'sche Funktion . . . . .	329
6.5.1	Propagator und Green'sche Funktion . . . . .	329
	Vergleich mit der Elektrodynamik . . . . .	330
6.5.2	Eigenschaften der Green'schen Funktion als Propagator . . . . .	330
6.5.3	Lehmanndarstellung der kausalen Green'schen Funktion . . . . .	331
	Stufenfunktion . . . . .	331
	Reihenentwicklung der Green'schen Funktion . . . . .	334
6.5.4	Beschreibung durch Feynmandiagramme . . . . .	335
6.6	Feynman'sche Wegintegrale . . . . .	337
6.6.1	Einleitung . . . . .	337
6.6.2	Propagator . . . . .	337
6.6.3	Vergleich mit der Klassischen Mechanik . . . . .	338
6.6.4	Übertragung in die Quantenmechanik . . . . .	338
<b>7</b>	<b>Streutheorie</b> . . . . .	<b>343</b>
7.1	Problemstellung . . . . .	343
7.1.1	Grundlagen . . . . .	343
7.1.2	Wirkungsquerschnitt . . . . .	344
	Interpretation der Begriffe . . . . .	345
7.1.3	Zeitunabhängige, asymptotische Betrachtung . . . . .	345
	Ansatz für die einlaufende Welle . . . . .	346
	Ansatz für die auslaufende Welle . . . . .	347
	Zusammenfassung zur asymptotischen Streulösung . . . . .	349
7.1.4	Streuung im realen Experiment . . . . .	349
7.2	Lippmann-Schwinger-Gleichung . . . . .	351
7.2.1	Grundlagen . . . . .	351
7.2.2	Lippmann-Schwinger-Gleichung . . . . .	352
	Ansatz: Umformen der Schrödinger-Gleichung . . . . .	352
	Green'sche Funktion als Darstellungsmatrix . . . . .	353
7.2.3	Lippmann-Schwinger in Impulsdarstellung . . . . .	354
7.2.4	Lippmann-Schwinger in Ortsdarstellung . . . . .	355
	Nebenrechnung: Bestimmung der Green'schen Funktion . . . . .	355
	Fortsetzung der Berechnung von $\psi$ . . . . .	359
7.2.5	Zusammenfassung . . . . .	360
7.3	Die $T$ -Matrix und das Optische Theorem . . . . .	362
7.3.1	Die „Transition“-Matrix . . . . .	362
	Motivation . . . . .	362
	Bestimmungsgleichung für $\hat{T}$ . . . . .	363
	Bedeutung der $T$ -Matrix . . . . .	364
7.3.2	Optisches Theorem . . . . .	366
	Beweis des Optischen Theorems . . . . .	367
	Interpretation des Optischen Theorems . . . . .	370
7.4	Die Born'sche Reihe . . . . .	372
7.4.1	Darstellung der $T$ -Matrix als Reihe . . . . .	372
	Konvergenz der Born'schen Reihe . . . . .	372

7.4.2	Møller-Operator . . . . .	373
7.4.3	Die Born'sche Reihe im Ortsraum . . . . .	374
	Deutung der einzelnen Reihenglieder . . . . .	374
	Born'sche Reihe als Feynman-Diagramm . . . . .	375
7.5	Born'sche Näherung . . . . .	376
7.5.1	Grundidee . . . . .	376
	Lokalität . . . . .	376
	Impulsübertrag . . . . .	377
7.5.2	Streuamplitude in Born'scher Näherung . . . . .	377
	Güte der Näherung . . . . .	379
7.5.3	Anwendung: Elektrischer Formfaktor . . . . .	379
	Streuamplitude und Elektrodynamik . . . . .	379
	Beispiele elektrischer Formfaktoren . . . . .	381
7.6	Streuamplitude und Streuphasen . . . . .	382
7.6.1	Betrachtungsweise des theoretischen Physikers . . . . .	382
	Spezialfall: Teilchen ohne Drehimpuls . . . . .	382
	Teilchen mit Drehimpuls . . . . .	383
	Vorteile der Darstellungsart . . . . .	384
7.6.2	Betrachtung aus der Sicht des Experimentators . . . . .	385
7.6.3	Vergleich der beiden Darstellungsarten . . . . .	386
7.6.4	Zusammenfassung der Phasenbetrachtung . . . . .	388
7.6.5	Überprüfung des Optischen Theorems . . . . .	388
7.7	Die „Distorted Wave Born Approximation“ (DWBA) . . . . .	390
7.7.1	Grundgedanke . . . . .	390
7.7.2	Aufspaltung des Potentials . . . . .	390
7.7.3	Aufspaltung der $T$ -Matrix . . . . .	392
7.7.4	Begriffsbildung . . . . .	393
7.7.5	Beispiele aus der Kernphysik . . . . .	394
<b>8</b>	<b>Vielteilchentheorie</b> . . . . .	<b>396</b>
8.1	Systeme von unterscheidbaren Teilchen . . . . .	396
8.1.1	Unabhängige Bewegung . . . . .	396
8.1.2	Abhängige Bewegung . . . . .	398
8.2	Symmetrisierung bei identischen Teilchen . . . . .	400
8.2.1	Einleitung . . . . .	400
8.2.2	Nomenklatur . . . . .	400
8.2.3	Operatoren in Vielteilchensystemen . . . . .	401
8.2.4	Der Vertauschungsoperator $\hat{P}_{ih}$ . . . . .	402
	Aussehen der (anti-)symmetrischen Wellenfunktionen . . . . .	404
8.2.5	Slater-Determinante . . . . .	407
8.2.6	Matrixelement eines Einteilchenoperators . . . . .	409
	Zusammenfassung . . . . .	410
8.3	Fock-Darstellung . . . . .	411
8.3.1	Einleitung . . . . .	411
	Vielteilchensysteme . . . . .	411
8.3.2	Fock-Darstellung . . . . .	412
8.3.3	Transformation . . . . .	413
8.3.4	Zweiteilchensysteme . . . . .	415
8.3.5	Ausblick . . . . .	419
8.4	Operatoren in der Fock-Darstellung . . . . .	420

8.4.1	Nomenklatur . . . . .	420
8.4.2	Operatoren . . . . .	421
	Einteilchenoperatoren . . . . .	422
	Antisymmetrische Vielteilchenoperatoren . . . . .	423
	Zweiteilchenoperatoren . . . . .	425
8.5	Wick'sches Theorem . . . . .	428
8.5.1	Einleitung . . . . .	428
8.5.2	Normalprodukt $\mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{Z})$ und Kontraktion $\mathcal{K}(\hat{U}\hat{V})$ . . . . .	428
8.5.3	Wick'sches Theorem . . . . .	430
8.6	Hartree-Fock-Gleichung . . . . .	433
8.6.1	Problembeschreibung . . . . .	433
8.6.2	Reduktion auf einen Einteilchen-Operator . . . . .	433
	Mögliche Ansätze . . . . .	433
	Optimale Näherung . . . . .	434
	Ansatz für die Einteilchen-Wellenfunktion . . . . .	434
	Hartree-Fock-Gleichung . . . . .	435
	Selbstkonsistenz-Problem . . . . .	437
	Abschließende Bemerkung . . . . .	438
8.7	Quasiteilchen; das BCS-Theorem . . . . .	439
8.7.1	Varianten zum Hartree-Fock-Verfahren . . . . .	439
	Superposition von Slater-Determinanten . . . . .	439
	Beimischungen . . . . .	439
8.7.2	Verallgemeinerung des Quasiteilchen-Ansatzes . . . . .	440
8.7.3	Allgemeines Quasiteilchen-Vakuum $ BCS\rangle$ . . . . .	442
	Sonderfälle . . . . .	442
	Teilchenpaare . . . . .	442
	Hamilton-Operator . . . . .	443
8.8	Symmetrieeigenschaft der Vielteilchensysteme . . . . .	446
8.8.1	Schalenmodell der Atomphysik . . . . .	446
8.8.2	Schalenmodell der Kernphysik . . . . .	446
8.8.3	Schalenmodell der Teilchenphysik . . . . .	446
8.8.4	Freies Vielteilchensystem . . . . .	447
8.8.5	Entartetes Fermigas . . . . .	447
<b>9</b>	<b>Relativistische Quantenmechanik</b> . . . . .	<b>449</b>
9.1	Begriffe der Speziellen Relativitätstheorie . . . . .	449
9.1.1	Lichtausbreitung . . . . .	449
9.1.2	4-er-Vektoren . . . . .	450
	Ortsvektor . . . . .	450
	Ko- und kontravariante Vektorschreibweise . . . . .	450
	Metrik der Raum-Zeit . . . . .	451
	Lorentz-Transformation . . . . .	452
	Geschwindigkeit . . . . .	453
9.1.3	Eigenzeit . . . . .	453
9.1.4	Impuls als 4-er-Vektor . . . . .	454
	Impuls und „effektive“ Masse . . . . .	454
	Energie und Impuls . . . . .	455
9.1.5	Vektor-Nomenklatur . . . . .	456
	Mischschreibweise . . . . .	456
	Metrischer Tensor . . . . .	457

	Transformationsverhalten kovarianter Vektoren . . . . .	458
	Rücktransformation . . . . .	458
	Differentiation . . . . .	459
9.1.6	Impulsoperator . . . . .	460
9.2	Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	462
9.2.1	Relativistische Schrödinger-Gleichung . . . . .	462
	Problematik . . . . .	462
	Zielsetzung . . . . .	463
9.2.2	Relativistische Wellenfunktion I . . . . .	463
	Ansatz . . . . .	463
	Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	463
9.2.3	Überprüfung der Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	464
	Zeitbetrachtung . . . . .	465
	Wahrscheinlichkeits- und Stromdichte . . . . .	465
9.2.4	Ergebnis durch Uminterpretation . . . . .	467
	Problem des Grenzfalls . . . . .	467
	Uminterpretation . . . . .	468
	Ansatz zur Erfüllung des Grenzfalls . . . . .	468
	Stromdichte . . . . .	469
	Ausblick . . . . .	469
9.3	Dirac-Gleichung . . . . .	470
9.3.1	Motivation . . . . .	470
9.3.2	Relativistische Wellengleichung II . . . . .	470
	Linearer Ansatz . . . . .	470
	Entwicklungskoeffizienten des Wurzeloperators . . . . .	470
	Dirac-Matrizen . . . . .	471
	Dirac-Gleichung . . . . .	473
	Vorläufige Interpretation des Beispiels . . . . .	474
	Ergebnis . . . . .	474
9.3.3	Kontinuitätsgleichung . . . . .	475
	Ergebnis . . . . .	476
	Zusammenfassen der Spinorkomponenten . . . . .	476
9.3.4	Ausblick . . . . .	476
9.4	Kovarianz der Dirac-Gleichung . . . . .	477
9.4.1	Schreibweise der Dirac-Gleichung . . . . .	477
	$\gamma$ -Matrizen . . . . .	477
	Dolch-Operator . . . . .	479
	Fragestellung . . . . .	479
9.4.2	Koordinatentransformationen . . . . .	479
	Beispielsystem . . . . .	479
	Koordinatentransformation . . . . .	480
	Kontravariante Transformationsmatrix . . . . .	481
	Kovariante Transformationsmatrix . . . . .	482
	Rücktransformation . . . . .	483
9.4.3	Lösung der Dirac-Gleichung . . . . .	484
	Zur Erinnerung . . . . .	484
	Lösung im Ruhesystem des Teilchens . . . . .	485
	Lösung im Laborsystem . . . . .	486
	Allgemeiner Ansatz . . . . .	487
	Normierung . . . . .	488

9.4.4	Boost . . . . .	490
	Zielsetzung . . . . .	490
	Transformation des Dirac-Spinors . . . . .	490
	Ansatz für den Boost . . . . .	491
	Aufstellen des Boost-Operators . . . . .	492
	Boost-Beispiele . . . . .	492
9.4.5	Negative Energien . . . . .	494
	Ruhsystem . . . . .	494
	Laborsystem . . . . .	495
	Interpretation . . . . .	495
	Lamb-Shift . . . . .	496
9.4.6	Ausblick . . . . .	496
9.5	Dirac-Teilchen im Zentralfeld . . . . .	497
9.5.1	Vergleich mit der Schrödinger-Gleichung . . . . .	497
	Eigenfunktionssystem . . . . .	497
	Paritätsoperator . . . . .	497
9.5.2	Ansatz für die Lösung der Dirac-Gleichung . . . . .	500
	Separationsansatz . . . . .	500
	Eigenwertgleichungen für die Lösungsanteile . . . . .	500
	Formale Lösung . . . . .	503
	Wahrscheinlichkeitsdichte . . . . .	504
9.6	Ladung im elektromagnetischen Feld . . . . .	505
9.6.1	Klassische Elektrodynamik . . . . .	505
	Maxwellgleichungen . . . . .	505
	Elektrodynamik und Mechanik . . . . .	506
	Magnetfeld und Vektorpotential . . . . .	506
9.6.2	Dirac-Gleichung . . . . .	507
	Vektorpotential . . . . .	507
	Hamilton-Funktion . . . . .	508
	Hamilton-Operator . . . . .	509
	Dirac-Gleichung . . . . .	509
	Ansatz . . . . .	510
	Nichtrelativistischer Grenzfall . . . . .	511
	<b>Anhang</b>	<b>513</b>
	<b>A Griechisches Alphabet</b>	<b>513</b>
	<b>B Physikalische Konstanten</b>	<b>514</b>
	<b>C Zeichen und Symbolik</b>	<b>515</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>517</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>517</b>
	<b>Literaturauswahl</b>	<b>522</b>

# Vorwort

Zur Vorbereitung auf die Diplomprüfung in Theoretischer Physik entschlossen wir uns dazu, die Mitschriebe der Quantenmechanik-Vorlesungen von Herrn Mütter in eine lesbare Form zu bringen (unsere „Live-Mitschriebe“ erfüllen diesen Anspruch nicht). Ständige Präsenz in den Vorlesungen, Mitschrift des Tafelanschriebs und eine Art „Kommentierung“, also eine Niederschrift dessen, was Herr Mütter nur erzählt hat ohne es anzuschreiben, waren die Voraussetzungen für das vorliegende Skript.

Handschriftlich macht ein solches Projekt wenig Sinn, da es schwer zu ändern, zu ergänzen, und vor allem auch zu vervielfältigen ist. Nur ein Textverarbeitungssystem kann den richtigen Rahmen bieten. Nach (negativ ausgefallenen) Tests zum Thema Formeln mit „Standard Office-Paketen“ fiel die Wahl schnell auf L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X. In Hinblick auf die Einsetzbarkeit dieses Satz-Wissens auch für die Diplomarbeit, arbeiteten wir uns zunächst grob in die Befehlswelt von L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X ein. Während die ersten Kapitel entstanden, konnten wir unseren Befehlsschatz ergänzen; insbesondere um die Möglichkeiten der  $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ -Pakete – Dank der ausgezeichneten Darstellung in [Grätzer].

Nun zu den Abstrichen. Vor allem Abbildungen kommen zu kurz; mangels Zeit wurden sie weggelassen. Wo Herr Mütter eine Skizze angemalt hat, wurde sie jedoch wenigstens durch eine Bildunterschrift angedeutet. Die meisten Skizzen sind für das Textverständnis auch nicht unbedingt notwendig, sie dienen mehr der Auflockerung durch Visualisierung.

Einen Index zu erstellen ist wohl sehr aufwendig. Stattdessen versuchten wir den Text durch zusätzliche Gliederungsebenen sinnvoll (feiner) zu unterteilen, um den „Handlungsgang“ offensichtlicher zu gestalten. Im Inhaltsverzeichnis führen wir alle vier Überschriftsebenen auf, so dass auch ohne Index ein Navigieren möglich ist.

Ansonsten wurde die Struktur der Vorlesung beibehalten. Der Inhalt wurde von uns ergänzt und bearbeitet, so dass wir es (möglichst auf Anhieb) verstehen würden, würden wir es das erste Mal lesen. Vor allem dieser Anspruch hat viel Mühe gekostet und das Skript dick werden lassen. Wir sind dadurch jedoch unserem Ziel einer Prüfungsvorbereitung näher gekommen, und hoffen, dass auch Andere davon profitieren können.

# Danksagung

Wir danken!

Bleckmann Mode für Männer GmbH für die generöse Bereitstellung von tausenden von Seiten Konzeptpapier für mehrere Probeausdrucke.



**BLECKMANN**



QM I - Wintersemester  
1997/98



# Kapitel 0

## Einleitung

### 0.1 Vorbemerkung

Zu Beginn dieses Jahrhunderts wird die Klassische Mechanik durch neue Theorien abgelöst. Verschiedene Experimente führen zu Widersprüchen, wenn klassisch argumentiert wird. An die Stelle der Klassischen Mechanik treten Theorien, die die Experimente widerspruchsfrei erklären können. Gleichzeitig enthalten diese Theorien jedoch die Klassische Mechanik als Grenzfall. Sie sind somit keine Spezialfälle, sondern global gültig, wobei sich ihre Formeln auf die Klassischen reduzieren, solange die Größenordnungen der Parameter in einem „menschlichen“ Rahmen bleiben.

- Die *Relativitätstheorie*: Raum und Zeit werden gleichwertig behandelt; sie sind durch die Gravitation „geknauscht“. Sind die betrachteten Geschwindigkeiten klein gegen die Lichtgeschwindigkeit und die Körper nicht zu massiv, so kann man klassisch rechnen.
- Die *Quantenmechanik*: Die Physik des mikroskopischen Bereichs ist eine Revolution. Sie ist „kontraintuitiv“, ihre Voraussagen widersprechen manchmal dem „gesunden Menschenverstand“. Ihr Auftauchen löst einen Streit aus, der philosophischer und religiöser Natur ist.<sup>1</sup> Im makroskopischen Bereich, wenn die Maßstäbe und die auftretenden Energien nicht zu klein sind, darf klassisch gerechnet werden. Befindet man sich aber tief im mikroskopischen Bereich, versagt die menschliche Anschauung. Modelle können dies teilweise abfangen, man sollte sich allerdings davor hüten, sie zu wörtlich zu nehmen!

---

<sup>1</sup>Albert Einstein rückblickend zu seiner verzweifelten Suche nach einer einheitlichen Theorie der Quanten [Hermann, S. 193]:

„Es war, wie wenn einem der Boden unter den Füßen weggezogen worden wäre.“

## 0.2 Warum ist die Quantenmechanik so revolutionär?

Vergleichen wir die Klassische Mechanik mit der Quantenmechanik.

*Klassische Mechanik*

*Quantenmechanik*

### Bewegungsbeschreibung des Systems

Die Bewegungsgleichung mit den Anfangsbedingungen liefert eine eindeutige Vorhersage für die Zukunft eines Systems aus Punktteilchen.

Ausgehend von den *Hamilton'schen Bewegungsgleichungen*:

$$\boxed{\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}} \quad \boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}}$$

erhält man durch die Kenntnis der Anfangsbedingungen  $p_i(t_0)$  und  $q_i(t_0)$ , sowie der Hamilton-Funktion  $H$ , die dynamischen Parameter  $p_i(t)$  und  $q_i(t)$  des Systems.

Die dynamischen Variablen des Systems,  $p_i$  und  $q_i$ , sind nicht gleichzeitig bestimmbar. Des weiteren sind nur Aussagen über die *Wahrscheinlichkeitsverteilung* der betrachteten Größen möglich, also welcher Wert im Mittel vieler Messungen gefunden wird.<sup>2</sup>

### „Weltbild“ der Wellen und Teilchen

Klassische Teilchen (oft als Punktteilchen beschrieben), wie z.B. Elektronen, Nukleonen, oder die Erde, sind Teilchen und verhalten sich auch so. Wellen breiten sich wie Wellen aus. Beschrieben werden sie in der Elektrodynamik, Optik und Hydrodynamik.

Die strenge Trennung der klassischen Konzepte *Welle* und *Teilchen* wird ersetzt durch einen *Welle-Teilchen-Dualismus*. Wellen zeigen ein Teilchenverhalten, Teilchen können als Welle beschrieben werden.

### Messwerte

Messwerte sind kontinuierlich.

Für viele Messgrößen (Observablen) gibt es nur diskrete Messwerte; sie sind *quantisiert*.

### Einfluss des Experiments auf das System

Das Experiment hat keinen Einfluss auf das System; die Messapparatur stört die Messung (bei durchdachtem Aufbau) nicht.

Der Beobachter stört den Zustand des Systems durch jede Messung, und beeinflusst damit unmittelbar das Messergebnis.

<sup>2</sup> Vor allem dieser Punkt löste eine Krise aus: Wie präzise lässt sich die Natur voraussagen?

## 0.3 Klassische Unterscheidung von Teilchen- und Welleneigenschaften

### 0.3.1 Gedankenexperiment: Der Doppelspalt

Ein Gedankenexperiment soll die Unterschiede zwischen dem quantenmechanischen Welle-Teilchen-Dualismus und dem klassischen Modell verdeutlichen.

Wir betrachten eine idealisierte (vereinfachte) Darstellung des Doppelspalt-Versuchs.<sup>3</sup>

Abbildung 1: Schematischer Aufbau des Doppelspalt-Experiments.

### 0.3.2 Versuch mit makroskopischen Kugeln

Der Detektor misst, wie viele Teilchen  $n(x)$ , bei der Position  $x$ , auf dem Schirm auftreffen. Die Gesamtzahl der detektierten Teilchen sei  $N$ . Dann ist:

$$W(x) = \frac{n(x)}{N}$$

der Anteil der Kugeln die bei  $x$  ankommen.  $W(x)$  entspricht aber auch der Wahrscheinlichkeit für *eine* Kugel, dass sie gerade bei  $x$  den Schirm trifft. Die Verteilungsfunktion  $W(x)$  zählt Kugeln, ist also positiv definit, d.h.  $W(x) \geq 0$ .

#### Versuchsablauf

1. Zunächst wird der linke Spalt abgedeckt, so dass die Kugeln nur durch die rechte Öffnung fliegen können. Die Verteilung  $W_r(x)$  wird detektiert.

Abbildung 2: Verteilung der Kugeln bei abgedecktem linken Spalt.

2. Nun werden die Kugeln nur durch den linken Spalt gelassen. Die Verteilung  $W_l(x)$  entspricht (statistisch betrachtet) der von  $W_r(x)$ , bis auf eine Verschiebung durch den Abstand der Spalte.

Abbildung 3: Verteilung der Kugeln bei abgedecktem rechten Spalt.

3. Beide Spalte sind offen, man erhält die Summe der beiden Einzelverteilungen, da die Kugeln sich nicht gegenseitig beeinflussen:

$$W(x) = W_l(x) + W_r(x)$$

---

<sup>3</sup>Young führte das hier beschriebene Experiment mit Photonen aus (Young'scher Doppelspaltversuch), und zeigte damit den Dualismus für klassisch als Welle betrachtete Objekte (deren Theorie Einstein 1905 aufstellte).

Davisson und Germer waren die Ersten, die vergleichbare Experimente mit Elektronen durchführten (1927), und somit den Dualismus für Objekte zugänglich machten, die bisher als reine Teilchen betrachtet wurden (zumindest bis 1923, als de Broglie den Dualismus für Teilchen voraussagte).

Abbildung 4: Gesamtverteilung der Kugeln beim Doppelspalt.

### Ergebnis für makroskopische Teilchen

Bei makroskopischen Kugeln addieren sich die Einzelverteilungen ungestört zur Gesamtverteilung.

### 0.3.3 Versuch mit Lichtwellen

Der Einfachheit halber wählen wir monochromatische elektromagnetische Wellen. Die Wellenlänge soll  $\lambda$  sein, dann ist die zugehörige Wellenzahl  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ . Mit der Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c$  ist die (Kreis-)Frequenz  $\omega = ck$ . Die der Lichtwelle zugeordnete Wellenfunktion:

$$\phi(\vec{r}, t) = a \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

beschreibt die Ausbreitung der Wellen im Raum. Die Richtung des Wellenvektors  $\vec{k}$  gibt die Ausbreitungsrichtung der Welle an. Er steht gleichzeitig für die räumliche Periodizität der Welle.

Die Wellenfunktion selbst kann durch kein Experiment gemessen werden. Die Detektoren können nur die Intensität messen:<sup>4</sup>

$$I(x) = \phi^*(x) \phi(x)$$

Eventuell vorhandene Phaseninformationen gehen dabei verloren.<sup>5</sup> Auch hier ist die (Intensitäts-)Verteilung  $I = \phi^* \phi \geq 0$  positiv definit.

Wiederholen wir nun die drei Teilerperimente für Lichtwellen, wobei wir idealisiert den Spalt so klein wählen, dass nur jeweils eine Elementarwelle hinter dem Spalt entsteht.<sup>6</sup>

### Versuchsablauf

1. Zunächst wird wieder der linke Spalt abgedeckt. Wir sehen nochmals eine Verteilung wie in Abbildung 2. Die Wellenfunktion und die zugehörige Intensitätsverteilung sind gegeben durch:

$$\phi_r = \frac{a}{r_r} e^{-i\omega t} e^{ikr_r}$$

$$I_r = \phi_r^* \phi_r = \frac{a^2}{r_r^2}$$

( $r_r$  und  $r_l$  sind im Folgenden der Abstand der Schirmkoordinate  $x$  zur rechten bzw. linken Spaltöffnung.)

<sup>4</sup>Der Vereinfachung wegen betrachten wir nur eine Dimension der Verteilung auf dem Schirm.

<sup>5</sup>Ein Phasenfaktor  $e^{i\varphi}$  wird durch die Betragsquadratbildung mit seinem „negativen“ Gegenstück  $e^{-i\varphi}$  zu 1 wemultipliziert.

<sup>6</sup>Interferenzen, die durch Überlagerung verschiedener Wellenzüge ein und desselben Spalts zustandekommen, möchten wir also ignorieren. Das entspricht zwar nicht der Realität, da dieser Effekt jedoch nichts zu unseren Überlegungen beiträgt, können wir ihn getrost weglassen; wir idealisieren eben.

### 0.3. KLASSISCHE UNTERSCHIEDUNG VON TEILCHEN UND WELLE 7

2. Decken wir den rechten Spalt ab, so erhalten wir erwartungsgemäß Abbildung 3:

$$\phi_l = \frac{a}{r_l} e^{-i\omega t} e^{ikr_l}$$
$$I_l = \phi_l^* \phi_l = \frac{a^2}{r_l^2}$$

3. Sind nun beide Spalte offen, so interferieren die Lichtwellen der Elementarwelle des linken Spalts mit der des rechten Spalts. Die Wellenfunktionen addieren sich zwar ungestört:

$$\begin{aligned}\phi_{\text{ges}} &= \phi_r + \phi_l \\ &= a e^{-i\omega t} \left( \frac{e^{ikr_r}}{r_r} + \frac{e^{ikr_l}}{r_l} \right)\end{aligned}$$

für die Intensitäten ergibt sich jedoch ein zusätzlicher Interferenzterm:

$$\begin{aligned}I_{\text{ges}} &= \phi_{\text{ges}}^* \phi_{\text{ges}} \\ &= \left( a e^{i\omega t} \left( \frac{e^{-ikr_r}}{r_r} + \frac{e^{-ikr_l}}{r_l} \right) \right) \cdot \left( a e^{-i\omega t} \left( \frac{e^{ikr_r}}{r_r} + \frac{e^{ikr_l}}{r_l} \right) \right) \\ &= a^2 \left( \frac{1}{r_r^2} + \frac{1}{r_l^2} \right) + \frac{1}{r_r r_l} \left( e^{ik(r_r - r_l)} + e^{-ik(r_r - r_l)} \right) \\ &= a^2 \left( \frac{1}{r_r^2} + \frac{1}{r_l^2} + \frac{2}{r_r r_l} \cos(k(r_r - r_l)) \right)\end{aligned}$$

Abbildung 5: Intensitätsverteilung beim Doppelspalt mit Lichtwellen.

#### Ergebnis für Wellen

Die Intensitäten der einzelnen Wellenzüge addieren sich nicht ungestört wie die Wellenfunktionen:

$$I_{\text{ges}} \neq I_l + I_r$$

da die Wellen miteinander interferieren; es entsteht eine andere Gesamtintensität. Formal können wir die Differenz durch ein „Interferenzglied“ beschreiben:

$$I_{\text{ges}} = I_l + I_r + I_{\text{Interferenz}}$$

#### 0.3.4 Fazit unseres Gedankenexperiments

Bis hierhin ist die Welt noch klassisch in Ordnung. Unsere Kugeln zeigen das erwartete Teilchenverhalten, die Interferenzerscheinungen der elektromagnetischen Wellen sind uns seit Huygens bekannt.

## 0.4 Quantenmechanischer Dualismus

### 0.4.1 Teilcheneigenschaften des Lichts

#### Energiequanten

Ein Detektor für Licht ist der Szintillationszähler. Schwächen wir die Intensität eines detektierten Strahls, so kann man im Szintillationszähler einzelne Elektronen „erkennen“. Diese werden jeweils von einzelnen Photonen durch den *Photoeffekt* ausgelöst.

**Satz.** Die Energie des Lichts (allgemein aller elektromagnetischer Wellen) wird in Paketen der Energie:

$$\boxed{E_{\text{Photon}} = h\nu = \hbar\omega} \quad \text{Energiequant}$$

transportiert. Der Proportionalitätsfaktor  $\hbar := \frac{h}{2\pi}$  dieser Beziehung zwischen Energie und Frequenz ist eine Naturkonstante.

Das *Planck'sche Wirkungsquantum*  $h$  hat die Dimension von *Energie · Zeit* bzw. *Impuls · Länge*. Dies entspricht einer *Wirkung*.

$$h = 6,626\,075\,5(40) \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad \text{Planck'sches Wirkungsquantum}$$

#### Fazit

Elektromagnetische Wellen können sich wie Teilchen verhalten. Aber wie sieht es mit den Teilchen selbst aus?

### 0.4.2 Welleneigenschaften von Teilchen

#### Interferenzen von Teilchen

Wir wiederholen den Doppelspaltversuch mit monoenergetischen Elektronen. Den Elektronen wird zwischen Glühkathode und Gitteranode die kinetische Energie  $\frac{1}{2}mv^2 = eU$  mitgegeben, wenn  $U$  die Potentialdifferenz der beiden Elektroden ist. Mit dieser Energie werden sie in Richtung Doppelspalt „freigelassen“.

Abbildung 6: Doppelspaltversuch mit Elektronen.

Auf dem Schirm finden wir das Interferenzbild vor, dass wir schon vom Licht kennen!

Versuchen wir den Impuls des Teilchens in Beziehung zu dieser Welleneigenschaft zu bringen. Benutzen wir dazu die Impulsbeziehung  $p = \hbar k$ , wie sie auch für Photonen gilt, so gelangen wir zu:

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



Setzen wir in  $p = mv$  die nach  $v$  aufgelöste Energiebeziehung ein:

$$k = \frac{\sqrt{2meU}}{\hbar}$$

Ändert man die Beschleunigungsspannung  $U$ , so ändert sich also die den Elektronen mit Impuls  $p$  zugeordnete Wellenzahl  $k$ , und damit auch das Interferenzbild, das diese Elektronen auf dem Schirm hinterlassen.

### 0.4.3 Quantenmechanische Deutung des Doppelspalts

Wir haben gesehen, dass sich die Verteilung auf dem Schirm ändert, je nachdem, ob wir einen Spalt zuhalten, und somit wissen, durch welchen Schlitz das Teilchen fliegt, oder ob wir beide Wege freihalten, und damit nicht mehr rekonstruieren können, welchen Weg das Teilchen genommen hat.

Im ersten Fall addieren sich die Intensitäten der einzelnen Verteilungen, im zweiten Fall addieren sich die Wellenfunktionen; die Gesamtintensität erhält einen zusätzlichen Interferenzterm. Man muss also unterscheiden, wie die Überlagerung stattfindet.

Zu beachten ist dabei immer, dass wir in der Quantenmechanik nur Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $W(x)$  messen können. Von der Wellenfunktion selbst können wir nur das Betragsquadrat in Erfahrung bringen:

$$W(x) = \phi^*(x) \phi(x)$$

Wir müssen nun offensichtlich zwei Alternativen der Überlagerung von Wellenfunktionen bzw. ihrer Intensitäten betrachten. Eine ausführliche Darstellung dazu (und zum gesamten Doppelspalt-Experiment) findet sich in [Feynman, Kapitel 1]. Fassen wir die Unterschiede zusammen.

#### Kohärente Überlagerung

Sind beide Spalte offen, so sind die Wege, die ein Elektron von der Quelle zum Schirm zurücklegen kann, *ununterscheidbar*,

$$\phi = \sum_i \phi_i \stackrel{\text{z.B.}}{=} \phi_{1.\text{Spalt}} + \phi_{2.\text{Spalt}}$$

man spricht von einem *kohärenten Zustand*. Bei der Wahrscheinlichkeitsverteilung treten dann Interferenzglieder auf:

$$W(x) = \left| \sum_i \phi_i(x) \right|^2 = \sum_i W_i(x) + \text{Interferenzterme}$$

Kohärente Überlagerung heißt also, dass sich die Wellenfunktionen gegenseitig beeinflussen können. Sie addieren sich zu einer resultierenden Gesamtwellenfunktion, deren Intensität gemessen werden kann.

### Inkohärente Überlagerung

Sind die Wege *unterscheidbar* (indem man wechselweise die Spalte abdeckt, oder die Elektronen beim Passieren eines Spalts sichtbar macht), so findet keine Interferenz statt:

$$W(x) = \sum_i W_i(x) = \sum_i |\phi_i(x)|^2$$

Hier spricht man von einem *inkohärenten Zustand*. Die Wellenfunktionen der einzelnen Alternativen „kennen“ sich hier nicht. Entsprechend addieren sich nur ihre Ergebnisse, die Einzelintensitäten.

### 0.4.4 Welle-Teilchen-Dualismus

#### Teilchen in der Quantenmechanik

Vom Elektron wissen wir, dass es Teilcheneigenschaften besitzt:

- Definierter Ankunftsort (Punkt auf einem Schirm).
- Fliegt (nachweisbar) durch einen (konkreten) Spalt.
- Besitzt wohldefinierte Energie und Impuls.

Wir haben aber auch gesehen, dass Elektronen Eigenschaften einer Welle annehmen können:

- Bewegung durch einen Doppelspalt wie eine Welle, mit Beugungs- und Interferenzerscheinungen.

#### Wellen in der Quantenmechanik

Von elektromagnetischen Wellen kennen wir das typische Wellenverhalten:

- Beugung,
- Interferenz.

Bei genauerer Betrachtung findet man aber auch Teilcheneigenschaften:

- Wohldefinierte Energie  $\hbar\omega$ .
- Konkreter Impuls (z.B. Impulsübertrag auf Elektronen bei Photo- und Comptoneffekt).

### Zusammenfassung

Die Unterscheidung zwischen Teilchen und Wellen muss aufgegeben werden. Klassisch als Teilchen betrachtete Objekte zeigen Wellencharakter, während elektromagnetische Wellen (Newton würde dies gerne hören) Teilcheneigenschaften aufweisen. Wir sprechen vom *Welle-Teilchen-Dualismus*.<sup>7</sup>

### Wo sind die makroskopischen Quanten?

Verhalten sich makroskopische Objekte anders als mikroskopische? Warum sehen wir keine Interferenzen in der makroskopischen Physik?

Fest steht, dass die makroskopische Welt sich um viele Größenordnungen vom mikroskopischen Bereich unterscheidet. Des Weiteren sind viele makroskopische Ereignisse unmittelbar „messbar“ (Jeder sieht, ob ein Fahrgast durch die hintere oder vordere Türe des Busses aussteigt, diese Sichtbarkeit lässt sich nicht ohne weiteres abschalten). Zusammenfassend lässt sich sagen:

- Die makroskopischen Alternativen sind unterscheidbar.
- Entsprechend liegen inkohärente Zustände vor (ohne Interferenz).
- Die Energien sind im Vergleich sehr groß, so dass die Wellenlängen extrem kurz sind, gemäß dem oben berechneten Gesetz

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

### Größenordnungsvergleich

Vergleichen wir die Welten anhand zweier Beispiele.

**Beispiel (Mikroskopische Welt).** Ein Elektron wird mit 1 V beschleunigt; es gewinnt dabei folgende Energie:

$$E = 1 \text{ eV} = 10^{-6} \text{ MeV}$$

Die „Elektronenmasse“ beträgt:<sup>8</sup>

$$m_e c^2 \approx 0,5 \text{ MeV}$$

Das ergibt für die Wellenzahl:

$$k = \frac{\sqrt{2 \cdot 0,5 \cdot 10^{-6} (\text{MeV})^2}}{\hbar c} \approx \frac{10^{-3} \text{ MeV}}{200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}} = \frac{1}{2 \text{ \AA}}$$

Die Wellenlänge liegt also im  $\text{\AA}$ -Bereich ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ).<sup>9</sup>

<sup>7</sup>Hier könnte man natürlich die Frage stellen, ob die betrachteten Objekte Welle und Teilchen zugleich sind, den „Mantel“ bei Gelegenheit wechseln, oder doch eher keines von beidem sind, und man besser den Begriff des (Wellen- oder Teilchen-) *Charakters* verwendet. Die klassische Begriffswelt hinter sich lassend kann man die Objekte – stilecht – *Quanten* nennen.

<sup>8</sup>Der Teilchenphysiker spricht gerne von der Masse eines Teilchens, obwohl er eigentlich die Energie des Teilchens meint. Manche drücken sich korrekter aus und reden von der (Ruhe-)Masse in der Einheit „MeV über  $c^2$ “. Diese Sprechweise ergibt sich aus der berühmten Formel  $E = mc^2$ .

<sup>9</sup>Die Längeneinheit Femtometer ( $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ ) wird in der Kernphysik auch gerne als *Fermi* bezeichnet.

**Beispiel (Makroskopische Welt).** Eine Kugel der Masse  $m = 1\text{ g}$  falle aus der Höhe  $h = 1\text{ m}$  herunter.

$$k = \frac{1}{10^{-16}\text{ fm}} = \frac{1}{10^{-29}\text{ cm}}$$

Zwischen den Welten liegen also etwa 20 Größenordnungen!

## 0.4.5 Historische Hinweise (Experimente) zur Dualität

### Welleneigenschaften von Teilchen

Der Wellencharakter von Teilchen ist vielfach nachweisbar:

- Wellen- und Beugungsphänomene von Elektronen.
- Neutroneninterferometer.
- „Unendlich“ viele Experimente mit „Elementarteilchen“ (Elektron, Proton, Atomkern)<sup>10</sup>

Historisch zuerst entdeckt wurden jedoch die:

### Teilcheneigenschaften von Wellen

Entscheidende historische Experimente dazu sind:

- **Der Photoeffekt:** Photonen schlagen Elektronen aus ihrem Atom. Das Photon gibt seine gesamte Energie  $\hbar\omega$  an ein Elektron ab, das in einem Atom gebunden ist. Wenn das Energiequant  $\hbar\omega$  größer als die Bindungsenergie des Elektrons ist, verlässt das Elektron sein Atom mit der verbleibenden Energie:

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}m_e v_e^2 = \hbar\omega - E_{\text{Bindung}}$$

Abbildung 7: Photoeffekt.

- **Der Comptoneffekt:** Photonen streuen an (quasi-)freien Elektronen. Photon und Elektron führen einen Stoß aus, der mit Hilfe der klassischen Erhaltungsgrößen Energie:<sup>11</sup>

$$E_i = \hbar\omega_i = \frac{1}{2}m_e v_e^2 + \hbar\omega_f$$

<sup>10</sup>Als *Elementarteilchen* bezeichnet man genau genommen nur solche Teilchen, die sich nicht aus anderen zusammensetzen. Nach dem derzeit anerkannten *Standardmodell* der Teilchenphysik – siehe hierzu [Griffiths] – sind das Leptonen (Elektronen sind Leptonen), Quarks und Wechselwirkungsteilchen (wie z.B. das Photon – das Austauscheteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung). So sind z.B. Protonen, mit den Quarks als Konstituenten, keine Elementarteilchen. Deshalb stehen die Anführungszeichen im Text.

<sup>11</sup>Der Index  $i$  steht für den Ausgangszustand „initial“,  $f$  entsprechend für „final“.

und Impuls:

$$p_i = \hbar k_i = \hbar k_f + m_e v_e$$

berechnet werden kann, wenn dem Photon die Energie  $\hbar\omega$  und der Impuls  $\hbar k$ , entsprechend seiner Frequenz  $\omega$  und seiner Wellenzahl  $k$ , zugeordnet wird.

Abbildung 8: Comptoneffekt.

- **Schwarzer Körper (Hohlraumstrahler):** Bei diesem wichtigen Experiment wurde zum ersten Mal die Annahme der Quantelung physikalischer Größen zur Lösung eines Problems benutzt.

**Definition.** Ein Schwarzer Körper ist ein Objekt, das die gesamte auftreffende Strahlung absorbiert.

**Satz.** Ein Körper konstanter Temperatur strahlt ein Spektrum elektromagnetischer Wellen aus, das zeitlich konstant bleibt. Das Frequenzspektrum eines Schwarzen Körpers hängt alleine von seiner Temperatur ab.

Abbildung 9: Spektrum eines Schwarzen Körpers.

Im Hohlraumwürfel (endlichen Volumens) der Kantenlänge  $a$  bilden sich stehende Wellen. Die Zahl der möglichen Schwingungsmoden  $N$  ergibt sich

Abbildung 10: Stehende Wellen im Hohlraumstrahler.

aus der Summe über alle Knoten in die drei Raumrichtungen:

$$N = \sum_{n_x n_y n_z} \hat{=} \int d^3k \sim \int \omega^2 d\omega$$

Dabei gilt für die Wellenzahlen der möglichen Schwingungen ( $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$ ):

$$k_x = n_x \frac{\pi}{a}, \quad k_y = n_y \frac{\pi}{a}, \quad k_z = n_z \frac{\pi}{a}$$

Für jede Mode (jede stehende Welle bzw. Freiheitsgrad  $\omega_i = ck_i$ ) gibt es, nach dem Gleichverteilungssatz der klassischen Statistik, die mittlere Energie  $E = \frac{1}{2}k_B T$ .

Vor 1900 konnte die experimentell festgestellte spektrale Intensitätsverteilung  $I(\omega, T)$  zwar durch zwei Näherungsformeln berechnet werden; allerdings nicht im gesamten Spektrum. Die theoretische Beschreibung des gesamten Kurvenverlaufs konnten sie nicht leisten:

Für kleine  $\omega$  ( $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$ ) lieferten Rayleigh und Jeans mit obigen Überlegungen:

$$I \sim \omega^2 k_B T$$

Das Wien'sche Strahlungsgesetz setzte für große  $\omega$ , also  $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \gg 1$  die Proportionalität folgendermaßen an:

$$I \sim \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

Planck stellte die Hypothese der Energiepakete  $\hbar\omega$  auf. Die Wahrscheinlichkeit ein solches Energiepaket zu finden ist dabei:

$$W \sim e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

Mit diesem Ansatz gelang es Planck die Näherungsformeln durch eine exakte Berechnungsformel abzulösen.

**Satz.** Für alle Körper, die sich im thermischen Gleichgewicht befinden, gilt als spektrale Energiedichte  $\frac{dE(\omega, T)}{d\omega}$ :

$$I(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

Planck'sche Strahlungsformel

Diese Quantelung der Energie wurde später von anderen Physikern übernommen; Planck selbst sah sie nur als einen „Taschenspielertrick“, mit dem das richtige Ergebnis herauskam.

# Kapitel 1

## Wellenmechanik eindimensionaler Systeme

### 1.1 Erwartungswerte von Observablen und Lokalisierung durch Wellenpakete

#### 1.1.1 Vorbemerkungen

##### Einstein-de-Broglie-Beziehungen

Der Welle-Teilchen-Dualismus der Quantenmechanik manifestiert sich in den folgenden beiden Beziehungen:

$$\boxed{E = \hbar\omega}$$

Einstein'sche Beziehung

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

de-Broglie-Beziehung

Sie gelten „in beiden Richtungen“; sie definieren also die Welleneigenschaften eines Teilchens genauso wie die Teilcheneigenschaften einer Welle. In dieser letzten Konsequenz stellte Einstein seine Beziehung in der Korpuskulartheorie des Lichts von 1905 auf. de Broglie stellte 1923 die Hypothese auf, dass auch materielle Teilchen Wellencharakter besitzen können. Die de-Broglie-Beziehung konnte für Teilchen erst Jahre später in Elektronenbeugungsexperimenten bestätigt werden.

**Deutung.** Die Einstein-de-Broglie-Beziehungen verknüpfen die dynamischen Variablen des Teilchens mit den charakteristischen Größen der zugeordneten Welle.

- Einem Materieteilchen der Energie  $E$  entspricht eine Materiewelle der (Kreis-)Frequenz  $\omega$ .
- Einer ebenen Welle  $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$  ist eine gleichförmige Bewegung der Energie  $E$  in Richtung von  $\vec{k}$  zuzuordnen.

Die Einstein-de-Broglie-Beziehungen gelten auch im relativistischen Bereich. Dort muss allerdings beachtet werden, dass das „Verbindungsglied“ eine andere Form annimmt:

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

$m_0$  ist die Ruhemasse des betrachteten Teilchens,  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit.

### 1.1.2 Ebene Wellen

#### Wahrscheinlichkeit

Die Wellenfunktion zur Beschreibung einer Wellenbewegung lautet im einfachsten Fall:

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega t)}$$

wobei für ebene Wellen die Amplitude  $A = \text{const.}$  ist. Mit dieser Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  werden in der Elektrodynamik elektromagnetische Wellen beschrieben, wobei  $\omega$  eine Funktion von  $k$  ist<sup>1</sup>. In der Elektrodynamik finden wir weiter, dass das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $|\psi|^2 \equiv \psi^* \psi$  der Intensität der Welle entspricht. Das Experiment zeigt uns, dass diese Intensität im Falle von „Teilchenwellen“ der Nachweiswahrscheinlichkeit dieser Teilchen entspricht.

**Satz.** *Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen an einer bestimmten Stelle nachzuweisen, ist durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion gegeben, durch die unser Teilchen im Sinne des Welle-Teilchen-Dualismus beschrieben wird.*

Für dieses Betragsquadrat führen wir einen neuen Begriff ein:

**Definition.** *Die Wahrscheinlichkeitsdichte:*

$$\varrho(\vec{r}, t) := \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \equiv |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

*entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen, das durch die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  beschrieben wird, am Punkt<sup>2</sup>  $\vec{r}$  gefunden wird.*

Wir berechnen damit die „Teilchendichte“ unserer ebenen Welle:

$$\varrho(x, t) := \psi^* \psi = |A|^2 = \text{const.}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer ebenen Welle liefert uns keine Information! Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist im ganzen Raum gleich. Damit hat man im Prinzip ein freies Teilchen vorliegen. Wegen der in Kürze vorgestellten Normierungsbedingung kann jedoch eine ebene Welle keine physikalischen Teilchen beschreiben.<sup>3</sup> Zur formelmäßigen Erfassung echter Teilchen benötigen wir den

<sup>1</sup>Die Verknüpfung  $\omega = \omega(k)$  wird als Dispersion bezeichnet. Für elektromagnetische Wellen im Vakuum gilt  $\omega = c|k|$

<sup>2</sup>Genau genommen ist es nicht die Wahrscheinlichkeit an einem (mathematischen) Punkt, sondern in einem infinitesimalen Volumenelement  $d^3r$  um den Punkt.

<sup>3</sup>In manchen Fällen genügt es, eine Wellenfunktion durch eine ebene Welle zu „näheren“ um ein Problem hinreichend genau zu beschreiben.



Begriff des Wellenpakets. Für ein solches Wellenpaket wird dann  $\varrho$  nicht mehr konstant sein, sondern eine „echte“ Verteilung liefern.

Betrachten wir nun eine ortsabhängige (und zeitunabhängige<sup>4</sup>) Wellenfunktion  $\psi(x)$ . Mit  $A = A(x)$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\varrho(x) = |A(x)|^2 \neq \text{const.}$$

Wenn die Amplitude von  $x$  abhängt, haben wir sicher keine „schöne“ ebene Welle mehr, mit der es sich so gut rechnen lässt.

Um physikalisch sinnvolle Teilchen beschreiben zu können, müssen wir eine Forderung an die Wahrscheinlichkeitsdichte, und damit auch an die Wellenfunktionen stellen.

**Satz (Normierungsbedingung).** *Wir normieren die Gesamtwahrscheinlichkeit auf eins. Diese Normierungsbedingung garantiert uns, dass sich das Teilchen (als Ganzes) irgendwo im betrachteten Raum aufhält:*

$$\int_V \varrho(\vec{r}) d^3r = 1 \quad \text{Normierungsbedingung}$$

Erst mit dieser Normierungsbedingung können wir genauer formulieren:

**Satz.** *Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(\vec{r})$  gibt uns die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen im vorgegebenen Volumen am Ort  $\vec{r}$  zu finden.*

Abbildung 1.1: Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x)$

**Beispiel.** Sei die Wellenamplitude  $A(x) = \gamma e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$ . Dieses  $A(x)$  beschreibt die Ortsabhängigkeit der Wellenfunktion ( $a$  gibt hierbei die Genauigkeit des Aufenthaltsortes an, bzw. die Breite der Verteilung). Die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich dann zu:

$$\varrho(x) = \gamma^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

Der Faktor  $\gamma$  soll sichern, dass obige Normierungsforderung erfüllt wird. Wir müssen also zunächst diesen Normierungsfaktor  $\gamma$  berechnen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x) dx = \gamma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx \stackrel{[\text{Bronstein}]}{=} \gamma^2 a \sqrt{\pi}$$

Aus der Normierungsbedingung  $\int \varrho dx = 1$  folgt für  $\gamma$ :

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

---

<sup>4</sup>Zeitunabhängig soll hier heißen, dass uns zunächst nur die Abhängigkeit vom Ort interessiert; die Zeit lassen wir während der Betrachtung mit  $t = 0$  feststehen.

Unsere Wellenfunktion<sup>5</sup> ist damit:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A(x) e^{ik_0 x} \\ &= \gamma e^{-\frac{x^2}{a^2}} e^{ik_0 x} \\ &= \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0 x} \quad (\psi_{\text{Beispiel}})\end{aligned}$$

Das Teilchen ist also um  $x$  lokalisiert, mit einer gewissen Abweichung  $\Delta x$ . Es ist nicht exakt am Punkt  $x$  lokalisierbar.<sup>6</sup>

### 1.1.3 Observable

Größen, die wir theoretisch zu beschreiben versuchen, sind grundsätzlich solche, die wir auch im Experiment messen können. Wir nennen sie auch gerne physikalische Größen. Nur für sie können wir die Theorie durch das Experiment überprüfen. Vor allem in der Quantenmechanik hat sich für diese „beobachtbaren“ Größen der Begriff *Observable* eingebürgert.

### 1.1.4 Erwartungswert

Die Quantenmechanik liefert uns Wahrscheinlichkeitsaussagen über ein System. Um diese zu verifizieren muss im Experiment eine große Anzahl von Messungen unter identischen Bedingungen durchgeführt werden. Ein für solche Messreihen aussagekräftiges Ergebnis für eine Observable  $q$  ist ihr Mittelwert  $\bar{q}$ .

In der Quantenmechanik wird das System, das wir beobachten, durch eine Wellenfunktion  $\psi$  beschrieben. Deren Ortsverteilung ist  $\varrho(x) = \psi^* \psi$ . Der Mittelwert einer Observablen  $f(x)$  hängt sicherlich davon ab, wo sich das System bevorzugt aufhält. Man findet folgende Beziehung:

**Satz.** Der Mittelwert  $\bar{f}(x)$  einer Observablen  $f(x)$  eines Systems, dessen Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x)$  ist, ist gegeben durch:

$$\bar{f}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \varrho(x) dx$$

**Beispiel.** So ist der Mittelwert für die Observable „Ort“  $x$  gegeben durch:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \varrho(x) dx$$

Dieser theoretische Wert gibt den im Experiment gemessenen (wenn wir  $x$  oft genug messen) um so besser wieder, je genauer die gewählte Wellenfunktion unser Teilchen beschreibt.

<sup>5</sup>Diese konkrete Wellenfunktion zieht sich als Beispiel durch die weiteren Betrachtungen. Wir nennen sie deshalb „ $\psi_{\text{Beispiel}}$ “ und verweisen gegebenenfalls auf diese Seite.

<sup>6</sup>Eine Messreihe des Aufenthaltsortes würde eine Verteilung der Messpunkte entsprechend Abbildung 1.1 ergeben.

Für unsere Beispiel-Wellenfunktion ist dies:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \left( \int_0^{+\infty} x e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx + \int_{-\infty}^0 x e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx \right) \\ &= 0\end{aligned}$$

Also der Koordinatenursprung.

In der Quantenmechanik hat sich eine andere Begriffswelt und Nomenklatur entwickelt, deren Relevanz wir erst später erkennen werden. Dazu ordnen wir  $\varrho = \psi^*\psi$  im Integral um und nennen quantenmechanische Mittelwerte fortan *Erwartungswerte*:

**Definition.** Der Erwartungswert einer Größe  $f(x)$  ist definiert als der Mittelwert von  $f(x)$  bezogen auf die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x) = \psi^*\psi$ :

$$\langle f \rangle \equiv \langle \psi | f | \psi \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) f(x) \psi(x) dx$$

**Notation.** Beachte die abkürzende Schreibweise  $\langle f \rangle$  in der Definition. Sie kann nur verwendet werden, wenn eindeutig ist, auf welche Wellenfunktion sich der Erwartungswert bezieht. Ist dies unklar, so muss der Erwartungswert ausgeschrieben werden. Manchmal wird dann auch  $\langle f \rangle_\psi$  geschrieben.

**Bemerkung.** Man darf den Erwartungswert  $\langle f \rangle$  nicht mit dem zeitlichen Mittelwert einer Messung zeitabhängiger Vorgänge verwechseln. Er stellt den Mittelwert einer Menge identischer Einzelmessungen (eines statischen Systems) dar.

### Beispiele für Erwartungswerte

**Beispiel.** Betrachte die Observable „Ort“:

$$f(x) = x$$

Ihr Erwartungswert ist:

$$\langle f(x) \rangle = \langle x \rangle$$

Er charakterisiert den mittleren Aufenthaltsort des Teilchens, also den Ort, an dem das Teilchen mit der größten Wahrscheinlichkeit gemessen werden kann.

Wenn wir die Wellenfunktion kennen, können wir die Wahrscheinlichkeitsdichte berechnen. Der Erwartungswert einer physikalischen Messgröße (z.B. der Auftreffpunkt eines Photons auf dem Schirm hinter einem Doppelspalt) ist die Gewichtung dieser Messgröße mit der Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktion.

**Beispiel.** Sei  $f(x)$  ein ortsabhängiges Potential:

$$f(x) = V(x)$$

Der Erwartungswert ist dann gegeben durch:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \varrho(x) dx$$

Bevor wir dieses Beispiel konkretisieren können, benötigen wir noch eine:

**Definition (Gamma-Funktion).** *Es ist:*<sup>7</sup>

$$\Gamma(k+1) = k\Gamma(k)$$

mit den speziellen Funktionswerten:

$$\Gamma(1) = 1 \qquad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

Abbildung 1.2: Potentialverlauf.

**Beispiel.** Damit können wir konkreter werden:  $V(x) = bx^k$ .

Der Erwartungswert ist dabei:

$$\begin{aligned} \langle bx^k \rangle &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} bx^k e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx \\ &= \frac{b}{a\sqrt{\pi}} \begin{cases} 0, & \text{für ungerade } k; \\ 2 \int_0^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} x^k dx = a^{k+1} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right), & \text{für gerade } k. \end{cases} \end{aligned}$$

**Beispiel.** Werden wir ganz konkret, und setzen  $k = 2$  ein.

Für  $k = 2$  benötigen wir den  $\Gamma$ -Funktionswert an der Stelle  $\frac{3}{2}$ :

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Daraus folgt für obigen Mittelwert:

$$\langle bx^2 \rangle = \frac{b}{a\sqrt{\pi}} a^3 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{ba^2}{2}$$

Wird  $a$  größer, so wird die Verteilung breiter.

Diese Berechnungen liefern uns als Information den Mittelwert einer Observablen. Die nächste Information die uns interessiert, ist die Schwankung um das Mittel, also eine Aussage über den Fehler einer Messung.

<sup>7</sup>Die Gleichungen sind genaugenommen nicht die Definition der  $\Gamma$ -Funktion, sondern Eigenschaften, die sich aus der Definition ergeben. Für unsere Zwecke spielt dies jedoch keine Rolle. Die genaue Definition findet sich z.B. in [Heuser-2, Abschnitt 150].

### 1.1.5 Abweichung vom Mittelwert

Zwar wissen wir noch nichts über die mittlere Streuung der Messwerte vom Mittelwert, die Abweichung der Einzelmessung können wir jedoch als Basis für weitere Untersuchungen verwenden.

**Definition.** Die Abweichungsfunktion  $g(x)$  gibt an, wie stark jede Einzelmessung  $f(x)$  vom Mittelwert abweicht.

$$g(x) := f(x) - \langle f \rangle$$

Da wir noch keine mathematische Beschreibung für die Schwankung der Messreihe kennen, versuchen wir es mit einem sinnvoll erscheinenden Ansatz, und prüfen diesen darauf, ob er physikalisch auswertbare Ergebnisse liefert.

1. Versuch um Informationen aus der Abweichungsfunktion  $g(x)$  zu gewinnen; Der Mittelwert der Abweichungsfunktion:

$$\begin{aligned} \langle g \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (f - \langle f \rangle) \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* f \psi dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \langle f \rangle \psi dx \end{aligned}$$

$\langle f \rangle$  ist eine Zahl und kann vor das Integral gezogen werden:

$$= \langle f \rangle - \langle f \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx$$

Mit der Normierung unserer Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} &= \langle f \rangle - \langle f \rangle \cdot 1 \\ &= 0 \end{aligned}$$

Ergebnis: Genauso viele Messungen liegen links wie rechts vom Mittelwert. Der Mittelwert der Abweichungsfunktion „bestraft“ aber jede Abweichung gleich, egal ob links oder rechts. Er liefert uns somit keine Information.

2. Versuch Diesmal quadrieren wir die Abweichungsfunktion, damit die Richtungsabhängigkeit der Abweichung wegfällt. Wir betrachten dazu den Mittelwert des Quadrats der Abweichungsfunktion:

$$\langle g^2 \rangle = \langle \psi | (f - \langle f \rangle)^2 | \psi \rangle$$

Klammern ausmultiplizieren:

$$= \langle \psi | f^2 - 2\langle f \rangle f + \langle f \rangle^2 | \psi \rangle$$

Erwartungswert in einzelne Terme auflösen:

$$= \langle f^2 \rangle - 2\langle f \rangle \langle \psi | f | \psi \rangle + \langle \psi | \langle f \rangle^2 | \psi \rangle$$

Abkürzende Schreibweise für alle Terme:

$$= \langle f^2 \rangle - 2\langle f \rangle \langle f \rangle + \langle \langle f \rangle^2 \rangle$$

Der Erwartungswert ist eine Zahl; der Erwartungswert einer Zahl ist diese selbst. Im letzten Term kann die Zahl  $\langle f \rangle^2$  herausgezogen werden (das dabei übrigbleibende Skalarprodukt  $\langle \psi | \psi \rangle$  ist wegen der Normierung eins):

$$\begin{aligned} &= \langle f^2 \rangle - 2\langle f \rangle \langle f \rangle + \langle f \rangle^2 \\ &= \langle f^2 \rangle - 2\langle f \rangle^2 + \langle f \rangle^2 \\ &= \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \end{aligned}$$

Es wird sich zeigen, dass dieser Ansatz sinnvoll ist.

**Definition (Mittleres Schwankungsquadrat).** *Das mittlere Schwankungsquadrat einer Funktion  $f$  ist gegeben durch den Erwartungswert der quadrierten Abweichungsfunktion:*

$$\boxed{(\Delta f)^2 := \langle g^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}$$

**Definition (Standardabweichung).** *Die Standardabweichung einer Funktion  $f$  ist durch die Wurzel des mittleren Schwankungsquadrats definiert:*

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

*Überprüfung des mittleren Schwankungsquadrats.* Wir möchten prüfen, ob die Definition eine sinnvolle Größe liefert. Betrachten wir hierzu wieder die ortsabhängige Wellenfunktion  $\psi_{\text{Beispiel}}$  von Seite 18:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0 x}$$

und die Observable „Ort“:

$$f(x) = x$$

Dann ist der Erwartungswert der Observable:

$$\langle f(x) \rangle = \langle x \rangle = 0$$

der Erwartungswert des Ortsquadrats:

$$\langle f^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2}$$

Das mittlere Schwankungsquadrat ergibt sich damit zu:

$$(\Delta x)^2 = \frac{a^2}{2} - 0^2 = \frac{a^2}{2}$$

und die Standardabweichung ist gegeben durch:

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

Die Definition des mittleren Schwankungsquadrats liefert einen Wert, der eine sinnvolle Aussage über die Breite der Verteilung liefert.  $\square$

Das mittlere Schwankungsquadrat  $(\Delta\xi)^2$  ist für beliebige Observable  $\xi$  benutzbar.

Später werden wir die Unschärfe einer Observable mit ihrer Standardabweichung identifizieren.

### 1.1.6 Mathematischer Einschub: Dirac'sche $\delta$ -Funktion

In diesem Abschnitt (eigentlich ständig) benötigen wir die Deltafunktion. Wir betrachten sie für eindimensionale Koordinaten (im dreidimensionalen Fall ändern sich im Prinzip nur die Vorfaktoren).<sup>8</sup>

**Definition ( $\delta$ -Funktion).** Die Dirac'sche  $\delta$ -Funktion lässt sich als Integral-kern mit folgender Eigenschaft definieren:<sup>9</sup>

$$f(x_0) := \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx$$

Die Integrationsgrenzen müssen nicht notwendigerweise den ganzen Raum abstecken. Allgemeiner könnte man definieren:

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx := \begin{cases} f(x_0), & \text{für } x_0 \in [a, b] \\ 0, & \text{für } x_0 \notin [a, b] \end{cases}$$

Ein Spezialfall dieser Definition ist mit  $x_0 = 0$  gegeben:

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

#### Eigenschaften der $\delta$ -Funktion

1. Symmetrie:

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

allgemeiner:

$$\delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x)$$

<sup>8</sup>Eine sehr ausführliche Darstellung zur  $\delta$ -Funktion findet sich im Anhang von [Cohen-2].

<sup>9</sup>Einem Mathematiker mag es grausen diese Integralschreibweise zu sehen, da das streng genommen für eine Distribution, was die  $\delta$ -Funktion eigentlich ist, nicht gerechtfertigt ist. Ein Physiker wird jedoch nicht in den Genuss kommen dies beachten zu müssen.

2. Faktor im Argument:

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$$

3. Argument als Vorfaktor:

$$x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$$

als Spezialfall davon:

$$x\delta(x) = 0$$

mit allgemeinem Vorfaktor:

$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0)$$

4. Überlappende  $\delta$ -Funktionen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y) \delta(x - z) dx = \delta(y - z)$$

5. Ist das Argument der  $\delta$ -Funktion eine Funktion,  $\delta(f(x))$ , so kann sie durch folgende Vorschrift auf die Form  $\delta(x - x_0)$  gebracht werden:

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i)$$

wobei  $x_i$  die Nullstellen  $f(x_i) = 0$  der Funktion  $f(x)$  sind.

### Fouriertransformation und $\delta$ -Funktion

Die Fouriertransformierte der Dirac'schen  $\delta$ -Funktion wird in der Quantenmechanik oft benutzt; mit ihrer Kenntnis lässt sich manches Integral vereinfachen:

$$\delta_{x_0}^{\text{FT}}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \delta(x - x_0) dx$$

Setzt man statt  $k$  den Impuls ein, so ändert sich der Vorfaktor:

$$\delta_{x_0}^{\text{FT}}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \delta(x - x_0) dx$$

Im Spezialfall  $x_0 = 0$  wird daraus eine Konstante:

$$\delta_0^{\text{FT}}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Oder mit geändertem Vorfaktor für  $p$ :

$$\delta_0^{\text{FT}}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$



Mit der inversen Fouriertransformation erhält man eine alternative Definition der  $\delta$ -Funktion:

$$\begin{aligned}\delta(x - x_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} dk \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p(x-x_0)}{\hbar}} dp\end{aligned}$$

### 1.1.7 Wellenpakete und Impulsverteilung

Eine ebene Welle  $\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$  beschreibt kein echtes physikalisches Teilchen, da mit der Amplitude  $A = \text{const.}$  auch die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$  im gesamten Raum konstant ist. Im Prinzip würde dies einem freien Teilchen entsprechen, jedoch ist ein solches  $\psi$  nicht normierbar, d.h. das Integral  $\int \varrho d^3r$  divergiert.

Wir müssen also Wellenfunktionen finden, die die realen Bedingungen erfüllen, nämlich dass *ein* Teilchen im gesamten Raum *genau ein ganzes mal* vorhanden ist.<sup>10</sup>

Es zeigt sich, dass für ebene Wellen das Superpositionsprinzip gilt. Lösen ebene Wellen die Bewegungsgleichung die unser System beschreibt, so lösen alle Linearkombinationen dieser Wellen wieder diese Differentialgleichung.

Eine solche Linearkombination lässt sich als Integral schreiben (Superposition – Summe – unendlich vieler ebener Wellen):

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int C(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k})t)} d^3k$$

Diese Superposition ebener Wellen nennt man ein (3-dimensionales) *Wellenpaket*, manchmal auch *Wellengruppe*.

Eine Wellenfunktion die eine Bewegungsgleichung löst, also ein physikalisches System dynamisch beschreibt, ist ein Wellenpaket.

Wir betrachten zunächst nur eindimensionale Probleme, z.B. Bewegungen in  $x$ -Richtung. Die Wellenfunktion hat dann folgende Form:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$$

Betrachten wir die Wellenfunktion nur zu einem konkreten Zeitpunkt (einfachheitshalber meist  $t = 0$ ):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

---

<sup>10</sup> Wenn im Folgenden immer wieder eine ebene Welle als Beispielwellenfunktion gewählt wird, so hat dies zwei Gründe. Zum einen lässt es sich mit ebenen Wellen sehr einfach rechnen; zum anderen liefern sie, für einfachere Problemstellungen, durchaus korrekte Ergebnisse. Die ebene Welle ist als Näherung für einfachere „physikalische“ Wellen geeignet.

Die hierin auftretende Gewichtungsfunktion  $C(k)$  der einzelnen Wellenzahlen  $k$  lässt sich als Fouriertransformierte von  $\psi(x)$  berechnen:

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

Wie  $\psi(x)$  die Ortsamplitude eines Teilchens ist, so ist  $C(k)$  dessen Impulsamplitude. In Analogie zur Ortswellenfunktion spricht man von der *Impulswellenfunktion*  $C(k)$  eines Teilchens.

### Impulsverteilung

Zusammenfassend können wir nun sagen:

**Satz.** Ein Wellenpaket  $\psi(x)$  ist eine Superposition von ebenen Wellen:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

Es hat die Impulsamplitude:

$$C(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx$$

Mit der  $\delta$ -Funktion gelingt uns der

*Beweis des Satzes.* Aus der Definition der  $\delta$ -Funktion:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \delta(x - x') dx'$$

Darstellung der  $\delta$ -Funktion ändern (inverse Fouriertransformation):

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk dx'$$

Vorfaktor und Exponentialfunktion aufspalten:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} e^{-ikx'} dk dx'$$

Integrale umordnen:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx'} \psi(x') dx' dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} C(k) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk \end{aligned}$$

□

**Interpretation**

- Aus Sicht der Mathematik:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

Wobei sich das Integral für diskrete Impulsverteilungen auf eine Summe reduziert:

$$\hat{=} \sum_j C_j e^{ik_j x} \quad \text{mit } p_j = \hbar k_j$$

- $C(k)$  ist die Fouriertransformierte<sup>11</sup> von  $\psi(x)$ .
  - $\psi(x)$  und  $C(k)$  enthalten äquivalente Informationen.
  - $\psi(x)$  und  $C(k)$  können ineinander umgerechnet werden (Einmal liegt die Teilcheninformation als Ort, einmal als Impuls vor).
- Physik
    - $C(k)$  ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein konkreter Impuls  $p = \hbar k$  auftritt.
    - Es gibt einen eindeutigen Zusammenhang zwischen einem lokalisierten Teilchen und seiner Impulsverteilung  $C(k)$ .
    - Wenn der Ort nicht genau definiert ist, dann ist es der Impuls, wenn der Ort eingegrenzt ist, so liegt eine breitere Impulsverteilung vor:  $x$  und  $p$  sind über eine Unschärfe(relation) miteinander verknüpft (Dazu gleich genaueres).

Man hat also zwei gleichwertige Darstellungen der Physik, die beide denselben quantenmechanischen Zustand beschreiben:

- $\psi(x)$ , die Ortsamplitude (oder Ortswellenfunktion) des Teilchens.
- $C(k)$ , die Amplitude für den wohldefinierten Impuls  $p = \hbar k$  des Teilchens.

Beachte die Verknüpfung von  $\psi(x)$  und  $C(k)$ : Je schärfer das eine, desto breiter ist das andere verteilt.<sup>12</sup>

**Beispiel.** Für unsere Wellenfunktion  $\psi_{\text{Beispiel}}$ :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0 x}$$

<sup>11</sup>Die Verteilung der Faktoren ist „Geschmackssache“, so wie hier definiert ist es für später praktisch. Man muss sich nur konsequent daran halten.

<sup>12</sup>Das ist eine Eigenschaft der Fouriertransformation, die ja beide Amplituden miteinander verbindet.

von Seite 18 berechnen wir die Impulswellenfunktion  $C(k)$ :

$$\begin{aligned} C(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi a\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x} dx \end{aligned}$$

Quadratische Ergänzung (Addition von 0 in der Exponentialfunktion):

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi a\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x + \frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2 - \frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2} dx$$

Umordnen der Terme im Exponenten („Binomi“ rückwärts):

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{2}a} - i\frac{a}{\sqrt{2}}(k_0 - k)\right)^2} dx$$

Substitution<sup>13</sup> liefert:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{2}a e^{-z^2} dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi a\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2} \cdot \sqrt{2} a \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

Zusammenfassen der Faktoren liefert als Ergebnis:

$$C(k) = \sqrt{a} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{a^2}{2}(k_0 - k)^2}$$

### Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

Wie die Ortswahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x)$  bilden wir analog eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(k)$  für den Impuls.

<sup>13</sup>Folgende Substitution:

$$z = \frac{x}{\sqrt{2}a} - i\frac{a}{\sqrt{2}}(k_0 - k)$$

bzw.:

$$x = \sqrt{2}az + ia^2(k_0 - k)$$

liefert für die Differentiale die Beziehung:

$$dx = \sqrt{2}a dz$$

**Definition.** Die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses ist:

$$W(k) := |C(k)|^2 = C^*(k) C(k)$$

**Satz.** Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen, das durch die Impulswellenfunktion  $C(k)$  beschrieben wird, den Impuls  $p = \hbar k$  besitzt, ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(k)$  des Impulses.

**Satz.**  $W(k)$  ist normiert:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(k) dk = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2(k_0-k)^2} dk = 1$$

Es ist eine Eigenschaft der Fouriertransformierten, dass, wenn  $\varrho(x)$  normiert ist, dies auch für das zugehörige  $W(k)$  gilt. Die Fouriertransformation erhält die Normierung.

**Definition.** Mit  $W(k)$  können wir Erwartungswerte für den Impuls berechnen:

$$\langle k \rangle \equiv \langle C | k | C \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) k C(k) dk$$

Die abkürzende Schreibweise  $\langle k \rangle$  ist nur sinnvoll, wenn klargestellt ist, auf welche Impulswellenfunktion  $C(k)$  sich die Erwartungswertbildung bezieht.

**Definition.** Mittleres Schwankungsquadrat des Impulses:

$$(\Delta k)^2 := \langle C | (k - \langle k \rangle)^2 | C \rangle = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$$

### 1.1.8 Die Heisenberg'sche Unschärferelation

#### Zusammenfassung am verwendeten Beispiel

Wir betrachten die Ergebnisse für unsere Wellenfunktion  $\psi_{\text{Beispiel}}$  von Seite 18. Mit der oben berechneten Impulswellenfunktion  $C(k)$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses:

$$W(k) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} e^{-a^2(k-k_0)^2}$$

Der Erwartungswert des Impulses:

$$\langle k \rangle = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2 a^2} k dk \stackrel{\text{Übung}}{=} k_0$$

Das Schwankungsquadrat:

$$(\Delta k)^2 \stackrel{\text{Übung}}{=} \frac{1}{2a^2}$$

Das mittlere Schwankungsquadrat des Ortes berechneten wir auf Seite 22:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{2}a^2$$

Multipliziert mit dem gerade berechneten Schwankungsquadrat des Impulses:

$$(\Delta x)^2(\Delta k)^2 = \frac{1}{4}$$

ausgedrückt mit  $p = \frac{\hbar}{k}$  ergibt sich:

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

ein Wert der unabhängig ist von  $a$ !

Abbildung 1.3: Impuls-Wahrscheinlichkeitsdichte.

Damit ist die vorige Überlegung zur Unschärfe bestätigt. Im Grenzfall  $\frac{1}{a} \rightarrow 0$  ist  $k = k_0$  scharf, dann ist  $A(x) = \text{const.}$  und somit  $x$  nicht mehr lokalisierbar. Umgekehrt wird für  $a \rightarrow 0$  der Ort  $x$  scharf, während  $\Delta k$  divergiert. Ausgedrückt durch die Standardabweichung erhalten wir für unser Beispiel:<sup>14</sup>

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Dieser Wert ist die untere Schranke für das Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe (bzw. dem Produkt der Breiten der zwei Verteilungen). Dieses Ergebnis wird jetzt mit der Heisenberg'schen Unschärferelation genauer erläutert.

### Konsequenz für den Experimentator

Wird der Impuls oder der Ort durch die Messapparatur eingeschränkt, so ist der Fehler in der Messung der anderen Observable entsprechend groß. Ist zum Beispiel durch das „Teilchen im Kasten“ ein kleiner Bereich  $\Delta x$  festgelegt, so kann der Impuls nicht mehr beliebig scharf gemacht werden.

### Allgemeingültigkeit der Unschärfe

**Satz (Heisenberg'sche Unschärferelation).** *Es ist grundsätzlich unmöglich den Ort und den Impuls eines Teilchens gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit zu messen. Mit der Beziehung:*

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Heisenberg'sche Unschärferelation

*als unterer Schranke, führt eine höhere Bestimmungsgenauigkeit der Ortskoordinate ( $\Delta x$  wird kleiner) zwangsweise (naturgegeben!) zu einer größeren Unschärfe der zeitgleichen Impulsmessung ( $\Delta p$  wird größer).*

<sup>14</sup>Beachte aber, dass das Ergebnis zunächst nur für das konkrete  $\psi_{\text{Beispiel}}$  gilt. Es wird sich jedoch zeigen, dass dieses Ergebnis generelle Gültigkeit besitzt.

Später werden wir sehen, dass nicht nur die Wirkung<sup>15</sup> „Ort mal Impuls“, sondern auch die Wirkung „Energie mal Zeit“ von diesem Zusammenhang betroffen ist.

### Bemerkungen.

- Dass das Produkt  $\Delta x \Delta k$  nach unten beschränkt ist, ist eine „klassische“ Beziehung zwischen den Breiten zweier Funktionen, von denen eine die Fouriertransformierte der anderen ist.
- In der Klassischen Mechanik gibt es eine solche Genauigkeitsbeschränkung nicht. [Cohen-1] zeigt am Beispiel eines Staubkorns, dass die Heisenberg'sche Unschärferelation auf makroskopischer Ebene von ihrer Größenordnung vernachlässigbar ist.

## 1.1.9 Berechnung von Erwartungswerten des Impulses

### Der Impulsoperator

Kennt man die Impulswellenfunktion  $C(k)$ , so kann man daraus direkt den Erwartungswert einer vom Impuls abhängigen Observablen berechnen:

$$\langle g(k) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) g(k) C(k) dk$$

Aber schon die Ortswellenfunktion genügt zur Berechnung (schließlich sind ja beide Funktionen zueinander äquivalent).

**Satz.** Die Erwartungswerte für den Impuls  $p = \hbar k$ , oder beliebige Funktionen  $g(p)$ , lassen sich direkt aus  $\psi(x)$  berechnen.

Man kann sich also die explizite Umrechnung mittels Fouriertransformation sparen; dazu brauchen wir aber eine:

**Definition (Der Impulsoperator).** Wir führen einen Operator ein der in der Quantenmechanik die Rolle übernimmt, die die Observable „Impuls“ in der Klassischen Mechanik hat. Wir ersetzen die Größe  $p$  durch den Operator  $\hat{p}$ :

$$p \longrightarrow \hat{p} := \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

Der so definierte Impulsoperator bezieht sich auf die Ortswellenfunktion  $\psi(x)$ .

**Bemerkung.** Welches „Aussehen“  $\hat{p}$  hat, hängt davon ab, in welcher Darstellungsart gerechnet wird, also bezüglich welcher Wellenfunktion,  $\psi(x)$  oder  $C(k)$ . Die Unterschiede zwischen Ortsdarstellung und Impulsdarstellung werden in der das Kapitel abschließenden Zusammenfassung erläutert.

<sup>15</sup>  $\hbar$  hat die Dimension einer Wirkung, daher auch der Name *Wirkungsquantum*. Das Produkt aus Länge und Impuls bzw. aus Energie und Zeit ergibt die Dimension einer Wirkung.

**Behauptung.** Mit der Ersetzung der Größe  $p$  durch ihren Operator  $\hat{p}$  lässt sich – wie im obigen Satz bestimmt – der Erwartungswert des Impulses mittels der Ortswellenfunktion  $\psi(x)$  darstellen:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

„Doppel“-Beweis. Mit der Ortswellenfunktion:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

und ihrer konjugiert komplexen Funktion:

$$\psi^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) e^{-ikx} dk$$

soll nach obiger Behauptung folgende Beziehung gelten:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx$$

Ausschreiben des Operators liefert:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

Einsetzen von  $\psi$  und  $\psi^*$ :

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k') e^{-ik'x} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk dk' dx$$

Differentiation ausführen:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k') e^{-ik'x} \frac{\hbar}{i} ik \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk dk' dx$$

Zusammenfassen der von  $x$  abhängigen Terme:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k') C(k) \hbar k \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix(k-k')} dx}_{\delta(k-k')} dk' dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k') C(k) \hbar k \delta(k-k') dk' dk \end{aligned}$$

Integration über  $dk'$ :

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) C(k) \hbar k dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) p C(k) dk \end{aligned}$$

Das ist die Definition des Erwartungswerts des Impulses. Der Operator  $\hat{p}$  liefert also das richtige Ergebnis.  $\square$



**Bemerkung.** Mit dem eben vorgestellten Impulsoperator lassen sich auch die Erwartungswerte beliebiger Funktionen berechnen, die vom Impuls  $p$  abhängen. Beachte aber, dass  $\hat{p}$  nur bezüglich der *Orts*wellenfunktion die Form  $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  besitzt.

**Beispiel.** Um den Erwartungswert von  $g(p) = p^2$  zu berechnen, ersetzt man  $p^2$  durch das Quadrat des Operators  $\hat{p}$ :

$$p^2 \quad \longrightarrow \quad \hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{i^2} \frac{d^2}{dx^2} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

### Operatorreihenfolge

Bei Rechnungen in der Quantenmechanik stoßen wir bald auf folgendes Problem. Klassisch gilt:

$$x \cdot p = p \cdot x$$

Wir werden uns die Frage stellen müssen, ob das auch für die Operatoren in der Quantenmechanik gilt. Zur Klärung berechnen wir den Erwartungswert in beiden „Richtungen“.

1.  $\hat{x}\hat{p}$ :

$$\langle \hat{x}\hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx$$

Hier wirkt die Ableitung nur auf  $\psi$ .

2.  $\hat{p}\hat{x}$

$$\langle \hat{p}\hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x \psi(x) dx$$

Jetzt wirkt die Ableitung auf das Produkt  $x\psi$ :

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \left( \psi(x) + x \frac{d}{dx} \psi(x) \right) dx$$

Diese einfache Rechnung zeigt, dass das Ergebnis durchaus von der Reihenfolge der Operatoren abhängen kann. Im Gegensatz zur Klassischen Mechanik muss in der Quantenmechanik also die Position der Operatoren beachtet werden! Wir werden später noch Regeln finden, die uns sagen, welche Reihenfolge die „richtige“ ist.

#### 1.1.10 Zusammenfassung

##### Zustand eines Systems

Das klassische Konzept der Bahn eines Teilchens wird durch den Begriff des von der Zeit  $t$  abhängigen *Zustands* des Teilchens ersetzt. Dieser Quantenzustand wird durch die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  beschrieben, die die gesamte (dynamische) Information, die man über das Teilchen erlangen kann, enthält.

$\psi(\vec{r}, t)$  wird als Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Aufenthalt des Teilchens interpretiert.

### Der Wahrscheinlichkeitsbegriff

Da viele der neuen Variablen oder Funktionen den Begriff Wahrscheinlichkeit in sich bergen, ist eine Verwechslung anfangs sehr wahrscheinlich. Deswegen seien sie kurz aufgeführt:

- $\psi(x)$  ist die eigentliche Wellenfunktion, oder Ortswellenfunktion. Sie wird auch Wahrscheinlichkeitsamplitude (für den Aufenthaltsort des Teilchens) oder Ortsamplitude genannt.  
 $C(k)$  ist entsprechend die Impulswellenfunktion (Wellenamplitude des Impulses oder Impulsamplitude) eines Teilchens.
- Die zugehörige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Teilchens am Ort  $x$  zur Zeit  $t$  ist proportional zu  $|\psi|^2$ . Diese Funktion ist die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x, t)$ . Man spricht auch von der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Teilchens.  
Analog ist die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Impuls proportional zu  $|C(k)|^2$ , der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $W(k)$  des Impulses eines Teilchens.
- Die später auftretende Wahrscheinlichkeitsdichteströmung<sup>16</sup>  $\vec{j}$  beschreibt die Bewegung des Teilchens, ausgedrückt durch die Wanderung (die Strömung) seiner Wahrscheinlichkeitsdichte aus einem Volumenelement hinaus (oder herein).

### Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeit

Der dynamische Zustand eines Systems wird charakterisiert durch die Ortswellenfunktion  $\psi(x)$  oder die dazu äquivalente Impulswellenfunktion  $C(k)$ . Daraus ergibt sich dann die Wahrscheinlichkeitsdichte für:

- den Aufenthaltsort des Teilchens:

$$\varrho(x) = \psi^*(x) \psi(x)$$

- den Teilchenimpuls:

$$W(k) = C^*(k) C(k)$$

wenn die Wellenfunktion normiert ist.

---

<sup>16</sup>Der Begriff Wahrscheinlichkeitsdichteströmung drückt aus, dass eine Wahrscheinlichkeitsverteilung wandert. Oft wird stattdessen der Begriff Wahrscheinlichkeitsstromdichte verwendet. Dieser ist nicht falsch, kann aber missverstanden werden, da er die Dichte eines Stromes implizieren kann, was aber nicht damit gemeint ist. Deshalb gehen wir bei der Einführung der Größe nochmals auf den Begriff ein.

**„Dichte“ einer Wahrscheinlichkeit**

Den Begriff der *Wahrscheinlichkeitsdichte* kann man sich folgendermaßen klar machen:<sup>17</sup> Wenn die möglichen Aufenthaltsorte des Teilchens ein Kontinuum bilden, so ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  in einem Volumenelement  $d^3x$  um die Stelle  $x$  zu finden proportional zu  $d^3x$  ( $c$  dient der Normierung):

$$d\mathcal{P}(\vec{x}, t) = c |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

Aufgelöst nach  $\varrho = |\psi(\vec{x}, t)|^2$  ergibt dies

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{1}{c} \cdot \frac{d\mathcal{P}(\vec{x}, t)}{d^3x}$$

Also eine *Wahrscheinlichkeit pro Volumenelement*, eben eine Wahrscheinlichkeitsdichte.

**Operatoren für Ort und Impuls**

Die physikalischen Observablen müssen wir durch quantenmechanische Operatoren ersetzen. Die Operatoren für die Observablen Ort und Impuls sind dabei durch die folgenden Terme definiert:<sup>18</sup>

**Im Ortsraum**, also im Bezug auf die Ortswellenfunktion  $\psi(x)$  ist:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= x \\ \hat{p} &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\end{aligned}$$

**Im Impulsraum**, das heißt bezüglich  $C(k)$  (dazu später noch mehr) gilt:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \\ \hat{p} &= p\end{aligned}$$

**Berechnung von Erwartungswerten**

Mittelwerte (Erwartungswerte) werden mit den Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  berechnet (Achte darauf, wo die Variable  $x$  oder  $p$ , und wo der Operator der entsprechenden Observablen steht):

$$\begin{aligned}\langle \hat{f}(\hat{x}) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f}(x) \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) \hat{f}(\hat{x}) C(k) dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) \hat{f}\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}\right) C(k) dk\end{aligned}$$

<sup>17</sup>Vgl. [Cohen-1, Abschnitt 1.2.2]

<sup>18</sup>In der Literatur wird gerne von *Ersetzungsregeln* gesprochen, da es keine strenge Herleitung gibt (Vgl. Fußnote 19).

und:

$$\begin{aligned}\langle \hat{g}(\hat{p}) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(k) \hat{g}(p) C(k) dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{g}(\hat{p}) \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{g}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx\end{aligned}$$

Die im Funktionsargument auftretenden Ableitungen wirken jeweils auf die hintere Wellenfunktion im Integral.

**Das mittlere Schwankungsquadrat** gibt uns ein Maß für den Messfehler an:

$$\begin{aligned}(\Delta \hat{f})^2 &= \langle (\hat{f} - \langle \hat{f} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \hat{f}^2 \rangle - \langle \hat{f} \rangle^2\end{aligned}$$

Mittels der Wurzel, der Standardabweichung, werden wir zur Heisenberg'schen Unschärferelation geführt.

### Zeitverhalten

Mit diesen Begriffen erhält man eine Beschreibung von physikalischen Zuständen (zu einem gegebenen Zeitpunkt) ausgedrückt durch Wahrscheinlichkeiten mit denen gegebene Observablen des Systems gemessen werden können.

Es stellt sich nun die Frage, wie sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Zeit ändert (wir sind jetzt noch hinter Newton, da bisher keine Dynamik im Spiel ist!). Davon handelt der nächste Paragraph.

### Herleitung der Quantenmechanik

Die quantenmechanischen Grundgesetze können nicht hergeleitet werden! Die Quantenmechanik ist der Klassischen Mechanik „übergeordnet“, nur im Grenzfall reduziert sich die Quantenmechanik auf die Klassischen Gesetze (Korrespondenzprinzip). Durch diesen Zusammenhang sind auch die Gesetze der Quantenmechanik gefunden worden. Die Schrödinger-Gleichung wird letztlich nur durch ihren Erfolg „bestätigt“.<sup>19</sup> Sie ist die einfachst mögliche Differentialgleichung, die den experimentellen Resultaten genügt.

---

<sup>19</sup>Richard Feynman meinte dazu:

„Woher haben wir diese Gleichung? Nirgendwoher. Es ist unmöglich sie aus irgend etwas Bekanntem herzuleiten. Sie ist Schrödingers Kopf entsprungen.“

Genauso wie Newtons Gesetze und die Maxwell'schen Gleichungen empirisch aufgestellt wurden.

## 1.2 Eine „Herleitung“ der Schrödinger-Gleichung aus der Klassischen Mechanik

In diesem Abschnitt benötigen wir die Poisson-Klammern aus der Klassischen Mechanik. Deswegen zunächst ein kurzer Rückblick.

### 1.2.1 Die Poisson-Klammern in der Klassischen Mechanik

**Definition.** Seien  $f(q_j, p_j)$  und  $g(q_j, p_j)$  stetige Funktionen der generalisierten Koordinaten und Impulse. Die Poisson-Klammern sind dann definiert durch:

$$\{f, g\} := \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right)$$

**Satz.** Die Poisson-Klammern sind invariant unter einer kanonischen Transformation:

$$\{f, g\}_{p_a, q_a} = \{f, g\}_{p_b, q_b}$$

Wobei  $p_a, q_a$  zu  $p_b, q_b$  kanonisch konjugierte Koordinaten sind.

### 1.2.2 Entwicklung von Observablen

Bisher betrachteten wir nur statische Verteilungen, zum Beispiel, wie die Wahrscheinlichkeit für das Auffinden eines Teilchens – zu einem konkreten Zeitpunkt  $t_0$  – über den Raum verteilt ist. Nun möchten wir die Systemdynamik ergründen, und fragen, wie die Wahrscheinlichkeiten sich mit der Zeit – oder mit anderen Größen – ändern. Mit „Entwicklung“ ist hier also die Veränderung einer Observable in Abhängigkeit von einer anderen Größe gemeint.

#### Ortsentwicklung

Sei  $\hat{\mathcal{O}}$  ein beliebiger Operator in Ortsdarstellung. Dann ist mit  $\psi(x, \mathcal{I})$  der Erwartungswert der zugehörigen Observable  $\mathcal{O}$  gegeben durch:

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{\mathcal{O}} \psi(x) dx$$

Konkrete Operatoren die wir in Abschnitt 1.1 behandelt haben:

- Impulsoperator  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$
- Ortsoperator  $\hat{x} = x$

Es stellt sich nun die Frage wie Ort und Impuls voneinander abhängen.

**Behauptung.** Der Impuls beschreibt eine infinitesimale Änderung von  $\psi(x)$  bezüglich  $x$ . Das heißt, dass für ein infinitesimales  $\varepsilon$  gilt:

$$\Delta\psi = \psi(x + \varepsilon) - \psi(x)$$

wobei die Differenz „ $\Delta$ “ von  $p$  abhängt.

*Beweis.* Mit der Taylorentwicklung, und  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  für die infinitesimale Ortsänderung, erhalten wir:

$$\Delta\psi = \psi(x + \varepsilon) - \psi(x)$$

Taylor für  $\psi(x + \varepsilon)$  eingesetzt:

$$\begin{aligned} &= \psi(x) + \varepsilon \frac{\partial\psi}{\partial x} + \dots - \psi(x) \\ &= \varepsilon \frac{\partial\psi}{\partial x} + \dots \\ &= \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{p} \psi(x) + \dots \\ &\approx \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{p} \psi(x) \end{aligned}$$

Der Operator  $\hat{p}$  erzeugt also, wie behauptet, eine infinitesimale Änderung von  $\psi$  in der Koordinate  $x$ . Man sagt,  $\hat{p}$  sei der *Generator der Ortsänderung*.  $\square$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit der kanonischen Transformation in der klassischen Mechanik.

**Satz (aus der Klassischen Mechanik).** *Ist  $g$  die Erzeugende einer infinitesimalen kanonischen Transformation, so berechnet sich die Änderung einer dynamischen Variable  $f$  unter dieser Transformation folgendermaßen:*

$$\Delta_\varepsilon f = f(p_{i\varepsilon}, q_{i\varepsilon}) - f(p_i, q_i) = \varepsilon \{f, g\}$$

**Beispiel.** Sei die Erzeugende  $g = p_i$ . Dann ergibt sich für die Änderung von  $f$ :

$$\begin{aligned} \Delta_\varepsilon f &= \varepsilon \{f, p_i\} \\ &= \varepsilon \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial p_i}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial p_i}{\partial q_j} \right) \\ &= \varepsilon \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \cdot \delta_{ij} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \cdot 0 \right) \\ &= \varepsilon \frac{\partial f}{\partial q_i} \end{aligned}$$

Also ist  $p_i$  die *Erzeugende* einer infinitesimalen Transformation von  $f$  bezüglich der Koordinate  $q_i$ .

Dies deckt sich mit der eben gefundenen Eigenschaft des quantenmechanischen Operators  $\hat{p}$  als Generator der Ortsänderung.

### Zeitentwicklung

Wie ändert sich der Zustand  $\psi(x, t)$  als Funktion von  $t$ ? Was ist  $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ ? Dazu vergleichen wir wieder:

**Satz (aus der Klassischen Mechanik).** *Ist die Hamilton-Funktion für eine infinitesimale Transformation einer Größe  $f$  verantwortlich, so gilt:*

$$\{f, H\} = \frac{df}{dt}$$

$H$  ist also der Generator der Zeitentwicklung.

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \Delta f &= \varepsilon \{f, H\} \\ &= \varepsilon \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) \\ &= \varepsilon \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) \\ &= \varepsilon \frac{df}{dt} \end{aligned}$$

□

Der letzte Rechenschritt folgt dabei aus dem totalen Differential:

$$df = \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} dp_j \right)$$

indem „durch  $dt$  geteilt“ wird.

### 1.2.3 Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

#### Hamilton-Operator und Bewegungsgleichung

Entsprechend den Ersetzungen für Ort und Impuls, muss nun auch die Hamilton-Funktion für die Quantenmechanik durch einen Hamilton-Operator ersetzt werden.

$$H(p, x) \longrightarrow \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$$

Dann ist nach den gerade dargestellten Beziehungen zwischen Funktionsänderungen und deren Erzeugenden, sowie der Verbindung zwischen Klassischer Mechanik und Quantenmechanik, der Hamilton-Operator für die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion „verantwortlich“. Wenn nun der Hamilton-Operator der Generator der Zeitentwicklung ist, so lässt sich mit ihm eine Bewegungsgleichung für quantenmechanische Systeme aufstellen. Wir erhalten somit eine Differentialgleichung, die unser System – bzw. Teilchen – durch eine Wellenfunktion dynamisch beschreibt. Diese Differentialgleichung ist die Schrödinger-Gleichung.

**Satz.** *Die zeitliche Entwicklung des Zustands  $\psi(x, t)$  wird bestimmt durch die Schrödinger-Gleichung:*

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Sie ist die Bewegungsgleichung quantenmechanischer Systeme. Aufgrund der expliziten Zeitableitung wird diese Differentialgleichung zeitabhängige Schrödinger-Gleichung genannt.<sup>20</sup>

Gerne wird die Kurzform verwendet:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\dot{\psi}$$

Diese Differentialgleichung wird durch das Experiment bestätigt.<sup>21</sup>

### Spezialfälle

Im Falle eines freien Teilchens nimmt der Hamilton-Operator die folgende einfache Gestalt an:

$$\hat{H}_{\text{frei}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung erhalten wir die Bewegungsgleichung eines freien Teilchens:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,t)} \quad \text{Freie Schrödinger-Gleichung}$$

Dies ist die *freie* oder *kräftefreie Schrödinger-Gleichung*.

**Beispiel.** Als konkreten Fall, um zu sehen, wie sich eine Hamilton-Funktion aus der Klassischen Mechanik in einen Hamilton-Operator der Quantenmechanik verwandelt, nehmen wir den eindimensionalen Harmonischen Oszillator. Klassisch lautet die Hamilton-Funktion des Oszillators:

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

Wir gehen über zum Hamilton-Operator, und damit zur Quantenmechanik, indem wir die Observablen  $p$  und  $x$  durch ihre Operatoren  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  ersetzen:

$$\begin{aligned} \hat{H} &\equiv \hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha \hat{x}^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \alpha x^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \alpha x^2 \end{aligned}$$

Mit diesem Hamilton-Operator können wir arbeiten.

<sup>20</sup> Von ihrem zeitunabhängigen Spezialfall wird der nächste Abschnitt handeln.

<sup>21</sup> Der Faktor  $i\hbar$  scheint zunächst inkonsistent zu  $\frac{\hbar}{i}$  bei  $\hat{p}$ , aber die Zeit ist etwas anderes als eine Ortskoordinate. Vergleiche dies mit der relativistischen Klassischen Mechanik – dort kommt bei Zeit auch ein  $i$  bzw. bei  $H$  ein Minus dazu.



**Bemerkung (zur Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung).**

Durch das Lösen der Gleichung erhält man die Zeitabhängigkeit, z.B. eines Erwartungswerts. Um eine Differentialgleichung 2. Ordnung in  $x$  und 1. Ordnung in  $t$  zu lösen, muss jedoch eine Anfangsbedingung  $\psi(x, 0)$  bekannt sein.

Zu lösen ist im Beispiel also folgende Differentialgleichung:

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

Hat man nun konkrete Anfangsbedingungen dazu vorgegeben, so lässt sich  $\psi(x, t)$ , und damit die Dynamik des Systems bestimmen.

**Fazit.** Der Vergleich mit der Klassischen Mechanik (z.B. Planetenbewegung) zieht sich wie ein roter Faden durch die „Gründerzeit“ der Quantenmechanik. Er lieferte z.B. das Ehrenfest-Theorem, das wir nun behandeln werden.

### 1.2.4 Quantenmechanische Erwartungswerte und Klassische Mechanik: Das Ehrenfest'sche Theorem

**Behauptung.** Wenn  $\psi(x, t)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, diese Gleichung also die zeitliche Änderung des Zustands  $\psi$  beschreibt, dann gelten für die mit  $\psi(x, t)$  berechneten Erwartungswerte die Gesetze der Klassischen Mechanik.

**Beispiel.** In der Klassischen Mechanik gilt:

$$\dot{p} = F$$

wobei  $F$  eine (eindimensionale) Kraft ist.

$$= -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Im dreidimensionalen Raum:

$$= -\text{grad } V$$

Nach der Behauptung muss also für die Quantenmechanik folgende „Zeitentwicklungsgleichung“ für den Erwartungswert  $\langle \hat{p} \rangle$  gelten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \langle \hat{F} \rangle \\ &= \left\langle -\frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \right\rangle \end{aligned}$$

Bevor wir die Behauptung beweisen, sei noch kurz die konjugiert komplexe Form der Schrödinger-Gleichung vorgestellt. Aus:

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

folgt durch Konjugation:

$$\hat{H}^* \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

Mit einer ortsabhängigen potentiellen Energie:

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

ist der Hamilton-Operator reell:

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

und somit gleich seinem konjugiert Komplexen:

$$= \hat{H}^*$$

Diese Identität<sup>22</sup> werden wir im folgenden Beweis<sup>23</sup> benutzen.

„Beweis“ des klassischen Verhaltens der Erwartungswerte.

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) dx$$

Differentiation ins Integral ziehen, Produktregel:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi + \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial t} \psi dx$$

Faktoren umformen:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} dx$$

Ersetzen der Zeitableitung – mittels der Schrödinger-Gleichung und ihrem konjugiert komplexen Gegenstück – durch den Hamilton-Operator:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \hat{H}^* \psi^* \right) \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( \hat{H} \psi \right) dx$$

Setzen wir den konkreten Hamilton-Operator  $\hat{H} = \hat{H}^*$  ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} &= \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx}_{\text{Term A}} + \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}(x) \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx \\ &\quad - \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) dx}_{\text{Term B}} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( \hat{V}(x) \psi \right) dx \end{aligned}$$

<sup>22</sup>Dass jeder Operator, der einer physikalischen Observablen zugeordnet ist, eng mit seinem konjugiert komplexen Ausdruck zusammenhängt, werden wir später kennenlernen.

<sup>23</sup>Ein echter Beweis ist dies nicht, da wir die Behauptung nur für das Beispiel der Kraft verwenden.

Eine Nebenrechnung soll helfen dies zu vereinfachen. Betrachte dazu Term  $A$ :

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^*}_{u'} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \psi}_v dx$$

Partielle Integration liefert:

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x}}_{uv} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}_{uv'} dx$$

=0

nochmalige partielle Integration:

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi}_{=0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) dx$$

$$= B$$

Bedingt durch das Minuszeichen vor Term  $B$  hebt sich dieser gegen  $A$  weg, die „Beweisformel“ reduziert sich um zwei Terme.<sup>24</sup> Ende der Nebenrechnung. Weiter im Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}(x) \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\hat{V}(x) \psi) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}(x) \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (\hat{V}(x) \psi) dx \end{aligned}$$

Produktregel für den hinteren Term:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}(x) \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \psi^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{V}(x) \right) \psi - \psi^* \hat{V}(x) \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{V}(x) \right) \psi dx \\ &= - \langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \rangle \end{aligned}$$

Womit man die Klassische Beziehung erhält. □

In 3 Dimensionen sieht diese Beziehung für die Erwartungswerte so aus:

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

Dies entspricht dem klassischen Newtonschen Gesetz. Für die Entwicklung der Quantenmechanik war diese Aussage (1927) ein wichtiger Eckpunkt:

<sup>24</sup>Bemerkung zu den verschwindenden Termen „...  $\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$ “ in der Nebenrechnung: In unserem Potential soll das Teilchen im Endlichen liegen. Die Funktion  $\psi(x)$  verschwindet entsprechend im Unendlichen. Die Grenzfälle  $\psi(x, t) |_{x \rightarrow -\infty}$  und  $\psi(x, t) |_{x \rightarrow +\infty}$  ergeben null.

**Satz (Ehrenfest'sches Theorem).** *Die Erwartungswerte von quantenmechanischen Größen gehorchen den klassischen Beziehungen. Insbesondere gilt:*

$$\boxed{m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{r} \rangle = -\langle \vec{\nabla} \hat{V} \rangle}$$

### Fazit

Wenn im Grenzfall das Newtonsche Axiom herauskommt, dann können wir davon ausgehen, dass die Quantenmechanik auch die anderen Gesetze der Klassischen Mechanik – ausgedrückt durch die Erwartungswerte – enthält. Statt der – unschärfebehafteten – Betrachtung von Ort und Impuls arbeitet man mit deren Erwartungswerten.

Die Quantenmechanik macht nur Aussagen über die Wahrscheinlichkeitsverteilung. Es zeigt sich nun, dass deren Erwartungswert die wichtigste Größe der betrachteten Observablen ist. Im Grenzfall der Klassischen Mechanik reduziert sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einen Wert, den Mittelwert, der dem Erwartungswert in der Quantenmechanik entspricht.

Experimentell muss eine Observable oft genug – unter identischen Bedingungen – gemessen werden. Als Ergebnis einer solchen Messreihe erhält man den Erwartungswert der Observable.

In Abschnitt 2.4.1 werden wir nochmals auf das Ehrenfest-Theorem zurückkommen.

## 1.3 Kontinuitätsgleichung

### 1.3.1 Vorbemerkungen

Aus der Elektrodynamik sollte die Ladungserhaltung bekannt sein, aus der die Kontinuitätsgleichung der Elektrodynamik folgt. Analog gibt es eine Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung) in der Mechanik von Gasen und Flüssigkeiten<sup>25</sup> (Teilchen, die durch die Begrenzungsfläche eines Volumens fließen) und, wie wir zeigen wollen, in der Quantenmechanik:

$$\frac{d\rho(\vec{r}, t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

$$\int_V \frac{d}{dt} \rho dV + \int_V \operatorname{div} \vec{j} dV = \frac{d}{dt} Q + \oint \vec{j} d\vec{f} = 0.$$

Abbildung 1.4: Kontinuitätsgleichung

In der Quantenmechanik haben wir es nicht mit Ladungsverteilungen, sondern mit Wahrscheinlichkeiten und Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu tun. Die Änderungen dieser Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind zur Beschreibung von Systemen von höchstem Interesse. Ändert sich die Wahrscheinlichkeitsdichte, so folgt daraus eine Wahrscheinlichkeitsdichteströmung (oder Dichtestrom)<sup>26</sup>. Diese macht Angaben darüber, wohin die „Teilchen“ abfließen.

In der Quantenmechanik definieren wir für die Wahrscheinlichkeitsdichte deshalb eine Kontinuitätsgleichung.

### 1.3.2 Kontinuitätsgleichung

**Satz.** *Ist die Wahrscheinlichkeitsdichte wie folgt definiert:*

$$\rho := \psi^* \psi,$$

*dann gilt mit der Definition der Wahrscheinlichkeitsdichteströmung*

$$\vec{j} := \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \text{ die Kontinuitätsgleichung:}$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div} \vec{j} = 0.$$

*Beweis.* Um  $\frac{d\rho}{dt} = -\operatorname{div} \vec{j}$  zu beweisen, benutzen wir die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

<sup>25</sup> Vergleiche mit [Bergmann-1, S. 302ff.].

<sup>26</sup> Wir benutzen den Begriff Dichteströmung und nicht die sonst gebräuchlichen Begriffe Stromdichte und Flussdichte, da hier die Dichte strömt und nicht der Strom dichtet.

mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \left( \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\hat{p}^2} + \hat{V}(x) \right),$$

um sie in die Ableitung von

$$\varrho(x, t) = \psi^* \psi(x, t)$$

einsetzen zu können.

Wir beginnen mit

$$\dot{\varrho} = \frac{d}{dt} \varrho$$

und wenden die Produktregel an:

$$= \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}.$$

Mit  $\frac{d}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}$  und  $\frac{d}{dt}^* = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \psi^*) \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* (\hat{H} \psi) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + \hat{V}(x) \psi^* \right) \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + \hat{V}(x) \psi \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* - \hat{V}(x) \psi^* \right) \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + \hat{V}(x) \psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right). \end{aligned}$$

Addieren wir null

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

und wenden die umgekehrte Produktregel an:

$$= \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\frac{\hbar}{2mi} \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)}_{j_x}.$$

Dies gilt für die  $x$ -Komponente. Die Rechnung geht für die  $y$ - und  $z$ -Komponente

analog.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(\vec{r}, t) &= \left( \frac{\partial}{\partial x} j_x + \frac{\partial}{\partial y} j_y + \frac{\partial}{\partial z} j_z \right) \\ \dot{\rho} &= - \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi) \\ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial \psi^*}{\partial y} \psi) \\ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \psi) \end{pmatrix} \\ &= - \vec{\nabla} \cdot \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} \\ &= - \operatorname{div} \vec{j} \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, daß es eine Gleichung in der Quantenmechanik gibt, die die Form einer Kontinuitätsgleichung hat. Durch diese wird  $\vec{j}$  definiert und es bleibt noch zu prüfen, ob  $\vec{j}$  dieselben Eigenschaften wie in der Elektrodynamik hat.  $\square$

### 1.3.3 Wahrscheinlichkeitsdichteströmung

**Definition.** Damit erklärt sich auch die Definition der Wahrscheinlichkeitsdichteströmung:

$$\vec{j} := \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*).$$

**Interpretation der Wahrscheinlichkeitsdichteströmung:** Mit der Definition der Impulsoperatoren

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} &= \hat{p}_x \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} &= \hat{p}_y \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} &= \hat{p}_z \end{aligned}$$

läßt sich die Wahrscheinlichkeitsdichteströmung folgenderweise schreiben:

$$\vec{j} = \frac{1}{2m} (\psi^* (\hat{\vec{p}} \psi) + \psi (\hat{\vec{p}} \psi)^*).$$

$\psi^* (\hat{\vec{p}} \psi)$  ist der Integrand des Erwartungswertes des Impulses.  $\vec{j}$  hat also Bedeutung für die Messung des Impulses des Teilchens. Die Wahrscheinlichkeitsdichteströmung macht also Aussagen über die Bewegung des Teilchens.  $\psi (\hat{\vec{p}} \psi)^*$  dient zur Symmetrisierung.<sup>27</sup>

---

<sup>27</sup>Ja, ja die Theoretiker!

**Bemerkung.** Zur Erinnerung:

Der Erwartungswert ist folgendermaßen definiert:

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx.$$

Der Impuls  $p$  dividiert durch die Masse  $m$  ergibt die Geschwindigkeit  $v$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist  $\varrho = \psi^* \psi$ . Also handelt es sich bei  $\psi^* (\hat{p} \psi)$  um eine Geschwindigkeitsdichte<sup>28</sup>. Die Geschwindigkeitsdichte  $\frac{p}{mV}$  ist groß, wo viele Teilchen sind, oder wo die Geschwindigkeit weniger Teilchen groß ist. Die „Anzahl der Teilchen“ entspricht der Wahrscheinlichkeit (es muß noch normiert werden).

### 1.3.4 Beispiel der ebenen Welle

**Beispiel.** Wir betrachten eine ebene Welle:

$$\psi(\vec{r}) = A(\vec{r}) e^{ik_0 x}.$$

Mit der Definition der Wahrscheinlichkeitsdichteströmung

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

ergibt sich, wenn wir  $\psi$  einsetzen:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left( e^{-ik_0 x} \begin{pmatrix} ik_0 e^{ik_0 x} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - e^{ik_0 x} \begin{pmatrix} -ik_0 e^{-ik_0 x} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left( e^{-ik_0 x} ik_0 e^{ik_0 x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - e^{ik_0 x} (-) ik_0 e^{-ik_0 x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left( ik_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + ik_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2m} |A|^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= |A|^2 \begin{pmatrix} \frac{\hbar k_0}{m} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichteströmung ist also konstant:

$$j_x(\vec{r}, t) = \text{const.}$$

<sup>28</sup>Hieraus erklärt sich der seltsame Begriff Stromdichte: Viele Teilchen mit Geschwindigkeiten bilden einen Strom. Strom wird hier also einer Geschwindigkeit gleichgesetzt.



Mit

$$\varrho = \psi^* \psi = |A|^2$$

folgt

$$\dot{\varrho} = 0$$

und mit der Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\varrho} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

also

$$\dot{\varrho} = 0 = -\operatorname{div} \vec{j}.$$

Eine ebene Welle in  $x$ -Richtung liefert nur eine Wahrscheinlichkeitsdichteströmung (Geschwindigkeitsdichte) in  $x$ -Richtung, unabhängig von Ort und Zeit. Im Beispiel ist aber auch die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$  konstant, woraus folgt, daß die Kontinuitätsgleichung trivial erfüllt ist. Es gibt zwar einen konstanten (kontinuierlichen, stationären) Strom, aber die Divergenz der Wahrscheinlichkeitsdichteströmung  $\operatorname{div} \vec{j}$  verschwindet. Eine konstante Dichte bewegt sich also in  $x$ -Richtung.

## 1.4 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

### 1.4.1 Schrödinger-Gleichung und Zeitunabhängigkeit

Wir betrachten wieder den Spezialfall, daß  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$  unabhängig von der Zeit ist (d.h. das Potential ist unabhängig von  $t$ ):

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

Man beachte, daß trotzdem für das Teilchen  $x = x(t)$  und  $p = p(t)$  gelten darf.

**Satz.** Ist  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}, \mathcal{X})$  d.h.  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ , so besitzt die (konservative)<sup>29</sup> Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (\text{konservative Schrödinger-Gleichung})$$

Lösungen der Form

$$\psi(x, t) = \phi_E(x) \cdot f_E(t), \quad (\text{stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung})$$

wobei für die separierten Funktionen

$$f_E(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

und

$$\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x) \quad (\text{zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung})$$

gilt.<sup>30</sup>

(Die Zusammengehörigkeit der Separationsfunktionen  $\phi_E$  und  $f_E$  ist durch den E-Index markiert.) Damit zerfällt die Lösung in einen „trivialen“ Anteil  $f_E$ , der immer gleich ist, sowie in einen Anteil, der mittels der sogenannten zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung berechnet werden muß.

*Beweis.* Wir setzen die vermutete Lösung (Separierbarkeit von Zeit und Ortsabhängigkeit) in die konservative Schrödinger-Gleichung ( $\hat{H}(x, \mathcal{X})$ ) ein:

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

<sup>29</sup> Zur Nomenklatur: Der Begriff konservative Schrödinger-Gleichung wird normalerweise nicht benutzt, da wir uns aber noch öfter auf die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit zeitunabhängigen Hamilton-Operator beziehen wollen, braucht die Gleichung einen Namen. Er erklärt sich daraus, daß die Energie in konservativen Systemen konstant ist.

<sup>30</sup> Zur Nomenklatur: Wenn der Hamilton-Operator der Schrödinger-Gleichung zeitunabhängig ist, dann ist die Energie eine Konstante. Dementsprechend spricht man auch von der stationären Lösung  $\psi(x, t) = \phi_E(x) f_E(t)$  der (konservativen) Schrödinger-Gleichung, wobei man beachten muß, daß  $\psi$  durchaus von  $x$  und  $t$  abhängig ist (die Energie ist stationär nicht die Lösung!). Korrekt wäre wohl sie als Wellenfunktion des stationären Energiezustandes zu bezeichnen.  $\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x)$  wird die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung genannt. Sie enthält nur den zeitunabhängigen Lösungsanteil  $\phi_E(x)$ , der, wohl um die Verwirrung noch zu vergrößern, wie  $\psi(x, t)$ , oft als Wellenfunktion des stationären Zustands bezeichnet wird. Siehe auch [Messiah-1, S. 73].

Einsetzen des Lösungsansatzes  $\psi = \phi_E(x) f_E(t)$ :

$$\hat{H}\phi_E(x) f_E(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_E(x) f_E(t).$$

Faktoren, die nicht von den Differentiationsvariablen abhängig sind, vor den Operator ziehen:

$$f_E(t) \hat{H}\phi_E = \phi_E(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_E(t).$$

Mit  $\phi_E(x) f_E(t)$  kürzen, wobei man beachtet, daß man nur durch Faktoren kürzt, die nicht unter den Ableitungen  $\frac{\partial}{\partial t}$  bzw.  $\hat{H}$  stehen:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{\phi_E(x)} \hat{H}\phi_E(x)}_{(x, \mathcal{X}), \text{ wenn } \hat{H}(\mathcal{X})} &= \underbrace{\frac{1}{f_E(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_E(t)}_{(\mathcal{X}, t)} \\ &=: E(\mathcal{X}, \mathcal{X}) \\ &= \text{const.} \end{aligned}$$

Wir haben also bisher gezeigt, daß die Lösung  $\psi$  der konservativen Schrödinger-Gleichung sich in einen zeitunabhängigen Teil  $\phi_E$  und einen ortsunabhängigen Teil  $f_E$  separieren läßt. Desweiteren haben wir eine Größe  $E$  definiert, die unabhängig von  $t$  und unabhängig von  $x$ , also konstant, ist (wie man an den jeweiligen Seiten der Gleichung ablesen kann).

Nun müssen wir noch zeigen, wie die Lösungen  $\phi_E(x)$  und  $f_E(t)$  aussehen.

Betrachten wir die linke Seite:  $\frac{1}{\phi_E(x)} \hat{H}\phi_E(x) = E$  und multiplizieren mit  $\phi_E$ , so erhalten wir folgende Eigenwertgleichung:

$$\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x).$$

Bearbeiten wir die rechte Seite analog, so erhalten wir folgende Differentialgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_E(t) = E f_E(t).$$

Sie hat die Lösung:

$$f_E(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Es gilt also für die stationären Lösungen<sup>31</sup> der Schrödinger-Gleichung  $\psi$ :

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \phi_E(x) f_E(t) \\ &= \phi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \end{aligned}$$

und

$$\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x) \quad (\text{zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung})$$

□

Mit Hilfe der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung kann man die  $\phi_E(x)$  berechnen.

## 1.4.2 Energie

### Erwartungswert des Hamilton-Operators

Betrachten wir die stationären Lösungen genauer!

Um die Bedeutung von  $E$  zu erkennen betrachten wir den Erwartungswert von  $\hat{H}$ , denn  $\hat{H}\phi_E = E\phi_E$  „verbindet“  $E$  und  $\hat{H}$ .

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{H} \psi \, dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^*(x) f_E^*(t) \hat{H} \phi_E(x) f_E(t) \, dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* e^{i\frac{E}{\hbar}t} \underbrace{\hat{H} \phi_E}_{E\phi_E} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \, dx \\
 &= E \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* \phi_E(x) \, dx \\
 &= E \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(x, \mathcal{X}) \, dx}_{=1} \\
 &= E
 \end{aligned}$$

$E$  ist der Erwartungswert  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  des Hamiltonoperators, welcher der Energie entspricht.

### Eigenschaften der Energie

$E$  ist eine Erhaltungsgröße in dem Sinne,

1. daß  $E$  unabhängig von der Zeit ist, und
2. daß sich  $E$  exakt messen läßt.

*Beweis.*

$$(\Delta E)^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \underbrace{\langle \hat{H} \rangle^2}_{=E^2}$$

---

<sup>31</sup>Stationäre Lösung bedeutet nicht, daß  $\psi$  nicht zeit- oder ortsabhängig wäre, sondern daß sie Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind, die unabhängig von der Zeit ist. Dabei ist  $E$  konstant (stationär). Es wird sich herausstellen, daß  $E$  die Energie des Systems ist.

wobei

$$\begin{aligned}\langle \hat{H}^2 \rangle &= \langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \hat{H} \hat{H} \phi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \hat{H} \hat{H} \phi(x) dx\end{aligned}$$

mit einer Nebenrechnung<sup>32</sup>

$$\begin{aligned}&= E^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx}_{=1} \\ &= E^2\end{aligned}$$

ist. Weil  $\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$  ist, ist das mittlere Schwankungsquadrat  $(\Delta E)^2$  also null.  $\square$

Jede Messung liefert denselben Mittelwert, es gibt keine Schwankungen!  
Dies führt zum Problem der Bewegung.

### 1.4.3 Energie und Bewegung

Auf Seite 30 wurde die Heisenberg'sche Unschärferelation aus der Existenz von Wellenpaketen mittels der Fouriertransformation hergeleitet:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Da in der Wellenfunktion  $e^{(ikx - i\omega t)}$  sowohl  $kx$  (und mit den Einstein-de-Broglie-Beziehungen auf Seite 15 also  $p, x$ ), als auch  $\omega t$  (und somit  $E, t$ ) paarweise auftreten, kann man sich plausibel machen, daß auch eine Energie-Zeit-Unschärfe Sinn macht.<sup>33</sup>

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Stationäre Lösungen sind Lösungen mit fest definierter Energie:  $(\Delta E)^2 = 0$ . Es gilt aber auch

$$\langle x \rangle = \int \phi_E^*(x) e^{i\frac{E}{\hbar}t} x \phi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dx = \langle x \rangle(\mathcal{A}).$$

<sup>32</sup>Nebenrechnung: zweimalige Anwendung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned}\hat{H} \hat{H} \phi &= \hat{H}(\hat{H} \phi) \\ &= \hat{H}(E \phi) \\ &= E \hat{H} \phi \\ &= E^2 \phi\end{aligned}$$

<sup>33</sup>Vergleiche mit [Haken/Wolf, S. 94]; beachte auch [Sakurai-1, S. 329].

Der Erwartungswert von  $x$  ist unabhängig von  $t$  und damit unabhängig von der Unbestimmtheit von  $t$ , die maximal ist bei fester Energie. Wenn  $\langle x \rangle$  konstant ist, dann bedeutet das auch, daß das Teilchen sich klassisch nicht bewegt. Daher darf man die Energie nicht einfach als kinetische Energie interpretieren, im Sinne einer Bewegung auf einer irgendwie gearteten Bahn (im klassischen Raum), sondern als „Zappeln“ um einen Mittelwert. Aber selbst das ist schon falsch, weil es eine bewegte Ladung impliziert. Hier verläßt die Quantenmechanik offenbar unsere (klassische) Anschauung.

Abbildung 1.5: klassisch stationärer Zustand

**Bemerkung.** Ein Teilchen, das sich klassisch nicht bewegt, und das bedeutet ja der konstante Erwartungswert von  $x$ , muß nicht Strahlung abgeben. Die Bohr'schen Postulate sind somit hinfällig.

#### 1.4.4 Beispiele

Es folgen drei Beispiele für verschiedene konkrete Potentiale<sup>34</sup> der konservativen Schrödinger-Gleichung.

##### 1. Beispiel. Konstantes Potential

$$V(x) = \text{const.}$$

Abbildung 1.6: Konstantes Potential

Die Hamilton-Funktion sieht klassisch wie folgt aus:

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

Wir ersetzen  $p$  und  $x$  durch die entsprechenden Operatoren der Quantenmechanik:

$$\begin{aligned} p &\rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ x &\rightarrow \hat{x} = x. \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator sieht dann so aus:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V} \right) \\ &= E \end{aligned}$$

---

<sup>34</sup>Es wird leider meist nicht zwischen Potential und potentieller Energie unterschieden. Ausnahme ist z.B. [Cohen-1].

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}\phi(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V} \right) \phi(x)$$

$$E\phi(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V} \right) \phi(x)$$

kurze Umformung:

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

$$= \alpha^2 \phi(x)$$

mit der Definition für  $\alpha$

$$\alpha^2 := \frac{2m}{\hbar^2} (V - E)$$

Spezielle Lösungen für obige Differentialgleichung sind leicht gefunden:

$$\phi_1(x) = e^{\alpha x}; \quad \phi_2(x) = e^{-\alpha x}$$

die allgemeine Lösung lautet:

$$\phi(x) = y_1 \phi_1(x) + y_2 \phi_2(x)$$

Betrachten wir nun diese Lösung genauer.

### Fallunterscheidung

- (a) Im Bereich  $V > E$  ist  $\alpha$  eine reelle Funktion und damit auch  $e^{\alpha x}$  bzw.  $e^{-\alpha x}$ . Wegen  $E = T + V$  ist aber  $T = E_{kin}$  negativ. Dies macht klassisch keinen Sinn.
- (b) Im Bereich  $V < E$  ist  $\alpha$  eine imaginäre Funktion.  $\alpha$  in die speziellen Lösungen eingesetzt ergibt:

$$\phi(x) = e^{\pm \alpha x}$$

oder

$$\phi(x) = e^{\pm i k_0 x}$$

wobei

$$k_0 := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)}$$

Daraus folgt

$$\hbar k_0 = \sqrt{2m(E - V)}$$

$$= \sqrt{2mT}$$

$$= \sqrt{2m \frac{p^2}{2m}}$$

$$= p$$

der Impuls!

## 2. Beispiel. Stückweise konstantes Potential

(Kastenpotential)

Abbildung 1.7: Stückweise konstantes Potential

$$V(x) = \begin{cases} V > 0, & x \in [-\infty, 0] \text{ Bereich I} \\ 0, & x \in [0, d] \text{ Bereich II} \\ V > 0, & x \in [d, \infty] \text{ Bereich III} \end{cases}$$

Im ersten Beispiel haben wir bereits die Lösung für ein konstantes Potential erarbeitet. Diese können wir jetzt auf die konstanten Teilbereiche anwenden.

$$\phi(x) = y_1 e^{\alpha x} + y_2 e^{-\alpha x}$$

Die Mathematik liefert die zwei Lösungsanteile  $e^+$  und  $e^-$ . Hier muß physikalisch argumentiert werden. Und zwar muß man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x) = \phi^* \phi$  berücksichtigen. Die Wellenfunktion muß normierbar sein um ein Teilchen beschreiben zu können und daher müssen die Lösungsanteile, die für  $-\infty$  bzw.  $\infty$  divergieren, wegfallen. Die Gesamtlösung für das Kastenpotential sieht also so aus:

$$\text{im Bereich I: } \phi_I = A_1 e^{\alpha x}$$

$$\text{im Bereich II: } \phi_{II} = a_2 e^{ik_0 x} + b_2 e^{-ik_0 x} \quad \text{Sinus/Kosinus-Schwingung}$$

$$\text{im Bereich III: } \phi_{III} = A_3 e^{-\alpha x}$$

Desweiteren gelten die folgenden Stetigkeitsbedingungen an den Verknüpfungsstellen:

$$\begin{aligned} \phi_I(0) &= \phi_{II}(0), & \phi_{II}(d) &= \phi_{III}(d), \\ \phi'_I(0) &= \phi'_{II}(0), & \phi'_{II}(d) &= \phi'_{III}(d) \end{aligned}$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte setzt sich dann aus den Wahrscheinlichkeitsdichten der drei Teilintervalle zusammen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \phi(x) dx = \int_{-\infty}^0 \phi_I^* \phi_I dx + \int_0^d \phi_{II}^* \phi_{II} dx + \int_d^{\infty} \phi_{III}^* \phi_{III} dx$$

Sprechen wir diesen Lösungsweg nochmal durch:

Die mathematischen Lösungen für das konstante Potential müssen an das Problem des Potentialtopfes (Kastenpotential) angepaßt werden!

Der Lösungsanteil  $e^{\alpha x}$  macht im Bereich III keinen Sinn, da für  $x \rightarrow \infty$  die Aufenthaltswahrscheinlichkeit unendlich wäre und daher die Wellenfunktion nicht normierbar wäre. (Die Wellenfunktion würde dann offenbar kein klassisches Teilchen beschreiben.) Im Bereich I gilt entsprechendes für  $e^{-\alpha x}$  und  $x \rightarrow -\infty$ . Der jeweils andere Lösungsanteil muß genutzt werden. Im Bereich II können beide Lösungsanteile Sinn machen.

Jetzt haben wir aber drei getrennte Lösungen eines Problems:



Wir müssen die drei Lösungen aneinander anpassen. Also fordern wir Stetigkeit<sup>35</sup> für die Gesamtlösung und deren Ableitung an den Übergangstellen<sup>36</sup>.

Wir haben also um das Problem des Kastenpotential zu lösen ein Gleichungssystem mit vier Variablen ( $A_1, a_2, b_2, A_3$ ). Die Stetigkeitsbedingungen liefern vier Gleichungen, aber es gibt noch eine fünfte Bedingung: Das Teilchen muß irgendwo sein!<sup>37</sup>:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x)\phi(x) d^3x = 1 \quad \text{Normierungsbedingung}$$

Dies führt dahin, daß das Gleichungssystem überbestimmt ist und daher meistens keine Lösung hat. Wir werden aber sehen, daß es für bestimmte, *diskrete Energien* Lösungen gibt.

Die Lösung im Bereich II kann man als Kosinus- bzw. Sinus-Schwingung betrachten. Je kleiner  $E$  ist, desto kleiner ist  $k_0$ , desto langsamer ist dann das Schwingen. Um die Randbedingungen zu erfüllen, können nur bestimmte Schwingungszustände eintreten. Dies entspricht *diskreten* Energien als Lösungen.

Auch beim Kastenpotential haben wir das Problem (wie schon beim konstanten Potential), daß im Bereich III  $E < V$  ist:

Dies macht klassisch keinen Sinn, da es keine negative kinetische Energie gibt, aber quantenmechanisch.<sup>38</sup>

### 3. Beispiel. Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden

Für

$$V \rightarrow \infty$$

mit

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$$

folgt, daß

$$\alpha \rightarrow \infty$$

<sup>35</sup>Ist die 1. Ableitung nicht stetig, so ist die 2. Ableitung nicht definiert! Aber wir brauchen die 2. Ableitung für die Schrödinger-Gleichung.

<sup>36</sup>Die Gesamtlösung muß nicht nur an den Übergangstellen stetig sein, sondern über den ganzen Bereich der Funktion. Dies aber erfüllen ja die Teilfunktionen, daher interessieren uns hier nur die Übergänge.

<sup>37</sup>Genauer: Die Gesamtwahrscheinlichkeit das Teilchen im gesamten Raum anzutreffen muß 1 sein.

<sup>38</sup>In der Quantenmechanik verlassen wir den Bereich der Anschauung! Die Materie die uns umgibt hat im Mikroskopischen Eigenschaften, die es so im Makroskopischen nur in bestimmten Ausprägungen gibt. Das etwas ein Teilchen und ein Welle ist, macht keinen Sinn in der klassischen Mechanik; es gibt nur Welle oder Teilchen. Also muß man konsequenterweise sagen, daß die mikroskopischen Teilchen weder Teilchen noch Welle sind, sondern ihr Charakter ist dergestalt, daß sie Eigenschaften einer Welle und eines Teilchens besitzen. Insofern ist es nicht mehr so verwunderlich, daß diese Körper, -äh- Dingsda sich bewegen und doch nicht strahlen (Bohr) oder daß sie negative kinetische Energie besitzen.

und damit

$$\phi_{I,III} \rightarrow 0.$$

Zur Erinnerung: im Bereich I ist  $\phi_I = A_1 e^{\alpha x}$  und im Bereich III ist  $\phi_{III} = A_3 e^{-\alpha x}$ .

Wenn

$$\phi_I = \phi_{III} = 0$$

ist, dann gilt für die Stetigkeitsbedingungen nun

$$\phi_{II}(0) = \phi_I(0) = 0$$

$$\phi_{II}(d) = \phi_{III}(d) = 0.$$

Wir setzen  $\phi_{II}(0) = 0$  in die Lösung des Bereichs II

$$\phi_{II} = a_2 e^{ik_0 x} + b_2 e^{-ik_0 x}$$

ein, um  $a_2$  und  $b_2$  zu bestimmen:

$$a_2 + b_2 = 0$$

$$b_2 = -a_2.$$

Damit läßt sich  $\phi_{II}(x)$  umschreiben zu

$$\begin{aligned} \phi_{II} &= a_2 (e^{ik_0 x} - e^{-ik_0 x}) \\ &= 2ia_2 \sin(k_0 x). \end{aligned}$$

Benutzt man die zweite Stetigkeitsbedingung

$$\phi_{II}(d) = 0$$

so folgt

$$\sin(k_0 d) = 0$$

und daraus schließlich

$$k_0 d = \pi n \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}$$

bzw.

$$k_0 = \frac{\pi n}{d}.$$

Es gibt also nur diskrete Wellenzahlen.

Da sich die Energie durch den Impuls  $p = \hbar k_0$  ausdrücken läßt,

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} n^2, \end{aligned}$$

sieht man, daß die Konsequenz ein diskretes Energiespektrum ist.

Nochmal zusammengefaßt:

$k_0$  kann nur Vielfache von  $\frac{\pi}{d}$  annehmen, damit die Randbedingung  $\sin(k_0 d) = 0$  erfüllt ist. Da aber die Energie mit  $k_0$  über die vorherige Gleichung verknüpft ist, gibt es nur diskrete Energiewerte, die mit  $n^2$  ansteigen.

Klassische Teilchen halten sich nur im Bereich II auf.

Abbildung 1.8: Sinus im Kasten

### Bemerkung.

- Bei  $V \rightarrow \infty$  ist die Stetigkeitsbedingung der Ableitungen nicht mehr möglich!
- Desweiteren ist  $n = 0$  in der Quantenmechanik, wegen der Orts-Impulsunschärfe nicht erlaubt!
- Die niedrigste Energie ist  $\neq 0$  wegen der Unschärfe.
- Es gilt auch, daß  $\Delta p$  groß ist, wenn  $\Delta x$  klein ist.
- Für  $0 < E < V$  erhält man gebundene Zustände.

### 1.4.5 Zusammenfassung

Wir sehen also, wenn  $\hat{H}(q, x, \mathcal{X})$  nicht explizit zeitabhängig ist, läßt sich die Lösung (Wellenfunktion) der Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t)$  in einen zeit- und einen ortsabhängigen Anteil aufteilen (Separation).

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators ist die Energie des Systems:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = E.$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x)$  ist eine entkoppelte Differentialgleichung 2. Ordnung nach dem Ort, während die andere entkoppelte Differentialgleichung  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f_E(t) = Ef_E(t)$  1. Ordnung nach der Zeit ist.

**Die konservative Schrödinger-Gleichung hat weiter die folgenden Eigenschaften:**

1. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig!

$$\varrho(x, t) = \psi_E^* \psi_E(x, t)$$

Bei stationären Lösungen hebt sich der zeitabhängige Teil zu 1 weg.

$$\begin{aligned} &= \phi_E^*(x)\phi_E(x) \\ &= \varrho(x, \mathcal{X}) \end{aligned}$$

2. Die Erwartungswerte für Operatoren sind daher konstant!

$$\begin{aligned}\langle \hat{g} \rangle &= \langle \phi | \hat{g} | \phi \rangle \\ &= \text{const.}\end{aligned}$$

Zum Beispiel der Erwartungswert für  $\hat{x}$ :

$$\langle \hat{x} \rangle = \text{const.}$$

Das Teilchen bewegt sich nicht. Aber:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}^2 \rangle &= \text{const.} \\ &\neq 0\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \rangle &= \text{const.} \\ &\neq 0\end{aligned}$$

Die Teilchen bewegen sich.

Da alle Erwartungswerte mit einer zeitunabhängigen Wahrscheinlichkeitsdichte gebildet werden, sind sie selbst auch zeitunabhängig. Es scheint ein Widerspruch zu sein, daß das Teilchen sich bewegt, aber zeitunabhängig ist:

Klassisch bedeutet es, daß das Teilchen im Mittel an einem festen Ort ist. Die stationäre Lösung hat in der Klassischen Mechanik kein Äquivalent.

3. Linearkombinationen  $\psi$  zweier Lösungen

$$\psi_{E_1} = \phi_{E_1}(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t}$$

und

$$\psi_{E_2} = \phi_{E_2}(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}$$

der konservativen Schrödinger-Gleichung sind auch Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}(x, t)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi.$$

Dies sind die aus der Klassischen Mechanik bekannten Lösungen mit  $\langle \hat{p}^2 \rangle$  bzw.  $\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \rangle \neq 0$  (aber konstanter Gesamtenergie).

$$\psi = a\psi_{E_1}(x, t) + b\psi_{E_2}(x, t)$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{H}(\mathcal{X})\psi_{E_1} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{E_1} \\ \hat{H}(\mathcal{X})\psi_{E_2} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{E_2}.\end{aligned}$$

- (a) Die Linearkombination  $\psi$  der Lösungen  $\psi_{E_x}(x, t)$  der konservativen Schrödinger-Gleichung ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung.

*Beweis.* Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}(x, t)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi$$

Man setzt in die linke Seite  $a\psi_{E_1} + b\psi_{E_2}$  ein. Da  $\hat{H}$  linear ist, ist die Aufspaltung der Summe möglich.

$$= \hat{H}a\psi_{E_1} + \hat{H}b\psi_{E_2}$$

$a$  und  $b$  sind konstant und lassen sich daher aus der Ableitung herausziehen:

$$\begin{aligned} &= a\hat{H}\psi_{E_1} + b\hat{H}\psi_{E_2} \\ &= ai\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_{E_1} + bi\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_{E_2} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}a\psi_{E_1} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t}b\psi_{E_2} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(a\psi_{E_1} + b\psi_{E_2}) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \end{aligned}$$

□

- (b) Die Lösung  $\psi$  ist in Bezug auf den Ort nicht stationär:  $\varrho(x, t)$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \varrho &= (a\psi_{E_1} + b\psi_{E_2})^*(a\psi_{E_1} + b\psi_{E_2}) \\ &= a^2\phi_{E_1}^*\phi_{E_2} + b^2\phi_{E_2}^*\phi_{E_2} \\ &\quad + ab^*\phi_{E_2}^*\phi_{E_1} e^{i(E_2-E_1)\frac{t}{\hbar}} + a^*\phi_{E_2}\phi_{E_1}^* e^{i(E_1-E_2)\frac{t}{\hbar}} \\ &= \varrho(x, t) \end{aligned}$$

Damit sind auch die Erwartungswerte zeitabhängig.

□

Für die Lösungen des zeitunabhängigen Hamilton-Operators gilt, daß die Energie konstant ist. Daher ist sie auch für die Linearkombination konstant. Das Teilchen bewegt sich (bleibt im Mittel nicht an einem Ort).

## 1.5 Harmonischer Oszillator I

### 1.5.1 Der klassische Harmonische Oszillator

Wir betrachten den Harmonischen Oszillator in einer Dimension:

Das Hooke'sche Gesetz definiert die rücktreibende Kraft

$$F_x = m\ddot{x} = -kx$$

beim Harmonischen Oszillator. Es gilt für das Potential

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2,$$

da

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

allgemein gilt. Die Funktion

$$x(t) = A \cos \omega t$$

löst bekanntlich die obere Differentialgleichung (deswegen: harmonisch), wobei

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

ist.

Die Kraft  $F_x$  ist immer entgegen der Auslenkung gerichtet. Das Potential ist konservativ.

Abbildung 1.9: Harmonischer Oszillator

### 1.5.2 Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik

Warum verwendet man den Harmonischen Oszillator in der Quantenmechanik?

Ist die Auslenkung aus der Ruhelage klein, dann läßt sich ein komplizierteres Potential, in der Nähe der Ruhelage, mit einem harmonischen Potential gut annähern. Da sich mit dem Harmonischen Oszillator gut rechnen läßt, wird die Lösung der Schrödinger-Gleichung in diesem Bereich erleichtert. Ist die Auslenkung aus der Ruhelage nicht klein, dann ist das Lösen der Schrödinger-Gleichung meist schwer.

Der Ausdruck „kleine Auslenkung“ aus der Ruhelage soll bedeuten, daß  $x - x_0$  so klein ist, daß  $(x - x_0)^3 \simeq 0$  gilt.

Schön ist, daß es sehr viele Probleme gibt, die mit diesem Potential angenähert werden können.

Beachte jedoch: Der Harmonische Oszillator ist nicht immer eine gute Näherung! Das harmonische Potential wird im Unendlichen unendlich. Ein unendlich großes Potential macht physikalisch dort meist keinen Sinn!

Abbildung 1.10: Lennard-Jones-Potential:

Bereich I: unendlich entfernt; die Teilchen (Atome) beeinflussen sich nicht.

Bereich II: Anziehung aufgrund der Massen oder entgegengesetzter Ladungen.

Bereich III: optimaler Abstand (Energiminimum)

Bereich IV: Repulsion (man spricht auch von der Zentrifugalbarriere aufgrund des Drehimpulses)

**Beispiel.** Nukleonen werden auf einen Atomkern geschossen. Sie spüren das Lennard-Jones-Potential.

Um zu verdeutlichen, warum das harmonische Potential eine gute Näherung darstellt, machen wir nun eine Taylor-Entwicklung des Problem-Potentials um  $x_0$ :

$$V(x) \Big|_{x \simeq x_0} = V(x_0) + (x - x_0) \frac{\partial}{\partial x} V(x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} V(x_0) + \dots$$

Im Minimum verschwindet die erste Ableitung:  $(x - x_0) \frac{\partial}{\partial x} V = 0$ . Da wir ja nur kleine Auslenkungen betrachten wollen sind die Terme höherer Ordnung gleich null. Damit ergibt sich als Näherung für das Problem-Potential  $V(x) = V_0 + \frac{1}{2} (x - x_0)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} V_0$ . Das parabelförmige Potential liefert eine recht gute Näherung!

### 1.5.3 Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

#### Einleitung

Wir werden uns nun ausführlich mit der Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung beschäftigen.

Der Hamilton-Operator lautet für das harmonische Potential

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

Damit schreibt sich die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{H} \phi(x) &= E \phi(x) \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \phi(x) &= E \phi(x). \end{aligned}$$

Das harmonische Potential stellt zwar eine Vereinfachung der Schrödinger-Gleichung dar, es hat jedoch die angenehme Eigenschaft, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte im Unendlichen verschwindet  $\rho(x \rightarrow \infty) = 0$ . Das Teilchen hält sich nicht dort auf, wo das Potential unendlich ist! Damit hält sich das Normierungsproblem in Grenzen.

#### Variablensubstitution

Wir nehmen eine geschickte Variablensubstitution vor:

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

mit

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

**Einheit von  $b$ :** Betrachten wir die Einheit von  $b$  (ohne auf die Größenordnung zu achten):

$$\begin{aligned} b &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ &= \left[ \sqrt{\frac{\text{Js}}{\text{kg s}^{-1}}} \right] \\ &= \left[ \sqrt{\frac{\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}}{\text{kg s}^{-1}}} \right] \\ &= \left[ \sqrt{\text{m}^2} \right] \\ &= [\text{m}] \end{aligned}$$

Auf anderem Weg kann man durch geschicktes Erweitern die Einheit bekommen:

$$\begin{aligned} b &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar^2 c^2}{mc^2 \hbar \omega}} \end{aligned}$$

Im Zähler steht ein Wirkung im Quadrat und eine Geschwindigkeit im Quadrat und im Nenner eine Energie im Quadrat.

$$\begin{aligned} &= \left[ \sqrt{\frac{\text{MeV}^2 \text{ fm}^2}{\text{MeV}^2}} \right] \\ &= [\text{fm}] \end{aligned}$$

Die Dimension von  $b$  ist eine Länge.

Da  $x$  auch die Dimension einer Länge hat ist  $q$  offenbar dimensionslos.

**Berechnung von  $\frac{\partial}{\partial x}$ :**

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} q \\ \frac{dx}{dq} &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ dx &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} dq \end{aligned}$$

Damit ist

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial q}.$$



**Schrödinger-Gleichung mit  $q$ :** Nun wollen wir die Schrödinger-Gleichung mit  $q$  umschreiben:

$$x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} q^2.$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung schreibt sich damit:

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi(q) &= E\phi(q) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} q^2\right) \phi(q) &= E\phi(q) \\ \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right) \phi(q) &= E\phi(q) \\ \left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right) \phi(q) &= \frac{2}{\hbar\omega} E\phi(q) \end{aligned}$$

oder

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right) \phi(q) = \varepsilon\phi(q) \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

mit

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

$\varepsilon$  ist dimensionslos!

### Ansatz für die Differentialgleichung

Wir versuchen nun diese Differentialgleichung  $\left[-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right] \phi(q) = \varepsilon\phi(q)$  zu lösen:

Wenn  $q \rightarrow \pm\infty$  geht, dann ist  $q^2 \gg \varepsilon$ , und wir können unsere Differentialgleichung nähern durch:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} - q^2\right) \phi = 0$$

oder

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial q^2} = q^2 \phi.$$

Diese neue Differentialgleichung hat bekanntlich zwei Lösungen:

$$\phi_\infty \sim e^{\pm \frac{q^2}{2}}$$

Sind diese asymptotischen Lösungen physikalisch sinnvoll?

Da  $q = \frac{x}{\ell}$  ist, folgt für  $q^2 \rightarrow \infty$ , daß  $x^2 \rightarrow \infty$  geht.  $e^{+\frac{q^2}{2}}$  ist unphysikalisch, da  $\varrho(x \rightarrow \infty) = \infty$  wäre (nicht normierbar). Daher bleibt die Lösung  $\phi_\infty \sim e^{-\frac{q^2}{2}}$  übrig.

Um nun die gesamte Lösung zu bekommen, machen wir folgenden

**Ansatz.**

$$\phi(q) = h(q) e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Dieser Ansatz scheint zunächst wenig Sinn zu machen, aber wir können Aussagen über  $h(q)$  machen.

Eigenschaften von  $h(q)$ :

1.  $h(q)$  ist ein endliches Polynom.
2.  $h(q)$  hat keine Polstellen! (Keine Stellen, an denen  $q \rightarrow \infty$  ginge.)
3. Die Asymptotik ist durch  $e^{-\frac{q^2}{2}}$  festgelegt.

Wir machen einen Potenzreihenansatz für  $h(q)$ :

$$h(q) = \sum_{i=0}^N a_i q^i$$

Da  $h(q)$  für  $q \rightarrow \infty$  das asymptotische Verhalten nicht verändern soll, muß

$$h(q) = \sum_{i=0}^N a_i q^i \quad \text{mit } N \neq \infty$$

gelten. Denn  $e^{-\frac{q^2}{2}}$  ist dominant für  $q \rightarrow \infty$ , wenn  $h(q)$  ein Polynom endlichen Grades ist und damit divergiert die Gesamtwellenfunktion  $\phi(q)$  nicht.

**Nebenrechnung** Nun berechnen wir  $\frac{d^2}{dq^2}\phi$  mit dem Ansatz:

$$\frac{d^2}{dq^2}\phi = \frac{d}{dq} \frac{d}{dq} \left( h(q) e^{-\frac{q^2}{2}} \right)$$

Produktregel

$$\begin{aligned} &= \frac{d}{dq} \left( h'(q) e^{-\frac{q^2}{2}} - h(q) q e^{-\frac{q^2}{2}} \right) \\ &= \frac{d}{dq} \left( e^{-\frac{q^2}{2}} (-qh + h') \right) \end{aligned}$$

Produkt- und Kettenregel

$$\begin{aligned} &= -q e^{-\frac{q^2}{2}} (-qh + h') + e^{-\frac{q^2}{2}} (-h - qh' + h'') \\ &= e^{-\frac{q^2}{2}} (q^2 h - qh') + e^{-\frac{q^2}{2}} (-h - qh' + h'') \\ &= e^{-\frac{q^2}{2}} (h'' - 2qh' - h + q^2 h) \end{aligned}$$

Ende der Nebenrechnung.

**Ansatz in Schrödinger-Gleichung einsetzen**

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung auf Seite 65 lautete:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2\right)\phi(q) = \varepsilon\phi(q).$$

Nach  $\frac{d^2}{dq^2}\phi$  aufgelöst und den Ansatz eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dq^2}\phi &= h e^{-\frac{q^2}{2}} (-\varepsilon + q^2) \\ &= e^{-\frac{q^2}{2}} (-\varepsilon h + q^2 h).\end{aligned}$$

Daraus folgt mit der Nebenrechnung

$$\begin{aligned}0 &= e^{-\frac{q^2}{2}} (h'' - 2qh' + q^2h - h + \varepsilon h - q^2h) \\ &= e^{-\frac{q^2}{2}} (h'' - 2qh' - h + \varepsilon h).\end{aligned}$$

Da  $e^{-\frac{q^2}{2}} \neq 0 \quad \forall q^2$  folgt, daß der Inhalt der runden Klammern verschwindet.

$$0 = (h'' - 2qh' + h(\varepsilon - 1))$$

**Nebenrechnung** Wir berechnen die Ableitungen der Potenzreihe:

$$\begin{aligned}h(q) &= \sum_{\nu=0}^N a_{\nu} q^{\nu} \\ h'(q) &= \sum_{\nu=1}^N a_{\nu} \nu q^{\nu-1} \\ h''(q) &= \sum_{\nu=2}^N a_{\nu} \nu(\nu-1) q^{\nu-2}\end{aligned}$$

Ende der Nebenrechnung.

**Einsetzen der Ableitungen** Einsetzen der Ableitungen in die Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned}0 &= (h'' - 2qh' + h(\varepsilon - 1)) \\ &= \sum_{\nu''} a_{\nu''} \nu''(\nu'' - 1) q^{\nu''-2} - 2q \sum_{\nu'} a_{\nu'} \nu' q^{\nu'-1} + (\varepsilon - 1) \sum_{\nu} a_{\nu} q^{\nu}\end{aligned}$$

( $\nu'$  bzw.  $\nu''$  bedeutet, daß die Summation bei 1 bzw. 2 beginnt und bis  $N$  geht.)  
Mit den folgenden Ersetzungen läßt sich diese Gleichung zusammenfassen.

$$\begin{aligned}\nu'' - 2 &= n \\ \nu' - 1 &= n \\ \nu &= n\end{aligned}$$

Eingesetzt:

$$0 = \sum_{n=0}^{N-2} a_{n+2}(n+2)(n+1)q^n - 2q \sum_{n=0}^{N-1} a_{n+1}(n+1)q^n + (\varepsilon - 1) \sum_{n=0}^N a_n q^n$$

$$0 = \sum_{n=0}^{N-2} a_{n+2}(n+2)(n+1)q^n - 2 \sum_{n=1}^N a_n n q^n + (\varepsilon - 1) \sum_{n=0}^N a_n q^n$$

Da  $q^n$  meist ungleich null ist, muß der  $n$ -te Koeffizient der gesamten Summe identisch null sein:<sup>39</sup>

$$0 = \sum_n q^n \underbrace{(a_{n+2}(n+2)(n+1) - 2na_n + (\varepsilon - 1)a_n)}_{= 0 \ \forall n}$$

Daher stellt die obige Gleichung eine Rekursionsgleichung für die Koeffizienten  $a_n$  des Polynoms  $h(q)$  dar.

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) = (2n + (1 - \varepsilon))a_n$$

$$a_{n+2} = \frac{(2n + 1 - \varepsilon)a_n}{(n+2)(n+1)}$$

$a_n$  ist also rekursiv bestimmt: wenn  $a_0$  bekannt ist, so kennen wir alle geraden  $a_n$ . Wenn  $a_1$  bekannt ist, so kennen wir alle ungeraden  $a_n$ .

### Diskretisierung

Da nun aber  $h(q)$  ein Polynom endlichen Grades sein soll, muß die Rekursion von  $a_n$  irgendwo abbrechen, d.h. es gibt ein  $n_{\max}$ , so daß

$$a_{n_{\max}+2} = 0 = \frac{(2n + 1 - \varepsilon)}{\underbrace{(n+2)(n+1)}_{= 0!}} a_{n_{\max}}.$$

Da  $a_{n_{\max}} \neq 0$  und  $n_{\max} \neq 0$  ist, muß gelten:

$$2n + 1 - \varepsilon = 0$$

$$\varepsilon = 2n + 1.$$

Dies bedeutet, daß  $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$  diskrete Werte annimmt!

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}(2n + 1)$$

$$E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

Wegen der Randbedingung  $\phi(q) \rightarrow 0$  für  $q \rightarrow \infty$  (d.h.:  $h(q)$  endlichen Grades bzw.  $\exists n_{\max} \neq 0$ ) sind Lösungen nur für diskrete Energiewerte  $E_n (n \in \mathbb{N} \setminus \{0\})$  möglich.

<sup>39</sup> Auf die obere Grenze der Summe muß man deswegen nicht so achten.

### Zusammenfassung

Um  $\phi(q)$  als Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für das harmonische Potential zu bestimmen, haben wir den Ansatz  $h(q) e^{-\frac{q^2}{2}}$  eingesetzt. Daraus haben wir eine Rekursionsgleichung für die Koeffizienten des Potenzreihenansatzes erhalten. Da  $\phi(q)$  für große  $q$  asymptotisch gegen  $e^{-\frac{q^2}{2}}$  gehen muß, mußte in  $\phi(q) = h(q) e^{-\frac{q^2}{2}}$  das Polynom  $h(q)$  endlichen Grades sein (da für  $q \rightarrow \infty$  die Exponentialfunktion überwiegen muß). Damit die Reihe abbricht (Koeffizienten verschwinden) mußte  $\varepsilon$  die Bedingung  $\varepsilon = 2n + 1$  erfüllen: Es gibt nur Lösungen für bestimmte diskrete Energien  $E_n$ .

Zu beachten ist noch, daß es nur eine „gerade Reihe“ (nur gerade Potenzen enthalten) bzw. „ungerade Reihe“ geben darf. Wählt man den geraden Teil, dann muß  $a_1 = 0$  sein, damit der ungerade Teil verschwindet und umgekehrt muß  $a_0 = 0$  sein, wenn man den ungeraden Teil gewählt hat. (Dies ist wegen des Abbruchs der Potenzreihe nötig.)

### 1.5.4 Lösungen mit diskreten Energien

Wir betrachten nun diese Lösungen genauer.

1.  $\boxed{n = 0}$

Dann ist mit  $\varepsilon = 2n + 1$ :

$$\varepsilon = 1,$$

und die Energie ist mit  $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ :

$$E_0 = \hbar\omega\frac{1}{2}. \quad \text{Dies ist die niedrigste Energie!}$$

Der allgemeine Ansatz, den wir gemacht haben lautete:

$$\phi = h(q) e^{-\frac{q^2}{2}} = \sum_{i=0}^n a_i q^i e^{-\frac{q^2}{2}}. \quad (\text{Ansatz})$$

Wir bestimmen nun die Koeffizienten. Der ungerade Teil der Potenzreihe muß verschwinden:

$$a_1 = 0$$

für den geraden gilt:

$$a_0 \neq 0 \\ a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0$$

Die Lösung lautet:

$$\phi_0(q) = a_0 e^{-\frac{q^2}{2}}$$

$a_0$  muß noch durch die Normierungsbedingung endgültig bestimmt werden

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_0^*(q) \phi_0(q) dq = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_0^*(x) \phi_0(x) dx = a_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} dx = 1$$

Es ergibt sich

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}}.$$

Mit dem Ansatz und  $q = \frac{x}{b}$  ergibt sich endlich die Wellenfunktion:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}.$$

2.  $\boxed{n = 1}$

Für die Energie ergibt sich

$$E_1 = \hbar\omega \frac{3}{2}.$$

Der gerade Teil der Potenzreihe verschwindet

$$a_0 = a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0.$$

Im Zwischenergebnis muß noch  $a_1$  bestimmt werden:

$$\phi_1(q) = a_1 q e^{-\frac{q^2}{2}}.$$

$a_1$  folgt aus der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1^*(x) \phi_1(x) dx = 1.$$

$a_1$  ist also

$$a_1 = \frac{2}{\sqrt{2b\sqrt{\pi}}}.$$

Die Wellenfunktion lautet damit

$$\phi_1(x) = \frac{2}{\sqrt{2b\sqrt{\pi}}} \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}.$$

3.  $\boxed{n = 2}$

Für die Energie ergibt sich

$$E_2 = \hbar\omega \frac{5}{2}.$$

Dann ist mit  $\varepsilon = 2n + 1$ :

$$\varepsilon = 5.$$

Hier muß  $a_1 = 0$  sein, da sonst die ungeraden  $a_i$  ungleich Null sind. Aus der Rekursionsgleichung

$$a_{n+2} = \frac{(2n+1-\varepsilon)a_n}{(n+2)(n+1)}$$

bestimmen wir  $a_2$

$$\begin{aligned} a_2 &= a_0 \frac{-5+1}{2} \\ &= -2a_0 \end{aligned}$$

Die Normierung läßt sich nun folgendermaßen schreiben

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_2^*(x) \phi_2(x) dx = 1$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_2(q) &= (a_0 - 2a_0q^2) e^{-\frac{q^2}{2}} \\ &= a_0 \left(1 - 2\frac{q^2}{b^2}\right) e^{-\frac{q^2}{2b^2}} \end{aligned}$$

ergibt sich:

$$a_0 = \frac{2}{\sqrt{4 \cdot 2\sqrt{\pi}b}}$$

Grundsätzliche Vorgehensweise: je nach dem, ob  $n$  gerade oder ungerade ist, muß von  $a_0$  bzw.  $a_1$  ausgegangen werden um über die Rekursion auf  $a_n$  zu kommen. Die Normierungsbedingung legt dann die Unbekannte ( $a_0$  oder  $a_1$ ) fest. Diese kann man dann in die Rekursionsgleichung einsetzen um dann  $\phi$  endgültig zu bestimmen.

Abbildung 1.11: Energien in Parabel (S.102 Fließbach)

Kommentar zum Bild:

$$\begin{aligned} E_2 &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + 2\right) \\ E_1 &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + 1\right) \\ E_0 &= \hbar\omega\frac{1}{2} \end{aligned}$$

### 1.5.5 Parität

Jetzt kommen wir zwanglos zum Thema Parität, denn unser Polynom  $h(q)$  liefert uns diese Eigenschaft der Wellenfunktion (Lösung der Schrödinger-Gleichung). Ist  $n$  gerade, so gibt es nur gerade  $a_n$  im Polynom  $h(q)$ , und damit gilt  $\phi(-x) = \phi(x)$ .

Die Eigenschaft  $\phi(-x) = \phi(x)$  nennt man *gerade Parität*.

Ist  $n$  ungerade, so gibt es nur ungerade  $a_n$  im Polynom  $h(q)$ , und damit gilt  $\phi(-x) = -\phi(x)$ .

Die Eigenschaft  $\phi(-x) = -\phi(x)$  nennt man *ungerade Parität*.

**Definition.** Allgemein heißt

$$\phi(-x) = \alpha\phi(x)$$

$\phi(x)$  hat gute Parität.

Welche Werte sind für die Parität möglich? Etwa auch 0,5?

**Satz.** Die Parität kann die Werte

$$\alpha = \begin{cases} +1 & \text{gerade} \\ -1 & \text{ungerade} \end{cases}$$

annehmen.

*Beweis.*

$$\phi(x) = \phi(-(-x))$$

mit  $-x = y$ :

$$= \phi(-y)$$

Definition der Parität angewandt:

$$\begin{aligned} &= \alpha\phi(y) \\ &= \alpha\phi(-x) \end{aligned}$$

Definition der Parität nochmals angewandt:

$$= \alpha^2\phi(x)$$

Nur für  $\alpha = +1$  oder  $\alpha = -1$  ist die Bedingung  $\phi(x) = \alpha^2\phi(x)$  erfüllt.  $\square$

Ist es ein Zufall, daß die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für den Harmonischen Oszillator gute Parität haben?

**Satz.** Ist das Potential  $V(x)$  spiegelsymmetrisch:

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

so haben die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$$

gute Parität.

Mit anderen Worten: Die Symmetrie des Potentials wirkt sich direkt auf die Eigenschaften von  $\phi$  aus. Ist  $V(x)$  symmetrisch bezüglich  $\pm x$ , so sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung von guter Parität. (Ein spiegelinvariantes Potential ergibt unmittelbar die Paritätseigenschaft für die Wellenfunktion.)



*Beweis.* Sei  $V$  invariant unter der Spiegeltransformation

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

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \phi(x) = E\phi(x).$$

Einsetzen von  $-x$  anstatt  $x$

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

Anwendung der Spiegelsymmetrie liefert

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \phi(-x) = E\phi(-x).$$

Wenn also  $\phi(x)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, dann ist auch  $\phi(-x)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung.  $\square$

(Beispiel eines solchen Potentials:  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = V(-x)$ )

**Satz.** Ist  $\phi(x)$  Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung zur Energie  $E$  (hat gute Parität), so sind auch

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \phi(x) + \phi(-x) \\ \phi_2(x) &= \phi(x) - \phi(-x) \end{aligned}$$

*Lösungen der Schrödinger-Gleichung.*

*Beweis.*

$$\begin{array}{lll} \phi_1(-x) = \phi(x) + \phi(-x) & = \phi_1(x) & \text{positive Parität} \\ \phi_2(-x) = \phi(-x) - \phi(x) & = -\phi_2(x) & \text{negative Parität} \end{array}$$

$\square$

Diese Lösungen haben wieder gute Parität.

Zur Veranschaulichung:

Positive Parität: die Wellenfunktion ist spiegelsymmetrisch zur  $y$ -Achse.

Negative Parität: die Wellenfunktion ist punktsymmetrisch zum Ursprung.

### 1.5.6 Zusammenfassung

1. Die stationäre Lösung existiert nur für diskrete Energien.
2. Es gibt unendlich viele Lösungen:

$$E_N = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad \text{äquidistant!}$$

3. Die minimale Energie ist für  $n = 0$  durch

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

gegeben. Diese nennt man *Nullpunktsenergie*.

### Herleitung der Nullpunktsenergie aus der Heisenberg'schen Unschärfe-Relation

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

**Satz.** Die minimale Energie ist aufgrund der Heisenberg'schen Unschärfe-Relation ungleich null.

*Widerspruchsbeweis.*

$$\begin{aligned} E &= 0 \\ &= \underbrace{T}_{\geq 0} + \underbrace{V}_{\geq 0} \end{aligned}$$

Damit  $T = 0$  gilt, muß der Erwartungswert von  $p^2$

$$\langle p^2 \rangle = 0$$

sein; und damit auch der Erwartungswert von  $p$

$$\langle p \rangle = 0.$$

Daher würde das mittlere Schwankungsquadrat verschwinden

$$\begin{aligned} \Delta p^2 &:= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \\ &= 0. \end{aligned}$$

Andererseits muß  $V = 0$  sein.

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle \end{aligned}$$

Also

$$\langle x^2 \rangle = 0.$$

Und so

$$\langle x \rangle = 0.$$

Und daher wäre das mittlere Schwankungsquadrat für  $x^2$

$$\begin{aligned}\Delta x^2 &:= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= 0.\end{aligned}$$

Keine Bewegung ( $\Delta x^2 = 0$ ) heißt, daß  $\langle p \rangle$  verschwinden müßte. Umgekehrt heißt auch  $\langle p \rangle = 0$  bzw.  $\langle p^2 \rangle = 0$ , daß  $x$  lokalisiert ( $\langle x \rangle = \text{const.}$ ) wäre. Es gäbe also keine Bewegung.

Dies ist aber im Widerspruch zur Heisenberg'schen Unschärfe-Relation! Die Nullpunktsenergie muß also ungleich null sein um die Heisenberg'sche Unschärfe-Relation zu erfüllen.

Versucht man die potentielle Energie null zu setzen, so sagt die Unschärfe, daß dann die kinetische Energie gegen  $\rightarrow \infty$  ginge und umgekehrt bedeutet ein scharfer Impuls, daß das Teilchen nicht lokalisiert ist. Dies heißt, daß das Potential  $V$  unendlich wird.  $\square$

Die Minimierung der Energie  $E_{min} = T + U$  wird durch Wahl von  $\phi_0$ :

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

erreicht.

4. Die Lösungen (Wellenfunktionen) der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung mit dem Potential des Harmonischen Oszillators lassen sich wie folgt schreiben:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{b}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

Wobei die  $H_n$  Hermitesche Polynome heißen. Sie enthalten entweder gerade oder ungerade Potenzen von  $x$  und sind vom Grad  $n$ . Daher haben die  $\phi_n$  positive oder negative Parität.<sup>40</sup>

5. Für die Lösungen der konservativen Schrödinger-Gleichung gilt, daß das Teilchen sich mit gleicher Wahrscheinlichkeit links wie rechts aufhält. Der Erwartungswert  $\langle x \rangle$  ist gleich null. Oder anders formuliert:  
Für  $\varrho(x, \mathcal{A})$  gilt

$$\varrho(-x) = \varrho(x).$$

*Beweis.*

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) x \phi(x) dx = \int_0^{+\infty} \varrho(x) x dx + \int_{-\infty}^0 \varrho(x) x dx = 0$$

Das Teilchen hält sich im Mittel in der Mitte auf.

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) x^2 \phi(x) dx = \int_0^{+\infty} \varrho(x) x^2 dx + \int_{-\infty}^0 \varrho(x) x^2 dx \neq 0$$

Die Schwankung ist aber ungleich null. Das Teilchen hält sich auch an anderen Orten auf.  $\square$

<sup>40</sup> Vergleiche [Flieckbach, S. 103].

6. Die klassische Bewegung  $x(t) = x_0 \cos \omega t$  läßt sich für  $t = 0$  und  $\langle x \rangle \neq 0$  als Überlagerung mehrerer Lösungen  $\phi_n$  konstruieren:<sup>41</sup>

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0(x, t) + \phi_1(x, t)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \right)\end{aligned}$$

mit den Lösungen für die Energien  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$  und  $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} e^{-i\frac{1}{2}\omega t} + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} e^{-i\frac{3}{2}\omega t} \right)$$

zusammengefaßt

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \left( 1 + \sqrt{2} \frac{x}{b} e^{-i\omega t} \right).$$

Daraus ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\varrho(x, t) = \frac{1}{2} \frac{1}{b\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{b^2}} \left( 1 + 2\sqrt{2} \frac{x}{b} \cos \omega t + 2 \frac{x^2}{b^2} \right)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho(x, t)$  wiederholt sich periodisch nach  $\omega t = 2\pi n$ .

---

<sup>41</sup>Dieses Ansinnen entspricht dem Ehrenfest'schen Theorem.

# Kapitel 2

## Grundlagen der Quantenmechanik

### 2.1 Zustand, Observable und Hilbertraum

#### 2.1.1 Notation der Systembeschreibung

##### Klassische Beschreibung

Klassisch ist ein System durch die generalisierten Koordinaten  $q_i(t_0)$  und  $p_i(t_0)$  zu einem Zeitpunkt  $t_0$  vollständig beschrieben. Die zusätzliche Angabe von  $H(p_i, q_i)$  legt das System für alle Zeiten fest. Damit hat man alles (Bewegungsgleichung und Anfangsbedingungen), um die Dynamik des Systems ( $q_i(t)$  und  $p_i(t)$ ) zu berechnen.

##### Darstellungsäquivalenz in der quantenmechanischen Beschreibung

Wie berechnet man in der Quantenmechanik den Zustand eines Systems, z.B. die Bewegung eines Teilchens? Nach Aufstellen der Schrödinger-Gleichung (d.h. Bestimmung des Hamilton-Operators) besitzen wir die Bewegungsgleichung, um die Systemvariablen berechnen zu können. Wir unterscheiden dabei folgende Darstellungsarten:

- Im Ortsraum: Wellenfunktion  $\psi(x)$ .
- Im Impulsraum: Impulswellenfunktion  $C(k)$ .
- Eine weitere Alternative folgt in diesem Abschnitt.

Aber diese verschiedenen Darstellungsarten sind äquivalent! Zur Beschreibung des Systems ist es völlig irrelevant, ob wir  $\psi(x)$  oder  $C(k)$  angeben. Eine Fouriertransformation liefert uns die jeweils andere Darstellung. Wir suchen nun einen Formalismus, der unabhängig von der Wahl des „Bezugssystems“ Ort oder Impuls ist. Mit ihm soll man rechnen können, um dann das fertige Ergebnis in die gewünschte Darstellung übertragen zu können.

### Bezugssystem-unabhängige Darstellung

Wir wählen dazu wieder die Wellenfunktion  $\psi$  als Repräsentante des Systems, jedoch lassen wir zunächst das Funktionsargument weg, um auszudrücken, dass die Beschreibung unabhängig davon ist. Dann führen wir die Dirac-Schreibweise ein. Sie bietet eine einfache Notation, die sehr gut zum mathematischen Formalismus des Hilbertraums passt, den wir im Folgenden darstellen möchten.

In der Dirac-Schreibweise wird die Zustandsfunktion mit  $|\psi\rangle$  notiert. Man spricht vom Zustandsvektor  $\psi$ . Dieser ist äquivalent zu den bisherigen Darstellungen, jedoch unabhängig von der Darstellungsart:

$$|\psi\rangle \hat{=} \begin{cases} \psi(x) & \text{im Ortsraum} \\ C(k) & \text{im Impulsraum} \end{cases}$$

### 2.1.2 Hilbertraum und Dirac-Schreibweise

#### Wellenfunktion und Vektorraum

Wir versuchen nun die Eigenschaften, die wir von den Wellenfunktionen kennen unter dem Begriff des Hilbertraums zusammenzufassen. Die Darstellung des Zustands erfolgte bisher durch komplexe Funktionen  $\psi(x)$ . Da jedoch die Wellenfunktionen Eigenschaften aufweisen, wie sie Elemente eines Vektorraums besitzen, stellen wir die Zustände als Vektoren eines solchen Raumes dar:

$$|\psi\rangle \hat{=} \text{Ket-Vektor } \psi \text{ als Element eines Vektorraums}$$

Sind die physikalischen Zustände  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$  Elemente des Vektorraums der Ket-Vektoren, so gilt dies auch für jede Linearkombination

$$|\psi\rangle = \alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle, \text{ mit } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

$|\psi\rangle$  ist ein Element des Hilbertraums, eines speziellen Vektorraums.

Für Elemente des Hilbertraums gilt das Superpositionsprinzip. Alle Zustände in der Quantenmechanik lassen sich als Elemente dieses Vektorraums auffassen.

Wir können alle (mathematischen) Eigenschaften des Hilbertraums nutzen um die (physikalischen) Eigenschaften der Zustände zu berechnen.

So existiert im Hilbertraum der Ket-Zustände ein Skalarprodukt.<sup>1</sup> Dieses Skalarprodukt entspricht einer Abbildung in den Körper der komplexen Zahlen.

#### Definition (Skalarprodukt).

$$\langle \phi | \psi \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx$$

Mathematisch bedeutet das Skalarprodukt eine Abbildung auf den Körper der komplexen Zahlen:

$$\langle \ | \ \rangle : \{\text{Vektorraum der Bra}\} \times \{\text{Vektorraum der Ket}\} \in \mathbb{C}$$

<sup>1</sup>Der Hilbertraum ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt.

**Definition.** Zu jedem Ket-Vektor  $|\psi\rangle$  gibt es einen dazu adjungierten Bra-Vektor<sup>2</sup>

$$\langle\psi| \equiv |\psi\rangle^\dagger$$

### Eigenschaften des Hilbertraums

- Die Vektoren  $|\psi_i\rangle$  bilden einen linearen Vektorraum über  $\mathbb{C}$ .  
D.h. Operationen sind linear bezüglich der Ket-Vektoren:

$$\begin{aligned}\langle\phi|\alpha\psi_1 + \beta\psi_2\rangle &= \alpha\langle\phi|\psi_1\rangle + \beta\langle\phi|\psi_2\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle\end{aligned}$$

- Die adjungierten Vektoren  $\langle\psi_i|$  bilden einen antilinearen Vektorraum über  $\mathbb{C}$ . Dies bedeutet, dass Operationen antilinear bezüglich der Bra-Vektoren sind:

$$\begin{aligned}\langle\alpha\psi_1 + \beta\psi_2|\phi\rangle &= \alpha^*\langle\psi_1|\phi\rangle + \beta^*\langle\psi_2|\phi\rangle \\ \langle\psi| &= \sum_i \alpha_i^* \langle\psi_i|\end{aligned}$$

### Eigenschaften des Skalarprodukts

Ist ein Zustand  $|\psi\rangle$  eine Linearkombination von Zuständen  $|\psi_i\rangle$ , so kann das Skalarprodukt wieder als Linearkombination der einzelnen Skalarprodukte geschrieben werden:

$$\begin{aligned}\langle\psi|\phi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \phi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_i \alpha_i^* \psi_i^*(x) \phi(x) dx \\ &= \sum_i \alpha_i^* \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^*(x) \phi(x) dx \\ &= \sum_i \alpha_i^* \langle\psi_i|\phi\rangle\end{aligned}$$

sowie

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i \langle\phi|\psi_i\rangle$$

Führen wir die Eigenschaften konkret auf:

---

<sup>2</sup>Die Namenswahl *Bra - Ket* ist historisch durch die Klammerschreibweise (engl. *Bracket*) bedingt. Physikalisch besteht kein Unterschied zwischen Bra- und Ket-Vektor. Sie stellen denselben Zustand dar. Mathematisch muss man sie jedoch unterscheiden. Ket ist ein Spaltenvektor, während Bra ein Zeilenvektor ist. Außerdem sind Bra und Ket zueinander konjugiert komplex.

- Das Skalarprodukt ist eine lineare Operation bezüglich der Ket-Zustände:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_i \alpha_i \langle \phi | \psi_i \rangle$$

- Es ist antilinear bezüglich der Bra-Zustände:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_i \alpha_i^* \langle \psi_i | \phi \rangle$$

- Es gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &\equiv \langle \psi | \phi \rangle^* \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx &= \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \psi^*(x) dx \right)^* \end{aligned}$$

- $\langle \phi | \phi \rangle$  ist reell und  $\geq 0$ . Damit ist:

$$\langle \phi | \phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle^*$$

und als Spezialfall gilt:

$$\langle \phi | \phi \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\phi\rangle = 0$$

- Die *Schwarz'sche Ungleichung* ist erfüllt:

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

Gleichheit ist genau dann gegeben, wenn  $|\phi\rangle$  eine Linearkombination von  $|\psi\rangle$  ist, also wenn:

$$|\phi\rangle = \lambda |\psi\rangle, \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{C}$$

ist.

**Einschub zur Schwarz'schen Ungleichung.** Die Schwarz'sche Ungleichung ist die (mathematische) Grundlage für die Heisenberg'sche Unschärferelation<sup>3</sup>, deshalb liefern wir den

*Beweis der Schwarz'schen Ungleichung.* Sei:

$$\lambda := \frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

Schreiben wir  $|\psi\rangle$  nun um, indem wir null addieren:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi\rangle \cdot \frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + |\psi\rangle - |\phi\rangle \cdot \frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \\ &= \lambda |\phi\rangle + |\psi\rangle - \lambda |\phi\rangle \end{aligned}$$

<sup>3</sup>Vgl. Abschnitt 2.3.7 auf Seite 115.



Dies entspricht einer Aufspaltung von  $|\psi\rangle$  in einen Anteil  $\parallel |\phi\rangle$  und einen Anteil  $\perp |\phi\rangle$ . Benennen wir noch:

$$|\xi\rangle := |\psi\rangle - \lambda|\phi\rangle$$

so heißt sich die Aufspaltung:

$$|\psi\rangle = \lambda|\phi\rangle + |\xi\rangle$$

Es gilt:

$$\begin{aligned}\langle\phi|\xi\rangle &= \langle\phi|\psi\rangle - \langle\phi|\phi\rangle \frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \\ &= 0\end{aligned}$$

wie erwartet, da  $|\xi\rangle$  durch unsere Festlegung  $\perp |\phi\rangle$  ist. Berechnen wir nun mit

Abbildung 2.1: Veranschaulichung der Aufspaltung von  $|\psi\rangle$  im zweidimensionalen Vektorraum.

der gewählten Aufspaltung das Skalarprodukt von  $|\psi\rangle$  mit sich selbst:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\lambda\phi + \xi|\lambda\phi + \xi\rangle$$

Nutzen wir die Linearität von Ket:

$$= \lambda\langle\lambda\phi + \xi|\phi\rangle + \langle\lambda\phi + \xi|\xi\rangle$$

Beachten wir die Antilinearität der Bra-Vektoren:

$$\begin{aligned}&= \lambda(\lambda^*\langle\phi|\phi\rangle + \underbrace{\langle\xi|\phi\rangle}_{=0}) + \lambda^*\underbrace{\langle\phi|\xi\rangle}_{=0} + \langle\xi|\xi\rangle \\ &= |\lambda|^2\langle\phi|\phi\rangle + \underbrace{\langle\xi|\xi\rangle}_{\geq 0} \\ &\geq |\lambda|^2\langle\phi|\phi\rangle\end{aligned}$$

Gleichheit gilt nur dann, wenn  $|\xi\rangle = |0\rangle$  ist.<sup>4</sup> Schreiben wir  $|\lambda|^2$  aus:

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq \underbrace{\frac{|\langle\phi|\psi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle^2}}_{\lambda^2} \langle\phi|\phi\rangle$$

und kürzen  $\langle\phi|\phi\rangle$  heraus:

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq \frac{|\langle\phi|\psi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle}$$

so erhalten wir nach Umformung die gewünschte Ungleichung:

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

Da nur für  $|\xi\rangle = |0\rangle$  das Gleichheitszeichen gilt, dann aber  $|\psi\rangle \parallel |\phi\rangle$  sein muss, ist die Schwarz'sche Ungleichung bewiesen.  $\square$

<sup>4</sup>Der Nullvektor  $\vec{0}$  wird gemäß der neuen Schreibweise als Zustandsvektor  $|0\rangle$  geschrieben.

### Basis und Entwicklungskoeffizienten

Zur Darstellung von Vektoren des Hilbertraums benötigen wir eine „vernünftige“ Basis für diesen Vektorraum.

**Definition (Basis des Hilbertraums).** *Im Folgenden sei der Hilbertraum  $N$ -dimensional.<sup>5</sup> Die Basiszustände seien  $|\phi_i\rangle$ , mit  $i = 1, \dots, N$ . Dann lässt sich der Zustand  $|\psi\rangle$  folgendermaßen schreiben:*

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_i\rangle$$

Diese Darstellung beschreibt die Projektion des Zustandsvektors auf die Basiszustände bzw. die *Entwicklung des Zustandsvektors nach Basiszuständen*. Die Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_i$  charakterisieren dabei den Zustand  $|\psi\rangle$  eindeutig.

Entsprechend definieren wir für den Bra-Vektor:

**Definition (Basisdarstellung für Bra-Vektoren).**

$$\langle \psi | = \sum_{i=1}^N \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \phi_i | = \sum_{i=1}^N \alpha_i^* \langle \phi_i |$$

Haben wir also eine Basis gegeben, und kennen wir die Entwicklungskoeffizienten eines Zustands  $|\xi\rangle$  in dieser Basis, so besitzen wir alle Informationen, um  $|\xi\rangle$  darstellen (und damit rechnen) zu können.

**Beispiel (für eine Basis).** Die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung des Harmonischen Oszillators:

$$\phi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_i\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}},$$

(wobei  $H_i$  die sogenannten *Hermite'schen Polynome* sind) werden oft als Basissystem für die Bewegung eines Teilchens in einer Dimension benutzt.

Damit ein System Basis sein kann, muss jede Wellenfunktion (jeder Zustand) als Überlagerung (Superposition) der Basiszustände darstellbar sein. Außerdem müssen alle Basiszustände untereinander linear unabhängig („senkrecht zueinander“) sein. Im Normalfall wählt man nicht einfach eine Orthogonalbasis, sondern eine Orthonormalbasis, bei der die Basiszustände normiert sind.

**Satz (Orthonormierungsbedingung).** *Für alle Basiszustände einer gegebenen diskreten Orthonormalbasis gilt:*

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

**Beispiel (Zweidimensionaler Vektorraum).** Eine nicht-orthogonale Basis verkompliziert die Rechnung unnötig, wie Abbildung 2.2 andeutet; deshalb wählen wir lieber eine orthogonale Basis, wie in Abbildung 2.3.

<sup>5</sup> Besteht die Basis aus abzählbar vielen Komponenten  $|\phi_i\rangle$ , so spricht man von einem *diskreten* Orthonormalsystem.

Abbildung 2.2: Nicht-orthogonale Basis.

Abbildung 2.3: Orthogonale Basis.

Eine Orthonormalbasis ist vorteilhaft, weil sich dann die Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_i$  einfach bestimmen lassen. Denn ist  $|\phi_i\rangle$  eine Orthonormalbasis, so ist:

$$\begin{aligned}\langle \phi_i | \psi \rangle &= \langle \phi_i | \sum_j \alpha_j \phi_j \rangle \\ &= \sum_j \alpha_j \underbrace{\langle \phi_i | \phi_j \rangle}_{\delta_{ij}} \\ &= \alpha_i\end{aligned}$$

**Berechnung der Entwicklungskoeffizienten.** Gegeben sei  $\psi(x)$ , also der Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  in Ortsdarstellung, sowie eine Basis  $|\phi_i\rangle$ , deren Zustände ebenfalls in Ortsdarstellung bekannt sind,  $\phi_i(x)$ . Dann ist:

$$\psi(x) = \sum_i \alpha_i \phi_i(x)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten:

$$\alpha_i = \langle \phi_i | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \psi(x) dx$$

Hierfür hat man ein wohldefiniertes Integral, das berechnet werden kann.

**Beispiel.** Ist  $\psi(x)$  auf einen Punkt  $x_0$  konzentriert:

$$\psi(x) = \delta(x - x_0)$$

so sind die Entwicklungskoeffizienten mit der Eigenschaft der  $\delta$ -Funktion einfach zu berechnen:

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \delta(x - x_0) dx \\ &= \phi_i^*(x_0)\end{aligned}$$

Fassen wir die Ergebnisse der obigen Definition nochmals zusammen, um einen wichtigen Operator vorstellen zu können.

**Satz.** Für alle  $|\psi\rangle$  gilt bezüglich einer (diskreten) Basis  $|\phi_i\rangle$ :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi \rangle$$

Dabei sind  $\langle \phi_i | \psi \rangle = \alpha_i$  die Entwicklungskoeffizienten von  $|\psi\rangle$  in dieser Basis.

**Satz (Der Eins-Operator).** *Der Operator:*

$$\boxed{\sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \equiv \hat{\mathbf{1}}} \quad \text{Identität}$$

*ist ein neutrales Element (Identität) des (Skalar-)Produkts im Hilbertraum. Die  $|\phi_i\rangle$  müssen dazu eine vollständige Orthonormalbasis bilden.*

Auf Seite 89 werden wir diesen Satz anders herum lesen und als Vollständigkeitsrelation einer Basis verstehen.

Die Identität werden wir fortan sehr oft verwenden, indem wir in Rechnungen mit „eins“ multiplizieren. Da wir es nicht immer explizit ausschreiben können, sollte sich jeder die Benutzung am folgenden Beispiel einprägen.

**Beispiel.** Wenn eine Orthonormalbasis  $|\phi_i\rangle$  gegeben ist, so gilt für den Zustand  $|\psi\rangle$  mit den Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_i$ :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_i\rangle$$

Die Entwicklungskoeffizienten entstehen durch Projektion des Zustands auf die Basiszustände; schreiben wir stattdessen also das Skalarprodukt:

$$= \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle$$

so erkennen wir darin unsere Identität von oben wieder:

$$= \hat{\mathbf{1}} |\psi\rangle$$

Entsprechend gilt für den Bra-Vektor:

$$\begin{aligned} \langle\psi| &= \sum_{i=1}^N \alpha_i^* \langle\phi_i| \\ &= \sum_{i=1}^N \langle\phi_i|\psi\rangle^* \langle\phi_i| \\ &= \sum_{i=1}^N \langle\psi|\phi_i\rangle \langle\phi_i| \end{aligned}$$

Auch hier steht wieder der Eins-Operator:

$$= \langle\psi| \hat{\mathbf{1}}$$

### Vektordarstellung der Zustände

Was nützen uns die Entwicklungskoeffizienten? Betrachten wir dazu das Skalarprodukt zweier Zustandsvektoren  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$ , mittels Basisvektoren und Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_{i1}$  und  $\alpha_{i2}$ :

$$\begin{aligned}\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle &= \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \langle \psi_2 | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \psi_1 \rangle \\ &= \sum_{j,i}^N \alpha_{j2}^* \alpha_{i1} \langle \phi_j | \phi_i \rangle\end{aligned}$$

Das Skalarprodukt zweier Basisvektoren entspricht aber, wie auf Seite 82 dargelegt, dem Kronecker- $\delta$ :

$$= \sum_{j,i}^N \alpha_{j2}^* \alpha_{i1} \delta_{ij}$$

und somit bricht eine Summe zusammen:

$$= \sum_i^N \alpha_{i2}^* \alpha_{i1}$$

Eine solche Summe aus Produkten ist aber gerade die ausgeschriebene Form des Skalarprodukts zweier Vektoren mit Koeffizienten  $\alpha_{i2}^*$  und  $\alpha_{i1}$ :

$$= (\alpha_{12}^* \quad , \dots, \quad \alpha_{N2}^*) \begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \vdots \\ \alpha_{N1} \end{pmatrix}$$

Mit dieser Darstellung erklärt sich nun auch der Begriff des *Zustandsvektors*.

**Satz.** *Ein Zustand kann durch einen Spaltenvektor dargestellt werden. Die Elemente des Vektors sind die Entwicklungskoeffizienten des Zustands bezüglich einer gegebenen Orthonormalbasis:*

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix}$$

**Bemerkung.** Hier ist es relevant, dass der Bra-Vektor das *Adjungierte* des Ket-Vektors ist. Durch das Transponieren erhalten wir nämlich den Bra-Vektor immer als Zeilenvektor, während der Ket-Vektor immer ein Spaltenvektor ist.

### Basistransformation

Eine Basis zeichnet sich durch die Eigenschaften aus, dass sie:

1. *orthonormal* ist:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

2. *vollständig* ist, ein Zustand sich also als Linearkombination der Basisvektoren darstellen lässt:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |\phi_i\rangle$$

3. *eindeutig* ist, also nicht mehr Elemente hat, als zur Darstellung nötig sind.<sup>6</sup>

Es ist nicht nur eine Basis möglich, es gibt (beliebig) viele, die diese Eigenschaften erfüllen. Sicher ist jedoch, dass alle solche Basen, in denen man einen konkreten Vektor darstellen kann, dieselbe Dimension haben. Dementsprechend muss es möglich sein, zwischen verschiedenen Basen zu wechseln. Wir suchen nun eine solche orthogonale Transformation  $|\phi_i\rangle \rightarrow |\tilde{\phi}_i\rangle$ .

Abbildung 2.4: Orthogonale Basistransformation.

**Definition (Unitäre Matrix).** Eine Matrix  $U$  heißt unitär, wenn die Adjungierte  $U^\dagger := (U^T)^*$  gleich der Inversen ist:

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

**Definition (Unitäre Transformation).** Eine Transformation von einer Orthonormalbasis  $|\phi_i\rangle$  in eine andere Orthonormalbasis  $|\tilde{\phi}_k\rangle$  nennt man unitäre Transformation. Die zugehörige Transformationsmatrix ist unitär:

$$\begin{aligned} |\tilde{\phi}_k\rangle &= \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \tilde{\phi}_k \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N U_{ik} |\phi_i\rangle, \quad \text{mit } k = 1, \dots, N \end{aligned}$$

Die  $U_{ik}$  sind hierbei die Entwicklungskoeffizienten der Basisvektoren  $|\tilde{\phi}_k\rangle$  bezüglich der Basis  $|\phi_i\rangle$ . Sie bilden eine Matrix, wobei für die einzelnen Koeffizienten gilt:

$$\begin{aligned} U_{ik} &\hat{=} U_{\text{Zeile}, \text{Spalte}} \\ &= \langle \phi_i | \tilde{\phi}_k \rangle \end{aligned}$$

(Die Spaltenvektoren der Matrix sind die Basisvektoren  $|\tilde{\phi}_k\rangle$  in der Basisdarstellung von  $|\phi_i\rangle$ ). Diese Transformationsmatrix hat damit folgendes Aussehen:

$$\begin{pmatrix} U_{11} & \dots & U_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{N1} & \dots & U_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \tilde{\phi}_1 \rangle & \dots & \langle \phi_1 | \tilde{\phi}_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_N | \tilde{\phi}_1 \rangle & \dots & \langle \phi_N | \tilde{\phi}_N \rangle \end{pmatrix}$$

<sup>6</sup>Dass sich kein Basisvektor als Linearkombination der anderen Basisvektoren schreiben lässt, ist in der Orthonormalitätsbedingung schon enthalten. Die Eindeutigkeit der Basis ist aber wichtig genug, um sie extra aufzuführen.

**Satz.** Zu jeder unitären Transformation  $U$  existiert eine unitäre Umkehrtransformation  $U^{-1}$ :

$$|\phi_i\rangle = \sum_k U_{ki}^{-1} |\tilde{\phi}_k\rangle$$

*Beweis.* Es gilt die Basisdarstellung für  $|\phi_i\rangle$ :

$$|\phi_i\rangle = \sum_k |\tilde{\phi}_k\rangle \langle \tilde{\phi}_k | \phi_i \rangle$$

Das auftretende Skalarprodukt ist die gesuchte Rücktransformationsmatrix:

$$U_{ki}^{-1} = \langle \tilde{\phi}_k | \phi_i \rangle$$

Vertauschen wir Bra und Ket, so wird das Skalarprodukt zusätzlich konjugiert:

$$\begin{aligned} &= \langle \phi_i | \tilde{\phi}_k \rangle^* \\ &= U_{ik}^* \end{aligned}$$

Also ist:

$$\boxed{U_{ki}^{-1} = U_{ik}^*}$$

Dies ist eine notwendige Eigenschaft einer Basistransformation.  $\square$

Wir können damit schreiben:

$$|\tilde{\phi}_k\rangle = \sum_{i=1}^N U_{ik} |\phi_i\rangle$$

für  $|\phi_i\rangle$  die Umkehrtransformation eingesetzt:

$$= \sum_{i=1}^N U_{ik} \sum_m U_{mi}^{-1} |\tilde{\phi}_m\rangle$$

Es muss aber auch gelten:

$$= \sum_m \delta_{km} |\tilde{\phi}_m\rangle$$

Vergleicht man die beiden letzten Terme miteinander, so folgt daraus die Eigenschaft:

$$\sum_{i=1}^N U_{ik} U_{mi}^{-1} = \delta_{km} = \mathbf{1}_N$$

Das Produkt der beiden Transformationsmatrizen ergibt die Einheitsmatrix:

$$U^{-1}U = \mathbf{1}$$

Für die Transformationsoperatoren gilt damit:

$$\boxed{U^{-1} = (U^T)^* \Leftrightarrow U \text{ ist unitär.}}$$

**Satz.** Eine unitäre Transformation  $U$  wird durch eine unitäre Matrix  $U_{ik}$  dargestellt.

Das ermöglicht es uns, mit den Mitteln der Matrizenrechnung zu prüfen, ob  $U$  eine unitäre Transformation ist.

**Satz.** Bei orthogonalen Transformationen sind  $U$  und  $U^{-1}$  reell, die Umkehrabbildung entspricht dementsprechend einer reinen Transposition der Transformationsmatrix:

$$U^{-1} = U^T$$

Ein Spezialfall von  $U$  sind z.B. die Drehungen, die wir noch ausführlich behandeln werden.

### 2.1.3 Systembeschreibung mit dem neuen Formalismus

#### Orts- und Impulsdarstellung

Bisher haben wir immer die Orts- oder die Impulsdarstellung für unsere physikalischen Zustände gewählt. Wie sehen diese Zustände aber konkret in einer Basisdarstellung aus?

Mittels der Fouriertransformation kann man zwischen Orts- und Impulsdarstellung wechseln:

$$\psi(x) \xleftarrow{\text{Fourier}^{-1}} \xrightarrow{\text{Fourier}} \tilde{\psi}(p)$$

Um zwischen diesen und der Dirac-Schreibweise zu wechseln, benötigen wir das Skalarprodukt. Wir behandeln die Umwandlung am Beispiel der ebenen Welle:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}, \quad \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$$

$\psi(x)$  bedeutet, dass jeder Koordinate  $x'$  eine komplexe Zahl  $\psi(x')$  zugeordnet wird. Sieht man  $x$  als (eine Art kontinuierliche) Basis an, so ergibt das Skalarprodukt aus dieser Basis mit der Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  die Wellenfunktion in dieser Basis, also  $\psi(x)$ :

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \psi(x') dx'$$

Die  $\delta$ -Funktion drückt die Verwendung von  $x$  als Basis aus;  $\psi$  wird explizit an der Stelle  $x$  dargestellt.

Die Impulsabhängigkeit gewinnt man, wie schon besprochen, durch Fouriertransformation:

$$\tilde{\psi}(p=\hbar k) = \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}}^{\text{Fourier}} \underbrace{\psi(x)}_{\langle x | \psi \rangle} dx$$



Dies entspricht aber gerade der Darstellung der Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  in der „Basis“  $p$ :

$$= \langle p | \psi \rangle$$

Vergleichen wir dies nun mit dem eben behandelten Basiswechsel, so müsste obiges Integral formal so aussehen:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$$

Das bedeutet, dass wir  $\psi$  in Ortsdarstellung – mittels einer Basistransformation von der Ortsbasis in die Impulsbasis – in die Impulsdarstellung wandeln.

Im direkten Vergleich der Integral- und der Dirac-Schreibweise können wir nun die Impulszustände in Ortsdarstellung extrahieren.<sup>7</sup> Mit:

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

erhalten wir für den Impulszustand:

$$\langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$$

Zusammenfassend können wir also schreiben:

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

Beim Zwischenschritt des Basiswechsels:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$$

benutzt man wieder die Vollständigkeitsrelation; diesmal für eine kontinuierliche Basis. Da sie wichtig ist, nennen wir sie nochmals:

**Satz (Vollständigkeitsrelation).** *Bilden die Vektoren  $|x\rangle$  eine kontinuierliche Basis für jeden Zustand  $|\psi\rangle$  eines gegebenen Raums, so gilt:*

$$\hat{\mathbf{1}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx$$

Für diskrete Basen lautet die Vollständigkeitsrelation:

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

**Bemerkung.** Die Vollständigkeit einer Basis bezieht sich immer auf konkrete Zustandsvektoren, bzw. auf den Raum, in dem diese Zustände existieren. Eine Basis kann nicht alleine leben, entsprechend kann man von Vollständigkeit nur reden, wenn gegebene physikalische Zustände eindeutig und vollständig auf die Vektoren der Basis abgebildet werden können.

<sup>7</sup>Wir sind bei der expliziten Darstellung immer noch beim Beispiel der ebenen Welle, nur die formale Schreibweise ist global gültig.

**Zusammenfassung:** Die Impulswellenfunktion  $\tilde{\psi}(p)$  ergibt sich als Skalarprodukt der Wellenfunktion mit dem Impuls; dies entspricht dem Skalarprodukt der Ortswellenfunktion  $\langle x | \psi \rangle$  mit der konjugiert komplexen Ortsdarstellung des Impulses  $\langle p | x \rangle$ :

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$$

$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle$  stellt nach wie vor die Wahrscheinlichkeitsamplitude für ein Teilchen mit dem Impuls  $p$  dar.

### Bemerkungen zu kontinuierlichen Basen

**Satz.** Das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen kann sowohl über die Orts- als auch über die Impulsdarstellung berechnet werden. Dazu werden die Zustände in der jeweiligen Orts- oder Impulsbasis dargestellt:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\langle \phi | x \rangle}_{\phi^*(x)} \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{\psi(x)} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\langle \phi | p \rangle}_{\tilde{\phi}^*(p)} \underbrace{\langle p | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p)} dp$$

**Satz (Orthonormierungsbedingung).** Für alle Basiszustände einer kontinuierlichen Basis gilt:

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

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \langle x | x' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | y \rangle \langle y | x' \rangle dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y) \delta(y - x') dy \\ &= \delta(x - x') \end{aligned}$$

□

Diese Beziehung gilt für beliebige kontinuierliche Orthonormalbasen, wie den Ort  $|x\rangle$ , den Impuls  $|p\rangle$ , ...

**Beachte** bei der Dimension der Basis:

- $x$  bzw.  $p$  stellen in diesen Skalarprodukten eine kontinuierliche Basis dar:

$$\begin{aligned} -\infty < x < +\infty \\ -\infty < p < +\infty \end{aligned}$$

- Das Kronecker- $\delta$  bei diskreten Basen geht für kontinuierliche Basen über in das Dirac- $\delta$ .
- Die Darstellung der  $\hat{\mathbf{1}}$  mittels Summation in einer diskreten Basis ( $\sum_{i=1}^N$ ) geht über in ein Integral bei kontinuierlichen Basen ( $\int_{-\infty}^{+\infty}$ ).

### Zusammenfassung der Darstellungsarten

Zur Darstellung eines physikalischen Zustands  $|\psi\rangle$  benötigt man eine Darstellungsbasis im Hilbertraum. Mögliche Basen sind:

- Zur Ortsdarstellung:

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$$

die kontinuierliche Ortsbasis  $|x\rangle$ .

- Zur Impulsdarstellung:

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

die kontinuierliche Impulsbasis  $|p\rangle$ , oder auch  $|k\rangle$ .

- Eine diskrete Basis aus orthonormalen Zustandsvektoren:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi \rangle$$

Dabei steht im Prinzip eine unendlich große Anzahl möglicher Kandidaten zur Verfügung. In der Praxis wird man eine geschickte, also möglichst einfache (dem System angepasste) Basis wählen.

### Messung von Observablen

Fassen wir die bisherigen Erkenntnisse nochmals zusammen, um die Erwartungswerte in die neue Schreibweise zu übertragen.

Physikalische Messgrößen (Observable) sind in der Klassischen Mechanik dynamische Variable  $F(p_i, q_i)$ , d.h. Funktionen der generalisierten Koordinaten, z.B.:

- Energie eines Systems:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

- Drehimpuls

$$\vec{l} = \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{pmatrix}$$

davon z.B. die  $x$ -Komponente:

$$l_x = (\vec{r} \times \vec{p})_x = yp_z - zp_y$$

- Orts- und Impulskomponenten, z.B.  $x$  oder  $p_x$ .

In der Quantenmechanik hat man stattdessen Operatoren  $\hat{F}(\hat{p}, \hat{x})$  die wiederum von Operatoren ( $\hat{p}$  und  $\hat{x}$ ) abhängen.

Bei diesen Operatoren gibt es einige Dinge zu beachten:

- Die Form des Operators hängt von der Darstellung ab. D.h. man gibt zunächst den Operator an, und „wählt“ die Form entsprechend der Darstellungsart.
- Die Differentiationen die in Operatoren auftreten sind, gemäß den Eigenschaften des Hilbertraums, lineare Operationen.

### Operatoren der Quantenmechanik in Ortsdarstellung ...

- $p \longrightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$
- $x \longrightarrow \hat{x} = x$

### ... und in Impulsdarstellung:

- $p \longrightarrow \hat{p} = p$
- $x \longrightarrow \hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$

Dass die letzteren Beziehungen die richtigen Ersetzungen der Koordinaten in Impulsdarstellung sind, möchten wir unter Einbeziehung der neuen Darstellungsart zeigen:

*Beweis.* Wir berechnen den Erwartungswert der Ortskoordinate, ausgehend von der Impulsdarstellung, indem wir die zu prüfenden Operatoren einsetzen:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\hat{p}) \hat{x} \psi(\hat{p}) dp \\ &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(p) \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \right) \psi(p) dp \end{aligned}$$

In der Bracket-Schreibweise lautet dies:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | p \rangle \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \right) \langle p | \psi \rangle dp$$

Eine Koordinatentransformation in die Ortsdarstellung liefert:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | x' \rangle \langle x' | p \rangle \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \right) \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx dx' dp$$

Gehen wir zurück in die Ortsdarstellung:

$$= \iiint \psi^*(x') \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x'} \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \psi(x) dx dx' dp$$

Ausführen der Differentiation:

$$= \iiint \psi^*(x') \frac{e^{i\frac{p}{\hbar}x'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \left(-\frac{i}{\hbar}x\right) \frac{e^{-i\frac{p}{\hbar}x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) dx dx' dp$$

Zusammenfassen der Exponentialfunktionen:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') x \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}(x'-x)} \psi(x) dx dx' dp$$

Erinnern wir uns an die alternative Definition der  $\delta$ -Funktion durch die inverse Fouriertransformation auf Seite 25, so „löst“ sich das Integral über  $p$  in der  $\delta$ -Funktion auf:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \delta(x' - x) x \psi(x) dx dx'$$

Integration über die  $\delta$ -Funktion:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

Dies ist die Form des Erwartungswerts in Ortsdarstellung. Die Ersetzung führt also zum richtigen Ergebnis.  $\square$

**Beispiel (Harmonischer Oszillator).** Die Hamilton-Funktion des Harmonischen Oszillators hat folgendes Aussehen:

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

Dann ist der Hamilton-Operator, wenn man die Variablen  $p$  und  $x$  durch die zugehörigen Operatoren  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  ersetzt – und das bezüglich der gewählten Darstellungsbasis:

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

In Ortsdarstellung ( $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ):

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

In Impulsdarstellung ( $\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$ ):

$$\hat{H}(p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dp^2}$$

Wendet man den Hamilton-Operator auf einen Zustand an, z.B. in Impulsdarstellung:

$$\hat{H}(p) \tilde{\psi}(p) = E \tilde{\psi}(p) = \tilde{f}(p)$$

so sieht dies in Bracket-Schreibweise folgendermaßen aus:

$$\langle p | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle = \langle p | E | \tilde{\psi} \rangle = \langle p | f \rangle$$

Unabhängig von der Darstellung schreibt man:

$$\boxed{\hat{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle}$$

Dies ist die Schreibweise der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung im Vektorraum der Ket-Zustände!

Der Operator  $\hat{H}$  ist eine Abbildung:

$$\hat{H} : (\text{Vektorraum})_{\text{Ket}} \rightarrow (\text{Vektorraum})_{\text{Ket}}$$

Der Erwartungswert des Operators  $\hat{H}$ :

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | f \rangle$$

ist das Skalarprodukt aus dem Bra-Vektor  $\langle \psi |$  und dem Ket-Vektor  $\hat{H} | \psi \rangle$ .

Wir „schlagen“ den Operator im Erwartungswert also dem Ket-Vektor zu, um dann das Skalarprodukt  $Bra \cdot Ket$  zu berechnen. Manchmal ließe es sich allerdings einfacher rechnen, wenn man den Operator auf den Bra-Zustand anwenden könnte. Davon handelt der folgende Abschnitt.

### Hilfsmittel: Adjungierte und hermitesche Operatoren

Ein Operator steht für eine Observable, die er im mathematischen Formalismus des Hilbertraums beschreibt. Es stellt sich also die Frage, ob man mit mathematischen Mitteln erkennen kann, ob ein Operator „Sinn“ macht, d.h. eine physikalisch sinnvolle Observable darstellen kann.

**Satz.** *Physikalisch sinnvolle Operatoren sind linear und hermitesch.*

Dies muss im Folgenden erläutert werden.

1. Der Operator  $\hat{A}$  sei linear.

- Mit:

$$| \psi \rangle = \alpha_1 | \psi_1 \rangle + \alpha_2 | \psi_2 \rangle$$

oder in „traditioneller“ Ortsdarstellung:

$$\psi(x) = \alpha_1 \psi_1(x) + \alpha_2 \psi_2(x)$$

gilt dann:

$$\hat{A} | \psi \rangle = \alpha_1 \hat{A} | \psi_1 \rangle + \alpha_2 \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

- Dies ist für die Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  erfüllt (z.B. in Ortsdarstellung):

$$\begin{aligned} x \psi(x) &= \alpha_1 x \psi_1(x) + \alpha_2 x \psi_2(x) \\ \hat{p} \psi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) = \alpha_1 \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x) + \alpha_2 \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_2(x) \end{aligned}$$

- Auch Kombinationen  $(+, \cdot)$  sind linear, mehrere Operatoren als Argument sind also erlaubt ( $\hat{A}(\hat{p}, \hat{q})$ ).
2.  $\hat{A}$  ist ein hermitescher Operator (hierzu zunächst ein Einschub, die Definition des Begriffs folgt danach).

**Definition.** Zu jedem Operator  $\hat{A}$  definieren wir den adjungierten Operator  $\hat{A}^\dagger$ :

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle =: \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle$$

für alle Zustände  $|\phi\rangle$  und  $|\psi\rangle$  des Hilbertraums.

Formal kann man das Skalarprodukt folgendermaßen schreiben:

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \phi | f \rangle$$

mit dem Ket-Vektor  $|f\rangle = |\hat{A}\psi\rangle$ ; bzw. mit dem Bra-Vektor  $\langle g| = \langle \hat{A}^\dagger \phi|$  als:

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle g | \psi \rangle$$

Damit haben wir das gerade angeschnittene Problem gelöst. Der Operator kann sowohl auf den Ket-, als auch auf den Bra-Zustand angewandt werden.

**Eigenschaften** der adjungierten Operatoren:

1. Vertauschung von Bra und Ket:

$$\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \phi \rangle^*$$

also:

$$\boxed{\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle^*}$$

Diese Beziehung ist sehr wichtig, wir möchten deswegen eine mögliche Herleitung zeigen.<sup>8</sup>

*Skizze.* Zunächst nutzen wir die unten vorgestellte 2. Eigenschaft, dass die zweimalige Adjunktion den Term nicht ändert:

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \left( \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^\dagger \right)^\dagger$$

<sup>8</sup>Die Herleitung benutzt die Eigenschaft der „Rückadjunktion“, die als nächster Punkt vorgestellt wird. Dort wird im Beweis die Vertauschungsregel benutzt, so dass eines davon auf dem anderen aufbaut. Deswegen nennen wir die Herleitung nur „Skizze“. Sie soll nicht dem Beweis dienen, sondern die Vertauschung einprägen.

Die 3. Eigenschaft zeigt, wie die Adjunktion auf Kombinationen wirkt. Dabei beachten wir, dass ein reiner Platzwechsel zunächst Bra und Ket unberührt lässt:

$$= (|\hat{A}\psi\rangle^\dagger \langle \phi |^\dagger)^\dagger$$

„Verteilen“ wir die Adjunktion noch auf die einzelnen Ket-Bestandteile, so tauschen diese wieder die Position:

$$= (|\psi\rangle^\dagger \hat{A}^\dagger \langle \phi |^\dagger)^\dagger$$

Nun führen wir die Adjunktionen aus, wodurch sich Spalten- und Zeilenvektor in ihr Gegenstück transponieren:

$$= (\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle)^\dagger$$

Der Erwartungswert ist eine Zahl, für physikalische Operatoren sogar  $\in \mathbb{R}$ , deswegen reduziert sich die äußere Adjunktion in eine Konjugation:

$$= (\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle)^*$$

□

2. Wiederholte Anwendung:

$$\boxed{(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}}$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \psi | \underbrace{\hat{A}^\dagger}_{=\hat{B}} | \phi \rangle^* \\ &= \langle \psi | \hat{B} | \phi \rangle^* \\ &= (\langle \phi | \hat{B}^\dagger | \psi \rangle)^* \\ &= \langle \phi | \hat{B}^\dagger | \psi \rangle \\ &= \langle \phi | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | \psi \rangle \end{aligned}$$

□

3. Anwendung auf kombinierten Ausdruck:

$$\boxed{(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger}$$

*Beweis.* Es gilt:

$$\langle \phi | (\hat{A}\hat{B}) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \phi \rangle^*$$

Aber auch:

$$\langle \phi | (\hat{A}\hat{B}) | \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \hat{B} | \psi \rangle = \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger) | \phi \rangle^*$$

Der Vergleich beider Ausdrücke liefert den Beweis. □



Nun haben wir das mathematische Handwerkszeug für die wichtige

**Definition.** Ein Operator heißt hermitesch oder selbstadjungiert, wenn gilt:

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

**Satz.** Erwartungswerte für hermitesche Operatoren sind reell (und nur damit können sie beobachtbare physikalische Größen darstellen).

*Beweis.* Eine Eigenschaft adjungierter Operatoren ist:

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

mit  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  folgt:

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

Und damit muss dieser Erwartungswert reell sein.  $\square$

Wie sieht es nun mit der Hermitizität unserer konkreten Operatoren aus?

**Beispiel (Ortsvektor).** Legen wir die Ortsdarstellung zugrunde, so ist  $\hat{x} = x$ . Die Observable  $x$  ist aber aus ihrer Definition heraus reell. Somit ist  $\hat{x}$  selbstadjungiert:

$$\boxed{\hat{x} = \hat{x}^\dagger}$$

**Beispiel (Impulsvektor).** In Ortsdarstellung ist  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  der Impulsoperator. Prüfen wir, ob er hermitesch ist:

$$\langle \phi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \psi(x)}_{\psi'(x)} dx$$

Partielle Integration:

$$= \underbrace{\frac{\hbar}{i} \phi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \phi^*(x) \frac{\hbar}{i} \psi(x) dx$$

Gemäß der Normierbarkeit verschwindet jede Wellenfunktion im Unendlichen, so dass der vordere Term null ist; den hinteren schreiben wir um:

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \right)^* \psi(x) dx$$

Dies ist  $\hat{p}$  angewandt auf  $\langle \phi |$ :

$$= \langle \hat{p} \phi | \psi \rangle$$

Es gilt aber auch:

$$\langle \phi | \hat{p} | \psi \rangle = \langle \hat{p}^\dagger \phi | \psi \rangle$$

Also ist  $\hat{p}$  hermitesch:

$$\boxed{\hat{p} = \hat{p}^\dagger}$$

**Beispiel.** Ist das Produkt der beiden,  $\hat{p} \cdot \hat{x}$ , auch hermitesch?

(Die Frage drängt sich auf, da die einzelnen „Koordinatenoperatoren“ ja hermitesch sind.) Für ihr Produkt ergibt sich allerdings:

$$\begin{aligned} (\hat{p}\hat{x})^\dagger &= \hat{x}^\dagger \hat{p}^\dagger \\ &= \hat{x} \hat{p} \\ &\neq \hat{p} \hat{x} \end{aligned}$$

Denn:

$$\begin{aligned} \hat{p}\hat{x} \psi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \psi(x)) \\ &= \frac{\hbar}{i} (\psi(x) + x \psi'(x)) \\ &= \frac{\hbar}{i} \psi(x) + x \hat{p} \psi(x) \end{aligned}$$

weil  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  ist. Damit erhalten wir:

$$\hat{p}\hat{x} = \hat{x}\hat{p} + \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{1}}$$

Ein Produkt aus hermiteschen Operatoren muss also nicht wieder hermitesch sein!

**Bemerkung.** In der klassischen Mechanik gilt  $px = xp$ . Wir wissen, dass dies in der Quantenmechanik nicht so ist. Diese Ungleichheit bedeutet, dass der zugeordnete Operator nicht selbstadjungiert ist. Man kann allerdings einen hermiteschen Operator aus  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  konstruieren. Der Operator:

$$\frac{1}{2} (\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})$$

ist hermitesch! Dieser Operator liefert also reelle Erwartungswerte und somit physikalisch sinnvolle Ergebnisse. Für  $\hat{p}\hat{x}$  und  $\hat{x}\hat{p}$  alleine gilt dies nicht.

## 2.2 Eigenzustände und Matrixdarstellung

### 2.2.1 Eigenzustände

**Definition.** Sei  $\hat{A}$  ein linearer, hermitescher Operator mit

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle = a|\psi\rangle \quad a \in \mathbb{R},$$

dann ist  $|\psi\rangle$  ein Eigenvektor zu  $\hat{A}$  und  $a$  ist der Eigenwert.

Die Begriffe stammen aus der Vektoralgebra. Der Ergebnisvektor  $\varphi$  ist parallel zu  $\psi$ , beziehungsweise ein Vielfaches von  $\psi$ .

**Satz.** Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell.

*Beweis.* Ist  $\hat{A}$  hermitesch ( $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ), dann ist  $a$  reell, da

$$\underbrace{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}_{\text{reell}} = \langle \psi | a | \psi \rangle = a \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{\text{reell}}.$$

□

Das Folgende ist eine Übung der Bracketschreibweise und ein Rückblick auf die lineare Algebra.

**Satz.** Sind  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$  Eigenvektoren von  $\hat{A}$  zum gleichen Eigenwert  $a$ , also  $\hat{A}|\psi_i\rangle = a|\psi_i\rangle$  mit  $i = 1, 2$ , dann folgt

$$|\psi\rangle = \lambda|\psi_1\rangle + \kappa|\psi_2\rangle$$

ist ebenfalls ein Eigenvektor zum Eigenwert  $a$ :

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle.$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \hat{A}|\psi\rangle &= \hat{A}(\lambda|\psi_1\rangle + \kappa|\psi_2\rangle) \\ &= \lambda\hat{A}|\psi_1\rangle + \kappa\hat{A}|\psi_2\rangle \\ &= \lambda a|\psi_1\rangle + \kappa a|\psi_2\rangle \\ &= a(\lambda|\psi_1\rangle + \kappa|\psi_2\rangle) \\ &= a|\psi\rangle \end{aligned}$$

□

**Satz.** Eigenzustände<sup>9</sup> mit verschiedenen Eigenwerten zu einem Operator sind orthogonal zueinander. Also:

Sei

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$$

---

<sup>9</sup>Wir benutzen ab hier den Begriff Eigenzustand als Überbegriff für Eigenvektor und Eigenfunktion, die ja ineinander überführt werden können.

und

$$\hat{A}|\beta\rangle = b|\beta\rangle,$$

dann folgt für  $b \neq a$ , daß

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0.$$

*Beweis.* Aus

$$\begin{aligned}\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle &= \langle\beta|a|\alpha\rangle \\ &= a\langle\beta|\alpha\rangle\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle &= \langle\hat{A}^\dagger\beta|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\hat{A}^\dagger|\beta\rangle^*\end{aligned}$$

da  $\hat{A}$  hermitesch ist

$$\begin{aligned}&= \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle^* \\ &= \langle\alpha|b|\beta\rangle^* \\ &= b\langle\alpha|\beta\rangle^* \\ &= b\langle\beta|\alpha\rangle\end{aligned}$$

folgt

$$a\langle\beta|\alpha\rangle = b\langle\beta|\alpha\rangle.$$

Umgeformt:

$$(a-b)\langle\alpha|\beta\rangle = 0.$$

Mit  $b \neq a$  folgt dann  $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$ . □

Dies hat wichtige Konsequenzen in der Quantenmechanik.

### 2.2.2 Eigenzustände und die Basis des Zustandsraums

**Satz.** Aus den Eigenzuständen  $|\alpha_i\rangle$  zu einem linearen, hermiteschen Operator  $\hat{A}$  können wir eine Orthonormalbasis des entsprechenden Zustandsraums (Hilbertraum) konstruieren.

*Beweis.* Wir führen hier den umfangreichen Beweis nicht explizit durch, sondern zeichnen nur den Beweisgang nach.

1. Vektoren  $|\alpha_i\rangle$  mit verschiedenen Eigenwerten  $a_1 \neq a_2$  sind bereits orthogonal zueinander. Sie müssen nur noch normiert werden:

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$$

2. Wenn es mehrere linear unabhängige Eigenzustände zum gleichen Eigenwert  $a_i$  gibt, also:

$$\hat{A} |\alpha_{i1}\rangle = a_i |\alpha_{i1}\rangle$$

$$\hat{A} |\alpha_{i2}\rangle = a_i |\alpha_{i2}\rangle$$

mit

$$|\alpha_{i2}\rangle \neq \lambda |\alpha_{i1}\rangle,$$

dann wählen wir eine Orthonormalbasis mittels des Orthonormalisierungsverfahren nach Gram-Schmidt<sup>10</sup>:

$$|\tilde{\alpha}_{i1}\rangle = \frac{|\alpha_{i1}\rangle}{\| |\alpha_{i1}\rangle \|};$$

$$|\tilde{\alpha}_{i2}\rangle = \frac{|\alpha_{i2}\rangle - \langle \alpha_{i1} | \alpha_{i2} \rangle |\alpha_{i1}\rangle}{\| |\alpha_{i2}\rangle - \langle \alpha_{i1} | \alpha_{i2} \rangle |\alpha_{i1}\rangle \|};$$

etc..

Die  $|\tilde{\alpha}_{i1}\rangle, \dots, |\tilde{\alpha}_{in}\rangle$  bilden dann die Orthonormalbasis zu den  $n$  linear unabhängigen Eigenzuständen  $|\alpha_{i1}\rangle, \dots, |\alpha_{in}\rangle$ . Der Eigenwert heißt dann  $n$ -fach entartet.

3. Zu zeigen ist dann noch, daß sie eine vollständige Basis bilden. Das heißt, jeder Zustand läßt sich als Linearkombination der  $|\tilde{\alpha}_i\rangle$  mit  $i = 1, \dots, k$  schreiben:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i=1}^k |\tilde{\alpha}_i\rangle \langle \tilde{\alpha}_i | \psi \rangle && \text{Vollständigkeit} \\ &= \sum_{i=1}^k |\tilde{\alpha}_i\rangle C_i \end{aligned}$$

Die  $C_i$  bilden die Entwicklungskoeffizienten für den Vektor  $\psi$  in der Basis der  $|\tilde{\alpha}_i\rangle$ .

Die Beziehung  $\hat{\mathbf{1}} = \sum_{i=1}^k |\tilde{\alpha}_i\rangle \langle \tilde{\alpha}_i |$  wird manchmal auch als Vollständigkeit bezeichnet. Es muß allerdings klar sein, auf welchen Vektor ( $|\psi\rangle$ ) sie sich bezieht und sie beinhaltet auch noch die Normierung.

□

**Satz.** In der vollständigen Basis seiner (normierten) Eigenzustände  $|\alpha_i\rangle$  können wir den Operator  $\hat{A}$  durch Spektraldarstellung darstellen:

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^k a_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i |$$

<sup>10</sup>Siehe zum Beispiel [Kaul-1, S. 360].

*Beweis.* Wegen der Vollständigkeit gilt

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^k |\tilde{\alpha}_i\rangle \langle \tilde{\alpha}_i | \psi \rangle$$

und somit auch

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^k \hat{A}|\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \psi \rangle.$$

Die  $|\alpha_i\rangle$  sind Eigenzustände und daher kann der Operator  $\hat{A}$  durch die Eigenwerte  $a_i$  ersetzt werden:

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^k a_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \psi \rangle.$$

Also:

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^k a_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|.$$

□

### 2.2.3 Beispiele für Eigenwertprobleme in der Quantenmechanik

Wir beschäftigen uns jetzt mit drei Beispielen, um zu zeigen, was diese mathematischen Beziehungen für die Physik bringen.

#### 1. **Beispiel.** Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

Wir haben in den §1.4 und §1.5 bereits die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung kennengelernt. Sie sah mit Eigenfunktionen geschrieben folgendermaßen aus:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

oder

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x).$$

Mit Eigenvektoren sieht sie nun so aus:

$$\hat{H}\langle x | \varphi_n \rangle = E_n \langle x | \varphi_n \rangle \quad \text{für alle } x.$$

Wobei die Terme  $\langle x | \varphi_n \rangle$  den Eigenzustand in Ortsdarstellung bilden.

Unabhängig von der Darstellung (Ort/Impuls) sieht die Gleichung dann so aus:

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad \text{Eigenwertgleichung}$$

$E_n$  ist eine reelle Zahl, da der Operator  $\hat{H}$  hermitesch ist. Eine Differentialgleichung der Quantenmechanik ist in den Hilbertraum übersetzt eine Eigenwertgleichung für Vektoren.<sup>11</sup>

## 2. Beispiel. Harmonischer Oszillator:

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für den Harmonischen Oszillator haben wir bereits in §1.5 auf Seite 63 kennengelernt:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \phi(x) = E \phi(x)$$

Die Eigenwerte der Lösungen berechneten sich zu

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

wobei man die Lösungen so bestimmte:

$$\varphi_n(x) = \alpha_n H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}.$$

Jetzt können wir sie auch durch

$$\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$$

darstellen.

Die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^* \varphi_{n'} dx = \delta_{nn'}$$

läßt sich nun so schreiben:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^* \varphi_{n'} dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi_n | x \rangle \langle x | \varphi_{n'} \rangle dx \\ &= \langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle \\ &= \delta_{nn'}. \end{aligned}$$

---

<sup>11</sup>Die mathematisch völlig korrekte Darstellung wäre:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \hat{H} | x' \rangle \langle x' | \varphi_n \rangle dx' = E_n \langle x | \varphi_n \rangle$$

wobei

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x'\rangle \langle x'| dx' = \hat{\mathbf{1}}$$

die Identität (eins) ist.

Der Zustand und der Operator werden in der gleichen Basis dargestellt.

Eigenvektoren mit verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal zueinander. Man kann sich also die Ausführung von  $\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^* \varphi_{n'} dx$  sparen. Die Eigenzustände  $|\varphi_n\rangle$  zum Harmonischen Oszillator bilden eine vollständige Basis. Also kann man die Entwicklung einer beliebigen Wellenfunktion für ein gebundenes Teilchen in einer Dimension

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$$

auch vektoriell in der Basis der Eigenzustände des Harmonischen Oszillators darstellen:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

mit  $c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$ .

**Beispiel.** Sei  $\hat{H}$  das Kastenpotential

Abbildung 2.5: Sinus im Kasten

Alle Funktionen, die die Randbedingung (außen = 0) erfüllen, lassen sich in der Basis der Sinuse darstellen.

## 2.2.4 Matrixdarstellung von linearen Operatoren

Sei  $|e_i\rangle$  mit  $i = 1, \dots, n$  eine Orthonormalbasis des betrachteten Hilbertraumes mit  $\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$ .<sup>12</sup>

**Satz.** Die Wirkungsweise eines linearen Operators  $\hat{A}$  wird eindeutig durch die  $N \times N$ -Matrix

$$A_{ij} = \langle \underbrace{e_i}_{\text{Zeile}} | \hat{A} | \underbrace{e_j}_{\text{Spalte}} \rangle$$

beschrieben.<sup>13</sup>

*Beweis.* Der Operator  $\hat{A}$  ist so definiert, daß er zu jedem Ursprungsvektor  $|\psi\rangle$  einen Bildvektor  $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$  definiert. Wobei die Zustände wie folgt entwickelt werden können:

$$|\psi\rangle = \sum_j^N |e_j\rangle \langle e_j | \psi \rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_i^N |e_i\rangle \langle e_i | \varphi \rangle.$$

<sup>12</sup>Statt einer diskreten Basis  $|e_i\rangle$  kann man auch eine kontinuierliche Basis  $|x\rangle$  wählen:  $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \psi \rangle |x\rangle dx$ .

<sup>13</sup>Operatoren lassen sich immer dann als Matrix darstellen, wenn der Hilbertraum eine diskrete Basis besitzt.



$\langle e_i | \varphi \rangle$  sind die Entwicklungskoeffizienten des Bildvektors  $|e_i\rangle$ .  $\langle e_j | \psi \rangle$  sind die Entwicklungskoeffizienten des Ursprungsvektors in der Basis der  $|e_j\rangle$ .

Setzen wir die Basisdarstellung von  $|\psi\rangle$  ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \hat{A} |\psi\rangle \\ &= \hat{A} \left( \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j | \psi \rangle \right). \end{aligned}$$

Mit  $\langle e_i |$  von links multipliziert erhalten wir den Entwicklungskoeffizienten von  $|\varphi\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle e_i | \varphi \rangle &= \langle e_i | \hat{A} |\psi\rangle \\ &= \langle e_i | \hat{A} \left( \sum_{j=1}^N |e_j\rangle \langle e_j | \psi \rangle \right). \end{aligned}$$

Wegen der Linearität des Operators  $\hat{A}$  können wir die Summe nach vorne ziehen:

$$= \sum_{j=1}^N \langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle \langle e_j | \psi \rangle.$$

Mit den Entwicklungskoeffizienten  $\langle e_j | \psi \rangle$  für  $|\psi\rangle$  und den Matrixelementen  $\langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle$  kann man also sofort die Entwicklungskoeffizienten für den Endzustand angeben:

$$\langle e_i | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^N \underbrace{\langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle}_{\text{Matrixelement}} \langle e_j | \psi \rangle$$

Und in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} \langle e_1 | \varphi \rangle \\ \vdots \\ \langle e_N | \varphi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle e_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle e_N | \psi \rangle \end{pmatrix}.$$

□

**Satz.** Wenn  $\hat{A}$  ein hermitescher Operator ist, dann gibt es eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen  $|\alpha_i\rangle$ , wobei die Matrix  $\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle$  diagonal ist.

*Beweis.* Sei  $|\alpha_i\rangle$  eine Basis der Eigenzustände zu  $\hat{A}$ , dann gilt für die Matrixelemente:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ij} &= \langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle \\ &= \langle \alpha_i | a_j | \alpha_j \rangle \\ &= a_j \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle \\ &= a_j \delta_{ij} \\ &= \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a_N \end{pmatrix} \end{aligned}$$

□

**Bestimmung der Eigenwerte  $a_i$  und Eigenzustände  $|\alpha_i\rangle$** 

1. Berechne die Matrix zu  $\hat{A}$  in beliebiger Basis  $\langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle$ .
2. Suche die Basistransformation  $T_{\alpha_i} = \langle \alpha_\alpha | e_i \rangle$ , so daß die Matrix in der neuen Basis diagonal ist:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_\alpha | \hat{A} | \alpha_\beta \rangle &= \sum_{ij} \langle \alpha_\alpha | e_i \rangle \langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle \langle e_j | \alpha_\beta \rangle \\ &= T \hat{A} T^{-1} \end{aligned}$$

3. Finde den Eigenwert zu

$$A_{ik} |\alpha\rangle = a_i |\alpha\rangle$$

mittels der Gleichung:

$$(A_{ik} - \delta_{ik} a_i) |\alpha\rangle = |0\rangle.$$

Sie hat nicht-triviale Lösungen, nur wenn  $\det|\hat{A} - \mathbf{1}a_i| = 0$ . Dann ist  $a_i$  Eigenwert von  $A_{ik}$ .<sup>14</sup>

4. Für festes  $a_i$  finde Lösungen  $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$  (Nullstellen des Polynoms) der obigen Eigenwertgleichung.

Hieraus ergeben sich die Eigenzustände.

**2.2.5 Hermitizität in Matrixdarstellung**

Wenn  $\hat{A}$  eine physikalische Observable darstellen soll, dann muß  $\hat{A}$  hermitesch sein (um eine reelle Zahl zu erzeugen).

Ist  $A_{ij} = \langle e_i | \hat{A} | e_j \rangle$  eine Matrixdarstellung zu  $\hat{A}$ , dann folgt:

$$\begin{aligned} A_{ij}^\dagger &= \langle e_i | \hat{A}^\dagger | e_j \rangle \\ &= \langle \hat{A}^\dagger e_j | e_i \rangle^* \\ &= \langle e_j | \hat{A} | e_i \rangle^* \\ &= A_{ji}^* \end{aligned}$$

Daraus folgt die Matrix des adjungierten Operators  $\hat{A}$  hat die Eigenschaft  $A^\dagger = (A^T)^*$ .

Für hermitesche Operatoren gilt  $A^\dagger = A = (A^T)^*$

**Beispiel.** Hermitesche Operatoren:

<sup>14</sup> $P_N(a_i) = \det|\hat{A} - \mathbf{1}Ea_i|$  ist das charakteristische Polynom. Siehe auch [Kaul-1, S. 346].

1.  $A_{ij}$  ist hermitesch, wenn  $A_{ij}$  reell und symmetrisch ist.
- 2.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}^{\dagger*} &= \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Was hat die Bedingung, daß  $\hat{A}$  hermitesch ist, für Auswirkungen auf die Matrix? Welche Bedeutung hat die Hermitizität bei der Messung? Das wird in §2.3 behandelt.

## 2.3 Messung von Observablen

Wir beschäftigen uns mit der Messung von Observablen.

### 2.3.1 Zwei einleitende Beispiele

1. **Beispiel.** Doppelspalt-Experiment:

Abbildung 2.6: Doppelspalt

Man mißt die Position  $x$  des Teilchens am Schirm.

Wie sieht die Entwicklung des Zustandes in Ortsbasis aus?

Aus dem Zustand  $|\psi\rangle$  kann man  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$  in Ortsdarstellung errechnen.

Die Wahrscheinlichkeit erhält man dann aus  $\varrho(x) = |\psi(x)|^2$ .

Durch die Messung von  $|\psi\rangle \rightarrow |x\rangle$  wird das Teilchen zu einer Annahme eines End-Zustandes  $|x\rangle$  gezwungen und daher kolabiert der Zustand  $\psi$  zu einem Ortseigenzustand (zu einer einzigen Realisierungsform). Vor der Messung ist nur die Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes  $|x\rangle$  gegeben und zwar durch  $\varrho(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2$ .

2. **Beispiel.** Energiemessung am Harmonischen Oszillator:

Wie sieht die Entwicklung des Zustandes in der Energiebasis aus?

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|\psi\rangle$$

Abbildung 2.7: Häufigkeit der Energiezustände

In einer Einzelmessung ermittelt man einen möglichen Energiewert  $E_n$ . Die  $|\varphi_n\rangle$  bilden eine diskrete Basis für alle möglichen Energiewerte. Viele Messungen ergeben eine Verteilung, aus der man die Entwicklungskoeffizienten  $C_n$  bestimmen kann. Diese sind mit der Basis der Energieeigenzustände verknüpft:  $C_n = \langle \varphi_n|\psi\rangle$ .

Mit  $C_n^2 = |\langle \varphi_n|\psi\rangle|^2$  berechnet man die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Energie:

$$\begin{aligned} \varrho(E) &= \sum_n \delta(E - E_n) |\langle \varphi_n|\psi\rangle|^2 \\ &= \sum_n \delta(E - E_n) C_n^2 \end{aligned}$$

### 2.3.2 Wichtige Definitionen

Folgende, wichtige Größen können, wie folgt, errechnet werden:

Der experimentell ermittelte Mittelwert:

$$\bar{E} = \sum_n E_n C_n^2.$$

Der aus den Zuständen errechnete Erwartungswert:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{i,n} \langle \psi | \varphi_i \rangle \underbrace{\langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_n \rangle}_{E_n \delta_{in}} \langle \varphi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n E_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2.\end{aligned}$$

Das Schwankungsquadrat<sup>15</sup>:

$$\begin{aligned}(\Delta E)^2 &= \langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle - |\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_n E_n^2 |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 - \left( \sum_n |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 E_n \right)^2.\end{aligned}$$

Die  $C_n^2$  bilden also die Verknüpfung zwischen den Meßwerten und den abstrakten Zustandsfunktionen.

### 2.3.3 Messung

**Satz.** Sei  $\hat{A}$  ein hermitescher Operator und  $|\psi\rangle$  ein Zustand. Eine Messung von  $\hat{A}$  führt  $|\psi\rangle$  in den Eigenzustand  $|\alpha_i\rangle$  mit der Wahrscheinlichkeit  $|\langle \alpha_i | \psi \rangle|^2$  über.

**Satz.** Die Messung von  $\hat{A}$  liefert einen scharfen Meßwert  $(\Delta \hat{A})^2 = 0$ , wenn  $|\psi\rangle$  Eigenzustand zu  $\hat{A}$  ist. Dann ist

$$|\langle \alpha_i | \psi \rangle| = \begin{cases} 1 & \text{für } \psi = \alpha_i; \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Abbildung 2.8: Energieverteilung mit Messung am Spalt und ohne Messung

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_n \rangle \\ &= a_n\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\langle \hat{A}^2 \rangle &= \langle \varphi_n | \hat{A}^2 | \varphi_n \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_i \rangle}_{a_n \delta_{in}} \underbrace{\langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_n \rangle}_{a_n \delta_{in}} \\ &= a_n^2,\end{aligned}$$

<sup>15</sup>Nebenrechnung zum Schwankungsquadrat:

$$\begin{aligned}\hat{H} \hat{H} | \varphi_n \rangle &= \hat{H} E_n | \varphi_n \rangle \\ &= E_n \hat{H} | \varphi_n \rangle \\ &= E_n^2 | \varphi_n \rangle.\end{aligned}$$

Noch eine Überlegung zu  $E_n^2$ : Eine diagonale Matrix mit sich selbst multipliziert ergibt wieder eine diagonale Matrix mit Elementen  $c_{ii}^2$ .

daraus folgt

$$\begin{aligned} (\Delta\hat{A})^2 &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \\ &= a_n^2 - a_n^2 \\ &= 0. \end{aligned}$$

Wenn der Zustand ein Eigenzustand ist, erhalten wir einen scharfen Meßwert.  $\square$

### 2.3.4 Gleichzeitige Meßbarkeit

**Definition.** Wir definieren den Kommutator:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

**Satz.** Zwei dynamische Variablen  $A, B$  sind genau dann gleichzeitig scharf meßbar, wenn die zugehörigen Operatoren vertauschbar sind:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

d.h. mit der Definition des Kommutators:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = 0.$$

**Satz.** Gleichzeitig scharf meßbar heißt genau, daß ein gemeinsames Eigenfunktionssystem (Basis) der Operatoren existiert. D.h. es existiert eine Basis  $|\alpha, \beta\rangle_i$ <sup>16</sup> mit

$$\hat{A}|\alpha, \beta\rangle_i = a_i|\alpha, \beta\rangle_i$$

und

$$\hat{B}|\alpha, \beta\rangle_i = b_i|\alpha, \beta\rangle_i.$$

*Beweis.* Damit lautet der Satz:

1. Falls eine gemeinsame Basis existiert, dann verschwindet der Kommutator.

Wenn  $|\alpha, \beta\rangle_i$  Eigenzustand zu  $\hat{B}$  ist, gilt:

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}|\alpha, \beta\rangle_i &= \hat{A}b_i|\alpha, \beta\rangle_i \\ &= b_i\hat{A}|\alpha, \beta\rangle_i \end{aligned}$$

mit der Bedingung  $|\alpha, \beta\rangle_i$  ist Eigenzustand zu  $\hat{A}$  mit Eigenwert  $a_i$ ,

$$\begin{aligned} &= b_ia_i|\alpha, \beta\rangle_i \\ &= a_ib_i|\alpha, \beta\rangle_i \\ &= a_i\hat{B}|\alpha, \beta\rangle_i \\ &= \hat{B}a_i|\alpha, \beta\rangle_i \\ &= \hat{B}\hat{A}|\alpha, \beta\rangle_i. \end{aligned}$$

---

<sup>16</sup>  $|\alpha, \beta\rangle_i$  soll einen physikalischen Zustand darstellen, der von zwei Variablen abhängt.

Hieraus folgt, daß  $\hat{A}\hat{B}|\alpha, \beta\rangle_i = \hat{B}\hat{A}|\alpha, \beta\rangle_i$  für alle Basiszustände ist. Damit gilt es auch für alle Linearkombinationen und somit für alle Zustände. Für alle Elemente des Hilbertraumes gilt also

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

und somit

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = 0.$$

2. *Verswindet der Kommutator, dann existiert eine gemeinsame Basis.*<sup>17</sup>  
Sei  $|\alpha_i\rangle$  eine vollständige Orthonormalbasis von Eigenzuständen zu  $\hat{A}$

$$\hat{A}|\alpha_i\rangle = a_i|\alpha_i\rangle,$$

und es gelte

$$\hat{B}|\alpha_i\rangle = |\chi_i\rangle,$$

dann ist  $|\chi_i\rangle$  auch Eigenzustand zu  $\hat{A}$  mit Eigenwert  $a_i$ .

$$\hat{A}|\chi_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|\alpha_i\rangle$$

Vertauschbarkeit:  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

$$= \hat{B}\hat{A}|\alpha_i\rangle$$

$$= \hat{B}a_i|\alpha_i\rangle$$

$$= a_i\hat{B}|\alpha_i\rangle$$

$$\hat{A}|\chi_i\rangle = a_i|\chi_i\rangle$$

Fallunterscheidung: ( $a_i$  ist jeweils fest)

- (a)  $a_i$  ist nicht entarteter Eigenwert zu  $\hat{A}$ :  
Aus

$$\hat{A}|\alpha_i\rangle = a_i|\alpha_i\rangle,$$

und

$$\hat{A}|\chi_i\rangle = a_i|\chi_i\rangle$$

folgt

$$|\chi_i\rangle = \lambda_i|\alpha_i\rangle,$$

und so

$$\hat{B}|\alpha_i\rangle = \lambda_i|\alpha_i\rangle.$$

Also hat  $\hat{B}$  den Eigenwert  $\lambda_i = \beta_i$ .

---

<sup>17</sup>Gemeinsame Basis bedeutet, daß die Anwendung des Operators  $\hat{B}$  auf einen Eigenzustand  $|\alpha_i\rangle$  von  $\hat{A}$  nicht die Eigenschaft, daß er Eigenzustand ist, wegnimmt.

- (b)  $a_i$  ist  $n$ -fach entarteter Eigenwert zu  $\hat{A}$ :  
 $n$ -fach entartet bedeutet, daß es  $n$  Eigenzustände  $|\alpha_i\rangle$  gibt, die bezüglich  $\hat{A}$  alle denselben Eigenwert haben:  
 $\hat{A}|\alpha_i\rangle = a_i|\alpha_i\rangle$ ,  $i \in \{i \mid a_i = a_j, i \neq j\}$ .  
 Nennen wir die  $n$ -fach entarteten Eigenwerte  $a_i =: a$ , und nummerieren die Eigenzustände geschickt durch, so können wir die Eigenwertgleichungen so schreiben:

$$\hat{A}|\alpha_i\rangle = a|\alpha_i\rangle \quad i = 1, \dots, n.$$

Mit

$$\hat{B}|\alpha_i\rangle = |\chi_i\rangle$$

folgt, ähnlich wie oben

$$\hat{A}|\chi_i\rangle = a|\chi_i\rangle \quad i = 1, \dots, n.$$

Jedoch gilt hier nicht einfach

$$|\chi_i\rangle = \lambda|\alpha_i\rangle,$$

wie im nicht entarteten Fall, sondern

$$\hat{B}|\alpha_i\rangle = |\chi_i\rangle = \sum_{j=1}^N x_{ij}|\alpha_j\rangle.$$

$$\langle \alpha | \hat{B} | \alpha \rangle = \begin{pmatrix} \ddots & 0 & 0 \\ 0 & X_{ij} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

$X_{ij}$  ist eine  $n \times n$  Untermatrix im Teilraum der entarteten Zustände ( $x_{ij} \neq 0$ ).<sup>18</sup>

Nun müssen wir noch eine Basistransformation finden, in der  $X_{ij}$  diagonal ist:

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_n \end{pmatrix}$$

$$|\gamma_i\rangle = \sum_{j=1}^n |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \gamma_i \rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{A}|\gamma_i\rangle &= \hat{A} \sum_{j=1}^n |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \gamma_i \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n a |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \gamma_i \rangle \end{aligned}$$

<sup>18</sup>In dieser Gleichung stehen die  $|\alpha\rangle$  für die gesamte Basis.



Daraus folgt, daß  $|\gamma_i\rangle$  Eigenzustand zu  $\hat{A}$  mit Eigenwert  $a_i$  und zu  $\hat{B}$  mit Eigenwert  $b_i$  ist.

Damit haben wir den Beweis in beide Richtungen geführt.  $\square$

### 2.3.5 Beispiele zu Kommutatoren

1.  $[\hat{p}_x, \hat{x}]_-$ :

In Operatoren geschrieben<sup>19</sup>:

$$\begin{aligned} [\frac{\hbar}{i}\partial_x, x]_- \psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\partial_x x \psi(x) - x \frac{\hbar}{i}\partial_x \psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i}\psi(x) + \frac{\hbar}{i}x\partial_x \psi(x) - x \frac{\hbar}{i}\partial_x \psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i}\psi(x) \\ [\hat{p}_x, \hat{x}]_- &= \frac{\hbar}{i} \end{aligned}$$

Das heißt  $\hat{p}_x$  und  $\hat{x}$  haben kein gemeinsames Eigenfunktionssystem und sind somit nicht gleichzeitig scharf meßbar.

2.  $[\hat{p}_x, \hat{y}]_-$ :

$$\begin{aligned} [\frac{\hbar}{i}\partial_x, y]_- \varphi(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\partial_x y \varphi \\ &= y \frac{\hbar}{i}\partial_x \varphi \\ &= 0 \end{aligned}$$

$\hat{p}_x$  und  $\hat{y}$  sind gleichzeitig meßbar.

3.  $[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}]_-$ :

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}]_- &= \hat{p}_x \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \hat{p}_x \\ &= 0 \end{aligned}$$

Es existiert ein gemeinsames Eigenfunktionssystem und die Observablen der Operatoren für Impuls und Energie sind gleichzeitig meßbar.

#### Anmerkung zu Eigenfunktionssysteme

Aber nicht jedes Eigenfunktionssystem zu  $\hat{B} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$  ist auch Eigenfunktionssystem zu  $\hat{A} = \hat{p}_x$ , obwohl ein gemeinsames Eigenfunktionssystem existiert:

Zum Beispiel ist die Wellenfunktion

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{ikx} + e^{-ikx})$$

---

<sup>19</sup>  $\partial_x$  bedeutet  $\frac{\partial}{\partial x}$

eine Eigenfunktion zu  $\frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ :

$$\begin{aligned}\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\varphi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi(x) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi(x) \\ &= a\varphi(x),\end{aligned}$$

aber nicht zu  $\hat{p}_x$ :

$$\begin{aligned}\hat{p}_x\varphi(x) &= \frac{\hbar}{i}\partial_x\varphi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{2}}(ike^{ikx} + (-ik)e^{ikx}) \\ &\neq a\varphi(x).\end{aligned}$$

### 2.3.6 Zusammenfassung

1. Für Observablen muß der Operator  $\hat{A}$  linear und hermitesch sein, um aus den abstrakten Eigenzustände  $|a\rangle$  reelle Messwerte zu erzeugen:

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \Rightarrow \langle A \rangle \text{ reell.}$$

2. Durch Messung kolabiert die Wellenfunktion in einen Eigenzustand; das Teilchen wird gezwungen in einen der Eigenzustände überzugehen. Das Gesamtergebnis kommt durch aufsummieren der einzelnen Treffer über den jeweiligen Eigenzuständen zustande.

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle \alpha_i | \psi \rangle |\alpha_i\rangle \quad \text{mit } \hat{A}|\alpha_i\rangle = a_i|\alpha_i\rangle$$

Abbildung 2.9: Diskretes Spektrum

3. Scharfe Messung bedeutet, daß alle Messungen dasselbe Ergebnis liefern. Alle Messungen ergeben also denselben Eigenzustand. Der gemessene Zustand ist also der Eigenzustand.

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &:= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= 0 \\ \Rightarrow |\psi\rangle &= |\alpha_i\rangle\end{aligned}$$

4. Sind  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  gleichzeitig scharf meßbar, so existiert ein gemeinsames Orthonormalsystem von Eigenzuständen. Wenn also

$$\hat{A}|\alpha, \beta\rangle = a|\alpha, \beta\rangle$$

und

$$\hat{B}|\alpha, \beta\rangle = b|\alpha, \beta\rangle$$

ist, dann gilt

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]_- &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ &= 0. \end{aligned}$$

$\hat{A}, \hat{B}$  kommutieren miteinander.

### 2.3.7 Heisenberg'sche Unschärferelation

Was bedeutet es, wenn der Kommutator  $[\hat{A}, \hat{B}]_-$  nicht verschwindet? Diese Frage führt uns zur

**allgemeinen Formulierung der Heisenberg'schen Unschärferelation:**

**Satz.** *Wenn*

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = i\hbar\hat{C}$$

*ist und  $\hat{A}, \hat{B}$  linear und hermitesch sind, dann ist auch  $\hbar\hat{C}$  ein hermitescher Operator<sup>20</sup> und es gilt:*

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \psi | \hbar\hat{C} | \psi \rangle^2$$

*oder vereinfacht*

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2 \langle \hat{C} \rangle^2$$

*Beweis.* 1. *Teilbeweis.*  $\hbar\hat{C}$  ist hermitesch.

Dies ist äquivalent mit der Frage ob  $i[\hat{A}, \hat{B}]_- = -\hbar\hat{C}$  hermitesch ist.

$$\begin{aligned} (i[\hat{A}, \hat{B}]_-)^\dagger &= -i([\hat{A}, \hat{B}]_-)^\dagger \\ &= -i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger \\ &= -i((\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger) \\ &= -i\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger + i\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger \\ &= -i\hat{B}\hat{A} + i\hat{A}\hat{B} \\ &= i[\hat{A}, \hat{B}]_- \end{aligned}$$

$-\hbar\hat{C}$  ist hermitesch und somit auch  $\hbar\hat{C} = \frac{1}{i}[\hat{A}, \hat{B}]_-$ .

$[\hat{A}, \hat{B}]_-$  ist antihermitesch. □

**Beispiel.**

$$[p_x, x]_- = \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x \right]_-$$

<sup>20</sup>Man beachte, das  $i: [\hat{A}, \hat{B}]_-$  ist antihermitesch und  $i[\hat{A}, \hat{B}]_-$  ist hermitesch.

Den Kommutator ausschreiben und für die nachfolgende Differentiation eine gedachte Funktion  $f$  hinschreiben (auf die die Operatoren wirken würden).

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(xf) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f$$

mit der Produktregel

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{i} + \frac{\hbar}{i} x f' - \frac{\hbar}{i} x f' \\ &= \frac{\hbar}{i} \\ &= -i\hbar \\ &= i\hbar \hat{C} \end{aligned}$$

$\hbar \hat{C} = -\hbar$ , also  $\hat{C} = -\hat{1}$  ist hermitesch;  $i\hbar \hat{C}$  ist antihermitesch.

2. *Teilbeweis.* Es gilt die Schwarz'sche Ungleichung:

$$|\langle g | f \rangle|^2 \leq \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle$$

□

**Beispiel.** 2 dimensionale Vektorrechnung

Abbildung 2.10: Vektorenbeispiel

$$\begin{aligned} \langle g | f \rangle &= |g||f| \cos \phi \\ |\langle g | f \rangle|^2 &= \langle g | g \rangle \langle f | f \rangle \cos^2 \phi \\ &\leq \langle g | g \rangle \langle f | f \rangle \cdot 1 \end{aligned}$$

3. *Teilbeweis.* Das Schwankungsquadrat läßt sich so schreiben:

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{A})^2 &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \\ &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle \\ &= \langle \hat{A}^\dagger - \langle \hat{A}^\dagger \rangle \psi | \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle | \psi \rangle \\ &= \langle g | g \rangle, \end{aligned}$$

genauso für  $\hat{B}$ :

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{B})^2 &= \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2 \\ &= \langle \hat{B}^\dagger - \langle \hat{B}^\dagger \rangle \psi | \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle | \psi \rangle \\ &= \langle f | f \rangle, \end{aligned}$$

in die Schwarz'sche Ungleichung eingesetzt:

$$\begin{aligned}
 (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 &\geq |\langle g|f\rangle|^2 \\
 &\geq |\langle \hat{A}^\dagger - \langle \hat{A}^\dagger \rangle \psi | \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \psi \rangle|^2 \\
 &= |\langle \psi | \underbrace{(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)}_{\hat{X}} | \psi \rangle|^2 \\
 &= |\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle|^2.
 \end{aligned}$$

Betrachten wir den Operator  $\hat{X}$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{X} &= \frac{1}{2} \left( \underbrace{(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)}_{\text{Produkt stehengelassen}} \right. \\
 &\quad \left. + \underbrace{\hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A} \rangle\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\hat{A} + \langle \hat{A} \rangle\langle \hat{B} \rangle}_{\text{Produkt ausmultipliziert}} \right. \\
 &\quad \left. + \underbrace{\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}}_{\text{null addiert}} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left( (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{B}\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\hat{A} + \langle \hat{A} \rangle\langle \hat{B} \rangle \right. \\
 &\quad \left. + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \right).
 \end{aligned}$$

Es ist  $\langle \hat{B} \rangle\hat{A} = \hat{A}\langle \hat{B} \rangle$  wegen der Linearität von  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  und wir haben  $+\hat{A}\hat{B}$  mit  $+\hat{B}\hat{A}$  getauscht, damit rechts der Kommutator steht:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \left( \underbrace{(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)}_{=\hat{F}} \right) + \frac{1}{2} \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]_-}_{=i\hbar\hat{C}} \\
 &= \hat{F} + \frac{1}{2}i\hbar\hat{C}
 \end{aligned}$$

Wie schon gezeigt ist  $\hbar\hat{C}$  hermitesch. Wir zeigen noch, daß  $\hat{F}$  hermitesch ist:

$$\begin{aligned}
 \hat{F}^\dagger &= \frac{1}{2}(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^\dagger(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^\dagger + \frac{1}{2}(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^\dagger(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^\dagger \\
 &= \frac{1}{2} \left( (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \right) \\
 &= \hat{F}
 \end{aligned}$$

Ein beliebiger Operator kann in einen hermiteschen und antihermiteschen Anteil zerlegt werden. Dies haben wir für  $\hat{X}$  gemacht<sup>21</sup>:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle}_{\text{komplex}} &= \langle \psi | \hat{F} + \frac{1}{2}i\hbar\hat{C} | \psi \rangle \\
 &= \underbrace{\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle}_{\text{reell}} + \frac{1}{2}i \underbrace{\langle \psi | \hbar\hat{C} | \psi \rangle}_{\text{reell}}
 \end{aligned}$$

<sup>21</sup>Beachte, daß  $\hat{X}$  nicht hermitesch ist:  $\hat{X} \neq \hat{X}^\dagger$ .

Jetzt zurück zu unserer Schwarz'schen Ungleichung:

$$(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq |\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle|^2$$

Es ergibt sich mit der obigen Gleichung:

$$\begin{aligned} &= |\langle \psi | \hat{F} + \frac{1}{2} i \hbar \hat{C} | \psi \rangle|^2 \\ &= |\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle + \frac{1}{2} i \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle|^2 \end{aligned}$$

Wir bilden das Betragsquadrat, wobei wir beachten das der obige Term als komplexe Zahl  $z = x + iy$  aufgefaßt werden kann<sup>22</sup>:

$$\begin{aligned} &= \left( \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle + \frac{1}{2} i \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle \right) \\ &\quad \left( \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle - \frac{1}{2} i \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle \right) \\ &= \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2 - \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \frac{1}{2} i \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle \\ &\quad + \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \frac{1}{2} i \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle - \frac{1}{4} i^2 \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle^2 \\ &= \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2 - \frac{1}{4} i^2 \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle^2 \\ &= \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle^2 \\ &= \underbrace{\langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle^2}_{\geq 0} + \frac{1}{4} \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle^2 \end{aligned}$$

Es gilt also

$$(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq \frac{1}{4} \langle \psi | \hbar \hat{C} | \psi \rangle^2$$

oder

$$\geq \frac{1}{4} \langle \psi | \frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}]_- | \psi \rangle.$$

□

Wir haben also die Heisenberg'sche Unschärferelation gezeigt:<sup>23</sup>

$$(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq \frac{1}{4} \langle \frac{1}{i} [\hat{A}, \hat{B}]_- \rangle^2$$

beziehungsweise

$$(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq \frac{1}{4} \langle \hbar \hat{C} \rangle^2.$$

□

<sup>22</sup>Es gilt für komplexe Zahlen:  $\langle z = x + iy \rangle^2 = (x + iy)(x - iy)$ .

<sup>23</sup>Vergleiche mit [Fließbach, S. 54] und [Dawydow, S. 51]. (Daß beim Fließbach das  $i$  im Zähler steht macht nichts, da es ja unter einem Quadrat steht.)

**Beispiele**

1. **Beispiel.** Die Impuls-Ort-Unschärferelation:

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}]_- &= \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x \right]_- \\ &= \frac{\hbar}{i} \\ &= i\hbar \underbrace{(-1)}_c \end{aligned}$$

daraus folgt:

$$(\Delta \hat{p})^2 (\Delta \hat{x})^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2$$

Betrachten wir den Spezialfall des Harmonischen Oszillators:

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

Bei einer ebenen Welle  $e^{ikx}$  mit  $p = \hbar k$  folgt  $(\Delta p)^2 = 0$ . Damit ist  $\varrho(x) = \text{const.}$  und damit  $(\Delta x)^2 = \infty$ .

2. **Beispiel.** Die Energie-Zeit-Unschärferelation:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, t]_- &= \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, t \right]_- \\ &= i\hbar \end{aligned}$$

Die Schrödinger-Gleichung<sup>24</sup>:

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$$

Die Unschärferelation für die Energie:

$$(\Delta E)^2 (\Delta t)^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2$$

Wenn man die stationäre Lösung von  $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$  betrachtet, bei der  $|\psi\rangle$  Eigenzustand ist und  $(\Delta E)^2 = 0$  ist, dann gilt auch  $(\Delta t)^2 = \infty$ . Man kann also keine Aussage über die zeitliche Entwicklung machen.

Bei einem Übergang zwischen zwei Zuständen handelt es sich um einen zeitlich begrenzten Vorgang, weshalb eine „Energieverschmierung“ auftritt.

---

<sup>24</sup>Beachte:  $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  ist nicht als Operatoridentität zu verstehen, sondern gilt nur für die Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

## 2.4 Kommutatorrelation und Poisson-Klammer

### 2.4.1 Quantisierungsbedingung

Sei  $|\psi\rangle$  eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$$

Sei außerdem  $\hat{A}$  ein hermitescher Operator (also verknüpft mit einer Messgröße  $A$ ). Berechnen wir für diese Größen die zeitliche Ableitung des Erwartungswerts:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}|\frac{\partial\psi}{\partial t}\rangle + \langle\frac{\partial\psi}{\partial t}|\hat{A}|\psi\rangle$$

Erweitern der beiden hinteren Terme mit  $i\hbar$ :

$$= \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{A}|i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}|\hat{A}|\psi\rangle$$

Ersetzen wir  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$  durch  $\hat{H}$ :

$$\begin{aligned} &= \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{A}|\hat{H}\psi\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle\hat{H}^\dagger\psi|\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H}|\psi\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{A}|\psi\rangle \end{aligned}$$

Zusammenfassen der Operatoren zum Kommutator:

$$\begin{aligned} &= \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{A},\hat{H}]_-|\psi\rangle \\ &= \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]_- \rangle \end{aligned}$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis mit der Klassischen Mechanik. Sei dabei  $A$  die dynamische Variable  $A(q(t), p(t), t)$ :

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial A}{\partial p}\dot{p} \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} \end{aligned}$$

Die Ähnlichkeit der beiden Ergebnisse ist kein Zufall. Ersetzen wir die Observablen durch die Erwartungswerte ihrer korrespondierenden Operatoren und die Poisson-Klammer durch den Kommutator, so erhalten wir aus einem klassischen Gesetz eine Beziehung für die Quantenmechanik. In Abschnitt 1.2.4, auf Seite 41 (Ehrenfest'sches Theorem), hatten wir im Zusammenhang mit dem Newton'schen Gesetz schon festgestellt, dass die zeitliche Entwicklung in der Quantenmechanik mittels der Erwartungswerte behandelt werden muss.

Mit der hier gefundenen Beziehung können wir nun die Operatoren direkt aus den klassischen Größen herleiten und überprüfen.



**Satz (Quantisierungsbedingung).** Die quantenmechanischen Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{H}$  müssen stets so definiert werden, dass folgende Beziehung zur klassischen Mechanik erfüllt ist:

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{H}]_- = i\hbar \hat{C} \quad \Leftrightarrow \quad \{A, H\} = C(q, p)}$$

In der Gründerzeit der Quantenmechanik hatte man damit ein wichtiges Werkzeug zur Aufstellung der Operatoren: Ist die Quantisierungsbedingung erfüllt, so entsprechen die Operatoren den Observablen im „klassischen Grenzfall“.)

### Die Quantisierungsbedingung und das Ehrenfest'sches Theorem

Nach dem Ehrenfest-Theorem muss die zeitliche Ableitung des Erwartungswerts gleich der zeitlichen Ableitung der klassischen Observablen sein:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \frac{d}{dt} A_{\text{klassisch}}$$

Die Quantisierungsbedingung liefert uns dabei eine Definition des Operators, die uns garantiert, dass die geforderte Gleichheit der zeitlichen Ableitungen besteht!

Betrachten wir nochmals die Aussage des Ehrenfest'schen Theorems:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x} \rangle = -\langle \vec{\nabla} \hat{V} \rangle$$

Die Beziehungen der Größen Ort, Impuls und Kraft können wir nun sowohl mittels der Quantisierungsbedingung, als auch durch das Ehrenfest'sche Theorem ausdrücken. Auf Seite 39 fanden wir  $H$  als Generator der Zeitentwicklung:

$$\begin{aligned} \{ \vec{p}, H \} &= \frac{d\vec{p}}{dt} \\ \{ \vec{x}, H \} &= \frac{d\vec{x}}{dt} \end{aligned}$$

Für diese Größen gelten die klassischen Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{p}}{dt} &= -\text{grad } V(\vec{x}, t) \\ m \frac{d\vec{x}}{dt} &= \vec{p} \end{aligned}$$

Die Übersetzung in die Quantenmechanik lautet:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}]_- \rangle = -\langle \text{grad } \hat{V}(\hat{x}, t) \rangle \\ m \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} &= \frac{m}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}]_- \rangle = \langle \hat{p} \rangle \end{aligned}$$

**Weitere Beispiele****Beispiel (Quantisierungsbedingung für generalisierte Koordinaten).**

Betrachten wir nur die Poisson-Klammer der Klassischen Mechanik mit den generalisierten Koordinaten  $q$  und  $p$ :

$$\{p, q\} = \underbrace{\frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial p}}_{=0} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial q}{\partial q}}_{=1} = -1$$

Aus diesem Ergebnis muss für die entsprechenden Operatoren gefordert werden, dass gilt:

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]_- = -\hat{\mathbf{1}}$$

bzw.:

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

und:

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

Zusammen mit der Quantisierungsbedingung erhalten wir die

**Konstruktionskriterien für Operatoren der Quantenmechanik:**

1. Definiere für jede physikalische Observable  $A$  einen Operator  $\hat{A}$ .
2.  $\hat{A}$  muss linear und hermitesch sein.
3. Erfüllt die Observable  $A$  die klassischen Beziehung  $\{A, B\} = C$ , so muss  $\hat{A}$  die Operatorbeziehung  $[\hat{A}, \hat{B}]_- = i\hbar \hat{C}$  erfüllen.

Mit diesen Bedingungen kann man die Quantenmechanik aus der Klassischen Mechanik aufbauen (Zumindest solange die quantenmechanischen Größen Analogien in der Klassischen Mechanik besitzen).

**Beispiel (Quantisierungsbedingung für Drehimpulscomponenten).**

Der klassische Drehimpuls lautet:

$$\vec{l} = \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{pmatrix} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

Es gilt für die Poisson-Klammer:

$$\begin{aligned} \{l_x, l_y\} &= \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial x} \frac{\partial l_y}{\partial p_x}}_{=0} - \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial p_x} \frac{\partial l_y}{\partial x}}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial y} \frac{\partial l_y}{\partial p_y}}_{=0} - \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial p_y} \frac{\partial l_y}{\partial y}}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial z} \frac{\partial l_y}{\partial p_z}}_{-p_y \quad -x} - \underbrace{\frac{\partial l_x}{\partial p_z} \frac{\partial l_y}{\partial z}}_{y \quad p_x} \\ &= xp_y - yp_x \\ &= l_z \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis zwingt uns folgende Beziehung für die Komponenten des quantenmechanischen Drehimpulses auf:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y]_- = i\hbar \hat{l}_z$$

Damit kennen wir eine Beziehung für den Drehimpuls in der Quantenmechanik, ohne dass wir uns dazu quantenmechanische Gedanken über den Drehimpuls machen mussten.

### 2.4.2 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Fragestellung: Wie übersetzt man den Zusammenhang bezüglich Erhaltungsgrößen, der sich in der Klassischen Mechanik aus den Poisson-Klammern ergibt, in die Quantenmechanik?

Die Poisson-Klammer hat für ein  $A$ , das nicht explizit von der Zeit abhängt,  $A(\mathcal{X})$ , also:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0,$$

die Eigenschaft:

$$\{A, H\} = 0.$$

Man spricht in diesem Zusammenhang von

- Symmetrie:  $\{A, H\} = 0$ , und
- Erhaltungsgröße:  $A = \text{const.}$  ( $A$  ist eine Konstante der Bewegung.)

Übersetzen wir dies in die Sprache der Operatoren:

Vertauscht  $\hat{A}$  mit  $\hat{H}$ :<sup>25</sup>

$$[\hat{A}, \hat{H}]_- = 0$$

– das ist die Symmetrie – so ist der Erwartungswert von  $\hat{A}$  eine Erhaltungsgröße:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{const.}$$

Also gilt der Zusammenhang:

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \text{const.} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{A}, \hat{H}]_- = 0}$$

**Bemerkung.** Sind Operatoren im Spiel, so müssen wir streng die Reihenfolge einhalten. Bei Ableitungen müssen wir zusätzlich beachten, wie „weit“ sie wirken. Außerdem sollte man im Hinterkopf behalten, dass der Kommutator auch ein Operator ist (er enthält selbst Operatoren, ist also auch einer). Nimmt man dies alles zusammen, so gerät man manchmal in Konflikt mit der Schreibweise. Um nicht den Überblick zu verlieren, was worauf wie wirkt, führen wir besser eine fiktive Funktion ein, die nur dazu dient, die Reichweite der Operatoren abzugrenzen. Im folgenden Beispiel bedienen wir uns mit  $f(x)$  einer solchen Hilfsfunktion.

<sup>25</sup>Vergleiche die Eigenschaft der Erhaltungsgröße mit der anderen Konsequenz der Symmetrie: Es existiert ein gemeinsames Eigenfunktionssystem für  $\hat{H}$  und  $\hat{A}$ . Die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung sind damit auch Eigenzustände zu  $\hat{A}$ .

**Beispiel.** Ist  $\hat{A} := \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ , so ist dies bezüglich einem (gegenüber Transformationen in  $x$  invarianten)  $\hat{H}$  eine Erhaltungsgröße.

*Beweis.* Sei  $f(x)$  eine fiktive Funktion, wie eben erläutert. Dann gilt mit obigem Operator  $\hat{A}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{H}]_- f(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{H} f(x) - \hat{H} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \\ &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \right) \hat{H} + \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{H} \right) f(x) - \hat{H} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \end{aligned}$$

Erster und letzter Term heben sich gegeneinander weg:

$$\begin{aligned} &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{H} \right) f(x) \\ &= 0 f(x) \\ &= 0 \end{aligned}$$

wenn  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial x} = 0$  ist.

$\hat{A}$  ist somit eine Erhaltungsgröße. □

Der im Beispiel benutzte Operator tritt in den generalisierten Koordinaten auf. Wir verallgemeinern die Zusammenhänge nun für die Operatoren der generalisierten Koordinaten:

**Satz.** Für generalisierte Koordinaten  $p_i$  und  $q_j$  bzw. ihre zugeordneten Operatoren gilt:

$$\boxed{\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \Leftrightarrow [\hat{q}_i, \hat{p}_j]_- = i\hbar \delta_{ij}}$$

Mit dem oben gesagten ergibt sich damit für die Operatorersetzung:

**Satz.** Für generalisierte Koordinaten (zusammengehörige Paare)  $p_i$  und  $q_i$  gilt folgende Ersetzungsvorschrift:

$$\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$$

(Wenn wir möchten, dass der Ortsoperator  $\hat{q}_i$  die Observable  $q_i$  darstellt, so muss der zugehörige Impulsoperator  $\hat{p}_i$  (in Ortsdarstellung) folgendermaßen aussehen:  $\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$ .)

Soll  $\hat{p}_i$  eine Erhaltungsgröße sein, so bedeutet dies:

$$[\hat{p}_i, \hat{H}]_- = 0 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}}{\partial q_i}$$

was nur erfüllt ist, wenn  $\hat{H}$  invariant gegenüber einer Transformation der  $q_i$  ist.

Abbildung 2.11: Generalisierte Koordinaten bei einer Rotation.

**Beispiel.** Sei  $\hat{q}_\alpha$  der Azimutwinkel in Kugel- oder Zylinderkoordinaten. Dann stellt der Operator:

$$\hat{p}_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}$$

eine infinitesimale Rotation um die  $z$ -Achse dar.

Es wird sich zeigen, dass  $\hat{p}_\alpha$  der Drehimpuls in  $z$ -Richtung ist (Eine Änderung von  $\hat{p}_\alpha$  bedeutet Rotation um die  $z$ -Achse, oder:  $\hat{p}_\alpha$  generiert eine infinitesimale Rotation um  $z$ ).

Wenn nun  $\hat{H}$  invariant bezüglich einer Rotation um die  $z$ -Achse ist, muss  $\hat{p}_\alpha$  eine Konstante der Bewegung sein, oder: Der Drehimpuls in  $z$ -Richtung ist eine Erhaltungsgröße.

**Beispiel (Operator der kinetischen Energie).** Die kinetische Energie eines Teilchens der Masse  $m$  ist in kartesischen Koordinaten (und drei Dimensionen):

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

Übersetzt in die Quantenmechanik führt dies auf den Operator:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

Übersetzen wir das in Zylinderkoordinaten, indem wir nur  $\Delta$  übertragen:

$$T_{\text{zyl}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\text{zyl}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) =: \hat{H}_1$$

Versuchen wir  $\hat{H}$  auf einem alternativen Weg zu finden:

Mit  $V = 0$  ist die Lagrange-Funktion gleich der kinetischen Energie, die wir in Zylinderkoordinaten ausdrücken:

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{m}{2} \left( \dot{\varrho}^2 + \varrho^2 \dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2 \right)$$

Dabei ist mit  $p_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_\alpha}$ :

$$\begin{aligned} p_\varrho &= m \dot{\varrho} \\ p_\varphi &= m \varrho^2 \dot{\varphi} \\ p_z &= m \dot{z} \end{aligned}$$

Die Hamilton-Funktion ist:

$$H = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - \mathcal{L} = \frac{1}{2m} \left( p_\varrho^2 + \frac{1}{\varrho^2} p_\varphi^2 + p_z^2 \right)$$

Übersetzen wir dies mit  $\hat{p}_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}$ , in die Quantenmechanik, so erhalten wir einen (alternativen) Operator  $\hat{H}_2$ :

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} (-\hbar^2) \left( \frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

Welches  $\hat{H}$  ist nun korrekt? Wie die folgende Rechnung zeigt, ist  $\hat{H}_2$  nicht hermitesch, also falsch:

*Falsifikation von  $\hat{H}_2$ .* Wir lassen die Argumente von  $\psi = \psi(\varrho, \varphi, z)$  weg:

$$\langle \psi | \hat{H}_2 | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \iiint \psi^* \left( \frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \, dz \, d\varphi \, d\varrho$$

Betrachte daraus nur das Integral über  $d\varrho$ :

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \underbrace{\psi^*}_{u'} \underbrace{\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varrho^2}}_{u'} \varrho \, d\varrho &= \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \varrho \psi^*}_{=0} \Big|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} \frac{\partial}{\partial \varrho} (\varrho \psi^*) \frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \, d\varrho \\ &= - \int_0^{+\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \, d\varrho - \int_0^{+\infty} \varrho \frac{\partial \psi^*}{\partial \varrho} \frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \, d\varrho \\ &= - \int_0^{+\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \, d\varrho - \underbrace{\psi \varrho \frac{\partial \psi^*}{\partial \varrho} \Big|_0^{+\infty}}_{=0} + \int_0^{+\infty} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \varrho \frac{\partial \psi^*}{\partial \varrho} \right) \psi \, d\varrho \\ &= - \int_0^{+\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varrho} \, d\varrho + \int_0^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial \varrho} \psi \, d\varrho + \int_0^{+\infty} \varrho \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \varrho^2} \psi \, d\varrho \end{aligned}$$

Das erste Integral ist das konjugiert komplexe zweite Integral. Das dritte Integral jedoch hat kein konjugiertes Gegenstück und hindert somit diesen Teil des Operators daran, selbstadjungiert zu sein. Damit ist  $\hat{H}_2$  nicht hermitesch.  $\square$

Dieses Beispiel sollte zeigen, dass die Konstruktion der Operatoren der Quantenmechanik nicht trivial ist. Bei jedem Schritt muss geprüft werden, ob die Forderungen (z.B. die Hermitizität) erfüllt sind.

## 2.5 Harmonischer Oszillator II

### 2.5.1 Einleitung

Wir werden die Lösung des Harmonischen Oszillators in einer alternativen darstellungsfreien Form angehen. Bei dieser Rechnung sind die Operatoren ohne spezielle Darstellung, wie zum Beispiel Impuls- oder Orts-Darstellung.

Der Hamilton-Operator lautet:

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

Man kann den Hamilton-Operator sowohl in Ortsdarstellung, als auch in Impulsdarstellung, in die konservative Schrödinger-Gleichung<sup>26</sup>, die unabhängig von der Darstellung ist, einsetzen. Man gewinnt dann eine Differentialgleichung, aus der die Wellenfunktion folgt.

Die konservative Schrödinger-Gleichung lautet

$$\hat{H}(x, \mathcal{X})\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t)$$

Die Lösung haben wir in 1.4 auf Seite 50 besprochen. Wir wollen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung, also die folgende Eigenwertgleichung lösen:

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle.$$

Dafür benutzen wir die Operatoreigenschaften des Kommutators

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}]_- &= \frac{\hbar}{i} \\ &= -i\hbar \\ &= -[\hat{x}, \hat{p}]_-, \end{aligned}$$

und definieren die Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$ :

**Definition.**

$$\begin{aligned} \hat{b} &:= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p} \right) \\ \hat{b}^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p} \right). \end{aligned}$$

Die Effizienz dieser Definition wird sich erst am Schluß zeigen.  $\hat{b}$  ist nur ein „mathematischer Konstrukt“, das wir zur Lösung verwenden.

### 2.5.2 Eigenschaften von $\hat{b}$

1. **Satz.**  $\hat{b}$  ist dimensionslos.

<sup>26</sup>Siehe Fußnote 29 auf Seite 50.

*Beweis.* (a) Betrachten wir den ersten Teil der Definition:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

hat die Dimension  $\frac{1}{\text{Oszillatorlänge}}$ , und

$$\hat{x}$$

hat die Dimension einer Länge. Der erste Teil ist also dimensionslos.

(b) Betrachten wir den zweiten Teil:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

hat die Dimension von  $\frac{1}{\text{Wirkung}}$  mal Länge, und

$$\hat{p}$$

hat die Dimension einer Wirkung geteilt durch Länge. Der zweite Teil ist also auch dimensionslos. □

2. **Satz.**  $\hat{b}$  ist linear.

*Beweis.*  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  sind linear, und damit ist auch  $\kappa\hat{x} + \lambda\hat{p}$  linear. □

3. **Satz.**  $\hat{b}$  ist nicht hermitesch und daher keine Observable (Meßgröße).

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \hat{b}^\dagger &= (\hat{b}^T)^* \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x}^\dagger - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}^\dagger \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right) \\ &\neq \hat{b} \end{aligned}$$

□

4. **Satz.** Aber  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  sind hermitesch, und es gilt:

$$\hat{b} + \hat{b}^\dagger = \frac{2}{\sqrt{2\hbar}} \sqrt{m\omega} \hat{x}$$

also

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



und

$$\hat{b} - \hat{b}^\dagger = \frac{2}{\sqrt{2\hbar}} \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}$$

also

$$\hat{p} = \frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{i\sqrt{2}} (\hat{b} - \hat{b}^\dagger).$$

Mit  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  können  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  dargestellt werden und somit auch der Hamilton-Operator  $\hat{H}$ . Der Hamilton-Operator wird sogar eine besonders einfache Form erhalten.

Wir können also eine invariante Transformation zwischen

$$\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{p} \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix}.$$

durchführen.

### 2.5.3 Der Hamilton-Operator durch $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$ dargestellt

Wir bestimmen nun  $\hat{H}$  mit Hilfe der neuen Basisoperatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$ , indem wir die obigen Umformungen einsetzen:

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

$\hat{p}$  und  $\hat{x}$  durch  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  ausdrücken

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2m} \left( -\frac{\hbar m\omega}{2} \right) (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2 \\ &= \frac{1}{2} \left( -\frac{\hbar\omega}{2} \right) (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 + \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2 \end{aligned}$$

ausklammern

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \left( -(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 + (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2 \right)$$

ausmultiplizieren

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar\omega}{4} \left( -(\hat{b}\hat{b} - \hat{b}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger) + (\hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger) \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \left( -\hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} - \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger + \hat{b}\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \left( +\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \left( 2(\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b}) \right) \end{aligned}$$

null addieren

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar\omega}{4} \left( 2(\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b}) + \underbrace{\hat{b}^\dagger\hat{b} - \hat{b}\hat{b}^\dagger}_{=0} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( 2\hat{b}^\dagger\hat{b} + [\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_- \right) \\ \hat{H} &= \hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}\hbar\omega[\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_-. \end{aligned}$$

Wir berechnen nun noch den Kommutator  $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_-$ <sup>27</sup>:

$$\begin{aligned} [\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_- &= \frac{1}{2\hbar} \left[ \sqrt{m\omega}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}, \sqrt{m\omega}\hat{x} - \frac{i}{m}\hat{p} \right]_- \\ &= \frac{1}{2\hbar} \left[ \underbrace{[\sqrt{m\omega}\hat{x}, \sqrt{m\omega}\hat{x}]_-}_{=0} + i[\hat{p}, \hat{x}]_- - i[\hat{x}, \hat{p}]_- - \underbrace{[i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}, i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}]_-}_{=0} \right]_- \end{aligned}$$

mit  $-i[\hat{x}, \hat{p}]_- = i[\hat{p}, \hat{x}]_-$  ergibt sich

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}]_- \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{i} \\ [\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_- &= \hat{\mathbb{1}}. \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator schreibt sich mit dem Operator  $\hat{b}$  also so:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\mathbb{1}} \\ &= \hbar\omega \left( \hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Führen wir noch den Operator  $\hat{N} := \hat{b}^\dagger\hat{b}$  ein, so läßt sich  $\hat{H}$  so schreiben:

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

## 2.5.4 Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Mit Hilfe der neuen Form des Hamilton-Operators können wir nun die Eigenwertgleichung

$$\hat{H} |\phi\rangle = E |\phi\rangle$$

lösen. Anders formuliert: wir müssen den Eigenzustand und Eigenwert zu  $\hat{N} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$  finden.<sup>28</sup>

<sup>27</sup>Man beachte die Regel  $[A+B, C+D]_- = (A+B)(C+D) - (C+D)(A+B) = [A, C]_- + [A, D]_- + [B, C]_- + [B, D]_-!$

<sup>28</sup>Ein Eigenzustand zu  $\hat{b}^\dagger\hat{b}$  ist ja auch ein Eigenzustand zu  $\hat{H}$ ; nur: der Eigenwert differiert um  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ .

**Einige mathematische Beziehungen**

Um das Eigenwertproblem bezüglich des Operators  $\hat{N}$  zu lösen betrachten wir drei mathematische Beziehungen.

1. **Satz.**  $\hat{N} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$  ist hermitesch.

*Beweis.* Mit der Nebenrechnung<sup>29</sup>:

$$\begin{aligned}\hat{b} &= \kappa \hat{x} + i \lambda \hat{p} \\ (\hat{b}^\dagger)^\dagger &= ((\kappa \hat{x} + i \lambda \hat{p})^\dagger)^\dagger \\ &= (\kappa \hat{x}^\dagger + i \lambda \hat{p}^\dagger)^\dagger \\ &= (\kappa \hat{x} - i \lambda \hat{p})^\dagger \\ &= \kappa \hat{x} + i \lambda \hat{p} \\ &= \hat{b}\end{aligned}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{N}^\dagger &= (\hat{b}^\dagger \hat{b})^\dagger \\ &= \hat{b}^\dagger (\hat{b}^\dagger)^\dagger \\ &= \hat{b}^\dagger \hat{b} \\ &= \hat{N}.\end{aligned}$$

□

2. **Satz.** Es gilt  $[\hat{b}^n, \hat{N}]_- = n \hat{b}^n$ .

*Beweis.* Beweis durch Induktion über n:

- (a)  $\boxed{n = 1}$

Zu zeigen ist  $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger \hat{b}]_- = \hat{b}$ .

Mit der Kommutatorrechenregel:

$$[A, BC]_- = B[A, C]_- + [A, B]_- C$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}[\hat{b}, \hat{b}^\dagger \hat{b}]_- &= \hat{b}^\dagger \underbrace{[\hat{b}, \hat{b}]_-}_{=0} + \underbrace{[\hat{b}, \hat{b}^\dagger]_-}_{=1} \hat{b} \\ &= \hat{b}.\end{aligned}$$

- (b)  $\boxed{n - 1 \rightarrow n}$

Zu zeigen ist: aus  $[\hat{b}^{(n-1)}, \hat{N}]_- = (n-1)\hat{b}^{(n-1)}$  folgt  $[\hat{b}^n, \hat{N}]_- = n\hat{b}^n$ .

$$[\hat{b}^n, \hat{N}]_- = [\hat{b} \hat{b}^{n-1}, \hat{N}]_-$$

<sup>29</sup>Beachte die Beweise der Linearität und Nichthermitizität von  $\hat{b}$  auf Seite 128.

mit der Kommutatorrechenregel

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

gilt

$$[\hat{b}^n, \hat{N}]_- = \hat{b}[\hat{b}^{n-1}, \hat{N}]_- + [\hat{b}, \hat{N}]_- \hat{b}^{n-1}$$

Induktionsannahme eingesetzt

$$\begin{aligned} &= \hat{b}(n-1)\hat{b}^{n-1} + 1\hat{b}^1\hat{b}^{n-1} \\ &= \hat{b}(n-1)\hat{b}^{n-1} + \hat{b}\hat{b}^{n-1} \\ &= (n-1)\hat{b}^n + \hat{b}^n \\ &= n\hat{b}^n \end{aligned}$$

□

**3. Satz.** Es gilt  $[\hat{b}^{\dagger n}, \hat{N}]_- = -n\hat{b}^{\dagger n}$ .

*Beweis.* Wir wissen von oben:

$$[\hat{b}^n, \hat{N}]_- = n\hat{b}^n$$

und daraus folgt

$$[\hat{b}^n, \hat{N}]^{\dagger} = n\hat{b}^{\dagger n}.$$

Wir formen den Kommutator um

$$\begin{aligned} [\hat{b}^n, \hat{N}]^{\dagger} &= (\hat{b}^n \hat{N} - \hat{N} \hat{b}^n)^{\dagger} \\ &= \hat{N}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger n} - \hat{b}^{\dagger n} \hat{N}^{\dagger}. \end{aligned}$$

Da  $\hat{N}$  hermitesch ist ( $\hat{N}^{\dagger} = \hat{N}$ )

$$\begin{aligned} &= \hat{N} \hat{b}^{\dagger n} - \hat{b}^{\dagger n} \hat{N} \\ &= [\hat{N}, \hat{b}^{\dagger n}]_- \\ &= -[\hat{b}^{\dagger n}, \hat{N}]_- \end{aligned}$$

und mit  $[\hat{b}^n, \hat{N}]^{\dagger} = n\hat{b}^{\dagger n}$  ergibt sich also

$$[\hat{b}^{\dagger n}, \hat{N}]_- = -n\hat{b}^{\dagger n}.$$

□

Mit diesen Sätzen kann man den Harmonischen Oszillator mit rein algebraischen Methoden lösen und muß keine vereinfachenden Annahmen machen.

**Berechnung der Eigenwerte von  $\hat{N}$** 

**Satz.** Sei  $|\alpha\rangle$  ein beliebiger normierter Eigenzustand zu  $\hat{N}$ , also  $\hat{N}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$  mit  $a$  reell ( $\hat{N}$  ist hermitesch) und  $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ , dann gilt:

1.  $\hat{b}^n|\alpha\rangle$  ist Eigenzustand mit Eigenwert  $(a-n)$  zu  $\hat{N}$ :

$$\hat{N}\hat{b}^n|\alpha\rangle = (a-n)\hat{b}^n|\alpha\rangle$$

2. und

$$|\hat{b}^n|\alpha\rangle|^2 = \langle\hat{b}^n\alpha|\hat{b}^n\alpha\rangle = a(a-1)(a-2)\cdots(a-(n-1)).$$

1. *Beweis.*

$$\hat{N}\hat{b}^n|\alpha\rangle = \hat{N}\hat{b}^n|\alpha\rangle + \hat{b}^n\hat{N}|\alpha\rangle - \hat{b}^n\hat{N}|\alpha\rangle$$

null addiert, so daß man den Kommutator bilden kann

$$= \hat{b}^n\hat{N}|\alpha\rangle + [\hat{N}, \hat{b}^n]_-|\alpha\rangle$$

Eigenwert eingesetzt

$$\begin{aligned} &= \hat{b}^na|\alpha\rangle + [\hat{N}, \hat{b}^n]_-|\alpha\rangle \\ &= \hat{b}^na|\alpha\rangle - [\hat{b}^n, \hat{N}]_-|\alpha\rangle \\ &= a\hat{b}^n|\alpha\rangle - n\hat{b}^n|\alpha\rangle \\ &= (a-n)\hat{b}^n|\alpha\rangle \end{aligned}$$

□

2. *Induktionsbeweis.*

$$\boxed{n=0}$$

$$\begin{aligned} \langle\hat{b}\alpha|\hat{b}\alpha\rangle &= \langle\alpha|\hat{b}^\dagger\hat{b}|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\hat{N}|\alpha\rangle \\ &= a\underbrace{\langle\alpha|\alpha\rangle}_{=1} \\ &= a \end{aligned}$$

$$\boxed{n-1 \rightarrow n}$$

$$\begin{aligned} \langle\hat{b}^n\alpha|\hat{b}^n\alpha\rangle &= \langle\alpha|\hat{b}^{\dagger n}\hat{b}^n|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\hat{b}^{\dagger n-1}\underbrace{\hat{b}^\dagger\hat{b}}_{\hat{N}}\hat{b}^{n-1}|\alpha\rangle \end{aligned}$$

mit dem Eigenwert  $a-(n-1)$  von  $\hat{N}$  zu  $\hat{b}^{n-1}|\alpha\rangle$ :

$$= a-(n-1)\langle\alpha|\hat{b}^{\dagger n-1}\hat{b}^{n-1}|\alpha\rangle$$

Aus  $\langle\hat{b}^{n-1}\alpha|\hat{b}^{n-1}\alpha\rangle$  ergibt sich dann  $(a-(n-2))$  und so weiter. □

### Diskretisierung

Wir müssen beachten, daß das Betragsquadrat  $|\cdot|^2$  per Definition immer größer-gleich null ist. Wäre  $a$  eine beliebige reelle Zahl mit  $a > 0$ , so kann man ein  $n$  finden, mit dem gilt:

$$\underbrace{a(a-1)\cdots(a-(n-2))}_{\text{Produkt aus Zahlen } > 0} \underbrace{(a-(n-1))}_{< 0} < 0.$$

Dies gilt zum Beispiel für  $n-1 > a$ .

Falls  $a \in \mathbb{N}$  ist, dann kann das Produkt nicht negativ werden, denn dann gibt es einen Term, der gleich null ist, falls  $n-1 > a$  ist! Damit verschwindet das Produkt! Die Bedingung, daß das Betragsquadrat  $|\cdot|^2$  der Normierung größer null ist erzwingt also, daß  $a \in \mathbb{N}$  ist. Dies ist die Diskretisierung der Eigenwerte und damit der erlaubten Energien.

### Grundzustand

Wie wir wissen ist  $\hat{b}^n |\alpha\rangle$  Eigenzustand zum Operator  $\hat{N}$  mit dem Eigenwert  $(a-n)$ . Mit  $a \in \mathbb{N}$  gibt es auch einen Eigenwert  $(a-n) = 0$ , wenn  $a = n$  ist. Dies ist der Eigenwert zum Grundzustand des Harmonischen Oszillators. Die Eigenwertgleichung für  $\hat{N}$  hat also eine Lösung

$$\hat{N} |\alpha_0\rangle = 0 |\alpha_0\rangle.$$

Für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung folgt, wenn man den Grundzustand  $|\alpha_0\rangle$  einsetzt:

$$\hat{H} |\alpha_0\rangle = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) |\alpha_0\rangle$$

Eigenwert für  $\hat{N}$  einsetzen:

$$\begin{aligned} &= \hbar\omega(0 + \frac{1}{2}) |\alpha_0\rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} |\alpha_0\rangle. \end{aligned}$$

Damit haben wir den ersten Eigenwert<sup>30</sup>:

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Man beachte, daß der Operator  $\hat{b}$  keinen Beitrag zur Normierung liefert:

$$\langle \alpha_0 | \hat{b}^\dagger \hat{b} | \alpha_0 \rangle = \langle \alpha_0 | \hat{N} | \alpha_0 \rangle$$

mit  $\hat{N} |\alpha_0\rangle = 0 |\alpha_0\rangle$

$$\begin{aligned} &= \langle \alpha_0 | 0 | \alpha_0 \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

also

$$\hat{b} |\alpha_0\rangle = 0.$$

Dies wird auch durch die Formel für die Diskretisierung deutlich, da immer ein Term des Normierungsfaktors verschwindet, wenn man  $\hat{b}$  auf  $|\alpha_0\rangle$  anwendet.

<sup>30</sup> Vergleiche mit Harmonischer Oszillator I auf Seite 69

**Angeregte Zustände**

**Satz.** Die weiteren Eigenzustände lassen sich aus dem Grundzustand mittels

$$|\alpha_n\rangle := \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle$$

bestimmen. Dabei ist  $|\alpha_n\rangle$  ein normierter Eigenzustand ( $\langle \alpha_n | \alpha_n \rangle = 1$ ) zu  $\hat{H}$  mit Eigenwert  $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ .

Diese Gleichung liefert alle Eigenzustände, die wir schon aus der Lösung der Differentialgleichung im Kapitel 1.5 kennengelernt haben.

1. *Beweis.* Wir beweisen zuerst die Behauptung ohne auf die Normierung zu achten!

$$\hat{N} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle = \hat{N} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle + \hat{b}^{\dagger n} \hat{N} |\alpha_0\rangle - \hat{b}^{\dagger n} \hat{N} |\alpha_0\rangle$$

null addieren um dann den Kommutator zu bilden

$$\begin{aligned} &= \hat{b}^{\dagger n} \hat{N} |\alpha_0\rangle + [\hat{N}, \hat{b}^{\dagger n}] |\alpha_0\rangle \\ &= \hat{b}^{\dagger n} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} |\alpha_0\rangle + [\hat{N}, \hat{b}^{\dagger n}] |\alpha_0\rangle \end{aligned}$$

Der erste Term verschwindet, da  $\hat{b} |\alpha_0\rangle = 0$

$$= -[\hat{b}^{\dagger n}, \hat{N}] |\alpha_0\rangle$$

mit der 3. Beziehung

$$\begin{aligned} &= n \underbrace{\hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle}_{|\tilde{\alpha}_n\rangle} \\ &= n |\tilde{\alpha}_n\rangle \end{aligned}$$

□

**Anmerkung.** Hat  $\hat{N}$  bezüglich  $|\tilde{\alpha}_n\rangle$  den Eigenwert  $n$

$$\hat{N} |\tilde{\alpha}_n\rangle = n |\tilde{\alpha}_n\rangle,$$

so ist

$$(\hat{N} + \frac{1}{2}) |\tilde{\alpha}_n\rangle = (n + \frac{1}{2}) |\tilde{\alpha}_n\rangle$$

und so gilt auch

$$\hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) |\tilde{\alpha}_n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) |\tilde{\alpha}_n\rangle.$$

Dies ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) |\tilde{\alpha}_n\rangle.$$

2. *Induktionsbeweis.* Um nun auch die Normierung zu beachten, müssen wir  $\langle \tilde{\alpha}_n | \tilde{\alpha}_n \rangle \stackrel{!}{=} n!$  beweisen, um die Eigenfunktion mit  $\frac{1}{\sqrt{n!}}$  zu korrigieren.

$$\boxed{n = 1}$$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\alpha}_1 | \tilde{\alpha}_1 \rangle &= \langle \hat{b}^\dagger \tilde{\alpha}_0 | \hat{b}^\dagger \tilde{\alpha}_0 \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_0 | \hat{b} \hat{b}^\dagger | \tilde{\alpha}_0 \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_0 | \hat{b} \hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger \hat{b} - \hat{b}^\dagger \hat{b} | \tilde{\alpha}_0 \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_0 | \hat{b}^\dagger \hat{b} + [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] | \tilde{\alpha}_0 \rangle \end{aligned}$$

$\hat{b}^\dagger \hat{b} | \tilde{\alpha}_0 \rangle$  verschwindet und  $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$

$$\begin{aligned} &= \langle \tilde{\alpha}_0 | \tilde{\alpha}_0 \rangle \\ &= 1 \\ &= 1! \end{aligned}$$

$$\boxed{n - 1 \rightarrow n}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{b}^{\dagger n} \tilde{\alpha}_0 | \hat{b}^{\dagger n} \tilde{\alpha}_0 \rangle &= \langle \hat{b}^{\dagger n-1} \tilde{\alpha}_0 | \hat{b} \hat{b}^\dagger | \hat{b}^{\dagger n-1} \tilde{\alpha}_0 \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_{n-1} | \hat{b} \hat{b}^\dagger | \tilde{\alpha}_{n-1} \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_{n-1} | \underbrace{\hat{b}^\dagger \hat{b}}_{=N} + \underbrace{[\hat{b}, \hat{b}^\dagger]}_{=1} | \tilde{\alpha}_{n-1} \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_{n-1} | n + 1 | \tilde{\alpha}_{n-1} \rangle \\ &= n \underbrace{\langle \tilde{\alpha}_{n-1} | \tilde{\alpha}_{n-1} \rangle}_{=(n-1)!} \\ &= n(n-1)! \\ &= n! \end{aligned}$$

□

### Zusammenfassung

Man erhält also die angeregten Zustände durch

$$|\alpha_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle,$$

wobei

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

ist. Weiterhin sind die Zustände dann schon normiert, wenn der Grundzustand normiert ist:

$$\langle \alpha_n | \alpha_n \rangle = 1.$$

Man kann also die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung so schreiben:

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



### 2.5.5 Die Bedeutung von $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$

Was ist die Bedeutung von  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$ ? Sie sind keine Meßgrößen, da sie nicht hermitesch sind und somit keine reellen Werte liefern. Was machen diese Operatoren?

1. Aufsteigeoperator:

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger |\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b}^{\dagger n+1} |\alpha_0\rangle \\ &= \frac{\sqrt{n+1}!}{\sqrt{n!}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{n+1}!} \hat{b}^{\dagger n+1} |\alpha_0\rangle}_{= |\alpha_{n+1}\rangle} \\ &= \sqrt{n+1} |\alpha_{n+1}\rangle\end{aligned}$$

Wendet man  $\hat{b}^\dagger$  auf einen Zustand  $|\alpha_n\rangle$  an, so erhält man den Zustand  $|\alpha_{n+1}\rangle$  mit einem um  $\hbar\omega$  größeren Eigenwert. Auf der „Energieleiter“ im Harmonischen Oszillator steigt der Zustand eine Sprosse höher, daher heißt  $\hat{b}^\dagger$  Aufsteigeoperator.  $\hat{b}^\dagger$  wird auch Phononenerzeugungsoperator genannt.

2. Absteigeoperator:

$$\begin{aligned}\hat{b} |\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b} \hat{b}^{\dagger n} |\alpha_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b} \hat{b}^\dagger \hat{b}^{\dagger n-1} |\alpha_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \underbrace{\hat{b}^\dagger \hat{b}}_{=n} + \underbrace{[\hat{b}, \hat{b}^\dagger]}_{=1} \right) \hat{b}^{\dagger n-1} |\alpha_0\rangle \\ &= \frac{n}{\sqrt{n!}} \hat{b}^{\dagger n-1} |\alpha_0\rangle \\ &= \sqrt{n} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} \hat{b}^{\dagger n-1} |\alpha_0\rangle \\ &= \sqrt{n} |\alpha_{n-1}\rangle\end{aligned}$$

Durch Anwendung von  $\hat{b}$  auf den Zustand  $|\alpha_n\rangle$  erhält man den nächstniedrigeren Zustand  $|\alpha_{n-1}\rangle$  (bis auf den Faktor  $\sqrt{n}$ ), daher heißt  $\hat{b}$  Absteigeoperator.  $\hat{b}$  wird auch Phononenvernichtungsoperator genannt.

### 2.5.6 Übergangsmatrix

#### Übergangsmatrix für $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$

Wie sieht die Übergangsmatrix für Zustände bezüglich  $\hat{b}^\dagger$  und  $\hat{b}$  aus? Wir können  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  in der Matrix der Basis der Eigenzustände darstellen.

$$\langle \alpha_i | \hat{b}^\dagger | \alpha_j \rangle = \hat{b}_{ij}^\dagger = \sqrt{j+1} \langle \alpha_i | \alpha_{j+1} \rangle = \sqrt{j+1} \delta_{ij+1}$$

Zeilen sind durch  $i$  und Spalten durch  $j$  markiert.<sup>31</sup>

$$\hat{b}_{ij}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Analog sieht es bei  $\hat{b}_{ij}$  aus:

$$\langle \alpha_i | \hat{b} | \alpha_j \rangle = \hat{b}_{ij} = \sqrt{j} \langle \alpha_i | \alpha_{j-1} \rangle = \sqrt{j} \delta_{ij-1}$$

$$\hat{b}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Die Matrix vereinfacht die Rechnung, wenn gemischte Zustände vorliegen. Anwendung von  $\hat{b}^\dagger$  auf einen solchen gemischten Zustand bedeutet Matrixmultiplikation mit der Übergangsmatrix ( $\hat{b}_{ij}^\dagger$ ).  $\hat{b}$  kann man über die Beziehung zu  $\hat{b}^\dagger$  berechnen<sup>32</sup>:

$$\hat{b}_{ji}^\dagger = \hat{b}_{ij}.$$

### Übergangsmatrix für $\hat{x}$ und $\hat{p}$

Wie sieht die Matrix für unsere Operatoren  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  aus?

Wir betrachten die Basisdarstellung von  $\hat{x}$ <sup>33</sup>:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_i | \hat{x} | \alpha_j \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha_i | \hat{b} + \hat{b}^\dagger | \alpha_j \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \langle \alpha_i | \hat{b} | \alpha_j \rangle + \langle \alpha_i | \hat{b}^\dagger | \alpha_j \rangle \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{j} \delta_{ij-1} + \sqrt{j+1} \delta_{ij+1} \right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$\hat{x}$  ist reel und symmetrisch; also hermitesch.

Analog bestimmt man  $\hat{p}$ . Wir erhalten zwar komplexe Einträge in der Matrix; sie ist jedoch auch hermitesch.

$$\langle \alpha_i | \hat{p} | \alpha_j \rangle = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \frac{1}{i} \langle \alpha_i | (\hat{b} - \hat{b}^\dagger) | \alpha_j \rangle$$

<sup>31</sup>Man beachte: Wir zählen die Zeilen und Spalten von 0 beginnend.

<sup>32</sup>Was man den Definitionen auf Seite 127 schon ansehen kann.

<sup>33</sup>Mit Hilfe des Satzes 4 auf Seite 128.

**Übergangsmatrix für  $\hat{x}^2$** 

Um  $\langle \alpha_i | \hat{x}^2 | \alpha_j \rangle$  zu berechnen verwenden wir wieder den „1-Trick“, wobei die  $|\beta\rangle$  die Basiszustände sind:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_i | \hat{x}^2 | \alpha_j \rangle &= \sum_{\beta} \langle \alpha_i | \hat{x} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{x} | \alpha_j \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dies ist also das Quadrat der Matrix  $\langle \alpha_i | \hat{x} | \alpha_j \rangle$ . Mit derselben Methode lassen sich  $\langle \alpha_i | \hat{p} | \alpha_j \rangle$  und  $\langle \alpha_i | \hat{p}^2 | \alpha_j \rangle$  berechnen.

Nun können wir unsere Ergebnisse mit den Ergebnissen des Kapitels 1.5 auf Seite 62 vergleichen (Darstellung der Zustände in Ortsdarstellung).

Zum Beispiel ist:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 | \hat{x}^2 | \alpha_1 \rangle &= \frac{3}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} H_1^2(x) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} x^2 H_1(x) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} dx. \end{aligned}$$

Insgesamt handelt es sich um eine sehr effiziente Methode zur Berechnung von Erwartungswerten für dynamische Variablen.

**Beispiel.** Der Impulsoperator.

$$\langle \alpha_i | \hat{H} | \alpha_j \rangle = \langle \alpha_i | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \alpha_j \rangle + \langle \alpha_i | \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 | \alpha_j \rangle$$

Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  ist bekannt und  $\hat{x}^2$  haben wir gerade berechnet.

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} &= \langle \alpha_i | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \alpha_j \rangle + \frac{m\omega^2 \hbar}{2 \cdot 2m\omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ &= \langle \alpha_i | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \alpha_j \rangle + \frac{\hbar\omega}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit läßt sich die Matrix für  $\hat{p}^2$  berechnen.

### 2.5.7 Berechnung der Wellenfunktionen

Lassen sich aus der algebraischen Formulierung nur Eigenwerte und Erwartungswerte berechnen, oder sogar die Zustände (Wellenfunktionen) selber?

#### 1. Grundzustand

Wenn wir den Absteigeoperator auf den Grundzustand (niedrigster Zustand) anwenden, dann erhalten wir den Nullvektor:

$$\begin{aligned}\hat{b}|\alpha_0\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}\hat{p}\right)|\alpha_0\rangle \\ &= 0.\end{aligned}$$

Diese Gleichung schreiben wir nun ein wenig um und benutzen dafür die Ortsdarstellung.

Wir fügen eine Eins mittels  $\int_{-\infty}^{+\infty}|x'\rangle\langle x'|dx'$  ein und multiplizieren  $\langle x|$  von links. Dies ergibt eine Zahlengleichung:

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\hat{b}|x'\rangle\langle x'|\alpha_0\rangle dx.$$

Für  $\hat{b}$  fügen wir die Darstellung mit  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  ein:

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{2}}\delta(x-x')\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}\hat{p}\right)dx'\phi_0(x).$$

Wir schreiben  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  in Ortsdarstellung:

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{2}}\delta(x-x')\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)dx'\phi_0(x).$$

Integration:

$$0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_0(x).$$

Durch Substitution mit  $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$  und damit  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}dy = dx$  erhalten wir:

$$0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{\partial}{\partial y}\right)\phi_0(y).$$

Umformung ergibt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial y}\phi_0(y) &= -y\phi_0(y) \\ \frac{\phi_0'(y)}{\phi_0} &= -y.\end{aligned}$$

Dies ist eine einfache Differentialgleichung, die sich durch Integration lösen lässt:

$$\begin{aligned}\int \frac{\phi_0'(y)}{\phi_0} dy &= - \int y dy \\ \ln \phi_0(y) &= -\frac{1}{2}y^2 \\ \phi_0(y) &= e^{-\frac{1}{2}y^2}.\end{aligned}$$

Die Ortsdarstellung der Wellenfunktion im Grundzustand  $|\alpha_0\rangle$  ergibt also mit  $y = \frac{x}{b}$

$$\phi_0(y) = e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{b^2}}.$$

2. Nun berechnen wir mittels des Aufsteigeoperators den ersten angeregten Zustand  $|\alpha_1\rangle$ .

$$\begin{aligned}\phi_1(y) &= \langle y | \alpha_1 \rangle \\ &= \langle y | \frac{1}{\sqrt{1}} \hat{b}^{\dagger} | \alpha_0 \rangle \\ &= (y - \frac{\partial}{\partial y}) \langle y | \alpha_0 \rangle \\ &= (y - \frac{\partial}{\partial y}) \phi_0 \\ &= (y - \frac{\partial}{\partial y}) e^{-\frac{1}{2}y^2} \\ &= 2e^{-\frac{1}{2}y^2}\end{aligned}$$

Dies ist also die Wellenfunktion zur Energie  $\frac{3}{2}\hbar\omega$ . Allerdings ist sie noch nicht normiert, da wir die Wellenfunktion des Grundzustands nicht normiert haben. Durch sukzessive Anwendung von  $\hat{b}^{\dagger}$  lassen sich alle Wellenfunktionen generieren.

$$\begin{aligned}\phi_n(y) &= \langle y | \alpha_n \rangle \\ &= \langle y | \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{b}^{\dagger n} | \alpha_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (y - \frac{\partial}{\partial y})^n \langle y | \alpha_0 \rangle.\end{aligned}$$

Mit rein algebraischen Überlegungen (Matrizenrechnung) können also physikalische Probleme gelöst werden.

## 2.6 Variationsmethode in der Quantenmechanik

### 2.6.1 Energieminimum

Ist der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  für ein Problem gefunden, so ist das nächste Ziel, die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung im Grundzustand  $|\phi_0\rangle$ , und damit die Energie  $E_0$  des Grundzustands, zu berechnen.

Zur weiteren Betrachtung definieren wir einen „funktionalen Energieeigenwert“ (der unabhängig von der Normierung von  $\psi$  ist):

$$E(\psi) := \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

**Behauptung.** Es gibt einen Energiewert  $E_0$ , so dass für jede Lösung  $|\psi\rangle$  der gegebenen zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$E(\psi) \geq E_0$$

ist;  $E_0$  also der niedrigste Energieeigenwert des Hamilton-Operators ist.

Stimmt die Behauptung, so ergibt dies mit der Eigenwertgleichung:

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

und dem Grundzustand  $|\phi_0\rangle$  folgende „Variationsbedingung“:

$$\delta E(\psi) = \delta \left. \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right|_{\psi=\phi_0} = 0$$

Für  $|\psi\rangle = |\phi_0\rangle$  nimmt die berechnete Energie  $E(\psi)$  den minimalen Eigenwert an. Da  $E(\psi)$  jedoch eine obere Schranke für  $E_0$  ist, heißt das, dass  $E_0$  selbst die Grundzustandsenergie sein muss.

*Beweis.* Die Eigenfunktionen  $|\phi_n\rangle$  zu  $\hat{H}$  bilden eine vollständige Basis. Mit:

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

ist:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \psi | \phi_n \rangle}_{c_n^*} \underbrace{\langle \phi_n | \psi \rangle}_{c_n} = \sum_n |c_n|^2$$

Damit berechnen wir  $E(\psi)$ :

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Wechsel in die Basis der Eigenzustände:

$$= \frac{\sum_{n,m} \langle \psi | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Energieeigenwert herausziehen:

$$= \frac{\sum_{n,m} \langle \psi | \phi_n \rangle E_m \langle \phi_n | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Das Skalarprodukt von Basiszuständen ergibt das Kronecker- $\delta$ :

$$= \frac{\sum_{n,m} \langle \psi | \phi_n \rangle E_m \delta_{nm} \langle \phi_m | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Auflösen der Skalarprodukte:

$$= \frac{\sum_{n,m} c_n^* c_m E_m \delta_{nm}}{\sum_n |c_n|^2}$$

Mit  $\delta_{nm}$  bricht eine Summation zusammen:

$$= \frac{\sum_m E_m |c_m|^2}{\sum_n |c_n|^2}$$

Da die Grundzustandsenergie  $E_0 \leq E_m$  ist, gilt:

$$\begin{aligned} &\geq \frac{\sum_m E_0 |c_m|^2}{\sum_n |c_n|^2} \\ &= E_0 \end{aligned}$$

$E(\psi)$  ist damit eine obere Schranke für die Energieeigenwerte. Da  $E_m = E_0$  nur dann gilt, wenn für  $m \neq 0$   $\sum_m |c_m|^2 = 0$  ist, folgt, dass  $\psi = \phi_0$  ist, und damit muss  $E_0$  der exakte niedrigste Eigenwert von  $\hat{H}$  sein.  $\square$

## 2.6.2 Vorgehensweise anhand eines Beispiels

**Beispiel (Eindimensionaler Harmonischer Oszillator).** Mögliche Lösungen des Harmonischen Oszillators besitzen folgende Ortsdarstellung:

$$\langle x | \phi_\alpha \rangle = \phi_\alpha(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}}{\sqrt{\pi} \alpha}$$

Wobei sie normiert sind:

$$\langle \phi_\alpha | \phi_\alpha \rangle = 1$$

Das Ziel ist es, dasjenige  $\alpha$  zu finden, bei dem  $E(\phi_\alpha) =: E(\alpha)$  ein Minimum einnimmt. Berechnen wir also  $E(\alpha)$  nach obiger „Vorschrift“:

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \langle \phi_\alpha | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 | \phi_\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} dx \end{aligned}$$

Berechnet man die auftretende Differentiation:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{x}{\alpha^2} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \right) \\ &= -\frac{1}{\alpha^2} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} - \frac{x}{\alpha^2} \left( -\frac{x}{\alpha^2} \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \\ &= \left( -\frac{1}{\alpha^2} + \frac{x^2}{\alpha^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}\end{aligned}$$

so führt dies zu:

$$E(\alpha) = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{\hbar}{2m} \left( -\frac{1}{\alpha^2} + \frac{x^2}{\alpha^4} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} dx$$

Mit Hilfe von [Bronstein] erhält man:

$$= \frac{\hbar^2}{4m\alpha^2} + \frac{1}{4}m\omega^2\alpha^2$$

Das Minimum von  $E(\alpha)$  erhalten wir durch Differentiation:

Abbildung 2.12: Minimum der Energie.

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = -\frac{2\hbar^2}{4m\alpha^3} + \frac{1}{2}m\omega^2\alpha \stackrel{!}{=} 0$$

Bringen wir einen Term auf die andere Seite:

$$\frac{1}{2}m\omega^2\alpha = \frac{2\hbar^2}{4m\alpha^3}$$

und lösen nach  $\alpha$  auf:

$$\alpha^4 = \frac{\hbar^2}{m\omega^2}$$

Wir erhalten somit das  $\alpha$ , für das die Energie ihr Minimum einnimmt:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Dieses Ergebnis entspricht der Oszillatorlänge „ $b$ “.

### 2.6.3 Allgemeine Vorgehensweise

Als allgemeinen Ansatz schreibt man die gesuchte Lösung in Form einer Potenzreihe:

$$\phi(x) = \sum_{\nu=0}^m \alpha_{\nu} x^{\nu} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$



wobei man nun mehrere Variationsparameter  $\alpha_\nu$  in die Rechnung einbeziehen muss. Das Beispiel behandelte den einfachsten Fall  $\nu = 0$ .

Die Vorgehensweise für angeregte Zustände baut auf dem Ergebnis für den Grundzustand auf.<sup>34</sup> Diese Methode ist allerdings sehr mühsam:

1. Bestimme den Grundzustand  $|\phi_0\rangle$  (wie eben besprochen).
2. Betrachte für den angeregten Zustand die zu minimisierende Funktion:

$$\tilde{E}(\phi) := \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \lambda |\langle \phi_0 | \phi \rangle|^2$$

Die Testwellenfunktion  $\phi$  liefert im Zusatzterm solange einen Beitrag, bis sie vom schon gefundenen  $\phi_0$  linear unabhängig ist. Dies ist genau beim Minimum von  $\tilde{E}(\phi)$  der Fall (für  $\lambda$  groß genug). Somit erhält man den ersten angeregten Zustand.

3. Diese Vorgehensweise wird nun, mit jeweils an die bisherigen Lösungswellenfunktionen angepasstem  $E$ , wiederholt.

---

<sup>34</sup>Das vorgestellte Variationsverfahren liefert nur den Grundzustand und die zugehörige niedrigste Energie des Systems.

## Kapitel 3

# Der Drehimpuls in der Quantenmechanik, Zentralfeld, Wasserstoffatom

### 3.1 Definition und grundlegende Eigenschaften

#### 3.1.1 Der Drehimpuls in der Klassischen Mechanik

##### Definition

Der (Bahn-)Drehimpuls eines (Punkt-)Teilchens ist definiert als das Kreuzprodukt aus Orts- und Impulsvektor:

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

Wir betrachten in diesem Abschnitt den Drehimpuls im konservativen Zentralfeld, d.h. für  $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ . Der Koordinatenursprung liege im Kraftzentrum.

##### Eigenschaften des Drehimpulses

1. Die Komponenten des Drehimpulses in Ortskoordinaten lauten:

$$\begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

2. Im Zentralfeld (und für kräftefreie Systeme) ist der Drehimpuls eine Konstante der Bewegung:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{L} \text{ ist eine Erhaltungsgröße.}$$

Die Bewegungskonstanz lässt sich mit der Poisson-Klammer folgendermaßen darstellen ( $\alpha$  steht immer für eine der drei Richtungen  $x, y, z$ ):

$$\frac{dL_\alpha}{dt} = \frac{\partial L_\alpha}{\partial t} + \{L_\alpha, H\} = 0$$

Drehimpulserhaltung heißt, dass die einzelnen Komponenten des Drehimpulses Konstanten der Bewegung sind:

$$\frac{\partial L_\alpha}{\partial t} = 0$$

Den Zusammenhang zwischen der Erhaltungsgröße und dem Generator der Zeitentwicklung ( $H$ ) drückt die Poisson-Klammer aus:

$$\{L_\alpha, H\} = 0$$

3. Für alle zyklischen Permutationen  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  von  $\{x, y, z\}$  gilt folgende Beziehung der Komponenten untereinander:

$$\{L_\alpha, L_\beta\} = L_\gamma$$

### 3.1.2 Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

#### Konstruktion

In den vorhergehenden Abschnitten haben wir gesehen, wie ein quantenmechanischer Operator aus den klassischen Eigenschaften seiner korrespondierenden dynamischen Variable hergeleitet werden kann. Dies wenden wir nun für den Drehimpulsoperator  $\hat{L}$  an.

Bei der Definition der Operatoren  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  und  $\hat{L}_z$  fordern wir:

1. Linearität,
2. Selbstadjungiertheit,
3. Erfüllung der Quantisierungsbedingung,
4. mit dem konkreten Aspekt der Erhaltung des Drehimpulses im Zentralfeld.

**Ansatz:** Wir gehen von den Kreuzprodukt-Komponenten des Drehimpulses aus, wie sie in der 1. klassischen Eigenschaft auf Seite 146 angegeben sind, und ersetzen dort die Orts- und Impulskordinaten durch die „bewährten“ Operatoren. Für die  $x$ -Komponente ist das:

$$L_x \quad \longrightarrow \quad \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$

Damit lautet die  $x$ -Komponente z.B. in Ortsdarstellung:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

Nun müssen wir prüfen, ob dieser Ansatz die Anforderungen erfüllt.<sup>1</sup>

1. Linearität:

*Beweis.* Die Komponenten  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$ ,  $\hat{p}_y$  und  $\hat{p}_z$  sind linear. □

2. Selbstadjungiertheit: Zunächst stellen wir fest, dass die Reihenfolge von  $\hat{p}_\alpha \hat{\beta}$  für  $\alpha \neq \beta$  willkürlich ist<sup>2</sup>, da keine gegenseitige Abhängigkeit besteht:

$$[\hat{p}_z, \hat{y}]_- = 0$$

Außerdem sei daran erinnert, dass die Orts- und Impulsoperatoren hermitesch sind. Wir benutzen dies im

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^\dagger &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^\dagger \\ &= (\hat{y}\hat{p}_z)^\dagger - (\hat{z}\hat{p}_y)^\dagger \\ &= \hat{p}_z^\dagger \hat{y}^\dagger - \hat{p}_y^\dagger \hat{z}^\dagger \end{aligned}$$

Benutzen wir die Selbstadjungiertheit der Komponenten:

$$= \hat{p}_z \hat{y} - \hat{p}_y \hat{z}$$

Setzen wir die Kommutatorbeziehung  $\hat{p}_z \hat{y} = \hat{y} \hat{p}_z + [\hat{p}_z, \hat{y}]_-$  ein:

$$= \hat{y} \hat{p}_z + [\hat{p}_z, \hat{y}]_- - \hat{z} \hat{p}_y$$

und nutzen aus, dass dieser Kommutator verschwindet,  $[\hat{p}_z, \hat{y}]_- = 0$ :

$$= \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$$

so erhalten wir das erhoffte Ergebnis:

$$= \hat{L}_x$$

Die Drehimpulskomponenten sind hermitesch (Der exemplarische Beweis für die  $x$ -Komponente soll genügen). □

**Satz.** *Alle Komponenten des Drehimpulses sind hermitesch:*

$$\boxed{\hat{L}_\alpha = \hat{L}_\alpha^\dagger}$$

<sup>1</sup>O.B.d.A. gelten die folgenden Aussagen für alle Komponenten. Der verständlicheren Darstellung wegen benutzen wir statt der Platzhalterdarstellung  $(\alpha, \dots)$  manchmal ein exemplarisches Beispiel.

<sup>2</sup>Beachte, dass dies bei  $\alpha = \beta$ , also z.B. für  $\hat{p}_z$  und  $\hat{z}$ , nicht so ist.  $[\hat{p}_z, \hat{z}]_- \neq 0!$

3. Die Quantisierungsbedingung legt nach der 3. klassischen Eigenschaft folgende Beziehung nahe:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]_- = i\hbar \hat{L}_z$$

Dies muss auch für alle zyklischen Permutationen der Drehimpulskomponenten gelten.

*Beweisskizze.*

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]_- = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]_-$$

Mit Hilfe der Beziehungen für allgemeine und unsere speziellen Kommutatoren (wie weiter unten zusammengefasst), wird dieser Kommutator nun so „entkoppelt“, dass nur noch Kommutatorausdrücke mit einzelnen Operatoren übrigbleiben. Ein Zwischenergebnis lautet dabei:

$$= \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x]_-}_{=-i\hbar\hat{p}_x} - \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x]_-}_{=0} - \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z]_-}_{=0} + \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]_-}_{=i\hbar\hat{p}_y}$$

Letztlich erhält man das Ergebnis:

$$\begin{aligned} &= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \\ &= i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

Womit die aus der Quantisierungsbedingung geforderte Beziehung erfüllt ist.  $\square$

Formulieren wir also den

**Satz.** Für alle zyklischen Permutationen der Komponenten  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  des Drehimpulses gilt:

$$\boxed{[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta]_- = i\hbar \hat{L}_\gamma}$$

4. Aus der Quantisierungsbedingung und der 2. klassischen Eigenschaft müssen wir an den Drehimpulsoperator die Forderung stellen, dass im Zentralfeld gilt:

$$\boxed{[\hat{L}_\alpha, \hat{H}]_- = 0}$$

Die Erhaltung des Drehimpulses in der Klassischen Mechanik wird also in die Quantenmechanik übersetzt, indem gefordert wird, dass es ein gemeinsames Eigenfunktionssystem für den Hamilton-Operator  $\hat{H}$ , und die Drehimpulskomponenten  $\hat{L}_\alpha$  gibt.

Den Kommutator dieser Operatoren können wir jedoch noch nicht berechnen, da wir noch keinen konkreten Hamilton-Operator haben. Dies ist somit eine Forderung, die wir an die Hamilton-Operatoren von Zentralfeldern stellen müssen.

Für ein System, dessen Energiezustand durch eine Quantenzahl  $\eta$ , und dessen Drehimpulszustand durch eine Quantenzahl  $\lambda$  charakterisiert werden kann, fordern wir also im Zentralfeld die gleichzeitige Erfüllung der beiden Eigenwertgleichungen:

$$\begin{aligned}\hat{H}|\eta, \lambda\rangle &= E_\eta|\eta, \lambda\rangle \\ \hat{L}_\alpha|\eta, \lambda\rangle &= l_\lambda|\eta, \lambda\rangle\end{aligned}$$

Die mit der Klassischen Mechanik korrespondierenden Eigenschaften sind also erfüllt, der Ansatz für den Drehimpulsoperator ist sinnvoll.

Um obige Beweisskizze zu ergänzen benötigt man folgende (allgemeine) Eigenschaften von Kommutatoren:

1. Kommutator mit Summe:

$$[A + B, C]_- = [A, C]_- + [B, C]_-$$

2. Kommutator aus Produkten:

$$\begin{aligned}[AB, CD]_- &= A[B, CD]_- + [A, CD]_- B \\ &= A(C[B, D]_- + [B, C]_- D) + ([A, C]_- D + C[A, D]_-)B\end{aligned}$$

sowie die konkreten Vertauschungseigenschaften unserer Operatoren:

3. Alle Ortsoperatoren vertauschen miteinander:

$$[\hat{y}, \hat{z}]_- = 0$$

4. Ebenso vertauschen die Impulsoperatoren untereinander:

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_z]_- = 0$$

Die Reihenfolge spielt dabei jeweils keine Rolle.

5. Bei „Mischungen“ müssen wir beachten, ob die Koordinatenrichtung übereinstimmt:

$$[\hat{y}, \hat{p}_y]_- = i\hbar = -[\hat{p}_y, \hat{y}]_-$$

6. oder verschieden ist:

$$[\hat{x}, \hat{p}_y]_- = 0$$

### Das Problem der Drehimpulserhaltung

Fassen wir die Ergebnisse zusammen, so stoßen wir auf das folgende Problem: Die Komponenten des Drehimpulses kommutieren nicht miteinander. Sie sind also nicht gleichzeitig messbar. Damit scheint die Drehimpulserhaltung in der Quantenmechanik experimentell grundsätzlich nicht nachweisbar zu sein, und

damit in Frage gestellt. Diese Nichtvertauschbarkeit müssen wir daher näher beleuchten.

Messen wir die  $z$ -Komponente eines Systems im Zentralfeld, so erhalten wir den Erwartungswert  $\langle \hat{L}_z \rangle$ . Wir können nach jeder  $z$ -Messung auch die beiden anderen Komponenten aufnehmen, sie ergeben jedoch statistisch verteilte Messwerte.<sup>3</sup> Wiederholt man die Messung oft genug, so stellt man jedoch fest, dass der Erwartungswert, der sich ja auf eine Messreihe bezieht, für die  $x$ - und  $y$ -Komponente zu null wegmittelt. Obwohl man also aufgrund der Einzelergebnisse nichts über  $\hat{L}_x$  und  $\hat{L}_y$  aussagen kann, ist mit

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0 = \text{const.} \quad \langle \hat{L}_z \rangle = \lambda = \text{const.}$$

der Drehimpuls als erhalten anzusehen.

Dieses Ergebnis wird auch dadurch gestützt, dass alle 3 Komponenten mit dem Hamilton-Operator des Zentralfelds kommutieren. Aus der Quantisierungsbedingung und der klassischen Poisson-Klammer folgt daraus die Drehimpulserhaltung. *Der Drehimpuls ist also eine Erhaltungsgröße*, auch wenn Einzelmessungen dies (naturbedingt) nicht offensichtlich erscheinen lassen.

### Der Operator $\hat{L}^2$

Es findet sich ein anderer physikalisch sinnvoller Operator, der sowohl mit den Komponenten des Drehimpulses, als auch mit dem Hamilton-Operator vertauscht. Ihn stellen wir nun vor:

**Definition.**

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Der Operator  $\hat{L}^2$  entspricht der Länge des Drehimpulsvektors zum Quadrat.

**Eigenschaften** von  $\hat{L}^2$ :

- $\hat{L}^2$  vertauscht mit den Drehimpulskomponenten:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x]_- = [\hat{L}^2, \hat{L}_y]_- = [\hat{L}^2, \hat{L}_z]_- = 0$$

- $\hat{L}^2$  vertauscht mit dem Hamilton-Operator:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2]_- = 0$$

- Konsequenz der Vertauschbarkeit ist, dass es ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  gibt.<sup>4</sup>

<sup>3</sup>In Abschnitt 3.2 werden wir sehen, dass der Drehimpuls gequantelt ist, also nur bestimmte Werte gemessen werden können. [Cohen-1] zeigt, dass die Messungen für die  $x$ - und  $y$ -Komponente nur diese möglichen Werte ergeben; sie sind jedoch statistisch verteilt, so dass im Mittel null herauskommt. Obwohl also die Einzelmessung dieser beiden Komponenten – aufgrund der Nichtvertauschbarkeit der Operatoren – aussageelos ist, „hält“ sie sich an die quantenmechanischen „Rahmenbedingungen“.

<sup>4</sup>Bei der Wahl der drei „kommutativen“ Operatoren wählt man als Drehimpulskomponente meist die  $z$ -Komponente, obwohl sie sich durch nichts vor den beiden anderen auszeichnet. Man muss nur konsequent diese eine Komponente beibehalten, da sich mit ihr ein anderes Eigenfunktionssystem ergibt als z.B. mit der  $y$ -Komponente. Dies ist die Folge der Nichtvertauschbarkeit der drei Einzelkomponenten des Drehimpulses.

Zeigen wir nun noch, dass  $\hat{L}^2$  mit z.B.  $\hat{L}_z$  kommutiert:

*Beweis.*

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z]_- = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z]_-$$

Wenden wir die 1. Kommutatorregel von Seite 150 an:

$$\begin{aligned} &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z]_- + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z]_- + \underbrace{[\hat{L}_z^2, \hat{L}_z]_-}_{=0} \\ &= \hat{L}_z^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_z^2 \\ &= \hat{L}_z^3 - \hat{L}_z^3 \\ &= 0 \end{aligned}$$

sowie die 2. Kommutatorregel:

$$= \hat{L}_x [\hat{L}_x, \hat{L}_z]_- + [\hat{L}_x, \hat{L}_z]_- \hat{L}_x + \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_z]_- + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]_- \hat{L}_y$$

Lösen wir die Kommutatoren auf mittels der Beziehungen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_z]_- &= -[\hat{L}_z, \hat{L}_x]_- = -i\hbar \hat{L}_y \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z]_- &= i\hbar \hat{L}_x \end{aligned}$$

so erhalten wir:

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

Der Operator  $\hat{L}^2$  vertauscht also mit den Drehimpulskomponenten.  $\square$

### Zusammenfassung

In der Klassischen Mechanik genügt es, die drei Einzelkomponenten des Drehimpulses und die Hamilton-Funktion zu kennen, um das vorliegende System beschreiben zu können. Durch die Nichtvertauschbarkeit der Einzelkomponenten in der Quantenmechanik ist dies hier nicht mehr so. Allerdings haben wir gesehen, dass es eine „Ersatzgröße“  $\hat{L}^2$  gibt, die mit den Drehimpulskomponenten und mit dem Hamilton-Operator vertauscht.

Mit  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  hat man aber drei Operatoren, deren Observable gleichzeitig scharf messbar sind. Sie ermöglichen es uns, einen (bahn-)drehimpulsbehafteten, quantenmechanischen Zustand vollständig zu beschreiben.<sup>5</sup> Dazu benötigt man ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ . Als dritter Operator wird  $\hat{L}_z$  gewählt, da er in Kugelkoordinaten einfacher ist. Wählt man, weil es sich für ein konkretes Problem anbietet, stattdessen  $\hat{L}_x$ , so ändert sich die Darstellung von  $\hat{H}$ . Das Problem selbst ist davon nicht betroffen.

<sup>5</sup>Der Spin eines Teilchens ist auch eine Art Drehimpuls, der zum quantenmechanischen Gesamtsystem gehört. Auf ihn werden wir in Kapitel 4 zu sprechen kommen. Zur Unterscheidung der verschiedenen Drehimpulse nennt man  $L$  den Bahndrehimpuls.



## 3.2 Algebraische Behandlung des Drehimpulses

### 3.2.1 Einleitung

Aus der Klassischen Mechanik kennen wir die drei Komponenten  $L_x, L_y, L_z$  des Drehimpulses, die wir in die Quantenmechanik übersetzen müssen. Als Buchstaben wählen wir  $\hat{J}$ , da wir später sehen werden, daß der Drehimpulsoperator  $\hat{J}$  in der Quantenmechanik etwas allgemeiner ist, als der aus der Klassischen Mechanik bekannte Drehimpuls  $\vec{L}$ . Der Drehimpulsoperator  $\hat{L}$  wird in der Quantenmechanik für den Bahndrehimpuls stehen.

#### Eigenschaften des $\hat{J}$ -Kommutators:

Der Kommutator des quantenmechanischen  $\hat{J}$ -Operators hat, wie im vorherigen Kapitel gezeigt, folgenden Eigenschaft<sup>6</sup>:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y]_- = i\hbar\hat{J}_z$$

Wie wir bereits bewiesen haben gilt: Wenn  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  hermitesch sind und  $[\hat{A}, \hat{B}]_- = i\hat{C}$  gilt, dann ist auch  $\hat{C}$  hermitesch<sup>7</sup>.

**Satz.** *Es gilt für alle zyklischen Permutationen der  $x, y$  und  $z$ :*

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y]_- = i\hbar\hat{J}_z.$$

Das heißt es existiert kein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{J}_i$  und  $\hat{J}_j$  mit  $i \neq j \wedge i, j \in \{x, y, z\}$  und sie sind daher nicht gleichzeitig meßbar.

#### Der Operator $\hat{J}^2$

Wir haben auch bereits den Operator  $\hat{J}^2$  im vorherigen Kapitel kennengelernt.<sup>8</sup>

#### Definition.

$$\hat{J}^2 := \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

Wobei  $[\hat{J}^2, \hat{J}_i]_- = 0$ , mit  $i \in \{x, y, z\}$  ist. Es existiert also ein gemeinsames Eigenfunktionssystem. Messen wir aber  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$ , so sind  $\hat{J}_x$  und  $\hat{J}_y$  nicht scharf definiert (meßbar).

Abbildung 3.1: Klassische Drehimpulsvektoren

<sup>6</sup>Der Faktor  $\hbar$  „korrigiert“ die Dimension.

<sup>7</sup> $i\hat{C}$  ist antihermitesch.

<sup>8</sup>Man beachte, daß der Operator  $\hat{J}$  ein Vektor ist, und dementsprechend das Quadrat als Skalarprodukt gebildet wird. Aus satztechnischen Gründen lassen wir den Vektorpfeil weg.

### 3.2.2 Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$

#### Das Eigenwertgleichungssystem

Da ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  existiert, muß Folgendes gelten:<sup>9</sup>

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |\alpha, \beta\rangle &= \hbar^2 a |\alpha, \beta\rangle \\ \hat{J}_z |\alpha, \beta\rangle &= \hbar b |\alpha, \beta\rangle.\end{aligned}\quad \text{Eigenwertgleichungen}$$

Um die Eigenwerte  $\hbar^2 a$  und  $\hbar b$  beziehungsweise  $a$  und  $b$  zu bestimmen, müssen wir ein wenig weiter ausholen, und definieren dazu zwei Operatoren<sup>10</sup>, deren Nützlichkeit sich später erweisen wird.

#### Definition.

$$\begin{aligned}\hat{J}^+ &= \hat{J}_x + i\hat{J}_y && \text{Aufsteigeoperator} \\ \hat{J}^- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y && \text{Absteigeoperator}\end{aligned}$$

#### Eigenschaften der Operatoren $\hat{J}^+$ und $\hat{J}^-$

1.  $\hat{J}^+$  adjungiert ist gleich  $\hat{J}^-$  und umgekehrt.

$$\begin{aligned}(\hat{J}^+)^\dagger &= \hat{J}_x^\dagger + (i\hat{J}_y)^\dagger \\ &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y \\ &= \hat{J}^-.\end{aligned}$$

Genauso:

$$(\hat{J}^-)^\dagger = \hat{J}^+.$$

$\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  sind nicht hermitesch.

2. Der Kommutator von  $\hat{J}_z$  und  $\hat{J}^+$ :

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

<sup>9</sup>  $|\alpha, \beta\rangle$  soll einen Zustand, der bezüglich  $\hat{J}^2$  den Eigenwert  $\hbar^2 a$  und bezüglich  $\hat{J}_z$  den Eigenwert  $\hbar b$  hat, darstellen. Diese Schreibweise definiert einen Zustand anhand seiner Eigenwerte bezüglich „interessanter“ Operatoren. Beachte: Wir wissen noch nicht, wie unsere Zustände aussehen! Wir kennen nur Eigenschaften des Zustandes, eben über ihren Erwartungswert bezüglich bestimmter Operatoren (dem Erwartungswert der Observablen).

<sup>10</sup> Unterscheidung: Plus (+) ist ein Index für den Operator, Kreuz (†) heißt adjungiert.

Analog geht die Rechnung für  $\hat{J}^-$ :

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

3. Der Kommutator von  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^2$ :

$$\begin{aligned} [\hat{J}^+, \hat{J}^2]_- &= [\hat{J}_x, \hat{J}^2]_- + i[\hat{J}_y, \hat{J}^2]_- \\ &= 0 \end{aligned}$$

Der Kommutator von  $\hat{J}^-$  und  $\hat{J}^2$ :

$$\begin{aligned} [\hat{J}^-, \hat{J}^2]_- &= [\hat{J}_x, \hat{J}^2]_- - i[\hat{J}_y, \hat{J}^2]_- \\ &= 0 \end{aligned}$$

Es gibt also jeweils ein gemeinsames Eigenfunktionssystem für  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^2$  und für  $\hat{J}^-$  und  $\hat{J}^2$ .

4. Das Produkt von  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$ :

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

Das Produkt von  $\hat{J}^-$  und  $\hat{J}^+$  berechnet sich analog:

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

### Wirkung der Operatoren $\hat{J}^+$ und $\hat{J}^-$

Die Wirkung von  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  auf Eigenzustände soll durch die folgenden Rechnungen festgestellt werden:

1. Die Wirkung von  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  auf Eigenzustände zu  $\hat{J}^2$ :

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle &= (\hat{J}^2 \hat{J}^+ + \hat{J}^+ \hat{J}^2 - \hat{J}^+ \hat{J}^2) |\alpha, \beta\rangle \\ &= ([\hat{J}^2, \hat{J}^+]_- + \hat{J}^+ \hat{J}^2) |\alpha, \beta\rangle \\ &= 0 + \hat{J}^+ \hat{J}^2 |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hat{J}^+ \hbar^2 a |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar^2 a \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle\end{aligned}$$

$\hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle$  ist also ein Eigenzustand zu  $\hat{J}^2$  mit Eigenwert  $\hbar^2 a$ . Analog bekommt man, daß  $\hat{J}^2 \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle = \hbar^2 a \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle$  ist.  $\hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{J}^2$ . Die Anwendung von  $\hat{J}^+$  oder  $\hat{J}^-$  auf einen Zustand generiert einen neuen Zustand, der jedoch denselben Eigenwert bezüglich  $\hat{J}^2$  hat wie der ursprüngliche Zustand:<sup>11</sup>

$$\hat{J}^2 |\alpha, \beta\rangle = \hbar^2 a |\alpha, \beta\rangle.$$

2. Die Wirkung von  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  auf Eigenzustände zu  $\hat{J}_z$ :

$$\begin{aligned}\hat{J}_z \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle &= \hat{J}^+ \hat{J}_z |\alpha, \beta\rangle + [\hat{J}_z, \hat{J}^+]_- |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hat{J}^+ \hbar b |\alpha, \beta\rangle + \hbar \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar(b+1) \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle\end{aligned}$$

$\hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{J}_z$  mit Eigenwert  $\hbar(b+1)$ .  
Analog:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle &= \hat{J}^- \hat{J}_z |\alpha, \beta\rangle + [\hat{J}_z, \hat{J}^-]_- |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hat{J}^- \hbar b |\alpha, \beta\rangle - \hbar \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar(b-1) \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle\end{aligned}$$

$\hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{J}_z$  mit Eigenwert  $\hbar(b-1)$ .

Abbildung 3.2: Bild zu den Eigenwerten

Ist ein Paar von Eigenwerten bekannt, so kennt man auch ein zweites Paar von Eigenwerten, da die Operatoren  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  bekannt sind. Für  $\hat{J}^+$  gilt, wenn es das Eigenwertpaar  $(a_0, b_0)$  gibt, so gibt es auch das Paar  $(a_0, b_0 + 1)$ . Genauso gilt für  $\hat{J}^-$ : Zu  $(a_0, b_0)$  gibt es das Eigenwertpaar  $(a_0, b_0 - 1)$ .<sup>12</sup>

### Eigenschaften der Eigenwerte $\hbar^2 a$ und $\hbar b$

Wir versuchen nun Eigenschaften von  $a$  und  $b$  herauszufinden und anhand dieser die Werte zu bestimmen. Damit bekommen wir auch die Zahlenpaare  $(a_0, b_0)$ ,  $(a_0, b_0 + 1)$  und  $(a_0, b_0 - 1)$ .

<sup>11</sup>Beachte die Eigenwertgleichungen auf Seite 154.

<sup>12</sup>Um präzise zu sein: Es müssen  $a$  und  $b$  noch mit  $\hbar^2$  beziehungsweise  $\hbar$  multipliziert werden, um Eigenwerte zu sein.

**Behauptung.**  $a$  ist positiv definit.

*Beweis.*  $\hbar^2 a$  ist Eigenwert zu  $\hat{J}^2$ . □

**Behauptung.**  $a \geq b^2$

*Beweis.* Aus der 4. Eigenschaft der Operatoren  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  folgt:

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

Also umgekehrt:

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

Es gelten weiterhin die zwei folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, \beta | \hat{J}^+ \hat{J}^- | \alpha, \beta \rangle &= \langle \hat{J}^- \alpha, \beta | \hat{J}^- \alpha, \beta \rangle \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Gleichheit würde nur für  $\hat{J}^- | \alpha, \beta \rangle = 0$  gelten. Aber das Skalarprodukt eines Zustandes mit sich selbst  $\langle \hat{J}^- \alpha, \beta | \hat{J}^- \alpha, \beta \rangle$  ist per Definition  $\geq 0$ .

$$\begin{aligned} \langle \alpha, \beta | \hat{J}^- \hat{J}^+ | \alpha, \beta \rangle &= \langle \hat{J}^+ \alpha, \beta | \hat{J}^+ \alpha, \beta \rangle \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Damit ist auch:

$$\frac{1}{2} \langle \alpha, \beta | \hat{J}^+ \hat{J}^- + \hat{J}^- \hat{J}^+ | \alpha, \beta \rangle \geq 0.$$

Dies läßt sich aber auch so schreiben:

$$\frac{1}{2} \langle \alpha, \beta | \hat{J}^+ \hat{J}^- + \hat{J}^- \hat{J}^+ | \alpha, \beta \rangle = \langle \alpha, \beta | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | \alpha, \beta \rangle.$$

Die Eigenwerte eingesetzt aus der Eigenwertgleichung von Seite 154 ergibt:

$$\begin{aligned} &= (\hbar^2 a - \hbar^2 b^2) \langle \alpha, \beta | \alpha, \beta \rangle \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Da

$$\langle \alpha, \beta | \alpha, \beta \rangle \geq 0$$

ist, folgt auch

$$(\hbar^2 a - \hbar^2 b^2) \geq 0$$

und damit

$$a \geq b^2.$$

□

$\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \geq 0$  bedeutet, daß die Länge (Betrag) des Drehimpulsvektors in der  $x$ - $y$ -Ebene positiv ist, denn  $\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \geq 0$ , was anschaulich vernünftig ist.

**Zusammenfassung:** Wir fassen unsere bisherigen Ergebnisse zusammen:

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |\alpha, \beta\rangle &= \hbar^2 a |\alpha, \beta\rangle \\ \hat{J}_z |\alpha, \beta\rangle &= \hbar b |\alpha, \beta\rangle \\ \hat{J}^- \hat{J}^+ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \\ \hat{J}^+ \hat{J}^- &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z \\ a &\geq b^2\end{aligned}$$

Desweiteren gilt:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle &= \hbar(b+1) \hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar(b+1)c |\alpha, \beta+1\rangle^{13}\end{aligned}$$

oder

$$\hat{J}^+ |\alpha, \beta\rangle = c |\alpha, \beta+1\rangle.$$

Analog:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle &= \hbar(b-1) \hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar(b-1)d |\alpha, \beta-1\rangle\end{aligned}$$

oder

$$\hat{J}^- |\alpha, \beta\rangle = d |\alpha, \beta-1\rangle.$$

**Bestimmung von  $a$  aus der Beschränkung von  $b$ :** Da  $\hat{J}^+$  den Eigenwert  $\hbar b$  erhöht, beziehungsweise  $\hat{J}^-$  den Eigenwert  $\hbar b$  erniedrigt, und  $a \geq b^2$  ist, gibt es eine obere Grenze  $b_{max}$ , beziehungsweise eine untere Grenze  $b_{min}$ . Dabei muß der Koeffizient  $c = 0$  für  $b_{max}$  sein, beziehungsweise  $d = 0$  für  $b_{min}$ .

**Satz.** *Es existiert ein  $b_{max}^2$ , so daß für alle  $a$ :*

$$\hat{J}^+ |\alpha, \beta_{max}\rangle = c |\alpha, \beta_{max} + 1\rangle = 0$$

*ist.*

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}\hat{J}^- \hat{J}^+ |\alpha, \beta_{max}\rangle &= 0 \\ (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) |\alpha, \beta_{max}\rangle &= 0 \\ (\hbar^2 a - \hbar^2 b_{max}^2 - \hbar^2 b_{max}) |\alpha, \beta_{max}\rangle &= 0\end{aligned}$$

---

<sup>13</sup>  $|\alpha, \beta+1\rangle$  bedeutet, daß der Zustand sich durch  $\hat{J}^+$  so ändert, daß er den Eigenwert  $b+1$  bekommt.  $|\alpha, \beta_{max}\rangle$  ist der Zustand, in dem der Eigenwert  $b = b_{max}$  noch ungleich null ist.

Da  $|\alpha, \beta_{max}\rangle \neq 0$ , folgt

$$\hbar^2 a - \hbar^2 b_{max}^2 - \hbar^2 b_{max} = 0.$$

Also

$$a = b_{max}^2 + b_{max}.$$

Analoges gilt für  $b_{min}$ :

**Satz.** *Es existiert ein  $b_{min}^2$ , so daß für alle  $a$ :*

$$\hat{J}^- |\alpha, \beta_{min}\rangle = d |\alpha, \beta_{min} - 1\rangle = 0$$

ist.

Daher:

$$\begin{aligned} \hat{J}^+ \hat{J}^- |\alpha, \beta_{min}\rangle &= 0 \\ (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z) |\alpha, \beta_{min}\rangle &= 0 \\ (\hbar^2 a - \hbar^2 b_{min}^2 + \hbar^2 b_{min}) |\alpha, \beta_{min}\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Da  $|\alpha, \beta_{min}\rangle \neq 0$  folgt

$$\hbar^2 a - \hbar^2 b_{min}^2 + \hbar^2 b_{min} = 0$$

Also

$$a = b_{min}^2 - b_{min}.$$

Die Forderungen sind offenbar symmetrisch:<sup>14</sup>

$$\begin{aligned} a &= b_{min}^2 - b_{min} \\ &= b_{min}(b_{min} - 1) \\ &= b_{max}^2 + b_{max} \\ &= b_{max}(b_{max} + 1) \end{aligned}$$

Also gilt

$$b_{min} = -b_{max}.$$

Abbildung 3.3: Eigenwerte in Parabel

<sup>14</sup>Man beachte die Schreibweise  $j(j+1)$  beziehungsweise  $j(j-1)$ . Sie wird uns noch öfter begegnen.

**Diskretisierung**

**Satz.** Bei vorgegebenen  $a$  gilt: Alle Eigenwerte lassen sich schreiben als

$$b = b_{min} + i \quad i = 0, 1, 2, \dots, n \in \mathbb{N}.$$

*Beweis.* Gäbe es ein  $b' = b_{min} + \varepsilon$  mit  $\varepsilon < 1$ , so müßte es auch ein  $b'' = b_{max} + \varepsilon$  geben, das ist aber mit dem Ergebnis  $b_{min}(b_{min} - 1) = a = b_{max}(b_{max} + 1)$  nicht verträglich. Es kann also nur mit natürlichen Zahlen erhöht werden.

Es gilt:

$$\begin{aligned} b_{max} &= b_{min} + n \\ &= -b_{max} + n \end{aligned}$$

Es gibt also immer ein  $i_{max} = n$ . □

Daraus folgt

$$\begin{aligned} b_{max} &= \frac{n}{2} \\ &= -b_{min}. \end{aligned}$$

Es gibt also  $n + 1$  Eigenwerte. Weiterhin folgt aus  $b_{max} = b_{min} + n$ , daß  $b_{max}$  nur ganzzahlig oder halbzahlig sein kann.

**Umbenennungen.** Wir machen folgende Umbenennungen:

$$j := b_{max} = \frac{n}{2},$$

dann schreibt sich  $a$  so:

$$a = j(j + 1),$$

und

$$m := b$$

Den Zustand  $|\alpha, \beta\rangle$  schreiben wir nun  $|j, m\rangle$ .

Die Eigenwertgleichungen von Seite 154 lassen sich nun umschreiben:

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j, m\rangle.$$

$\hbar^2 j(j + 1)$  stellt den Eigenwert zum Quadrat des Längenoperators dar. Er hat daher die Dimension einer Länge zum Quadrat.

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \quad m = \{-j, -j + 1, \dots, +j - 1, +j\}$$

Die  $\hbar m$  sind Eigenwerte des Drehimpulses zur  $z$ -Koordinate. Der jeweilige Eigenwert  $\hbar m$  stellt die Projektion der Observablen auf die  $z$ -Achse dar.  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  ändern nicht die Länge, sondern die Projektion auf die  $z$ -Achse, generieren also eine Umorientierung der Observablen.

Die gefundenen Beziehungen sind allgemein hergeleitet, das heißt sie gelten nicht nur für die Drehimpulse  $L_{x,y,z}$ , sondern können auch für andere Operatoren gelten.



**Eigenwerte zu  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$ .** Wir berechnen noch die Faktoren  $c$  und  $d$ .<sup>15</sup>

**Satz.** Sei  $|j, m\rangle$  normiert<sup>16</sup>, das heißt  $\langle j, m | j, m \rangle = 1$ , dann gilt

$$\hat{J}^+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle$$

und

$$\hat{J}^- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle.$$

Die Wurzelausdrücke nennt man auch Normierungsfaktoren.<sup>17</sup>

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned} |\hat{J}^+ |j, m\rangle|^2 &= |c |j, m+1\rangle|^2 \\ &= |c|^2 \underbrace{\langle j, m+1 | j, m+1 \rangle}_{\text{auf 1 normiert}} \\ &= |c|^2 \end{aligned}$$

genauso gilt

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}^+ j, m | \hat{J}^+ j, m \rangle &= \langle j, m | \hat{J}^- \hat{J}^+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \underbrace{\langle j, m | j, m \rangle}_{=1} \end{aligned}$$

Es ist also

$$\begin{aligned} |c|^2 &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \\ c &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m^2 - m} \\ &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \end{aligned}$$

Analog berechnet sich der Faktor für  $\hat{J}^-$ .

Wir überprüfen noch kurz, ob dieser Faktor  $c$  null erzeugt, damit  $j(j+1) \geq m^2$  gilt<sup>18</sup>. Dafür multiplizieren wir den Wurzel Ausdruck aus:

$$c = \hbar \sqrt{j^2 + jm + j - jm - m^2 - m}$$

und setzen  $b_{max} = m_{max} = j$  ein.

$$\begin{aligned} &= \hbar \sqrt{j^2 + jj + j - jj - j^2 - j} \\ &= 0 \end{aligned}$$

<sup>15</sup>Vergleiche auch mit [Fließbach, S. 275-282].

<sup>16</sup>Und entsprechend  $|j, m-1\rangle$  und  $|j, m+1\rangle$ .

<sup>17</sup>Die Operatoren  $\hat{J}^+$  und  $\hat{J}^-$  nennt man, wie schon  $\hat{b}^\dagger$  und  $\hat{b}$ , Aufsteige- und Absteigeoperator.

<sup>18</sup>Zur Erinnerung:  $a \geq b^2$ .

Also

$$\hat{J}^+ |j, m = j\rangle = 0$$

$\hat{J}^+$  angewandt auf den maximalen Zustand  $|j, m = j\rangle$  sollte ja null liefern.  $\square$

$j$  kann die Werte  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$  annehmen. Bezüglich  $\hat{J}_z$  gibt es für ein  $j$  verschiedene Eigenwerte  $-\hbar^2 j, \dots, +\hbar^2 j$ . Wählen wir zum Beispiel  $j = 1$ , dann gibt es die Zustände  $\hat{J}_z |1, m\rangle$  mit  $m = -1, 0, 1$ .

Abbildung 3.4:  $j$  gegen  $m$  abgetragen

Wir erhalten ein „Netz“ der erlaubten Werte für die Paare  $(a, b)$  beziehungsweise jetzt  $(j, m)$ . Wir werden später sehen, daß Bahndrehimpulse nur ganzzahlige Werte annehmen können. Die Mathematik liefert uns aber auch halbzahlige Lösungen, die historisch Kopfschmerzen gemacht haben. Es wird sich aber herausstellen, daß es etwas Physikalisches gibt, das die halbzahligen Werte annimmt: „Spin“. Dieser Spin ist ein klassisch unbekannter Effekt, der aber ähnliche Eigenschaften wie ein klassischer Drehimpuls hat.<sup>19</sup> Für den Bahndrehimpuls ist  $j$  ganzzahlig.

---

<sup>19</sup>Näheres in Kapitel 4.

### 3.3 Drehimpuls in Ortsdarstellung

#### 3.3.1 Einleitung

Der Drehimpuls ist, wie folgt definiert:

$$\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}.$$

Dementsprechend sieht der Drehimpulsoperator aus:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} &= \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \\ &= \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z & - & \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x & - & \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y & - & \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Kommutatoren haben wir bereits berechnet:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y]_- &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_z]_- &= [\hat{L}^2, \hat{L}_x]_- = 0. \end{aligned}$$

Die Eigenwertgleichungen haben wir im vorherigen Kapitel behandelt:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \text{ mit } l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \text{ und } m = -l, -l+1, \dots, +l. \end{aligned}$$

Wir suchen jetzt einen Satz von Operatoren für eine spezielle Darstellung und zwar für die Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten. Diese Operatoren müssen natürlich die obigen Eigenschaften haben.<sup>20</sup> Wir wollen also wissen, wie der Bahndrehimpulsoperator  $\hat{\vec{L}}$  und der Zustand  $|l, m\rangle$  in Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten aussieht.

Der Drehimpuls hat oft mit rotationssymmetrischen Problemen zu tun, deshalb übersetzen wir  $\hat{\vec{L}}$  in Kugelkoordinaten:

Abbildung 3.5: Koordinatensystem

<sup>20</sup>Für den Bahndrehimpuls wählen wir den Buchstaben  $L$  statt des allgemeinen  $J$ . Beachte: Die allgemeinen Formulierungen der Beziehungen sind unabhängig von der speziellen Darstellungsart (Basis).

**Kugelkoordinaten:** Der Vektor  $\vec{r}$  schreibt sich:<sup>21</sup>

$$\begin{aligned}\vec{r} &= \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z\end{aligned}$$

wobei

$$\vec{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

der Einheitsvektor in  $x$ -Richtung ist.

Es folgen die Transformationsgleichungen um einen Vektor, von dem die Kugelkoordinaten bekannt sind, in kartesischen Koordinaten anzugeben:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta,\end{aligned}$$

wobei  $r \in [0, \infty[$  die Länge des Vektors,  $\vartheta \in [0, \pi[$  der Winkel zur  $z$ -Achse und  $\varphi \in [0, 2\pi[$  der Winkel zur  $x$ -Achse in der  $x$ - $y$ -Ebene ist.

Der Einheitsvektor  $\vec{e}_i$  der Kugelkoordinaten in kartesischen Koordinaten ergibt sich, wenn man in  $i$ -Richtung geht. Daher benutzen wir die partielle Ableitung, um den Einheitsvektor  $\vec{e}_i$  zu bestimmen:

$$\begin{aligned}\vec{e}_r &= N \frac{\partial \vec{r}}{\partial r} \\ &= N \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Für den Einheitsvektor wird gefordert  $|\vec{e}_r|^2 = 1$ . Daraus folgt, daß

$$1 = N^2(\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi + \cos^2 \vartheta)$$

ist. Da der Inhalt der runden Klammern gleich eins ist, ist die Normierungskonstante  $N = 1$  für  $\vec{e}_r$ .

$$\begin{aligned}\vec{e}_\vartheta &= N \frac{\partial \vec{r}}{\partial \vartheta} \\ &= Nr \begin{pmatrix} \cos \vartheta \cos \varphi \\ \cos \vartheta \sin \varphi \\ -\sin \vartheta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

---

<sup>21</sup>Den Einheitsvektoren  $\vec{e}_i$  geben wir kein Dach, da diese Kennzeichnung den Operatoren vorbehalten sein soll. Da es keinen anderen Vektor gibt der  $e$  heißt, kann es nicht zu Verwechslungen kommen.

Für  $\vec{e}_\vartheta$  ist  $N = \frac{1}{r}$ .

$$\begin{aligned}\vec{e}_\varphi &= N \frac{\partial \vec{r}}{\partial \varphi} \\ &= Nr \sin \vartheta \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Für  $\vec{e}_\varphi$  ist  $N = \frac{1}{r \sin \vartheta}$ .

Der Nabla-Operator schreibt sich  $\vec{\nabla} = \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \partial_\vartheta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \partial_\varphi$ .

### 3.3.2 $\hat{\vec{L}}$ in Kugelkoordinaten

Wir legen das Kugelkoordinatensystem so, daß der Vektor  $\vec{r}$  ausschließlich in  $r$ -Richtung  $\vec{r} = r\vec{e}_r (+0\vec{e}_\vartheta + 0\vec{e}_\varphi)$  zeigt. Dann erhalten wir den Drehimpulsoperatorvektor in Kugelkoordinaten.

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}} &= \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} \\ &= \frac{\hbar}{i} \vec{e}_r r \times \left( \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \partial_\vartheta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \partial_\varphi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( r \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_r}_{=0} \partial_r + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\vartheta}_{\vec{e}_\varphi} \frac{r}{r} \partial_\vartheta + \underbrace{\vec{e}_r \times \vec{e}_\varphi}_{-\vec{e}_\vartheta} \frac{r}{r \sin \vartheta} \partial_\varphi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( \vec{e}_\varphi \partial_\vartheta - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \partial_\vartheta - \cos \vartheta \cos \varphi \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \\ \cos \varphi \partial_\vartheta - \cos \vartheta \sin \varphi \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \\ 0 + \sin \vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \end{pmatrix} \quad \text{Drehimpulsoperatorvektor}\end{aligned}$$

Daraus folgt:  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi$ . Die Ausdrücke für  $\hat{L}_x$  beziehungsweise  $\hat{L}_y$  sind komplexer und daher wählt man  $\hat{L}_z$  als betrachtete Komponente des Drehimpulses.

$\hat{L}^2$  wird wie folgt berechnet:<sup>22</sup>

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \vec{e}_\varphi \partial_\vartheta \vec{e}_\varphi \partial_\vartheta - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \vec{e}_\varphi \partial_\vartheta - \vec{e}_\varphi \partial_\vartheta \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi \right)$$

<sup>22</sup>Wie im vorherigen Abschnitt schon erwähnt, verzichten wir auf den Vektorpfeil von  $\hat{L}^2$ . Das Quadrat von  $\hat{\vec{L}}$  wird als Skalarprodukt gebildet.

Mit

$$\begin{aligned} \partial_\vartheta \vec{e}_\varphi &= 0 \\ \partial_\varphi \vec{e}_\varphi &= \begin{pmatrix} -\cos \varphi \\ -\sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \\ \partial_\vartheta \vec{e}_\vartheta &= \begin{pmatrix} -\sin \vartheta \cos \varphi \\ -\sin \vartheta \sin \varphi \\ -\cos \vartheta \end{pmatrix} \\ \partial_\varphi \vec{e}_\vartheta &= \begin{pmatrix} -\cos \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left( \underbrace{\vec{e}_\varphi (\underbrace{\partial_\vartheta \vec{e}_\varphi}_{=0}) \partial_\vartheta + \vec{e}_\varphi \vec{e}_\varphi (\underbrace{\partial_\vartheta^2}_{=1})}_{\text{Produktregel}} - \frac{1}{\sin \vartheta} \underbrace{\vec{e}_\vartheta (\underbrace{\partial_\varphi \vec{e}_\varphi}_{=-\cos \vartheta}) \partial_\vartheta - \vec{e}_\vartheta \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin \vartheta} (\partial_\varphi \partial_\vartheta)}_{\text{Produktregel}} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{\vec{e}_\varphi (\underbrace{\partial_\vartheta \hat{e}_\vartheta}_{=0}) \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi - \vec{e}_\varphi \vec{e}_\vartheta (\underbrace{\partial_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta}}_{=0}) \partial_\varphi - \vec{e}_\varphi \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} (\partial_\vartheta \partial_\varphi)}_{\text{mehrfache Produktregel}} \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\frac{1}{\sin \vartheta} \vec{e}_\vartheta (\underbrace{\partial_\varphi \hat{e}_\vartheta}_{=0}) \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\varphi + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \vec{e}_\vartheta (\underbrace{\partial_\varphi \frac{1}{\sin \vartheta}}_{=0}) \partial_\varphi + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \hat{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} (\partial_\varphi^2)}_{\text{mehrfache Produktregel}} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \partial_\vartheta^2 + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \partial_\vartheta + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial^2 \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \underbrace{\frac{1}{\sin \vartheta} \partial_\vartheta \sin \vartheta \partial_\vartheta}_{\text{Umkehrung der Produktregel}} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial_\varphi^2 \right) \end{aligned}$$

Den Drehimpulsoperator haben wir jetzt in Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten.

### 3.3.3 Berechnung der Kugelflächenfunktionen

Wir suchen nun die Zustände in der Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten. Die Drehimpulseigenschaften hängen nicht von  $r$  ab! Daher kann man die Eigenschaften des Drehimpulses auf eine Kugeloberfläche beliebigen Radiuses projizieren, wobei die Kugelflächenfunktionen zur Beschreibung benutzt werden. Diese sind durch die Angabe von nur zwei Winkeln bestimmt.

Wir bestimmen nun die Kugelflächenfunktionen, dazu benutzen wir die allgemeinen Eigenwertgleichungen:

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

und definieren die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$ :

**Definition.**

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) := \langle \vartheta, \varphi | l, m \rangle,$$

wobei  $l, m$  die Eigenwerte zu  $\hat{L}_z, \hat{L}^2$  sind.<sup>23</sup>

**Bestimmung von  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$**

Wir lösen nun die zur Eigenwertgleichung korrespondierende Differentialgleichung in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \\ \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \end{aligned}$$

Wir machen den Separationsansatz

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \quad \text{Ansatz}$$

und setzen ihn ein

$$\frac{\hbar}{i} \partial_\varphi \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} = \hbar m \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi}.$$

Offenbar löst er die Differentialgleichung, denn

$$\frac{\hbar}{i} \chi_{lm}(\vartheta) im e^{im\varphi} = \hbar m \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi}.$$

**Behauptung.**  $m$  ist ganzzahlig.

*Beweis.* Wegen der Eindeutigkeit der Lösung muß  $Y_{lm}$   $2\pi$ -periodisch bezüglich  $\varphi$  sein, also:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi) &= Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ &= Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 4\pi). \end{aligned}$$

Wir setzen diese Symmetriebedingung ein

$$\begin{aligned} \chi_{lm}(\vartheta) e^{im(\varphi+2\pi)} &= \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} e^{i2\pi m} \\ &= \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \end{aligned}$$

Es gilt also die Bedingung

$$e^{i2\pi m} = 1$$

Hieraus folgt, daß  $m$  ganzzahlig ist. Da  $m = -l, \dots, +l$  ist, folgt daraus auch, daß  $l$  ganzzahlig ist.  $\square$

**Satz.**  $m$  und  $l$  sind ganzzahlig.

Mögliche Werte für  $|l, m\rangle$  sind:

$$\underline{|0, 0\rangle; |1, -1\rangle; |1, 0\rangle; |1, 1\rangle; |2, -2\rangle; |2, -1\rangle; |2, 0\rangle; |2, 1\rangle; |2, 2\rangle}.$$

<sup>23</sup>Das heißt: Wir projizieren den Zustand  $|l, m\rangle$  auf die Einheitsvektoren  $\vec{e}_\vartheta$  und  $\vec{e}_\varphi$ ; wir benutzen  $\vec{e}_\vartheta$  und  $\vec{e}_\varphi$  als Basis der Darstellung.

**Bestimmung von  $\chi_{lm}(\vartheta)$  - Legendre-Polynome  $P_{lm}(\xi)$** 

$\chi_{lm}(\vartheta)$  beinhaltet die Information über die  $\vartheta$ -Abhängigkeit.  
Wir benutzen die Eigenwertgleichung

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

und setzen den Drehimpulsoperator in Kugelkoordinaten und den obigen Ansatz ein:

$$\begin{aligned} &= -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_{\vartheta} \sin \vartheta \partial_{\vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial_{\varphi}^2 \right) \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ &= -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_{\vartheta} \sin \vartheta \partial_{\vartheta} \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ &\quad - \hbar^2 \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial_{\varphi}^2 \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ \hbar^2 l(l+1) \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} &= -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_{\vartheta} \sin \vartheta \partial_{\vartheta} \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ &\quad - \hbar^2 \frac{1}{\sin^2 \vartheta} (-m^2) \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ \hbar^2 l(l+1) \chi_{lm}(\vartheta) &= -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_{\vartheta} \sin \vartheta \partial_{\vartheta} \chi_{lm}(\vartheta) \\ &\quad - \hbar^2 \frac{1}{\sin^2 \vartheta} (-m^2) \chi_{lm}(\vartheta) \\ \hbar^2 \left( l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \chi_{lm}(\vartheta) &= -\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \partial_{\vartheta} \sin \vartheta \partial_{\vartheta} \chi_{lm}(\vartheta) \end{aligned}$$

Um diese Differentialgleichung in eine handhabbarere Form zu bringen definieren wir:

**Definition.**

$$\xi := \cos \vartheta,$$

daraus folgt für die Ableitung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vartheta} &= \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ &= -\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \xi}. \end{aligned}$$

**Definition.**

$$\chi_{lm}(\vartheta) := P_{lm}(\xi)$$

Die Lösungen  $P_{lm}(\xi)$  der Differentialgleichung nennt man Legendre-Polynome.

Die rechte Seite der obigen Differentialgleichung schreibt sich dann folgendermaßen:

$$-\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} (-\sin \vartheta) \frac{\partial}{\partial \xi} \sin \vartheta (-\sin \vartheta) \frac{\partial}{\partial \xi} P_{lm}(\xi)$$



wobei

$$\begin{aligned}\sin \vartheta(-\sin \vartheta) &= -\sin^2 \vartheta \\ &= -(1 - \cos^2 \vartheta) \\ &= -(1 - \xi^2)\end{aligned}$$

ist. Damit kann man die gesamte Differentialgleichung so schreiben:

$$\hbar^2 \left( l(l+1) - \frac{m^2}{(1-\xi^2)} \right) P_{lm}(\xi) = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} P_{lm}(\xi)$$

Nun kann man die Differentialgleichung für die  $P_{lm}(\xi)$  lösen. Wir kennen immer noch nicht unsere Zustände (Wellenfunktionen). Wir wissen nur wie sie sich bezüglich gewisser Operatoren verhalten. Die Differentialgleichung für  $\chi_{lm}(\vartheta)$  beziehungsweise  $P_{lm}(\xi)$  führt uns auf die Lösung von  $|l, m\rangle$ .

### Bestimmung der Legendre-Polynome $P_{lm}$

Zunächst betrachten wir  $m=0$ .

Dann schreibt sich unsere Differentialgleichung so:

$$\begin{aligned}\hbar^2 \left( \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi}}_A + \underbrace{l(l+1)}_B \right) P_{l0}(\xi) &= 0 \\ \hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} + l(l+1) \right) P_{l0}(-\xi) &= 0\end{aligned}$$

Wir können  $\xi$  durch  $-\xi$  ersetzen, denn wenn  $P_{l0}(\xi)$  eine Lösung ist, dann ist auch  $P_{l0}(-\xi)$  eine Lösung.

Wir machen nun einen Potenzreihenansatz:

$$P_{l0}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k.$$

Damit ergibt sich die Ableitung:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} P_{l0}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1}.$$

$P_{l0}$  hat gute Parität. Daraus folgt, daß es entweder nur gerade  $k$  (positive Parität) oder nur ungerade  $k$  (negative Parität) gibt.

Der rechte Teil des Terms A unserer Differentialgleichung schreibt sich mit dem Ansatz so:

$$\begin{aligned}(1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} P_{l0}(\xi) &= 1 \frac{\partial}{\partial \xi} P_{l0}(\xi) - (\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} P_{l0}(\xi) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} - (\xi^2) \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (k a_k \xi^{k-1} - k a_k \xi^{k+1}).\end{aligned}$$

Nun der gesamte Term A:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \xi}(1 - \xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} P_{l0}(\xi) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \sum_{k=0}^{\infty} (k a_k \xi^{k-1} - k a_k \xi^{k+1}) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (k(k-1) a_k \xi^{k-2} - k(k+1) a_k \xi^k).\end{aligned}$$

Umindizierung  $k = k - 2$ :

$$= \sum_{k=-2}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k - \sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) a_k \xi^k.$$

Da  $k = -2$  und  $k = -1$  keine Beiträge liefern:<sup>24</sup>

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k - \sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) a_k \xi^k.$$

Der Term B der Differentialgleichung schreibt sich mit dem Ansatz so:

$$l(l+1) P_{l0} = l(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k.$$

Die Differentialgleichung nun komplett mit Ansatz ausgeschrieben:

$$-l(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k - \sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) a_k \xi^k.$$

Potenzvergleich und anschließend durch  $\xi^k$  geteilt

$$-l(l+1) a_k = (k+2)(k+1) a_{k+2} - k(k+1) a_k$$

und umformen

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - l(l+1)}{(k+2)(k+1)} a_k.$$

Dies ist eine Rekursionsformel zur Bestimmung der  $a_k$ , die bei  $k = l$  abbricht, und somit lassen sich die  $P_{l0}(\xi) = \sum_k^l a_k \xi^k$  bestimmen. Die  $P_{l0}(\cos \vartheta)$  heißen Legendre-Polynome und sind Polynome vom Grad  $l$ . Die Koeffizienten der Potenzreihe sind durch  $P_{l0}(\xi) = \sum_k^l a_k \xi^k$  eindeutig bestimmt bis auf eine Konstante  $a_k$  (ein Faktor ändert nichts am Zustand als Eigenfunktion). Die Normierung liefert dieses erste  $a_k$ . Mit mühsamer Rechnerei kann man die Lösung herleiten. Normalerweise schaut man in Tabellen nach.

Wir haben nun alles, um die konkreten Kugelflächenfunktionen zu berechnen.

<sup>24</sup>Es verschwindet jeweils ein Term. Daher kann man  $k$  von null starten lassen.

### 3.3.4 Beispiele

Wir berechnen die Kugelflächenfunktionen mit Hilfe der Legendre-Polynome.

Zur Erinnerung:

$$P_{l0}(\xi) = \sum_{k=0}^l a_k \xi^k.$$

**Beispiel.** Betrachten wir zuerst die geraden Lösungen:

$l = 0$ :

$$\begin{aligned} P_{00}(\xi) &= a_0 \xi^0 \\ &= a_0 \cos^0 \vartheta \\ &= a_0 \end{aligned}$$

$l = 2$ :

Benutzen wir die Rekursionsformel (mit  $k = 0$ )

$$a_2 = \frac{0 - 6}{2} a_0$$

dann ergibt sich

$$\begin{aligned} P_{20}(\xi) &= a_0(\xi^0 - 3\xi^2) \\ &= a_0(1 - 3\cos^2 \vartheta). \end{aligned}$$

Ebenso für  $l = 4$ .

Zur Bestimmung von  $a_0$  siehe noch später!

Betrachten wir nun die ungeraden Lösungen:

$l = 1$ :

$$P_{10} = a_1 \xi^1$$

$l = 3$ :

$$\begin{aligned} P_{30} &= a_1 \left( \xi^1 + \frac{2 - 12}{6} \xi^3 \right) \\ &= a_1 \left( \xi - \frac{5}{3} \xi^3 \right) \end{aligned}$$

und so weiter.

#### Bestimmung der $Y_{lm}$ für $m = 0$

Wir wollten unsere  $Y_{lm}$  bestimmen:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \chi_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} \\ &= P_{lm}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \\ &= P_{lm}(\xi) e^{im\varphi} \end{aligned}$$

Für  $Y_{10}$  haben wir Lösungen gefunden. Allerdings müssen wir noch, um den Startwert  $a_0$ , beziehungsweise  $a_1$ , der Rekursionsgleichung zu bestimmen, die Normierung einarbeiten. Wir berechnen beispielhaft  $Y_{10}$ .

$$\begin{aligned} Y_{10} &= a_1 \cos \vartheta e^{im\varphi} \\ &= a_1 \cos \vartheta \end{aligned}$$

Um  $a_1$  zu bestimmen, fordern wir folgende Normierung:

$$\begin{aligned} \langle Y_{10} | Y_{10} \rangle &= 1 \\ &= |a_1|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \underbrace{\sin \vartheta d\vartheta}_{=d(\cos \vartheta)} \Big|_{-1}^1 d\phi \\ &= |a_1|^2 2\pi \int_{-1}^1 \cos^2 \vartheta d(\cos \vartheta) \\ &= |a_1|^2 2\pi \frac{1}{3} x^3 \Big|_{-1}^1 \\ &= 2\pi |a_1|^2 \left( \frac{1}{3} - \left(-\frac{1}{3}\right) \right) \\ 1 &= 2\pi |a_1|^2 \frac{2}{3} \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} |a_1|^2 &= \frac{3}{4\pi} \\ a_1 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}. \end{aligned}$$

So läßt sich für jedes  $Y_{lm}$  die Konstante aus der Normierungsbedingung bestimmen.

### Bestimmung der $Y_{lm}$ für $m \neq 0$

Dies geht mit Hilfe des  $\hat{L}^+$ -Operators:

$$\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

$Y_{11}$  bestimmt man somit aus  $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$ .

$$\begin{aligned} \hat{L}^+ |l, m\rangle &= a \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle \\ \hat{L}^+ |1, 0\rangle &= \hbar \sqrt{1 \cdot 2} |1, 1\rangle \end{aligned}$$

Wenn wir den Zustand  $Y_{10}$  und den Operator<sup>25</sup>  $\hat{L}^+$  in die letzte Gleichung einsetzen erhalten wir:

$$\hbar \sqrt{2} Y_{11} = \left( \frac{\hbar}{i} (-\sin \varphi \partial_\vartheta - \cot \vartheta \cos \varphi \partial_\varphi) + i \frac{\hbar}{i} (\cos \varphi \partial_\vartheta - \cot \vartheta \sin \varphi \partial_\varphi) \right) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

<sup>25</sup> Aus der Gleichung für den Aufsteigeoperator  $\hat{L}^+$  auf Seite 154 und umgeformt mit Hilfe von  $\hat{L}$  auf Seite 165.

Ableitungen bilden:

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left( +\frac{\hbar}{i} \sin \vartheta \sin \varphi + \hbar \cos \varphi (-) \sin \vartheta \right) \\
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left( +\frac{\hbar i}{ii} \sin \vartheta \sin \varphi - \hbar \cos \varphi \sin \vartheta \right) \\
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left( -\hbar i \sin \vartheta \sin \varphi - \hbar \cos \varphi \sin \vartheta \right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left( \hbar i \sin \vartheta \sin \varphi + \hbar \cos \varphi \sin \vartheta \right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hbar \sin \vartheta (i \sin \varphi + \cos \varphi) \\
\hbar \sqrt{2} Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hbar \sin \vartheta e^{i\varphi}
\end{aligned}$$

Also schließlich

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}.$$

Die  $Y_{lm}$  schaut man gewöhnlich in Tabellen nach oder benutzt das Programm Mathematica oder dergleichen. Wir haben aber zumindest gezeigt, daß die Werte nicht vom Himmel fallen.

### 3.3.5 Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

Wir nennen einige Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen.<sup>26</sup>

1. Die Kugelflächenfunktionen sind für Vektoren  $\vec{r}(r, \vartheta, \varphi)$  definiert. Man betrachtet allerdings nur die  $\varphi$ -,  $\vartheta$ -Abhängigkeit auf der Einheitskugel mit  $r = 1$ . Die Kugelflächenfunktionen liefern für jeden Ort  $(\vartheta, \varphi)$  auf der Einheitskugel einen Zahlenwert.

2. **Definition.** *Kugelflächenfunktionen*<sup>27</sup>:

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

(Die  $P_{lm}(\vartheta)$  heißen auch *assoziierte Legendre-Polynome*.)

3. **Behauptung.** Die Kugelfunktionen  $Y_{lm}$  sind normiert:

$$\int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 d\varphi d(\cos \vartheta) = 1.$$

<sup>26</sup>Siehe auch [Flickebach, S. 177-179] und [Messiah-1, S. 445-447].

<sup>27</sup>Man spricht auch verkürzt von den Kugelfunktionen.

4. **Behauptung.** Die Kugelfunktionen sind orthogonal zueinander:

$$\langle l, m | l' m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} = \iint Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\varphi d(\cos \vartheta).$$

5. **Behauptung.** Die Kugelfunktionen  $Y_{lm}$  sind Eigenfunktionen zu  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ .<sup>28</sup>

6. **Behauptung.** Die Kugelfunktionen  $Y_{lm}$  bilden eine vollständige Basis für Funktionen auf einer Kugeloberfläche:

Also kann man die Funktion  $\psi(\vartheta, \varphi)$  so darstellen:

$$\psi(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

in Ket-Schreibweise:

$$|\psi\rangle = \sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m | \psi \rangle.$$

Die Kugelfunktionen  $Y_{lm}$  oder Eigenzustände  $|l, m\rangle$  bilden eine Basis. Den Wert von  $\psi$  an der Stelle  $(\vartheta, \varphi)$  bekommt man also so:

$$\begin{aligned} \langle \vartheta, \varphi | \psi \rangle &= \sum_{l,m} \langle \vartheta, \varphi | l, m \rangle \langle l, m | \psi \rangle \\ &= \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ &= \iint Y_{lm}^* \psi(\vartheta, \varphi) d\varphi d(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Jede Funktion läßt sich als Linearkombination der  $Y_{lm}$  schreiben, so wie sich jeder Vektor aus  $\mathbb{R}^3$  als Linearkombination von  $x, y, z$  schreiben läßt.

**Beispiel.**  $\psi$  sei eine beliebige Funktion, die auf einer Kugeloberfläche definiert ist. Zum Beispiel die Erdoberfläche und  $\psi$  stellt die Temperatur am Ort  $(\vartheta, \varphi)$  der Erdoberfläche dar.<sup>29</sup>

<sup>28</sup>So haben wir sie ja schließlich konstruiert!

<sup>29</sup>Eine alternative Betrachtungsweise wäre diesen Wert als die Länge eines Vektors zu interpretieren.

## 3.4 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für das Zentralfeld

### 3.4.1 Einleitung

Ein Zentralfeldpotential  $V$  ist eine Funktion des Abstands  $|\vec{r}|$  (z.B. Gravitationsfeld).

In der Klassischen Mechanik gilt: Ist  $V = V(|\vec{r}|)$ , dann ist der Drehimpuls  $\vec{L}$  eine Erhaltungsgröße. Anders ausgedrückt:

$$\frac{dL_i}{dt} = \frac{\partial L_i}{\partial t} + \{L_i, H\} = 0,$$

wobei  $\{L_i, H\}$  die Poisson-Klammer darstellt.

Wegen der Korrespondenz der Quantenmechanik zur Klassischen Mechanik muß der zur Poisson-Klammer gehörige Kommutator gleich null sein, wenn die Poisson-Klammer gleich null ist.<sup>30</sup>

### 3.4.2 Die Kommutatoren von $\hat{L}^2$ , $\hat{L}_z$ mit $\hat{H}$

Wir wollen zeigen, daß der Kommutator von  $\hat{L}^2$  beziehungsweise  $\hat{L}_z$  mit  $\hat{H}$  tatsächlich verschwindet, daß also ein gemeinsames Eigenfunktionssystem existiert.

*Beweis.* Im Abschnitt 3.1.2 haben wir gefordert:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z]_- = 0.$$

Wie wir bereits auf Seite 152 gezeigt haben gilt:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z]_- = 0.$$

Bleibt noch zu zeigen:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}^2]_- &= [\hat{H}, \hat{L}_x^2]_- + [\hat{H}, \hat{L}_y^2]_- + [\hat{H}, \hat{L}_z^2]_- \\ &= [\hat{H}, \hat{L}_x]_- \hat{L}_x + \hat{L}_x [\hat{H}, \hat{L}_x]_- \\ &\quad + [\hat{H}, \hat{L}_y]_- \hat{L}_y + \hat{L}_y [\hat{H}, \hat{L}_y]_- \\ &\quad + [\hat{H}, \hat{L}_z]_- \hat{L}_z + \hat{L}_z [\hat{H}, \hat{L}_z]_- \end{aligned}$$

Da  $[\hat{H}, \hat{L}_i]_- = 0$  ist, folgt:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2]_- = 0$$

□

<sup>30</sup>Siehe auch im Abschnitt 2.4.2 auf Seite 123, wo wir den Zusammenhang zwischen Poisson-Klammer und Kommutator ausführlich behandelt haben.

### 3.4.3 Die Lösungsfunktionen $\psi_{Elm}$ im Zentralfeld

Wie sieht die Eigenfunktion  $\psi_{Elm}$  in Ortsdarstellung aus? Dafür benötigen wir im Folgenden diese Eigenwertgleichungen:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{Elm} &= E\psi_{Elm} \\ \hat{L}^2\psi_{Elm} &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{Elm} \\ \hat{L}_z\psi_{Elm} &= \hbar m\psi_{Elm}\end{aligned}$$

Wir benutzen wieder die Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten.

Wie wir im vorherigen Kapitel gesehen haben, kann man ein beliebige Funktion auf der Kugeloberfläche durch die Kugelflächenfunktionen<sup>31</sup> darstellen:  $f(\vartheta, \varphi) = \sum_{lm} a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ .<sup>32</sup> Eine beliebige Funktion  $f$ , die in  $\mathbb{R}^3$  definiert ist, kann man als Linearkombination der Kugelflächenfunktionen mit ortsabhängigen Entwicklungskoeffizienten  $R_{lm}(r)$  schreiben:

$$f(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l,m} R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Um die gesuchte Wellenfunktion zu finden machen wir also den Ansatz:

$$\psi_{Elm}(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l',m'} R_{l'm'}(r) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi).$$

Damit  $\psi_{Elm}$  Eigenfunktion zu  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  ist, muß die Summe zusammenbrechen.<sup>33</sup>

$$\psi_{Elm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{Elm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Das heißt, daß beim Zentralfeld nur ein Term der obigen Summe übrig bleibt.

#### Bestimmung der $R_{Elm}(r)$

Wir bestimmen nun die  $R_{Elm}(r)$  und betrachten dazu den Hamilton-Operator in Ortsdarstellung.<sup>34</sup> Der Laplace-Operator lautet:

$$\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2.$$

Dieser ist allerdings noch in kartesischen Koordinaten. Da unser Potential sich am einfachsten in Kugelkoordinaten darstellen läßt, formen wir ihn in Kugelkoordinaten um:

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r + \frac{1}{r^2} \left( -\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r - \frac{1}{r^2} \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}.\end{aligned}$$

<sup>31</sup>Die  $Y_{lm}$  bilden ein vollständiges Basissystem für Funktionen auf der Kugeloberfläche.

<sup>32</sup>Man wählt meist ein festes  $r$  (gewöhnlich gleich eins) und weist dem Ort  $(\vartheta, \varphi)$  einen Wert zu. Dieser Wert kann dann z.B. eine Temperatur sein. Wenn die Entwicklungskoeffizienten  $a_{lm}$  Funktionen von  $r$  sind ( $R_{lm}(r)$ ), dann kann man sogar dem ganzen Raum Werte zuweisen.

<sup>33</sup>Wenn  $\psi$  eine Eigenfunktion zu  $\hat{L}^2$  ist, so ist sie ein Zustand zu nur einer Quantenzahl  $l$ . Als Eigenfunktion zu  $\hat{L}_z$  ist sie auch ein Eigenzustand zu nur einer Quantenzahl  $m_l$ .

<sup>34</sup>Vergleiche auch mit [Fliekbach, S. 180-186].



Damit lautet der Hamilton-Operator:<sup>35</sup>

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + \hat{V}(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + \hat{V}(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + \hat{V}(r).\end{aligned}$$

Wenn  $\hat{V}(r, \vartheta, \varphi)$  gilt, dann steckt die ganze Winkelabhängigkeit von  $\hat{H}$  in  $\hat{L}^2$ . Den Hamilton-Operator und unseren Ansatz in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{Elm} &= E\psi_{Elm} \\ \hat{H}R_{Elm}Y_{lm} &= ER_{Elm}Y_{lm} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + \hat{V}(r)\right)R_{Elm}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= ER_{Elm}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi).\end{aligned}$$

Der linke Term wirkt nur auf  $R_{Elm}(r)$ , während der rechte Term nur auf die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  wirkt.  $\hat{L}^2 Y_{lm}$  kennen wir schon:  $Y_{lm}$  ist Eigenfunktion zu  $\hat{L}^2$  und damit können wir den Eigenwert  $\hbar^2 l(l+1)$  einsetzen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \hat{V}(r)\right)R_{Elm}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = ER_{Elm}Y_{lm}.$$

Damit steckt der gesamte Winkelanteil in den Kugelflächenfunktionen. Der Hamilton-Operator ist unabhängig von  $m$ ; oder anders formuliert: die Quantenzahl  $m$  taucht zwar in den  $Y_{lm}$  auf, aber nicht im Hamilton-Operator, deswegen kann  $R$  nicht von  $m$  abhängen:

$$\hat{H}R_{El}(r) = ER_{El}(r).$$

### Bestimmung der $R_{El}(r)$ bzw. $u_{El}(r)$

Wir suchen nun eine Lösung für die radiale Schrödinger-Gleichung<sup>36</sup>. Um den Hamilton-Operator in eine geschicktere Form bringen zu können, zeigen wir die folgenden Identitäten:

#### 1. Behauptung.

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$$

*Beweis.* Betrachten wir zuerst die linke Seite:

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} &= \frac{1}{r^2}\left(2r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) \\ &= \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\end{aligned}$$

<sup>35</sup>  $\mu$  ist die Masse des Teilchens.

<sup>36</sup> Schrödinger-Gleichung ohne Winkelanteil.

Nun betrachten wir die rechte Seite:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

Produktregel auf den rechten Teil ( $\frac{\partial}{\partial r} r$ ) angewandt<sup>37</sup>

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( 1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned}$$

Produktregel

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \\ &= \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \end{aligned}$$

Dies war ja das Ergebnis der linken Seite. □

## 2. Behauptung.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = - \left( \frac{1}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} - \left( \frac{1}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 &= \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} r \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \end{aligned}$$

und mit obigen Beweis:

$$= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}.$$

□

---

<sup>37</sup>Man beachte, daß die Terme noch auf eine Funktion angewandt werden sollen. Daher muß man die Produktregel benutzen. (Man stelle sich eine Funktion  $f$  zusätzlich zu  $r$  vor.)

Die radiale Schrödinger-Gleichung können wir nun umschreiben:

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \hat{V}(r) \right) R_{El}(r) &= E R_{El}(r) \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \hat{V}(r) \right) R_{El}(r) &= E R_{El}(r) \\ \left( \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \hat{V}(r) \right) R_{El}(r) &= E R_{El}(r) \\ \left( \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \hat{V}(r) \right) R_{El}(r) &= E R_{El}(r) \end{aligned}$$

Diese Umformungen haben wir gemacht, damit man sieht, daß der erste Teil des Hamilton-Operators den radialen Impuls  $\hat{p}_r^2$  beinhaltet.<sup>38</sup> Wobei wir

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

und

$$\begin{aligned} \hat{p}_r^2 &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 \\ &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \\ &= -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} r \\ &= -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \end{aligned}$$

benutzt haben. Daher läßt sich die Schrödinger-Gleichung in eine kompakte Form schreiben.

### Die Radiallösung $u_{El}$ der Schrödinger-Gleichung:

Wir machen den Ansatz

$$R_{El}(r) = \frac{1}{r} u_{El}(r).$$

Warum machen wir diesen Ansatz?

Wir werden eine uns schon bekannte Schrödinger-Gleichung erhalten. Sie sieht

<sup>38</sup>Zur Plausibilität:  $[\hat{p}_r, \hat{r}]_- = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r r - \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r^2 - \frac{\partial}{\partial r} r \right) = \frac{\hbar}{i} (2 - 1) = \frac{\hbar}{i} = [\hat{p}_x, \hat{x}]_-$

wie die Schrödinger-Gleichung im eindimensionalen Fall aus. (Reduktion!).

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r} + \hat{V}(r) \right) \frac{1}{r} u_{El}(r) &= E \frac{1}{r} u_{El}(r) \\ \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r} + \frac{1}{r} \hat{V}(r) \right) u_{El}(r) &= E \frac{1}{r} u_{El}(r) \\ \frac{1}{r} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r} + \hat{V}(r)}_{\text{effektives Potential}} \right) u_{El}(r) &= E \frac{1}{r} u_{El}(r) \end{aligned}$$

Allerdings muß man beachten, daß das Potential  $\hat{V}_{\text{eff}}$  eine andere Form hat.<sup>39</sup> Nun können wir  $E$  und  $R_{El}$  bestimmen.

$$\hat{H} u_{El} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \hat{V}_{\text{eff}}(r) \right) u_{El}(r) = E u_{El}(r)$$

Wir haben also hergeleitet, daß der Hamilton-Operator des Zentralfeldes ( $\in \mathbb{R}^3$ ) sich als Hamilton-Operator in einer Dimension mit einem effektiven Potential, das von der kinetischen Energie abhängt, darstellen läßt.

**Beispiel.** Betrachten wir das Potential

$$V(r) = \begin{cases} < 0 & \text{für } r < x, \\ \equiv 0 & \text{für } r > x. \end{cases}$$

Abbildung 3.6: Topfpotential mit effektiven Potential

Kommentar zum Bild:

1.  $\boxed{l=0}$

$$\hat{V}_{\text{eff}} = \hat{V}$$

Dies stellt im Allgemeinen den Grundzustand, also die niedrigste Energie für ein Teilchen im Potential dar.

2.  $\boxed{l=1}$

$$\hat{V}_{\text{eff}} = \hat{V} + \frac{\hbar^2 2}{2\mu r^2}$$

3.  $\boxed{l=2}$

$$\hat{V}_{\text{eff}} = \hat{V} + \frac{\hbar^2 6}{2\mu r^2}$$

<sup>39</sup>Das Potential enthält einen Beitrag der kinetischen Energie. Die Zentrifugalbarriere hat seine Ursache nicht in einer Kraft, sondern in der kinetischen Energie. (Scheinkraft)

Beachte, daß das effektive Potential  $\hat{V}_{\text{eff}}$  von  $l$  abhängig ist. Ist  $l > 0$ , dann ist das effektive Potential  $\hat{V}_{\text{eff}}$  größer als das Zentralpotential  $\hat{V}$ . Bei höheren  $l$  wird der Zentrifugalterm immer größer und damit die „Tasche“ des attraktiven Potentials immer kleiner. Ab einem bestimmten  $l$  ist gar keine Attraktion mehr vorhanden; das effektive Potential ist im gesamten Raum repulsiv. Dann ist  $E_l \geq E_0$  und es gibt keine Bindungszustände!

$l$  repräsentiert die Eigenschaften des Drehimpulses. Wenn das Teilchen einen gewissen Drehimpuls hat, so muß es kreisen! Zwingt man das Teilchen immer näher an den Ursprung zu immer kleineren Kreisen, so muß es wegen der Erhaltung des Drehimpulses immer schneller kreisen. Das Potential divergiert!

### 3.4.4 Parität von Zuständen

Unter der Parität eines Zustandes versteht man den Eigenwert des Paritätsoperators. Dieser kann die Werte  $+1$  und  $-1$  annehmen.<sup>40</sup>

**Definition.** Der Paritätsoperator:

$$\hat{\Pi}\phi(\vec{r}) = \phi(-\vec{r}).$$

Dies entspricht einer Spiegelung am Koordinatenursprung (Punktspiegelung). In kartesischen Koordinaten ausgeschrieben sieht er so aus:

$$\hat{\Pi}\phi(x, y, z) = \phi(-x, -y, -z)$$

und in Kugelkoordinaten:

$$\hat{\Pi}\phi(r, \vartheta, \varphi) = \phi(r, \pi - \vartheta, \pi + \varphi).$$

Abbildung 3.7: Koordinatensystem

**Satz.** Ist  $V(\vec{r})$  zentralsymmetrisch, dann gilt:

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}]_- = 0.$$

*Beweis.* Wir machen mehrere Schritte:<sup>41</sup>

1.

$$\begin{aligned} [p_x^2, \hat{\Pi}]_- &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} + \hat{\Pi} \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \\ &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} + \hbar^2 \frac{d^2}{d(-x)^2} \hat{\Pi} \\ &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} + \hbar^2 \frac{d}{d(-x)} \frac{d}{d(-x)} \hat{\Pi} \\ &= -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} + \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \hat{\Pi} \\ &= 0 \end{aligned}$$

<sup>40</sup> Vergleiche auch [Messiah-1, S. 191].

<sup>41</sup> Beachte bei der Berechnung, daß die Operatoren auf eine Funktion  $f$  wirken.

Damit haben wir den Kommutator für die kinetische Energie  $\hat{T}$  berechnet, denn gilt:

$$[\hat{p}_x^2, \hat{\Pi}]_- = 0$$

dann auch

$$[\hat{p}_y^2, \hat{\Pi}]_- = 0$$

und

$$[\hat{p}_z^2, \hat{\Pi}]_- = 0.$$

Somit gilt

$$[\hat{T}, \hat{\Pi}]_- = 0.$$

2. Nun berechnen wir den Kommutator für das Potential:

$$\begin{aligned} [\hat{V}, \hat{\Pi}]_- f(\vec{r}) &= (\hat{V}\hat{\Pi} - \hat{\Pi}\hat{V})f(\vec{r}) \\ &= \hat{V}(\vec{r})f(-\vec{r}) - \hat{V}(r, \pi - \vartheta, \pi + \varphi)f(-\vec{r}) \end{aligned}$$

Als Zentralfeld ist  $\hat{V}$  rotationssymmetrisch:

$$\begin{aligned} &= \hat{V}(\vec{r})f(-\vec{r}) - \hat{V}(r)f(-\vec{r}) \\ [\hat{V}, \hat{\Pi}]_- &= 0. \end{aligned}$$

Da der Potentialoperator und der Operator der kinetischen Energie jeweils mit dem Paritätsoperator vertauschen, vertauscht auch der Hamilton-Operator mit dem Paritätsoperator.  $\square$

Es existiert also ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{H}$  und  $\hat{\Pi}$ . Der Eigenwert von  $\hat{\Pi}$  ist eine gute Quantenzahl; ein Zustand kann also zusätzlich durch die Parität charakterisiert werden.

**Behauptung.** Auch  $\hat{L}_z$  vertauscht mit  $\hat{\Pi}$ :

$$[\hat{L}_z, \hat{\Pi}]_- = \left[ \frac{\hbar}{i} \partial_x y - \frac{\hbar}{i} \partial_y x, \hat{\Pi} \right]_- = 0.$$

*Beweis.* Durch folgende Überlegung überzeugen wir uns:

Da die Koordinaten in  $\hat{L}_z$  immer paarweise vorkommen, hebt sich der Vorzeichenwechsel immer gegenseitig auf.  $\square$

**Behauptung.** Für  $\hat{L}^2$  gilt:

$$[\hat{L}^2, \hat{\Pi}]_- = 0.$$

Betrachten wir die Wirkungsweise des Paritätsoperators auf unsere Eigenfunktion  $R_{El}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ :

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}R_{El}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= R_{El}(r)Y_{lm}(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) \\ &= (-1)^l R_{El}(r)Y_{lm}(\pi, \varphi)\end{aligned}$$

$\hat{\Pi}$  wirkt nur auf die  $Y_{lm}$ , das heißt die Parität ist allein eine Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen, wobei sie nur von  $l$  abhängt.

**Satz.** *Ist  $l$  gerade, so ist der Eigenwert zu  $\hat{\Pi} + 1$ . Man nennt das positive Parität.*

*Ist  $l$  ungerade, so ist der Eigenwert zu  $\hat{\Pi} - 1$ . Dies ist negative Parität.*

### 3.4.5 Normierung der $\psi_{Elm}$

Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung lautet ausgeschrieben:

$$\psi_{Elm} = \frac{u_{El}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Es soll die Normierungsbedingung gelten:

$$\langle \psi_{Elm} | \psi_{Elm} \rangle = 1.$$

$$\langle \psi_{Elm} | \psi_{Elm} \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \vartheta \left( \frac{1}{r^2} u_{El}^* Y_{lm}^*(r) u_{El}(r) Y_{lm} \right) d\varphi d\vartheta dr$$

Die  $Y_{lm}$  sind bereits normiert:

$$\begin{aligned}&= \int_0^\infty r^2 \left( \frac{1}{r^2} u_{El}^*(r) u_{El}(r) \right) dr \\ &= \int_0^\infty u_{El}^*(r) u_{El}(r) dr.\end{aligned}$$

Die  $u_{El}$  müssen dann so gewählt werden, daß das Integral eins ergibt.

## 3.5 Dreidimensionaler Harmonischer Oszillator

### 3.5.1 Einleitung

Die potentielle Energie eines Teilchens im Harmonischen Oszillator

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

ist ein gutes Modell für gebundene Quantensysteme (z.B. Atom, Atomkern). Der Harmonische Oszillator ist allerdings nicht immer verwendbar, da es zum Beispiel möglich ist Nukleonen aus dem Kern zu schießen. In diesem Fall darf das Potential für einen großen Abstand  $r$  nicht unendlich werden! Der Harmonische Oszillator ist für Quarks plausibler, da in diesem Fall das Confinement gilt. Aber für das Ziel, eine erste nicht triviale Approximation für gebundene Teilchen zu finden, ist er sehr geeignet.<sup>42</sup>

Abbildung 3.8: Potentialverlauf

### 3.5.2 Bestimmung der $u_{El}$

Wir wollen das Eigenwertproblem  $\hat{H}\psi = E\psi$  lösen.

Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + \hat{V}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \hat{r}^2.$$

Dazu wollen wir die Lösungen als Eigenfunktionen von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  darstellen. Da die Operatoren  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  untereinander und mit  $\hat{H}$  vertauschen, können wir den folgenden Ansatz machen:<sup>43</sup>

$$\psi_{Elm} = \frac{u_{El}}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Wir suchen nun die konkrete Form der  $u_{El}$ .

Für den obigen Ansatz des Eigenwertproblems verwenden wir die Eigenwertgleichung  $\hat{H}\psi = E\psi$  in Form der Radialgleichung<sup>44</sup>:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{\hbar^2}\mu^2\omega^2 r^2 \right) u_{El}(r) = E u_{El}(r) \quad \text{Radialgleichung}$$

Der weitere Lösungsweg verläuft analog zum eindimensionalen Fall.

<sup>42</sup>Vergleiche mit [Fließbach, S. 206-215].

<sup>43</sup>Wie wir in den vorherigen Abschnitten herausgearbeitet haben.

<sup>44</sup>Diese Gleichung entspricht der Schrödinger-Gleichung im eindimensionalen Fall, wie wir auf Seite 179 gesehen haben.



**Fallunterscheidung**1.  $\boxed{l=0}$ 

In diesem Fall entspricht die radiale Schrödinger-Gleichung der Schrödinger-Gleichung des eindimensionalen Falles des Harmonischen Oszillators.

$$E_{n0} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

$$u_{n0} = \alpha H_n\left(\frac{r}{b}\right) e^{-\frac{r^2}{2b^2}}, \text{ mit } b = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega\mu}}$$

Wobei  $b$  die Oszillatorlänge und die  $H_n$  die Hermite-Polynome<sup>45</sup> sind. Betrachte wir das Hermite-Polynom für gerade  $n$ :  $n = 0, 2, 4, \dots$

$$H_n\left(\frac{r}{b}\right) = \beta\left(\frac{r}{b}\right)^0 + \beta_2\left(\frac{r}{b}\right)^2 + \dots + \beta_n\left(\frac{r}{b}\right)^n$$

$H_n(0)$  verschwindet nicht! Dies hätte zur Folge, daß  $u_{El} \neq 0$  wäre und damit  $\psi(r=0) = \frac{u_{n0}(r)}{r} Y_{lm}$  unendlich würde für  $r \rightarrow 0$ . Damit wäre die Wahrscheinlichkeitsdichte unbeschränkt:

$$\varrho(r=0) = \psi^* \psi = \infty.$$

Dies ist ein unphysikalisches Ergebnis für alle geraden  $n$ . Wir lassen nur Lösungen zu, die regulär am Koordinatenursprung sind. Es kommen also nur ungerade  $n$  in Frage. Damit tritt der problematische Term  $\beta\left(\frac{r}{b}\right)^0$  nicht mehr auf. Alle anderen Terme enthalten  $\frac{r}{b}$  und verschwinden für  $r \rightarrow 0$ . Für die Energie ergibt sich:

$$E_{n0} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \text{ mit } n \text{ ungerade}$$

oder umformuliert:

$$E_{\tilde{n}0} = \left(2\tilde{n} + 1 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \text{ mit } \tilde{n} = 0, 1, 2, \dots$$

$$= \left(2\tilde{n} + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega.$$

Für die Nullpunktsenergie in 3 Dimensionen ergibt sich also:

$$\frac{3}{2} \hbar\omega = E_{00}.$$

Mit  $\tilde{n}$  geschrieben lauten die Hermite-Polynome:

$$u_{\tilde{n}} = \alpha H_{2\tilde{n}+1} \left( \frac{r}{b} e^{\frac{r^2}{2b^2}} \right).$$

2.  $\boxed{l > 0}$ 

Für  $l \neq 0$  erhalten wir einen zusätzlichen Term, der mit  $\frac{1}{r^2}$  geht.

<sup>45</sup> Vergleiche [Messiah-1, S. 442] und [Sakurai-1, S. 453].

- (a) Betrachte wir wieder die Radialgleichung von Seite 184 für kleine  $r$ , also  $r \rightarrow 0$ . Damit reduziert sich die Schrödinger-Gleichung auf die asymptotische Form:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} u_{El}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u_{El}(r) &\simeq 0 \\ -\frac{d^2}{dr^2} u_{El}(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u_{El}(r) &= 0. \end{aligned}$$

Dies ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung und hat die Lösungen:

$$u_{El}(r) = r^{l+1}$$

und

$$u_{El}(r) = r^{-l}.$$

Die allgemeine Lösung ist eine Linearkombination beider Lösungen:

$$u_{El}(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}.$$

Diese Lösung müssen wir genauer betrachten. Da für  $r \rightarrow 0$  auch  $u \rightarrow 0$  gehen muß, muß  $B = 0$  sein. Sonst bekämen wir eine unphysikalische Lösung, da  $r^{-l}$  für  $l = 0$  konstant ist, beziehungsweise für  $l > 0$  divergiert. Es bleibt also als Lösung:

$$u_{El} = Ar^{l+1}.$$

- (b) Betrachten wir nun die Radialgleichung für  $r \rightarrow \infty$ . Hier wird der  $r^2$ -Term relevant, der  $l$ -Term hingegen verschwindet. Die Radialgleichung sieht dann so aus:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} u_{El} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 u_{El} &= 0 \\ -\frac{d^2}{dr^2} u_{El} + \frac{1}{\hbar^2} \mu^2 \omega^2 r^2 u_{El} &= 0 \end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung hat als allgemeine Lösung:

$$u_{El} = C e^{+\frac{r^2}{2b^2}} + D e^{-\frac{r^2}{2b^2}}.$$

$C$  muß gleich null sein, da sonst  $\varrho(r)$  für  $r \rightarrow \infty$  gegen unendlich gehen würde, was für gebundene Zustände keinen Sinn macht (abgesehen vom Normierungsproblem). Die Lösung lautet also

$$u_{El} = D e^{-\frac{r^2}{2b^2}}.$$

Um aus den beiden asymptotischen Lösungen die Gesamtlösung zu erhalten, machen wir nun für  $l > 0$  den Ansatz:

$$u_{El}(r) = E r^{l+1} f_l(r) e^{-\frac{r^2}{2b^2}},$$

wobei  $f_l(r)$  ein passendes asymptotisches Verhalten haben muß. Dieser Ansatz ergibt die Lösungen:<sup>46</sup>

$$u_{nl}(r) = Er^{l+1} L_{nl}\left(\frac{r^2}{b^2}\right) e^{-\frac{r^2}{2b^2}}$$

Hierbei sind die  $L_{nl}$  die assoziierten Laguerre-Polynome. Diese Lösungen sind diskret und ergeben daher diskrete Energien:

$$E_{ln} = \hbar\omega \left( 2n + l + \frac{3}{2} \right)$$

mit der Ersetzung  $N = 2n + l$

$$E_N = \hbar\omega \left( N + \frac{3}{2} \right).$$

Damit ergibt sich die Nullpunktsenergie:

$$E_{l0} = \left( l + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega.$$

**Zusammenfassung** Wichtig war hier, wie man die Lösung gewinnt:

1. Wie verhalten sich die Gleichungen in Grenzfällen:  
Reduktion der Gleichung auf die in Grenzfällen relevanten Terme.
2. Welche Teile/Terme machen physikalisch Sinn:  
Werden durch Asymptotik festgelegt.
3. Den Ansatz numerisch mit Computer lösen.

### 3.5.3 Konsequenzen - Beispiel

In der folgenden Tabelle geben wir an, welche und wieviele Kombinationen von  $n$  und  $l$  dieselbe Energie ergeben. Dies ist der Entartungsgrad für die möglichen Energiewerte.

N	l	n	m	Entartungsgrad	Anzahl der Nukleonen
0	0	0	0	1	2
1	1	0	-1, 0, 1	3	6
2	0	1	0	1	2
2	2	0	-2, -1, 0, 1, 2	5	12

Tabelle 3.1: Entartungsgrad

Für  $N = 2$  hat der Gesamtentartungsgrad<sup>47</sup> den Wert 6. Beachte, daß  $m$  nicht in die Energie eingeht! Dies ist gerade die Entartung!

<sup>46</sup>Ohne weitere Herleitung.

<sup>47</sup>Mit  $N = 2n + l$ .

## Abbildung 3.9: Pauliprinzip

Wir wollten den Harmonischen Oszillator als Modell für Atomkerne. Wir können nun schauen, ob dieses Modell Atomkerne beschreibt und ob dort Entartung auftritt.

Die zwei ersten Nukleonen sind sehr stark gebunden, ein drittes Nukleon ist nicht mehr so stark gebunden. Wird also ein neuer Energiezustand besetzt, so ist die Bindung nicht so stark wie bei den vorherigen Nukleonen.

N		
2	${}^4\text{He}$	
8	${}^{16}\text{O}$	
20	${}^{40}\text{Ca}$	
28	${}^{48}\text{Ca}$	
50		Ab hier mit dem Oszillatormodell nicht mehr erklärbar!
82		
120		

Tabelle 3.2: Magische Zahlen

Magische Zahlen stellen die Anzahl der Nukleonen in vollbesetzten Energiezuständen dar. Die experimentell gefundenen Magischen Zahlen weichen jedoch bald von denen des Harmonischen Oszillators ab. Das Modell versagt bei vielen Nukleonen.

## 3.6 Wasserstoffatom

### 3.6.1 Einleitung

Bisher haben wir ein Teilchen in einem Potential betrachtet, jetzt betrachten wir ein Zweiteilchensystem.

Abbildung 3.10: Zweiteilchensystem von außen betrachtet

### 3.6.2 Hamilton-Operator und Schwerpunktskoordinaten

Die potentielle Energie stellt sich bei unserem Problem so dar:

$$V(\vec{r}_p, \vec{r}_e) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}.$$

Betrachten wir zunächst den Hamilton-Operator in kartesischen Koordinaten im Laborsystem:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}\Delta_p - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_e - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}.$$

Dabei ist

$$\Delta_p = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}$$

und

$$\Delta_e = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}.$$

Hier haben wir es zum ersten Mal mit 6 statt 3 Koordinaten zu tun. Deswegen suchen wir ein geeignetes Koordinatensystem, in dem sich die Anzahl der Koordinaten wieder auf 3 reduziert. Diese Anforderung erfüllt ein System mit relativen Koordinaten.

#### Schwerpunktskoordinaten

Der Schwerpunktsvektor im Laborsystem angegeben:

$$\vec{R} = \frac{\sum_i m_i \vec{r}_i}{\sum_i m_i} = \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{M}, \text{ mit } M = m_p + m_e.$$

Die Relativkoordinate ergibt sich zu:<sup>48</sup>

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_e \\ y_e \\ z_e \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \\ z_p \end{pmatrix}.$$

Daraus ergibt sich die potentielle Energie:

$$V = -\frac{e^2}{|\vec{r}|}.$$

Dieses Ergebnis ist vernünftig für das Coulombpotential, da es nur abhängig vom Abstand der Teilchen ist. Für das Potential haben wir die Anzahl der Koordinaten reduziert.<sup>48</sup> Jetzt müssen wir noch die Ableitungen nach den Teilchenkoordinaten betrachten.

*Nebenrechnung:* Wir bilden die erste Ableitung für die  $x$ -Elektronkoordinate:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx_e} &= \frac{dx_{\text{CM}}}{dx_e} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{dx}{dx_e} \frac{d}{dx} \\ &= \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + 1 \frac{d}{dx} \end{aligned}$$

Die Ableitungen für die  $y$ - und  $z$ -Koordinate werden entsprechend gebildet. Analog bilden wir auch die Ableitungen für die Protonkoordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx_p} &= \frac{dx_{\text{CM}}}{dx_p} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{dx}{dx_p} \frac{d}{dx} \\ &= \frac{m_p}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} - 1 \frac{d}{dx} \end{aligned}$$

Wir bilden die zweite Ableitung:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx_e^2} &= \left( \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d}{dx} \right) \left( \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d}{dx} \right) \\ &= \frac{m_e^2}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} \frac{d}{dx} + \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d^2}{dx^2} \end{aligned}$$

$x$  und  $x_{\text{CM}}$  sind unabhängig voneinander und daher ist die Differentiation vertauschbar.

$$= \frac{m_e^2}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + 2 \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d^2}{dx^2}$$

Die zweiten Ableitungen für die  $y$ - und  $z$ -Koordinate werden wieder entsprechend gebildet.

Analog berechnen wir wieder die zweiten Ableitungen für die Protonkoordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx_p^2} &= \left( \frac{m_p}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d}{dx} \right) \left( \frac{m_p}{M} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d}{dx} \right) \\ &= \frac{m_p^2}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} - 2 \frac{m_p}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d^2}{dx^2} \end{aligned}$$

*Ende der Nebenrechnung.*

<sup>48</sup>Durch Betragsbildung folgt der Abstand zwischen den beiden Koordinaten.

<sup>49</sup>Im Grunde auf einen Skalar.

Wir setzen nun die Ableitungen in den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  ein:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{m_p} \frac{d^2}{dx_p^2} + \frac{1}{m_e} \frac{d^2}{dx_e^2} &= \frac{1}{m_p} \left( \frac{m_p^2}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} - 2 \frac{m_p}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d^2}{dx^2} \right) \\
 &\quad + \frac{1}{m_e} \left( \frac{m_e^2}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + 2 \frac{m_e}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \frac{d^2}{dx^2} \right) \\
 &= \frac{m_p}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} - 2 \frac{1}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} \\
 &\quad + \frac{m_e}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + 2 \frac{1}{M} \frac{d}{dx} \frac{d}{dx_{\text{CM}}} + \left( \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \right) \frac{d^2}{dx^2} \\
 &= \frac{m_p + m_e}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + \left( \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \right) \frac{d^2}{dx^2} \\
 &= \frac{M}{M^2} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + \left( \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \right) \frac{d^2}{dx^2} \\
 &= \frac{1}{M} \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} + \left( \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \right) \frac{d^2}{dx^2}
 \end{aligned}$$

Für die  $y$ - und  $z$ -Koordinate entsprechend.

Für den Hamilton-Operator ergibt sich also:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{d^2}{dx_{\text{CM}}^2} \frac{d^2}{dy_{\text{CM}}^2} \frac{d^2}{dz_{\text{CM}}^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{d^2}{dx^2} \frac{d^2}{dy^2} \frac{d^2}{dz^2} \right) - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

mit der Definition der reduzierten Masse  $\mu$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\mu} &:= \frac{m_e + m_p}{m_e \cdot m_p} \\
 &= \frac{m_e}{m_e \cdot m_p} + \frac{m_p}{m_e \cdot m_p} \\
 &= \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e}.
 \end{aligned}$$

Wir können den Hamilton-Operator in eine kompaktere, separierte Form bringen:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\text{CM}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \\
 &= \underbrace{\hat{H}_R}_{\text{Wirkt ausschließlich auf die Schwerpunktskoordinate.}} + \underbrace{\hat{H}_r}_{\text{Wirkt ausschließlich auf die Relativkoordinate.}}
 \end{aligned}$$

Wir erhalten zwei Lösungen, die sich isoliert berechnen lassen, da sie vollkommen unabhängig voneinander sind!

### 3.6.3 Separation der Wellenfunktion

**Satz.** Sei  $\hat{H} = \hat{H}_R + \hat{H}_r$ , dann gilt sowohl  $\hat{H}_R \varphi = E_R \varphi$  als auch  $\hat{H}_r \psi = E_r \psi$ . Man kann dann für  $\hat{H} \chi = E \chi$  einen Separationsansatz machen:

$$\chi(\vec{R}, \vec{r}) = \varphi(\vec{R}) \cdot \psi(\vec{r}).$$

Besteht der Hamilton-Operator aus einer Summe, so ist die dazugehörige Wellenfunktion ein Produkt aus den einzelnen Teillösungen.

*Beweis.*

$$\begin{aligned}\hat{H}_R\chi(\vec{R}, \vec{r}) + \hat{H}_r\chi(\vec{R}, \vec{r}) &= E\chi(\vec{R}, \vec{r}) \\ \psi(\vec{r})\hat{H}_R\varphi(\vec{R}) + \varphi(\vec{R})\hat{H}_r\psi(\vec{r}) &= E\varphi(\vec{R})\psi(\vec{r})\end{aligned}$$

Auseinanderziehen des Produktes ist möglich, da  $\hat{H}_R$  nicht auf  $\psi(\vec{r})$  wirkt und genauso  $\hat{H}_r$  nicht auf  $\varphi(\vec{R})$ . Multipliziert man noch mit  $\frac{1}{\varphi\psi}$ , so erhält man:

$$\underbrace{\frac{1}{\varphi(\vec{R})}\hat{H}_R\varphi(\vec{R})}_{E_{\text{CM}}(\vec{R}, \vec{r})} + \underbrace{\frac{1}{\psi(\vec{r})}\hat{H}_r\psi(\vec{r})}_{E_r(\vec{r}, \vec{R})} = E(\vec{R}, \vec{r})$$

Als Ergebnis erhält man zwei Summanden, von denen der eine nicht von  $R$  abhängig ist und der andere nicht von  $r$ . Die Summe ergibt eine Zahl  $E$ , die weder von  $r$  noch von  $R$  abhängt, die also eine Konstante ist. Also sind die beiden Summanden auch unabhängig von  $r$  und  $R$  und somit Konstanten.

$$\begin{aligned}E_{\text{CM}} &= \frac{1}{\varphi(\vec{R})}\hat{H}_R\varphi(\vec{R}) \\ &= \text{const.}\end{aligned}$$

oder

$$E_{\text{CM}}\varphi(\vec{R}) = \hat{H}_R\varphi(\vec{R}).$$

$E_{\text{CM}}$  ist die Energie der Schwerpunktsbewegung.

$$\begin{aligned}E_r &= \frac{1}{(\psi\vec{r})}\hat{H}_r\psi(\vec{r}) \\ &= \text{const.}\end{aligned}$$

oder

$$E_r\psi(\vec{r}) = \hat{H}_r\psi(\vec{r}).$$

$E_r$  ist die Energie der Relativbewegung. □

Die Gesamtenergie berechnet sich additiv:

$$E = E_{\text{CM}} + E_r.$$

Wir können jetzt zwei Teilprobleme (Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Problem der Schwerpunkts- und der Relativbewegung) betrachten:



### 3.6.4 Separierte Schrödinger-Gleichungen für das Wasserstoffatom

1. Betrachten wir die Schrödinger-Gleichung für die CM-Bewegung.

$\hat{H}_{\text{CM}}$  hängt nur von der kinetischen Energie des Schwerpunktes ab.

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{CM}}\varphi(\vec{R}) &= E_{\text{CM}}\varphi(\vec{R}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\text{CM}}\varphi(\vec{R}) &= E_{\text{CM}}\varphi(\vec{R}) \\ \left(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z\right)\varphi_x\varphi_y\varphi_z &= (E_x + E_y + E_z)\varphi(\vec{R}),\end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{R}) &= N e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \\ &= N e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad \text{mit } \vec{p} = \hbar\vec{k}\end{aligned}$$

ist.

Hier können wir wiederum nach unabhängigen Koordinaten (diesmal nach den Raumrichtungen:  $x, y, z$ ) aufspalten, und  $\varphi(\vec{R})$  ist dann ein Produkt ebener Wellen in diese Raumrichtungen.

Für die kinetische Energie des Schwerpunktes ergibt sich:

$$\begin{aligned}E_{\text{CM}} &= E_x + E_y + E_z \\ &= \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\end{aligned}$$

Bewegt sich das ganze Wasserstoffatom, so trägt diese Bewegung zur Gesamtenergie<sup>50</sup> bei.

2. Betrachten wir die Schrödinger-Gleichung für die Relativbewegung.

Der  $\frac{1}{|\vec{r}|}$  Term läßt sich nicht in  $x, y, z$ -Anteile aufspalten.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Betrachten wir nun die reduzierte Masse:

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_e + m_p}$$

Die Masse des Protons beträgt

$$m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$$

und die des Elektrons

$$m_e = 0,511 \text{ MeV}/c^2,$$

---

<sup>50</sup>Dies ist die kinetische Energie des freien Wasserstoffatoms.

daher beträgt die reduzierte Masse in unserem Fall

$$\mu = 0,5107 \text{ MeV}/c^2$$

In erster Näherung ist also das Proton fest im Raum und definiert damit den Schwerpunkt. Nur das Elektron bewegt sich ( $\mu \approx m_e$ ). Aber es gibt andere Probleme, bei denen diese Näherung nicht möglich ist, obwohl der Hamilton-Operator der gleiche ist. Obige Gleichung läßt sich auf viele Probleme der Teilchenphysik übertragen.

### Beispiel.

- Beim Positronium ( $e^- e^+$ ) sieht der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  fast so aus, wie beim H-Atom, nur daß das  $\mu$  kleiner ist:  $\mu = \frac{1}{2}m_e$ .
- Beim Antiprotonium ( $\bar{p}p$ ) gilt ähnliches  $\mu = \frac{1}{2}m_p$ .
- Beim Anti-H-Atom ( $\bar{p}e^+$ ) ist wieder alles ähnlich, nur daß die Ladung ein anderes Vorzeichen hat.
- und dann gibt es noch Myonische Atome.

## 3.6.5 Wasserstoffatom

### Lösung der Schrödinger-Gleichung

Mathematisch betrachtet hat man bei der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom eine Differentialgleichung für ein Zentralfeldproblem ( $V(\vec{r})$ ) vorliegen.<sup>51</sup> Daher können wir die Ergebnisse aus den vorherigen Kapiteln übernehmen.<sup>52</sup>

Die Wellenfunktion  $\psi_{lm}$  können wir mit Hilfe der Kugelflächenfunktionen darstellen:

$$\psi_{lm} = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Die Schrödinger-Gleichung nimmt damit die Form

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right) u = E u$$

$$\frac{d^2}{dr^2} u - \frac{(l(l+1))}{r^2} u + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{r} + E \right) u = 0$$

an.

Um eine Lösung zu finden betrachten wir wieder das asymptotische Verhalten:<sup>53</sup>

<sup>51</sup>Vergleiche mit [Heuser-3, S. 352-354].

<sup>52</sup>Aufspaltung in Radial und Winkelanteil; Aussagen über den Drehimpuls etc.

<sup>53</sup>Siehe ausführlicher in [Messiah-1, S. 370] und auch [Cohen-2, S. 20-31], sowie [Fließbach, S. 216-227].

1.  $\boxed{r \rightarrow 0}$  Der  $\frac{1}{r^2}$  Term wird am größten, der  $\frac{1}{r}$  Term ist vernachlässigbar:

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

In diesem Fall bekommt man als Lösung  $u = r^{l+1}$ .

2.  $\boxed{r \rightarrow \infty}$  Sowohl der  $\frac{1}{r^2}$  Term als auch der  $\frac{1}{r}$  Term verschwinden:

$$\frac{d^2}{dr^2}u + \frac{2\mu}{\hbar^2}Eu = 0.$$

Man bekommt  $u = e^{\pm\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|}r}$ . Es kommt nur die Lösung  $e^{-\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|}r}$  in Frage, da das Teilchen sich in der Nähe des Protons aufhalten soll und nicht im Unendlichen. Für  $E < 0$  sind die Zustände gebunden. Ist  $E = 0$ , so ist das Elektron gerade nicht gebunden.

Die Gesamtlösung lautet:

$$\begin{aligned} u(r) &= r^{l+1}L_{nl}(r)e^{-\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|}r} \\ &= r^{l+1}L_{nl}(r)e^{-\frac{\sqrt{2\mu \cdot 13,5\text{eV}}}{\hbar N}r}. \end{aligned}$$

$L_{nl}$  ist eine Polynom (Laguerre-Polynom<sup>54</sup>), das analytisch lösbar ist, aber einfacher numerisch berechnet wird.

Wir haben eine Differentialgleichung zweiten Grades: Es gibt zwei linear unabhängige Lösungen, aber es gibt auch drei Randbedingungen:  $r \rightarrow 0$ ,  $r \rightarrow \infty$ , und die Normierung. Das ist „zuviel des Guten“ und daher gibt es nur für bestimmte Energiewerte Lösungen. Die Differentialgleichung hat nur diskrete Lösungen bei:

$$\begin{aligned} E &= E_{nl} \\ &= \frac{\mu e^4}{2\hbar^2(n+l+1)^2} \end{aligned}$$

beim Wasserstoffatom

$$\begin{aligned} E_{nl} &= -13,5\text{eV} \frac{1}{(n+l+1)^2} \\ &= -13,5\text{eV} \frac{1}{N^2}, \text{ mit } N = n+l+1. \end{aligned}$$

Es gibt auch Lösungen für  $E > 0$ , aber die interessieren uns vorläufig nicht. Da  $E_{nl} \sim (n+l+1)^{-2}$  ist  $E$  entartet.

Abbildung 3.11: Schematische Skizze der Energieniveaus im Wasserstoffatom

<sup>54</sup>Näheres in [Heuser-3, S. 310-313].

Abbildung 3.12: Das Wasserstoffspektrum

**Diskussion der verschiedenen Lösungen**

Die Wellenfunktion lautet:

$$\psi_{Nlm} = \frac{u_l(\vec{r})}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \text{ mit } N = n + l + 1.$$

1. Grundzustand ( $N = 1$ ):

$$\psi_{100} = \frac{r^{0+1} C e^{-\gamma r}}{r} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{Y_{00}} \text{ mit } \gamma = \frac{\sqrt{2\mu|E_{\text{Grundzustand}}|}}{\hbar}$$

Diese Lösung fällt exponentiell mit  $r$  ab.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist:

$$\rho = \psi_{100}^* \psi_{100} = \frac{L^2 e^{-2\gamma r}}{4\pi}.$$

2. Erster angeregte Zustand ( $N = 2$ ):

$$\begin{aligned} \psi_{200} &= \frac{r^{0+1}}{r} (1 - \beta r) C e^{-\frac{\gamma}{2} r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ &= C e^{-\frac{\gamma}{2} r} (1 - \beta r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{aligned}$$

Auch diese Lösung fällt exponentiell mit  $r$  ab, aber langsamer und außerdem gibt es eine Nullstelle wegen  $(1 - \beta r)$ .<sup>55</sup>

Abbildung 3.13: Wellenfunktionen

Für beide Lösungen gilt: Sie haben keine  $(\vartheta, \varphi)$ -Abhängigkeit ( $l = 0$ ) und sind somit rotationssymmetrisch.

3.  $N = 2, l = 1, m = 0$ :

$$\psi_{210} = \frac{r^{1+1}}{r} C e^{-\frac{\gamma}{2} r} \underbrace{\cos \vartheta}_{Y_{10}}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist:

$$\rho_{210} = \psi_{210}^* \psi_{210}.$$

Das Teilchen ist auf der z-Achse, da  $\rho$  groß ist für  $\vartheta = 0^\circ$  und  $180^\circ$ .

Abbildung 3.14: Wellenfunktion für  $l = 1, m = 0$ 

4.  $N = 2, l = 1, m = 1$ :

$$\psi_{211} = \frac{r^2}{r} C e^{-\frac{\gamma}{2} r} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$$

$m \neq 0$ , ist ein Ring.

---

<sup>55</sup>Vom Laguerre-Polynom.

Abbildung 3.15: Wellenfunktion für  $l = 1$ ,  $m = \pm 1$

## 3.7 Die numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Zentralfeld I

### 3.7.1 Einleitung

Wir betrachten die konservative Schrödinger-Gleichung<sup>56</sup> mit Drehimpuls im Zentralfeld:  $V = V(|\vec{r}|)$ . Daher nehmen wir den Ansatz  $\psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  zur Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung:<sup>57</sup>

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u(r) + \hat{V}(r) u(r) = E u(r).$$

Wir führen das effektive Potential  $\tilde{V}_l(r)$  als „Schönheitskorrektur“ ein:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \tilde{V}_l(r) u(r) = E u(r)$$

Abbildung 3.16: Wood-Saxon-Potential

Das *Wood-Saxon-Potential* hat die Form:

$$V(r) = V_0 \frac{1}{1 + e^{\frac{r-r_0}{a}}},$$

wobei der Parameter  $a$  als Hautdicke bezeichnet wird.

Wir wollen die Schrödinger-Gleichung mit einem Potential, wie zum Beispiel dem Wood-Saxon-Potential, lösen. Dieses Problem wird uns jetzt beschäftigen.

### 3.7.2 Numerische Lösung

Wir schreiben die Differentialgleichung um:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( \tilde{V}_l(r) - E \right) u(r) = \tilde{\tilde{V}}_l(r) u(r)$$

Der physikalische Inhalt der Differentialgleichung steckt in:

- der Potentialform
- und den Randbedingungen.

Betrachten wir die Randbedingungen genauer:

Die Lösung für  $\boxed{r \rightarrow 0}$  lautete

$$u(r) = A r^{l+1},$$

und für  $\boxed{r \rightarrow \infty}$

$$u(r) = B e^{-\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} r}.$$

Wir suchen die Normierungskonstanten  $A$  und  $B$ , um  $u(r)$  für alle  $r$  zu finden.

<sup>56</sup>Zur Nomenklatur beachte Seite 50.

<sup>57</sup>Vergleiche mit der Methode von [Schmid, S. 149-163].

### Eine Möglichkeit zur numerischen Lösung

Eine Möglichkeit der numerischen Lösung soll betrachtet werden, dabei wird die „einfache“ Form der Differentialgleichung genutzt:

Sie ist eine reine Differentialgleichung zweiter Ordnung; es kommen keine Ableitungen erster Ordnung vor.<sup>58</sup>

Prinzipieller Ablauf:

- Umschreiben des Differentialquotienten als Differenzenquotient (lineare Näherung)
- Auflösen nach  $u(r + dr)$

Schreiben wir die zweite Ableitung mit Hilfe des Differentialquotienten:

$$\begin{aligned} u''(r) &= \frac{du'}{dr} \\ &= \frac{u'(r + \frac{dr}{2}) - u'(r - \frac{dr}{2})}{dr} \\ &= \frac{\frac{u(r+dr) - u(r)}{dr} - \frac{u(r) - u(r-dr)}{dr}}{dr} \\ &= \frac{u(r + dr) + u(r - dr) - 2u(r)}{dr^2}, \end{aligned}$$

wobei  $dr \rightarrow 0$  geht.

Letzte Gleichung benutzen wir und lösen sie nach  $u(r + dr)$  auf:

$$u(r + dr) = u''(r)dr^2 - u(r - dr) + 2u(r).$$

Nun setzen wir die Beziehung aus der Schrödinger-Gleichung ein:

$$= \tilde{V}(r)u(r)dr^2 - u(r - dr) + 2u(r). \quad \text{positive Schritte}$$

Für  $u(r - dr)$  machen wir dasselbe:

$$\begin{aligned} u(r - dr) &= u''(r)dr^2 - u(r + dr) + 2u(r) \\ &= \tilde{V}(r)u(r)dr^2 - u(r + dr) + 2u(r). \quad \text{negative Schritte} \end{aligned}$$

Benutzen wir die Gleichung für die „positiven Schritte“, so starten wir vom Ursprung. Wir setzen  $r = 0$  in die asymptotische Lösung  $u(r) = Ar^{l+1}$  ein:

$$u(0) = 0$$

und für  $r = dr$ :

$$u(0 + dr) = A(dr)^{l+1};$$

---

<sup>58</sup>Es gibt allgemeinere Verfahren, z.B. Runge-Kutta, aber vom Prinzip wird überall dasselbe gemacht.

für  $A = 1$  ergibt sich schließlich:

$$= dr^{(l+1)}.$$

Also ergibt sich mit  $r = dr$ :

$$u(2dr) = dr^2 \tilde{V}(r)u(dr) - \underbrace{u(0)}_{=0} + 2u(dr)$$

Abbildung 3.17: Iteration der Lösungskurve

Wenn wir  $u(r)$  kennen, dann können wir  $u$  an der Stelle  $u(r + dr)$  bestimmen. Um  $\tilde{V}_l(r)$  beziehungsweise  $\tilde{V}_l(r)$  bestimmen zu können, müssen wir einen Wert  $E$  einsetzen. Wir nehmen mal an, daß  $E_i = -10$  MeV ist. Dies ist eine reine Schätzung! Ob der Wert sinnvoll ist werden wir später herausfinden. Mit  $r = 2dr$  können wir weiter  $u(3dr)$  bestimmen.

Mit der Gleichung für die „negativen Schritte“ starten wir bei  $r = 20$  fm ( $\approx \infty$ ) und benutzen die Lösung für die andere Asymptotik

$$u(20 \text{ fm}) = B e^{-\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} r}.$$

Wir nähern uns nach innen mit Schritten von  $-dr$  an. Mit  $B = 1$  erhalten wir für  $u((20 \text{ fm}) - dr)$  wohldefinierte Werte. Das Verfahren läßt sich für  $2dr, 3dr, \dots, ndr$  fortführen.

Abbildung 3.18: Kurve

- von innen nach außen (mit z.B.  $A = 1$ )
- von außen nach innen (mit z.B.  $B = 1$ )

Wir erhalten verschiedene Ergebnisse am „Matching Point“ für  $r = 4$  fm. Durch Variation der freien Parameter  $A, B, E_i$  können die Lösungskurven aneinander angefügt werden.

- Wähle  $B$  so, daß  $u_{in}(r = R_{MP}) = u_{out}(r = R_{MP})$ . Am Berührungspunkt soll die Funktion stetig sein, auch in der ersten Ableitung.
- Wähle  $A$  so, daß  $\int_0^\infty u^2(r) dr^2 = 1$ . Die Normierung wird damit erfüllt.
- Wähle  $E$  so, daß die erste Ableitung stetig ist. Beim variieren ist zu bedenken, daß nur bestimmte diskrete Werte möglich sind, die man finden muß. Daraus folgt die Energie für die gebundene Zustände.

Abbildung 3.19: Potentialtopf

Wählt man  $E > 10$  MeV, dann ist die Energie größer, damit die Wellenzahl größer und damit gibt es mehr Schwingungen. Somit ist die Anfangskurve und das Minimum näher am Nullpunkt. Variation der Energie führt zur Anpassung an das Ende der Kurve.



Die numerische Lösung ist aber nicht unbedingt exakt, da die Schrittweite  $dr$  größer null ist:

- Ist  $dr$  groß:  
zu wenige Schritte, daher zu grob.
- $dr$  klein:
  - a) numerische Fehler:  $dr$  kann nicht beliebig klein werden, da die Genauigkeit von der Anzahl der numerischen Schritte abhängt.
  - b) unphysikalische Lösung beigemischt.

## 3.8 Die Numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Zentralfeld II

### 3.8.1 Einleitung

Die Eigenwertgleichung lautet:

$$\hat{H}|\psi_a\rangle = E_a|\psi_a\rangle.$$

Wir suchen nun eine Möglichkeit die  $\psi_a$  und  $E_a$  in einer geeigneten Basis zu bestimmen.

### 3.8.2 Numerische Lösung

**Behauptung.** Sei  $|\varphi_i\rangle = R_i(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  ein vollständiges Funktionensystem, daß zur Beschreibung unserer Radialfunktion geeignet ist, und es gelte:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij},$$

dann können wir  $|\psi_a\rangle$  nach  $|\varphi_i\rangle$  entwickeln.

Allerdings muß die Anzahl der Basisvektoren zur numerischen Berechnung eingeschränkt werden:

$$\begin{aligned} |\psi_a\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \psi_a \rangle \\ &\approx \sum_{i=1}^N |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle \varphi_i | \psi_a \rangle}_{C_{ia}} \end{aligned}$$

Kurzum: Gesucht sind die Entwicklungskoeffizienten  $C_{ia}$ .

#### Berechnung der $C_{ia}$ , $E_a$ :

Wir betrachten die Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi_a \rangle &= E_a \langle \varphi_j | \psi_a \rangle \\ \sum_{i=1}^N \langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle C_{ia} &= E_a C_{ja}, \end{aligned}$$

oder als Matrix geschrieben:

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_N \rangle \\ \langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1a} \\ C_{2a} \\ \vdots \\ C_{Na} \end{pmatrix} = E_a \begin{pmatrix} C_{1a} \\ C_{2a} \\ \vdots \\ C_{Na} \end{pmatrix}$$

**Bemerkung.** Es gilt:  $\langle \varphi_2 | \hat{H} | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \hat{H} | \varphi_2 \rangle^*$ , da  $\hat{H}$  hermitesch ist.

Die Vorgehensweise ist also:

1. Wahl einer geschickten Basis  $|\varphi_i\rangle$ .<sup>59</sup>
2. Berechne  $\langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle$ .
3. Diagonalisiere die Matrix (löse das Eigenwertproblem) für  $E_a C_{ia}$ . Zur Diagonalisierung gibt es einige numerische Verfahren.

Betrachten wir einige Beispiele, um zu sehen, wie eine geeignete Basis aussieht:

### 3.8.3 Beispiele

1. **Beispiel.** Betrachten wir einen Oszillator:

Sei

$$\hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2 + a\hat{r}^3.$$

Eine mögliche Basis ist dann:

$$\langle r | \varphi_i \rangle = \frac{u_i(r)}{r}.$$

Dies war ja die Lösung des Harmonischen Oszillators (mit  $a = 0$ ).  
Der Hamilton-Operator lautet:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2 + a\hat{r}^3,$$

und daraus folgen die Matrixelemente:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle &= \langle \varphi_j | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2 | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_j | a\hat{r}^3 | \varphi_i \rangle \\ &= \langle \varphi_j | E_i^{H.O.} | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_j | a\hat{r}^3 | \varphi_i \rangle \\ &= E_i^{H.O.} \delta_{ij} + \int_0^\infty r^2 \frac{u_j(r)}{r} ar \frac{u_i(r)}{r} dr \\ &= E_i^{H.O.} \delta_{ij} + \int_0^\infty u_j(r) ar u_i(r) dr. \end{aligned}$$

Diese Verfahren geht für beliebige Potentiale  $\hat{V}$ :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2 + \hat{V} - \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2.$$

Mit  $\frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2$  wird eine Teildiagonalisierung erreicht. Dieses Hilfspotential muß dann wieder von  $\hat{V}$  abgezogen werden, so daß man

$$\langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle = E_i^{H.O.} \delta_{ij} + \langle \varphi_j | \hat{V} - \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2 | \varphi_i \rangle$$

---

<sup>59</sup>Dies ist die Aufgabe für Physiker.

erhält.

Im Prinzip liefert das Harmonische-Oszillator-Potential immer eine „genaue“ Lösung, jedoch muß für manche Probleme  $N$  sehr groß gemacht werden. Für diese Probleme nimmt man deshalb andere „Standardpotentiale“, um die Anzahl der Basisvektoren einzuschränken. Beim Wood-Saxon-Potential zum Beispiel ist dieses Verfahren für kleine  $r$  noch gut. Für große  $r$  ist das Harmonische Oszillator-Potential als Basis nicht mehr so gut geeignet.

2. **Beispiel.** Betrachten wir eine Wellenfunktion in einem sphärischen Kastenpotential:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{für } r \leq R \\ \infty & \text{für } r > R \end{cases}$$

Abbildung 3.20: Sphärisches Kastenpotential

Im äußeren Bereich soll  $\varphi_i(r) = 0$  gelten, während wir für den inneren Bereich eine Lösung für  $\varphi_i$  suchen:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2mr^2} \right) a_j = E_j u(r)$$

Wir machen den Ansatz:

$$\varphi_i = \frac{u_i}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

(a)  $\boxed{l=0}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u = E u(r)$$

Es gibt die linear unabhängigen Lösungen  $e^{ikr}$  und  $e^{-ikr}$  mit  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  für jedes  $E$ .

Mit den Randbedingungen:

$$\begin{aligned} u(r=0) &= 0 \\ u(r=R) &= 0 \end{aligned}$$

folgen die Lösungen:

$$\begin{aligned} \sin kr &= \frac{1}{2i}(e^{ikr} - e^{-ikr}) \\ \cos kr &= \frac{1}{2}(e^{ikr} + e^{-ikr}). \end{aligned}$$

$\sin kr$  hat die richtige Asymptotik für  $r \rightarrow 0$ .  $\cos kr$  hat die falsche Asymptotik für  $r \rightarrow 0$ . Es kommt also nur die Sinus-Lösung in Frage. Zusätzlich gilt die Randbedingung:

$$\sin kR = 0.$$

Es muß also  $kR = n\pi$  gelten. Also  $k_i = \frac{n_i\pi}{R}$  beziehungsweise  $E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$ . Die gesuchte Wellenfunktion lautet nun

$$\varphi_i(r) = \frac{\sin k_i r}{r} Y_{00}.$$

- (b)  $\boxed{l \neq 0}$  Bei dieser allgemeineren Form ist die Schrödinger-Gleichung umfangreicher:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u + \frac{\hbar^2(l(l+1))}{2mr^2} u = Eu(r)$$

Es gibt wieder zwei linear unabhängige Lösungen:

$$\begin{aligned} u_l(r) &= kr j_l(kr) \\ \check{u}_l(r) &= kr n_l(kr). \end{aligned}$$

Wir definieren  $x := kr$ . Die  $j_l$  sind die *sphärischen (regulären) Besselfunktionen*<sup>60</sup> und die  $n_l$  die *sphärischen Neumannfunktionen*<sup>61</sup>.

Die ersten beiden sphärischen Besselfunktionen lauten:

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x} \\ j_1(x) &= \frac{\sin x^2}{x} - \frac{\cos x}{x}. \end{aligned}$$

Die ersten beiden sphärischen Neumannfunktionen lauten:

$$\begin{aligned} n_0(x) &= -\frac{\cos x}{x} \\ n_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}. \end{aligned}$$

Daraus folgt dann die reguläre Lösung

$$u_0(r) = \sin(kr).$$

Die Neumannfunktionen sind physikalisch nicht sinnvolle Lösungen, da sie für  $r \rightarrow 0$  divergieren. Die Wellenfunktion ist dann nicht normierbar!

Aus der Randbedingung  $u_l(R) = kR j_l(kR) = 0$  folgt, daß nur diskrete Werte  $k_n$  auftreten können.

### Zusammenfassung

- Geeignete Basis wählen;
- Variation der Anzahl der Basisvektoren;
- Zur Kontrolle: Numerische Berechnung eines bekannten Potentials.
- Variation der Anzahl der Basisvektoren bis die Kurvendifferenz gering ist.

<sup>60</sup>Vergleiche mit [Schmid, S. 209-217] und mehr Mathematisches zu den Besselfunktionen erfährt man in [Heuser-3, S. 292-309].

<sup>61</sup>Die sphärischen Neumannfunktionen werden auch irreguläre Besselfunktionen genannt.

# Kapitel 4

## Spin und Rotation

### 4.1 Der Teilchen-Spin

Das Korrespondenzprinzip, das besagt, dass beim Übergang vom Mikroskopischen in makroskopische Größenordnungen die quantenmechanischen Gesetze aufgrund hoher Energien bzw. sehr kurzer Wellenlängen in die klassischen Gesetze münden, hat dem Aufbau der Quantenmechanik oft geholfen. So wie Ehrenfest-Theorem bzw. Quantisierungsbedingung unterstützt es letztlich jedoch nur die Aufstellung quantenmechanischer Beziehungen aus ihren klassischen Analogien heraus. So haben wir in Abschnitt 3.1 den quantenmechanischen Drehimpuls komplett aus klassischen Gesetzen hergeleitet. Dieses Prinzip versagt jedoch für mikroskopische Eigenschaften der Natur, die kein klassisches Gegenstück besitzen. Der Stern-Gerlach-Versuch deutete darauf hin, dass ein neues Konzept in die Quantenmechanik eingearbeitet werden muss; man stellte die Hypothese vom *Spin* eines Teilchens auf. Man fand jedoch Analogien zum Drehimpuls, so dass der Spin als eine Art „intrinsischer Eigendrehimpuls“ bestimmter Teilchen zwar eine neue Seite der Quantenmechanik zeigt, jedoch mit den Eigenschaften des quantenmechanischen Drehimpulses verglichen werden kann. Dies wird in diesem 4. Kapitel dargestellt.<sup>1</sup>

#### 4.1.1 Stern-Gerlach-Experiment

Beim Stern-Gerlach-Versuch werden Silberatome durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geschossen. Die Feldrichtung steht dabei (wenn man von der Inhomogenität absieht) senkrecht zur Strahlrichtung. Man beobachtet nun, wie das Magnetfeld die Atome ablenkt. Silberatome sind elektrisch neutral und paramagnetisch. Eine Ablenkung kann nach bisherigen Überlegungen aber nur durch eine Teilchenladung und durch den Drehimpuls der Elektronen im Atom stattfinden, was für Silberatome nicht gegeben ist. Der Versuch zeigt jedoch eine Ablenkung. Die Quantenmechanik muss also um ein Konzept ergänzt werden, das das Stern-Gerlach-Experiment erklären kann.

---

<sup>1</sup>[Sakurai-1] baut – ausgehend vom Stern-Gerlach-Versuch – die Quantenmechanik auf. Der Spin „dient“ hier gleichzeitig zur Einführung der Bracket-Schreibweise.

### Versuchsanordnung

Abbildung 4.1: Polschuhe zur Erzeugung eines inhomogenen Magnetfelds.

Abbildung 4.2: Teilchenstrahl im Magnetfeld.

Zur Vereinfachung sei das Magnetfeld in  $z$ -Richtung gelegt:<sup>2</sup>

$$\vec{B} = B \vec{e}_z$$

Ist das  $B$ -Feld inhomogen, also  $B = B(z)$ , so gibt es einen Gradienten in  $z$ -Richtung:

$$\frac{dB}{dz} \neq 0$$

### Wirkung eines $\vec{B}$ -Felds

Welche Kräfte können eine Ablenkung der Atome bewirken?

- Die Lorentz-Kraft  $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$  bewirkt eine Ablenkung bewegter geladener Teilchen im Magnetfeld. Die im Versuch verwendeten Silberatome besitzen jedoch keine Nettoladung; mit  $q = 0$  erfahren sie keine Lorentz-Kraft.
- Atome können ein magnetisches Moment  $\vec{\mu}$  besitzen. Dieses „versucht“ sich parallel zum externen Magnetfeld  $\vec{B}$  einzustellen (weil das der energetisch günstigere Zustand ist). Da die verwendeten Silberatome paramagnetisch sind, besitzen sie ein magnetisches Moment. Es wird sich jedoch zeigen, dass dieses nicht von der Bewegung der Elektronen um den Kern (also nicht vom Bahndrehimpuls  $\vec{L}$ ) stammt.

### Experimentelle Befunde

Eine Ablenkung der neutralen Atome kann nur durch die Wirkung des Magnetfelds auf deren magnetische Momente entstehen. Klassisch geht man davon aus, dass die Momente statistisch verteilt sind. Die maximalen Auslenkungen kommen zustande, wenn das Moment parallel oder antiparallel zum Magnetfeld steht. Das Experiment sollte, auf einem Schirm hinter dem Magneten, eine „Auffächerung“ des Strahls zwischen diesen Maxima ergeben. Das Experiment zeigt jedoch, dass man nicht klassisch argumentieren darf. Die Atome treffen nur (mit einer gewissen Breite der Verteilung) an den beiden Maxima-Punkten auf.

Besprechen wir zur Klärung die Kraftwirkung auf das magnetische Moment.

<sup>2</sup>Den Einheitsvektoren  $\vec{e}_i$  geben wir kein Dach, da diese Kennzeichnung den Operatoren vorbehalten sein soll. Da es keinen anderen Vektor gibt der  $e$  heißt, kann es nicht zu Verwechslungen kommen.

### Magnetisches Moment

Klassisch führt jeder Kreisstrom (wie oft pro Sekunde kommt ein Elektron vorbei) zu einem magnetischen Moment. Man berechnet es, indem man idealisiert annimmt, dass das Elektron eine Kreisbewegung um den Kern ausführt. Der (Kreis-)Strom ist abhängig von der Ladung  $q$  des Teilchens und der Frequenz  $\nu$  der Bewegung.

$$j = q\nu = q \frac{v}{2\pi r}$$

Das magnetische Moment einer Kreisbewegung ist definiert durch das Produkt *Strom · umkreiste Fläche*. Diese Fläche wird durch den Flächenvektor  $\vec{f}$  beschrieben, dessen Länge die Größe der Fläche darstellt, und dessen Richtung senkrecht auf der Fläche steht. Im Falle des Elektronenumlaufs gilt dafür die „rechte-Hand-Regel“: Deutet der Zeigefinger in die Richtung der Vorwärtsbewegung, so zeigt der Daumen die Richtung des Flächenvektors an.

Abbildung 4.3: Kreisstrom.

Das magnetische Moment ist mit diesem Flächenvektor  $\vec{f}$  gegeben als:

$$\begin{aligned}\vec{\mu} &= \frac{1}{c} j \vec{f} \\ &= q \frac{v}{2\pi r c} \pi r^2 \vec{e}_z\end{aligned}$$

kürzen und mit  $\frac{m}{m}$  multiplizieren:

$$\begin{aligned}&= \frac{q}{2mc} m v r \vec{e}_z \\ &= \frac{q}{2mc} \vec{L}\end{aligned}$$

Ein magnetisches Moment ist also proportional zum Bahndrehimpuls der es verursachenden Ladung.

### Energie und Kraft durch das Magnetfeld

Berechnen wir die potentielle Energie für  $\vec{\mu}$  im Magnetfeld:

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Mit  $\mu_z$  als Projektion des Moments auf die  $z$ -Achse:

$$\begin{aligned}&= -\mu_z B \\ &= -\frac{q}{2mc} L_z B\end{aligned}$$

Das negative Vorzeichen besagt, dass Atome deren magnetisches Moment parallel zum  $\vec{B}$ -Feld steht, eine geringere potentielle Energie haben, als solche mit



antiparallel eingestelltem Moment. Die parallele Ausrichtung ist also die bevorzugte Stellung (wenn den Atomen die Zeit gegeben wird sich auszurichten).<sup>3</sup>

Die Kraft(wirkung) auf das magnetische Moment hängt von der „Beschaffenheit“ des Magnetfelds ab:

1. Ist  $\vec{B}$  homogen, also unabhängig von der  $z$ -Koordinate, so ist die potentielle Energie des Moments ebenfalls unabhängig vom Ort:

$$V = \text{const.}, \quad \frac{dV}{dz} = 0$$

Es wirkt keine Kraft auf das Atom; es fliegt unabgelenkt durch das Feld.

2. Ist  $\vec{B}$  inhomogen,  $\frac{dB}{dz} \neq 0$ , so gibt es eine Kraftkomponente in  $z$ -Richtung:

$$\begin{aligned} F_z &= -\frac{\partial V}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial z} (\mu_z B) \\ &= \frac{q}{2mc} L_z \frac{\partial B}{\partial z} \end{aligned}$$

Diese Kraft ist proportional zum Drehimpuls der Ladung.

### Atome im inhomogenen Magnetfeld

- Klassisch erwarten wir eine (kontinuierliche) Auffächerung des Strahls:

$$F_z = \frac{q}{2mc} \frac{\partial B}{\partial z} |\vec{L}| \cos \vartheta$$

mit:

$$\vartheta = \angle (\vec{L}, \vec{e}_z)$$

- In Abschnitt 3.2 haben wir gelernt, dass der quantenmechanische Drehimpuls gequantelt ist. Er kann nur bestimmte diskrete Werte annehmen. Dementsprechend sollten wir  $2l + 1$  diskrete Flecken sehen können. Mit

Abbildung 4.4: Strahlaufspaltung.

den möglichen  $z$ -Komponenten des Drehimpulses:

$$\hat{L}_z = \hbar m_l \vec{e}_z$$

wobei die magnetische Drehimpulsquantenzahl  $m_l$  bezüglich einer gegebenen Drehimpulsquantenzahl  $l$  nur folgende Werte annehmen kann:

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

<sup>3</sup>Beim Stern-Gerlach-Experiment wird den Atomen keine Zeit gegeben sich auszurichten; die einzige Wirkung des Magnetfelds ist eine Auslenkung. Diese hängt jedoch davon ab, wie das Moment relativ zum Magnetfeld steht.

erhalten wir  $2l + 1$  verschiedene Einstellungen der  $z$ -Komponente, und damit  $2l + 1$  mögliche Kraftwirkungen in  $z$ -Richtung:

$$F_z = \frac{q\hbar}{2mc} \frac{\partial B}{\partial z} m_l$$

Der Proportionalitätsfaktor im quantenmechanischen Ergebnis der Aufspaltung ist eine Größe, die häufig vorkommt:

**Definition.** Das Bohr'sche Magneton  $\mu_B$  ist definiert durch:

$$\mu_B := \frac{q\hbar}{2mc} \quad \text{Bohr'sches Magneton}$$

Da  $\mu_B$  umgekehrt proportional zur Masse ist, ist das magnetische Moment des Elektrons größer als das des Protons. Als Konsequenz ist das magnetische Moment eines Kerns<sup>4</sup> gegenüber dem seiner Elektronen vernachlässigbar (Faktor 2000).

### Vorhersage für Silberatome

Wir kennen das Wasserstoffatom mit seinem einzelnen Elektron, aber wie sieht das Energietermschema von Silber mit 47 Elektronen aus? Betrachten wir zu-

Abbildung 4.5: Energietermschema von Silber mit den aufgefüllten Edelmetallschalen und einem einzelnen Elektron in der 5. S-Schale.

nächst einfachere Atome mit weniger Elektronen und versuchen aus dem Vergleich auf die 47 Elektronen des neutralen Silberatoms zu schließen.

**Beispiel (Lithium).** Lithium besitzt drei Elektronen, wobei die zwei in der S-Schale keinen Bahndrehimpuls besitzen. Dadurch haben sie eine gewisse Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kern, sehen dort also alle drei Protonen. Diese Elektronen sind entsprechend stark gebunden. Betrachten wir das dritte Elektron mit Bahndrehimpuls. Es sieht den Kern durch die beiden anderen Elektronen abgeschirmt, also nur noch eine effektive Ladung 1. Durch diese Unterschiede in der Bindungsenergie wird die Entartung aufgehoben. Durch den Bahndrehimpuls des äußeren Elektrons existiert aber auch ein magnetisches Moment.

Abbildung 4.6: Elektronen„bahnen“ am Beispiel von <sup>3</sup>Li.

Abbildung 4.7: Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am Kern.

**Beispiel (Helium).** Mit seinen zwei Elektronen in der S-Schale ist der Bahndrehimpuls null. Somit hat das Helium-Atom kein magnetisches Moment. Dies gilt für alle Edelgase, da sich bei ihren abgeschlossenen Elektronenschalen deren  $L_z$ 's immer gegenseitig kompensieren.

<sup>4</sup>Auch die Nukleonen bewegen sich im Kern, insofern darf auch hier ein magnetisches (Kern-)Moment erwartet werden.

Bei Silber sind alle Elektronenzustände bis inklusive  $n = 4$  voll besetzt. Daraus resultiert ein Bahndrehimpuls von null (Die S-Schalen-Elektronen haben keinen Bahndrehimpuls, die Impulse der anderen Elektronen heben sich jeweils gegenseitig auf). Das letzte Elektron sitzt in der 5. S-Schale, kann dadurch keinen eigenen Bahndrehimpuls beisteuern. Silber sollte also kein magnetisches Moment haben.

Das Experiment zeigt aber eine Aufspaltung in 2 Flecken. Das verursachende magnetische Moment kann aber nach obigen Betrachtungen nicht vom Bahndrehimpuls stammen, da  $\sum_{i=1}^{47} L_{z,i} = 0$  ist. Es gibt also noch etwas, das ein magnetisches Moment mit sich bringt und für Silberatome zwei Werte annehmen kann. Rechnet man die Aufspaltung zurück, so erhält man für die neue Art von „Drehimpuls“ die zwei Werte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  für die Projektion auf die  $z$ -Achse.

**Fazit:** Der Stern-Gerlach-Versuch zeigt, dass das Konzept des Elektronenspins in die Quantenmechanik eingeführt werden muss. Dieses stellen wir nun vor, wobei wir die abschließende Deutung des Versuchs an das Ende dieses Abschnitts verschieben.

### 4.1.2 Der Elektronenspin

#### Definition

Als Folgerung aus dem Experiment postuliert man den Elektronenspin:

**Satz.** *Das Elektron besitzt einen inneren („intrinsischen“) Drehimpuls, den Spin  $\vec{s}$ . Dieser Elektronenspin ist gequantelt. Seine Spinprojektion (auf die  $z$ -Achse) kann die Werte  $s_z = +\frac{\hbar}{2}$  und  $s_z = -\frac{\hbar}{2}$  annehmen. Man spricht vom Zustand  $m_s = +\frac{1}{2}$  bzw.  $m_s = -\frac{1}{2}$ .*

Zwei neue Quantenzahlen, die Spinquantenzahl  $s$  und die magnetische Spinquantenzahl  $m_s$  müssen eingeführt werden, um den Zustand eines Elektrons vollständig beschreiben zu können. Die Quantenzahlen  $n$ ,  $l$  und  $m_l$  reichen dazu nicht aus. Bei Elektronen misst man die Spinprojektionen  $s_z = +\frac{\hbar}{2}$  und  $s_z = -\frac{\hbar}{2}$ . Die Spinquantenzahl von Elektronen legt man deswegen (in Analogie zu den Quantenzahlen des Drehimpulses) mit  $s = \frac{1}{2}$  fest, die magnetische Spinquantenzahl  $m_s$  kann die Werte  $+s$  und  $-s$  annehmen.

**Bemerkung.** Wir werden erst später auf das Pauli-Prinzip eingehen. Hier sei aber bemerkt, dass der Spin des Elektrons dafür „sorgt“, dass das Pauli-Prinzip für Elektronen weiterhin gilt. Betrachtet man nur die „alten“ Quantenzahlen, so können zwei Elektronen denselben Zustand  $|n, l, m_l\rangle$  besetzen (z.B.  $n = 1, l = 0$ ). Erst der Spin sorgt dafür, dass es sich tatsächlich um zwei unterschiedliche Zustände  $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$  handelt.

**Notation (Ket-Schreibweise mit Spin).** Die Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  für ein Elektron kann durch die explizite Nennung der Quantenzahlen charakterisiert werden:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |n, l, m_l, s, m_s\rangle \\ &= |n, l, m_l, s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

oder, wenn wir die Radialwelle und die Kugelflächenfunktion vorziehen:

$$= R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

Betrachtet man nur den Spinanteil eines Teilchens, so lässt man die nicht relevanten Quantenzahlen weg (bei Elektronen oft auch  $s$ ):

$$|\phi\rangle = |s, m_s\rangle \quad \text{Spinfunktion eines Teilchens}$$

Wie soll man sich den Spin vorstellen? Der Spin verhält sich wie ein Drehimpuls. Es gibt aber Aspekte des Spins, die nichts mit einem Drehimpuls zu tun haben. Man sollte sich also den Spin nicht konkret als Eigendrehung des Elektrons vorstellen.<sup>5</sup> Letztlich kann man nur sagen, dass der Spin eine weitere Eigenschaft des Elektrons ist. Um sich über das Problem der Vorstellbarkeit hinwegzuhelfen, nennt man es eine intrinsische (also innere) Eigenschaft. Dass jedoch Gemeinsamkeiten zum Drehimpuls bestehen ist sicher. Die Quantelung ist ein Beispiel dafür, auf die Kopplung dieser beiden Teilcheneigenschaften werden wir noch eingehen müssen.

### Weitere Schreibweisen für den Spin

Die Spinfunktion  $|s, m_s\rangle$  kann entweder als (Bra- oder) Ket-Zustand, oder als Zustandsvektor geschrieben werden. Die verschiedenen Darstellungen sind äquivalent. Zu beachten ist, dass Elektronen immer Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen sind, und somit die Angabe von  $s$  redundant ist. Die unteren beiden Darstellungsarten

Bezeichnung der Darstellung	Spinprojektion $s_z$ zeigt in die	
	positive	negative
	z-Richtung	
Zustandsvektor	$ \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
Zustandsvektor für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen	$ +\rangle$	$ -\rangle$
Spinor	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
„Aussprache“	Spin-Up	Spin-Down
„Vektorsprache“	$\uparrow$	$\downarrow$

Tabelle 4.1: Darstellungsarten der Spinfunktion für Elektronen.

werden gerne im Text oder in Abbildungen verwendet.

<sup>5</sup> Für manche Aspekte mag diese Anschauung zwar helfen – wie für das daraus resultierende magnetische Moment. Jedoch ist diese Analogie letzten Endes falsch. Mit der Relativitätstheorie wird widerlegt, dass das magnetische Moment einer Eigenrotation des Elektrons entspringt (Die experimentelle Obergrenze für den Elektronenradius impliziert z.B. für ein Massenelement am Elektronäquator, dass  $v > c$  sein müsste! Dies darf aber nicht sein.)

### Eigenschaften des Spins

Zum Vergleich mit dem Drehimpuls sind gleiche Eigenschaften mit ♡, abweichende mit ♣ markiert.

- Anomales<sup>6</sup> (♣) magnetisches Moment (♡):

$$\vec{\mu}_S = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{anomal}}}{2} \frac{q}{2mc} \vec{S}$$

wobei  $\vec{S} \parallel \vec{\mu}$  eingestellt ist (♡,  $\vec{L} \parallel \vec{\mu}$ ).

- $s$  ist halbzahlig<sup>7</sup> (♣,  $l$  ist ganzzahlig).
- $2s + 1$  Einstellmöglichkeiten für  $s_z$  (♡,  $2l + 1$  für  $l_z$ ).
- Es gibt Spinoperatoren  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ , die die Projektion auf die Raumachsen beschreiben (♡,  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ ).
- $\mu_{\text{Spin}}$  ist *nicht* die Konsequenz einer Eigendrehung des Elektrons<sup>8</sup> (♣).

### Spinoperatoren

Entgegen der bisherigen Methode zur Aufstellung der quantenmechanischen Operatoren, haben wir beim Spin keine Möglichkeit auf klassische Erfahrungen aufzubauen.

Ausgehend von der Tatsache, dass die Messung der Spinprojektion  $s_z$  die Werte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  ergibt, muss vom Operator  $\hat{S}_z$  gefordert werden, dass er diese Werte als Eigenwerte erzeugt:<sup>9</sup>

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle$$

**Behauptung.** Der Spinoperator der  $z$ -Komponente ist:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Der Spin hat zwei Einstellmöglichkeiten,  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$ . Damit sollten wir erwarten, dass eine vernünftige Basis zwei linear unabhängige Komponenten besitzt. Die Spinoren in Tabelle 4.1 sind solche Basisvektoren. Ein Spinzustand besitzt in Vektordarstellung zwei Komponenten. Das obere Element eines Spin-Vektors ist die Projektion des Spins  $|s\rangle$  auf den Up-Basisvektor  $|+\rangle$ , der untere Koeffizient stellt die Projektion von  $|s\rangle$  auf den Down-Basisvektor  $|-\rangle$  dar. Da nun der Spin als Vektor im 2-dimensionalen Raum (der Spinoren) darstellbar

<sup>6</sup>Der Faktor 2, der historisch den Namen „anomal“ einbrachte, ist zunächst nur empirisch. Theoretisch kann ihn erst die Dirac-Gleichung (relativistische Quantenmechanik) erklären.

<sup>7</sup>Beachte, dass die Gleichheit eines Zustands nach einer  $360^\circ$ -Drehung nur mit ganzzahligen Drehimpulsen verträglich ist.

<sup>8</sup>Siehe hierzu Fußnote 5 auf Seite 212.

<sup>9</sup>Die Schreibweise  $|\pm\rangle$  dient zur Darstellung eines beliebigen (allgemeinen) Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustandsvektors.

ist, muss der zugehörige Spinoperator eine  $2 \times 2$ -Matrix sein.  $\hat{S}_z$  besitzt also die richtige Dimensionierung. Es bleibt noch zu prüfen, ob  $\hat{S}_z$  den richtigen Eigenwert zu den (angenommenen) Eigenvektoren  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  reproduziert. Im folgenden Beweis benutzen wir die Spinor-Matrix-Darstellung.

*Beweis.* Prüfen wir die Behauptung zunächst für Spin-Up.

$$\hat{S}_z |+\rangle \equiv \hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Einsetzen der Behauptung:

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Matrix-Vektor-Multiplikation ausführen:

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \end{aligned}$$

$\frac{\hbar}{2}$  ist der geforderte Eigenwert. Für Spin-Up ist  $\hat{S}_z$  also korrekt. Prüfen wir den Operator nun für Spin-Down:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Auch für  $\downarrow$  erhalten wir den geforderten Eigenwert  $-\frac{\hbar}{2}$ . Der Operator ist gerechtfertigt.  $\square$

Lesen wir obige Eigenwertgleichungen vollständig, so ergibt sich, dass:

- die Eigenwertgleichung des Spin-Operators  $\hat{S}_z$  zwei linear unabhängige Lösungen besitzt:
- der Spin-Eigenvektor  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  dabei den Eigenwert  $\frac{\hbar}{2}$  hat,
- der Eigenvektor  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  den Eigenwert  $-\frac{\hbar}{2}$  besitzt.

Die Operatoren für die anderen beiden Raumrichtungen ergeben sich zu:

$$\boxed{\hat{S}_x := \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} \quad \boxed{\hat{S}_y := \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}} \quad \text{Spinoperatoren}$$

Es wird sich als praktisch erweisen zwei weitere Operatoren aufzustellen, die die Spinzustände umklappen können, „Spinumklappoperatoren“. Wir suchen also einen Operator, der aus Spin-up Spin-down macht, und einen, der die umgekehrte Operation kennt. Folgender Operator  $\hat{S}_+$  leistet Ersteres (das Hochklappen wird durch den Index „+“ ausgedrückt):

$$\hat{S}_+ := \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

*Test.* Lassen wir  $\hat{S}_+$  zunächst auf  $\uparrow$  wirken:

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ausführen der Matrix-Vektor-Multiplikation ergibt:

$$= |0\rangle$$

d.h. der Operator  $\hat{S}_+$  kann  $\uparrow$  nicht hochklappen, weil  $\uparrow$  schon „oben“ ist.

Anders sieht es bei einem Down-Spin aus:

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$\hat{S}_+$  klappt also  $\downarrow$  um und erzeugt  $\uparrow$ . Unser gewählter Operator und die Matrixschreibweise funktionieren also.  $\square$

Wir machen die Definition nun offiziell.

**Definition (Aufsteigeoperator des Spins).** *Der Operator*

$$\boxed{\hat{S}_+ := \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}} \quad \text{Spin-Aufsteigeoperator}$$

*klappt einen Down-Spin nach oben um.*

**Definition (Absteigeoperator des Spins).** *Der Operator*

$$\boxed{\hat{S}_- := \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} \quad \text{Spin-Absteigeoperator}$$

*klappt einen Up-Spin herunter.*

Die Definition des Absteigeoperators unterscheidet sich nur durch ein Vorzeichen vom Aufsteigeoperator:

$$\hat{S}_- := (\hat{S}_+)^\dagger$$

Diese beiden Operatoren sind also nicht hermitesch. Sie sind damit nicht für eine (physikalisch sinnvolle) Eigenwert- bzw. Erwartungswertfindung zu gebrauchen. Nichtsdestotrotz werden sie sich als nützlich erweisen.

Der Operator  $\hat{S}_+$  klappt den Spin eine „Stufe“ höher. Bei halbzahligen Spin heißt das, dass aus  $s = -\frac{1}{2}$  durch Anwendung von  $\hat{S}_+$   $s = \frac{1}{2}$  wird. Eine weitere Anwendung würde zu  $s = \frac{3}{2}$  führen. Da der Elektronenspin jedoch nur die Werte  $\pm\frac{1}{2}$  annehmen kann, führt diese Operation zu keinem möglichen Zustand. Die Anwendung ergibt also  $|0\rangle$ .<sup>10</sup>

<sup>10</sup>Diese Eigenschaft kann auch mathematisch ausgedrückt werden: Z.B. ist Spin-Up kein Eigenzustand zum Operator  $\hat{S}_+$ . Die Anwendung des Operators auf diesen Zustand kann somit keinen gültigen (physikalischen) Zustand ergeben; dies kennzeichnet man mit  $|0\rangle$ .

**Eigenschaften der Spin-Matrizen**

- Die Definition der Klapp-Operatoren kann man auch anders herum lesen:

$$\begin{aligned}\hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)\end{aligned}$$

- Spinoperatoren und Pauli'sche Spinmatrizen sind eng miteinander verbunden:

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

- Die Spinoperatoren sind (anders als die Spin-Klapp-Operatoren) hermitesch:

$$\hat{S}_\alpha^\dagger = \hat{S}_\alpha$$

*Beweis.*  $\sigma_x$  und  $\sigma_z$  sind symmetrische Matrizen mit reellen Einträgen. Damit bleibt eine Adjunktion ohne Wirkung. Fehlt noch der Beweis für  $\hat{S}_y$ :

$$\begin{aligned}\hat{S}_y^\dagger &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^\dagger \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}^* \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \hat{S}_y\end{aligned}$$

□

- Die Kommutatoren der Spinoperatoren stehen in direkter Analogie zum Drehimpuls (sei wieder  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$  jede zyklische Permutation von  $\{x, y, z\}$ ):

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta]_- = i\hbar \hat{S}_\gamma$$

Definiert man noch den Operator  $\hat{S}^2$ :

$$\hat{S}^2 := \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

so kommutiert dieser mit den Einzelkomponenten:

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_\alpha]_- = 0$$



- Der so definierte Operator  $\hat{S}^2$  hat für Spin- $\frac{1}{2}$  den Eigenwert  $\hbar^2 \frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4} \hbar^2$ . Allgemein lautet der Eigenwert für einen Spin  $s$ :  $\hbar^2 s(s + 1)$ .

Die Kommutatorbeziehungen der  $\hat{S}_\alpha$  sind eine direkte Folge der Eigenschaften der Paulimatrizen:

$$\begin{aligned} [\sigma_\alpha, \sigma_\beta]_- &= 2i\sigma_\gamma \\ \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1}_2 \end{aligned}$$

**Bemerkung.** Die Spinmatrizen fallen nicht vom Himmel, sondern sind mathematische Definitionen, die aus den physikalischen Eigenschaften des Spins „herausdestilliert“ wurden. Eine mathematische Konsequenz des Drehimpuls-ähnlichen Verhaltens des Spins ist zum Beispiel, dass die Spinmatrizen die Kommutator-Eigenschaften des Drehimpulses erfüllen müssen.

### Deutung des Stern-Gerlach-Versuchs

Das magnetische Moment des Elektronenspins ist proportional und parallel zum Spin. Zwei Elektronen im selben Zustand  $|n, l, m_l\rangle$  müssen eine unterschiedliche Spineinstellung besitzen (Da keine zwei Elektronen denselben Zustand  $|n, l, m_l, s, m_s\rangle$  besetzen dürfen; so „verlangt“ es das Pauli-Prinzip). Die zwei Spins heben sich also gegenseitig auf, da sie entgegengesetzt ausgerichtet sind (den Zweiteilchen-Spinzustand würde man  $|\uparrow\downarrow\rangle$  bezeichnen). Bleibt also das 47. Elektron übrig. Ohne Partner bleibt dessen magnetisches Spinnmoment „unkompensiert“. Die Aufspaltung des Strahls stammt also vom Spin des letzten Elektrons, das einen effektiven Drehimpuls  $\hat{S}_{z,47}$  besitzt. Dieser ist gequantelt und kann zwei Werte annehmen, entsprechend erhält man zwei Flecken auf dem Schirm.

## 4.2 Translation und Rotation

Wir haben in Abschnitt 1.2.2 auf Seite 38 gesehen, dass der Impulsoperator der Generator einer Ortsverschiebung ist. Diese Ortsverschiebung möchten wir nun verallgemeinern, indem wir einen Translationsoperator suchen. Mit Drehimpuls und Spin haben wir die Grundlagen um auch „Winkelverschiebungen“ zu behandeln, wir werden die im ersten Teil gewonnenen Erfahrungen anwenden, um auch einen Rotationsoperator aufzustellen.

### 4.2.1 Translation von Zuständen

#### Vorüberlegungen

Wir definieren zunächst formal einen Translationsoperator, der eine Wahrscheinlichkeitsverteilung an einen anderen Ort verschiebt, das Aussehen der Verteilung dabei aber unverändert lässt.

**Beispiel.** Sei im Folgenden  $\phi_a$  eine Wellenfunktion deren Zentrum bei  $x = a$  liegt; als Zustandsvektor ausgedrückt:

$$|a\rangle \equiv |\phi_a\rangle$$

bzw. in Ortsdarstellung:

$$\langle x|a\rangle \equiv \phi_a(x)$$

Soll der Operator  $\hat{T}$  unser Teilchen, das durch  $\phi_a$  beschrieben wird, um  $\Delta x$  verschieben, so drücken wir dies durch  $\hat{T}(\Delta x)$  aus.

Abbildung 4.8: Translation einer Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Mit der Beispielwellenfunktion  $|\phi_a\rangle$  versuchen wir nun etwas über den Translationsoperator zu erfahren.

Man kann eine Verschiebeoperation auf zwei Arten deuten:

1. Der Operator  $\hat{T}(\Delta x)$  verschiebt unser System  $\phi_a$  um  $\Delta x$ :

$$\begin{aligned}\phi_{\text{neu}}(x) &= \hat{T}(\Delta x)\phi_a(x) \\ &= \phi_{a+\Delta x}(x)\end{aligned}$$

2. Der Operator  $\hat{T}$  verschiebt das Koordinatensystem um  $-\Delta x$ :

$$\begin{aligned}\phi_a(x_{\text{neu}}) &= \phi_a(\hat{T}(\Delta x)x) \\ &= \phi_a(x - \Delta x)\end{aligned}$$

In Ket-Schreibweise wird das folgendermaßen ausgedrückt: Der Translationsoperator  $\hat{T}(\Delta x)$  auf einen Zustand angewandt, der das „Ortsmerkmal“  $x$  hat, erzeugt einen Zustand mit Merkmal  $x + \Delta x$ :

$$\hat{T}(\Delta x)|x\rangle = |x + \Delta x\rangle$$

Weil  $\hat{T}$  aus einem Anfangszustand  $|x\rangle$  einen Endzustand  $|x + \Delta x\rangle$  generiert, folgern wir:

**Behauptung.** Der Operator  $\hat{T}$  muss folgende Integraldarstellung besitzen:

$$\hat{T}(\Delta x) = \int_{-\infty}^{+\infty} |x' + \Delta x\rangle\langle x'| dx'$$

*Beweis.* Multiplizieren wir  $|x\rangle$  von rechts:

$$\begin{aligned} \hat{T}(\Delta x)|x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x' + \Delta x\rangle\langle x'|x\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x' + \Delta x\rangle\delta(x - x') dx' \\ &= |x + \Delta x\rangle \end{aligned}$$

Die Integraldarstellung des Translationsoperators  $\hat{T}$  reproduziert die Translation des Ortszustands richtig; sie ist also korrekt.  $\square$

Wenden wir dieses Wissen auf  $\phi_a(x) = \langle x|a\rangle$  an:

$$\begin{aligned} \phi_{\text{neu}}(x) &= \hat{T}(\Delta x)\phi_a(x) \\ &= \langle x|\hat{T}(\Delta x)|a\rangle \end{aligned}$$

$\hat{T}$  ausschreiben:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|x' + \Delta x\rangle\langle x'|a\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - (x' + \Delta x))\phi_a(x') dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta((x - \Delta x) - x')\phi_a(x') dx' \\ &= \phi_a(x - \Delta x) \end{aligned}$$

Wir erhalten mit diesem Operator das gewünschte Ergebnis. Die gewonnene Integralschreibweise ist jedoch nicht die allgemeine Operatorform, sondern nur deren Ortsdarstellung.

### Aufstellen des Translationsoperators

Wie sieht  $\hat{T}(\Delta x)$  allgemein aus, oder anders formuliert: Aus welchen elementaren Operatoren setzt sich der Translationsoperator zusammen (und wie)?

Sehen wir uns dazu zunächst eine infinitesimale Translation an, um daraus auf Größeres schließen zu können.<sup>11</sup>

1. Sei die Verschiebung infinitesimal ( $\Delta x \rightarrow dx$ ), dann ist:

$$\hat{T}(dx)\phi(x) = \phi(x - dx)$$

Nach Taylor entwickelt:

$$= \phi(x) - dx \frac{d}{dx}\phi(x) + \frac{(dx)^2}{2} \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) - \dots$$

da  $dx$  klein ist, kann der quadratische Term schon vernachlässigt werden:

$$\approx \phi(x) - dx \frac{d}{dx}\phi(x)$$

Ausklammern von  $\phi(x)$ :

$$= \left(1 - dx \frac{d}{dx}\right)\phi(x)$$

Hier erkennen wir den Impulsoperator  $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  wieder:

$$= \left(1 - dx \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x\right)\phi(x)$$

Dass  $\hat{p}_x$ , als der Generator der infinitesimalen Translation in  $x$ , eine Rolle im Translationsoperator spielt, verwundert nicht.

2. Sei  $\Delta x$  nun endlich groß:

$$\hat{T}(\Delta x)\phi(x) = \phi(x - \Delta x)$$

Entwickeln wir wieder nach Taylor:

$$= \phi(x) - \Delta x \frac{d}{dx}\phi(x) + \frac{1}{2!}(\Delta x)^2 \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \dots$$

Setzen wir wieder  $\hat{p}$  statt der Differentiation ein. Diesmal dürfen wir aber keine Terme vernachlässigen, da  $\Delta x$  „relativ“ groß sein kann:

$$= \phi(x) - \left(\Delta x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x\right)\phi(x) + \frac{1}{2!} \left(-\Delta x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x\right)^2 \phi(x) - \dots$$

Schreiben wir diese Reihe kompakter:

$$= \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\Delta x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x\right)^k\right)\phi(x)$$

---

<sup>11</sup>Den Index  $a$  der Wellenfunktion lassen wir der Übersichtlichkeit wegen weg; er ist hier auch nicht relevant, da die Rechnungen allgemein gültig sind.

Diese Entwicklung entspricht aber der Exponentialfunktion:

$$= e^{-\Delta x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x} \phi(x)$$

Damit haben wir die Darstellung des Translationsoperators gefunden.

$$\hat{T}(\Delta x) = e^{-\Delta x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x}$$

Da wir in obiger Rechnung keine Einschränkungen für  $\Delta x$  gemacht haben, und auch keine Terme vernachlässigten, ist die gefundene Formel von allgemeiner Gültigkeit. Außerdem kann man sie sofort auf drei Dimensionen verallgemeinern:

**Satz.** Der Translationsoperator einer Verschiebung um  $\Delta \vec{r}$  ist gegeben durch:

$$\boxed{\hat{T}(\Delta \vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta \vec{r} \cdot \hat{p}}} \quad \text{Translationsoperator}$$

Wendet man  $\hat{T}$  auf eine Funktion an, muss man jeden Term der Exponentialreihe einzeln anwenden, und hoffen, dass viele Terme wegfallen, oder dass das Ergebnis wieder eine (bekannte) Reihe ist.

### Eigenschaften des Translationsoperators

- Der Translationsoperator ist unitär:

$$\hat{T}^{-1} = \hat{T}^\dagger$$

*Beweis.* Die Umkehroperation entspricht der Transformation in die entgegengesetzte Richtung, also muss gelten:

$$\hat{T}^{-1}(\Delta \vec{r}) \stackrel{!}{=} \hat{T}(-\Delta \vec{r})$$

in Exponential-Schreibweise:

$$\begin{aligned} &= e^{-\frac{i}{\hbar} (-\Delta \vec{r}) \cdot \hat{p}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} (\Delta \vec{r}) \cdot \hat{p}} \\ &= \hat{T}^\dagger \end{aligned}$$

da  $\hat{p}$  selbstadjungiert ist, also  $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$  gilt. □

- Die Hintereinanderausführung zweier Translationen ist vertauschbar:

$$\hat{T}(\Delta \vec{r}_1) \hat{T}(\Delta \vec{r}_2) = \hat{T}(\Delta \vec{r}_2) \hat{T}(\Delta \vec{r}_1)$$

Abbildung 4.9: Vertauschung der hintereinander ausgeführten Translationen.

*Beweisskizze.* Die Eigenschaft folgt aus der Vertauschbarkeit der Impulsoperatoren:

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_x] = 0$$

Denn damit ist auch:

$$\begin{aligned} \hat{T}(\Delta y) \hat{T}(\Delta x) &= e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta y)\hat{p}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta x)\hat{p}_x} \\ &\stackrel{!}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta x)\hat{p}_x} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta y)\hat{p}_y} \\ &= \hat{T}(\Delta x) \hat{T}(\Delta y) \end{aligned}$$

□

**Bemerkung (zum Beweis).** Anschaulich ist die Vertauschbarkeit von Translationen klar. Aber auch in Operatorschreibweise kann man es einsehen, wenn man beachtet, dass letztlich nur Impulsoperatoren gegeneinander vertauscht werden, also die Reihenfolge der Ableitungen. Die dort auftretenden partiellen Ableitungen beeinflussen sich aber nicht:

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x}$$

## 4.2.2 Rotation von Zuständen

### Vorüberlegungen

Versuchen wir nun einen Operator  $\hat{R}$  aufzustellen, der Rotationen beschreiben kann. Den Drehwinkel (oder die Rotationsachse) geben wir meist als Index an. Die Angabe als Argument geschieht vor allem dann, wenn mehrere Drehungen durch einen Operator ausgedrückt werden sollen, und somit die Reihenfolge mitentscheidend ist. Denn im Gegensatz zu Translationen hängt bei Rotationen das Endergebnis von der Reihenfolge der Einzeloperationen ab. Dies kann man sich mit Hilfe eines Buches leicht vor Augen führen.

$$\hat{R}(x\text{-Achse}) \hat{R}(y\text{-Achse}) \neq \hat{R}(y\text{-Achse}) \hat{R}(x\text{-Achse})$$

Damit kennen wir schon eine formale Eigenschaft der Rotationsoperatoren; der Kommutator zweier Rotationen (um verschiedene Achsen) ist im Allgemeinen ungleich null:

$$[\hat{R}_x, \hat{R}_y]_- \neq 0$$

Wie schon bei der Translation können wir auch die Rotation von zwei Seiten (aus zwei Koordinatensystemen heraus) betrachten:

Abbildung 4.10: Drehung um die  $z$ -Achse.

1. Einerseits wird die Wellenfunktion im Raum gedreht, also:

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{Drehung}} \hat{R}\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$$

2. Andererseits kann man aber auch das Koordinatensystem unter der Wellenfunktion verdrehen:

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{\text{Drehung}} \psi(\hat{R}\vec{r}) = \psi(\vec{r}')$$

**Beispiel (für eine Drehung um die  $z$ -Achse).** Wählen wir einen Drehwinkel  $\alpha$  um die  $z$ -Achse. Dann ist:

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \hat{R}_\alpha \psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r}' = \hat{R}_\alpha \vec{r}) \end{aligned}$$

Schreiben wir das Argument der Wellenfunktion in Vektorschreibweise:

$$\psi' \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \hat{R}_\alpha \psi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Die Anwendung von  $\hat{R}$  auf den Zustand heißt, wie wir oben gesehen haben, eine Koordinatentransformation durchzuführen;  $\hat{R}$  wird also auf das Argument der Wellenfunktion angewandt:

$$= \psi \left( \hat{R}_\alpha \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right)$$

Führen wir die konkrete Rotation aus, so erhalten wir das „gedrehte“ Argument der Wellenfunktion:

$$= \psi \begin{pmatrix} x \cos \alpha + y \sin \alpha \\ y \cos \alpha - x \sin \alpha \\ z \end{pmatrix}$$

Beim Anwenden des Rotationsoperators werden also die Koordinaten des Zustands entsprechend der „Rotationsoperation“ verändert.

### Aufstellen des Rotationsoperators

Betrachten wir, wie schon bei der Translation, die Veränderung der Wellenfunktion zunächst für eine infinitesimale, dann für eine allgemeine Rotation.

1. Sei  $\varepsilon$  eine infinitesimale Drehung. Dann kann man folgende Näherungen benutzen:

$$\begin{aligned} \cos \varepsilon &\approx 1 \\ \sin \varepsilon &\approx \varepsilon \end{aligned}$$

Damit ist, wenn wir, wie oben, wieder eine Drehung um die  $z$ -Achse betrachten, und das Argument als Vektor ausschreiben:

$$\hat{R}_\varepsilon \psi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \psi \begin{pmatrix} x \cos \varepsilon + y \sin \varepsilon \\ y \cos \varepsilon - x \sin \varepsilon \\ z \end{pmatrix}$$

Mit den Näherungen für kleine  $\varepsilon$  schreibt sich die Wellenfunktion folgendermaßen:

$$\approx \psi \begin{pmatrix} x + y \cdot \varepsilon \\ y - x \cdot \varepsilon \\ z \end{pmatrix}$$

Die Variation in den Koordinaten  $x$  und  $y$  können wir, wegen der Infinitesimalität, aus dem Argument „herausziehen“. Auf eine Komponente bezogen schreiben wir also statt  $\psi(x + \Delta x)$ , so etwas wie  $\psi(x) + \psi'(x)$  (das Argument schreiben wir zur besseren Überschaubarkeit klein):

$$= \psi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \varepsilon \left( y \frac{d}{dx} \psi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - x \frac{d}{dy} \psi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right)$$

Klammern wir die Wellenfunktion aus, so bleibt links davon ein Operator stehen:

$$= \left( 1 + \varepsilon \left( y \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dy} \right) \right) \cdot \psi(\vec{r})$$

Setzen wir statt der Ableitungen den Impulsoperator ein:

$$= \left( 1 + \varepsilon \frac{i}{\hbar} (y \hat{p}_x - x \hat{p}_y) \right) \cdot \psi(\vec{r})$$

Damit kommt aber der Drehimpuls ins Spiel, denn  $y \hat{p}_x - x \hat{p}_y = -\hat{L}_z$ :

$$= \left( 1 - \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \right) \psi(\vec{r})$$

Für infinitesimale Drehungen  $\varepsilon$  erhalten wir folgenden Drehoperator:

$$\hat{R}_\varepsilon = \left( 1 - \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \right)$$

Der Rotationsoperator enthält den Operator des Drehimpulses  $\hat{L}_z$ . Das verwundert nicht, denn  $\hat{L}_z$  ist der Generator einer infinitesimalen Rotation um die  $z$ -Achse.

2. Kommen wir nun zu einer „endlich großen“ Drehung um die  $z$ -Achse mit Drehwinkel  $\alpha$ . Wir versuchen einen Trick anzuwenden, indem wir auf das eben erarbeitete Ergebnis der infinitesimalen Drehung zurückgreifen. Statt  $\hat{R}_\alpha$  betrachten wir hierzu  $\hat{R}_{\alpha+\varepsilon}$ . Dies ist aber (bei gleicher Drehachse) die Hintereinanderausführung der zwei Einzeldrehungen:

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\alpha+\varepsilon} &= \hat{R}_\varepsilon \hat{R}_\alpha \\ &= \left( 1 - \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \right) \hat{R}_\alpha \end{aligned}$$



Betrachten wir nun die Änderung des Operators  $\hat{R}_\alpha$  mit Hilfe seines Differentialquotienten:

$$\frac{d\hat{R}_\alpha}{d\alpha} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{R}_{\alpha+\varepsilon} - \hat{R}_\alpha}{\varepsilon}$$

Einsetzen der Hintereinanderausführung:

$$\begin{aligned} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\left(1 - \varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z\right) \hat{R}_\alpha - \hat{R}_\alpha}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-\varepsilon \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \hat{R}_\alpha}{\varepsilon} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \hat{R}_\alpha \end{aligned}$$

Trennen wir die Variablen:

$$\frac{d\hat{R}_\alpha}{\hat{R}_\alpha} = -\frac{i}{\hbar} \hat{L}_z d\alpha$$

und integrieren die damit erhaltene Differentialgleichung, so erhalten wir als Ergebnis:

$$\boxed{\hat{R}_\alpha = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z}} \quad \text{Rotationsoperator (Drehung um die } z\text{-Achse)}$$

Damit haben wir den Drehoperator  $\hat{R}$  in anwendbarer Form. Für Drehungen um die  $x$ - oder  $y$ -Achse muss man nur den Drehimpuls um die entsprechende Achse gegen  $\hat{L}_z$  austauschen.

Nun können wir den Rotationsoperator auf einen Zustand anwenden:

**Beispiel.** Wir betrachten eine Drehung um die  $z$ -Achse mit Winkel  $\alpha$  für die stationäre Lösung  $\psi$  eines rotationssymmetrischen Potentials.  $m_l$  ist die magnetische Drehimpulsquantenzahl. Der Zustand sei ohne Spin. Dazu zerlegen wir zunächst  $\psi$  in Radial- und Winkelanteil:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} P_{lm_l}(\cos \vartheta) e^{im_l \varphi}$$

Wenden wir  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}$  auf den Lösungszustand an, so erhalten wir den Eigenwert:

$$\hat{L}_z \psi(\vec{r}) = \hbar m_l \psi(\vec{r})$$

Im Rotationsoperator  $\hat{R}$  kommt der Drehimpulsoperator  $\hat{L}_z$  auch in Potenzen vor. Die mehrmalige Anwendung liefert aber jeweils nur ein weiteres Mal den Eigenwert  $\hbar m_l$ . Diese Ersetzung benötigen wir im Folgenden. Schreiben wir den Operator aus:

$$\hat{R}_\alpha \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z} \psi(\vec{r})$$

Entwickeln wir die Exponentialfunktion als Reihe:

$$= \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z + \frac{1}{2!} \left( \frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z \right)^2 - \dots \right) \psi(\vec{r})$$

Lassen wir nun  $\hat{L}_z$  wirken:

$$= \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \hbar m_l + \frac{1}{2!} \left( \frac{i}{\hbar} \alpha \hbar m_l \right)^2 - \dots \right) \psi(\vec{r})$$

Die Reihe stellt aber immer noch eine Exponentialfunktion dar:

$$\begin{aligned} &= e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hbar m_l} \psi(\vec{r}) \\ &= e^{-i \alpha m_l} \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Schreiben wir die Wellenfunktion wieder aus, so erhalten wir:

$$= \frac{u_{nl}(r)}{r} P_{lm_l}(\cos \vartheta) e^{i m_l (\varphi - \alpha)}$$

Vergleicht man das mit der ungedrehten Wellenfunktion, so sieht man, dass nur ein (Phasen-)Faktor  $e^{-i m_l \alpha}$  durch die Rotation hinzukommt. Diese Phase ändert aber nichts am physikalischen Ergebnis, da sie bei der Bildung des Betragsquadrats herausfällt. Das ist auch was man erwarten sollte, denn die Drehung darf bei einem rotationssymmetrischen System keine Änderung des physikalischen Zustands bewirken.

Berechnungen von Drehungen um die  $x$ - oder  $y$ -Achse laufen analog.

### Vergleich von Rotations- und Translationsoperator

Die Form der Operatoren  $\hat{T}$  und  $\hat{R}$  ist die gleiche. Das liegt daran, dass alle Operatoren von Koordinatentransformationen diese Form besitzen:

$$\exp(\text{Vorfaktor} \cdot \text{„Verschiebung“} \cdot \text{zugehöriger (generierender) Operator})$$

### 4.2.3 Allgemeine Rotationen

Unsere bisherigen Betrachtungen zielten auf *Bahndrehimpulse*, nun möchten wir den allgemeinen Fall betrachten. Jeder beliebige Drehimpuls erzeugt eine Drehung, wir sprechen also nun allgemein vom *Drehimpuls*. Wir ersetzen  $\hat{L}$  durch  $\hat{J}$ , um dies auch in den Formeln zum Ausdruck zu bringen. Des Weiteren möchten wir uns beliebige Rotationen ansehen, nicht mehr nur solche um eine Achse.

### Euler'sche Winkel

Beliebige Rotationen werden durch die drei *Euler'schen Winkel* beschrieben:

1.  $\alpha$  – Drehwinkel um die  $z$ -Achse.
2.  $\beta$  – Drehwinkel um die neu erhaltene  $y$ -Achse.
3.  $\gamma$  – Drehwinkel um die neue  $z$ -Achse.

Die Reihenfolge der Drehachsen ist Konvention; sie hat sich so eingebürgert. Mit dieser Konvention definieren die Winkel  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  jede beliebige Drehung vollständig und eindeutig.

Der allgemeine Rotationsoperator  $\hat{R}$  stellt eine Hintereinanderausführung dreier Rotationen dar. Er hat damit folgende Form:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z}$$

**Bemerkung.** Beachte die Reihenfolge der einzelnen Teiloperatoren:

- Die Operatoren werden von rechts beginnend, nach links fortlaufend, auf eine Wellenfunktion angewandt (der Operator, der der Wellenfunktion am nächsten steht, darf sie auch zuerst beeinflussen).
- Die Reihenfolge ist im Allgemeinen relevant:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z}$$

Ein Spezialfall ist eine Drehung mit  $\beta = 0$ . Damit (und nur dann) ist die Reihenfolge der zwei  $z$ -Drehungen egal.

Abbildung 4.11: Allgemeine Drehung.

### Eigenschaften des Rotationsoperators

- **Unitarität:** Der Rotationsoperator ist unitär:

$$\boxed{\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger}$$

*Beweis.* Mit der allgemeinen Regel:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

und weil die  $\hat{J}_i$  hermitesch sind, ist:

$$\hat{R}^\dagger(\alpha, \beta, \gamma) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z} e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z}$$

Außerdem ergibt das Produkt aus der Exponentialfunktion und deren konjugiert komplexer Funktion:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\xi\hat{J}_i} e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{J}_i} = e^0 = \mathbf{1}_3$$

Somit heben sich die  $e$ -Funktionen, von der Mitte an, paarweise gegeneinander auf:

$$\begin{aligned} \hat{R}^\dagger \hat{R} &= e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{J}_z} e^{\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_y} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma \hat{J}_z}}_{=1} e^{-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{J}_z} \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{=1} \\ &= \mathbb{1}_3 \\ &= \hat{R}^{-1} \hat{R} \end{aligned}$$

Also ist  $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger$ . □

- **Eigenzustände und Eigenwerte:** Ein „drehimpulsbelasteter“ Zustand, der Eigenzustand von  $\hat{J}_z$  ist, erfüllt folgende Eigenwertgleichung:

$$\hat{J}_z |j, m_j\rangle = j |j, m_j\rangle$$

wobei der Eigenwert  $j$  noch gefunden werden muss. Die Ket-Schreibweise  $|j, m_j\rangle$  soll dabei verdeutlichen, dass es sich um einen Eigenzustand mit den Quantenzahlen  $j$  und  $m_j$  handelt. Ist nur der (Gesamt-)Drehimpuls  $\hat{J}$  im Spiel, so kann der Index  $j$  der Magnetquantenzahl  $m_j$  entfallen.

Der Zustand  $|j, m_j\rangle$  soll ein Eigenzustand bezüglich der Operatoren  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  sein. Das ist möglich, weil  $\hat{J}^2$  mit allen Drehimpulsoperatoren vertauscht:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\alpha]_- = 0$$

**Behauptung.** Der Zustand  $\hat{R} |j, m\rangle$  ist Eigenzustand von  $\hat{J}^2$  mit dem Eigenwert  $\hbar^2 j(j+1)$ .

*Beweis.* Wir addieren zunächst null:

$$\hat{J}^2 \hat{R} |j, m\rangle = \hat{J}^2 \hat{R} |j, m\rangle - \hat{R} \hat{J}^2 |j, m\rangle + \hat{R} \hat{J}^2 |j, m\rangle$$

Die vorderen zwei Operatorpaare lassen sich als Kommutator schreiben:

$$= [\hat{J}^2, \hat{R}]_- |j, m\rangle + \hat{R} \hat{J}^2 |j, m\rangle$$

Dieser Kommutator verschwindet jedoch, da  $\hat{R}$  selbst nur aus  $\hat{J}_\alpha$ 's besteht (und diese mit  $\hat{J}^2$  vertauschen):

$$= \hat{R} \hat{J}^2 |j, m\rangle$$

Nun können wir  $\hat{J}^2$  auf den Zustand wirken lassen; erhalten somit den Eigenwert:

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

Der Operator  $\hat{R}$  darf nun mit dieser Zahl vertauscht werden:

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

Der Rotationsoperator ändert also nichts am Eigenwert eines Eigenzustands zum Operator  $\hat{J}^2$ . □

### Drehungen und Basisdarstellung, Wigner-Funktionen

Betrachten wir zunächst eine einzelne Drehung mit Drehwinkel  $\xi$  um die  $\alpha$ -Achse. Innerhalb der Exponentialfunktion können wir dabei, wie oben gezeigt, den Operator durch seinen zugehörigen Eigenwert ersetzen, wenn wir ihn auf einen Eigenzustand von  $\hat{J}_\alpha$  anwenden:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{J}_\alpha} |j, m\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hbar m} |j, m\rangle$$

Die Drehung erzeugt also eine zusätzliche komplexe Phase des Zustands:

$$= e^{-i\xi m} |j, m\rangle$$

Diesen (Dreh-)Eigenwert  $e^{-i\xi m}$  kann man, bezüglich einer gegebenen Quantenzahl  $m$ , als komplexe Funktion ansehen, die vom Winkel  $\xi$  abhängt.

Nimmt man alle Drehimpulszustände  $|j', m'\rangle$ , die ein Teilchen annehmen kann, so bilden diese eine Basis für den Drehimpulszustand des Teilchens (sie sind vollständig und linear unabhängig). Nutzen wir diese Basis, um den gedrehten Zustand damit darzustellen (wir schieben also die Identität  $\hat{1}$  der Drehimpulsbasiszustände ein):

$$e^{-i\frac{\xi}{\hbar}\hat{J}_\alpha} |j, m\rangle = \sum_{j'} \sum_{m'=-j}^{+j} |j', m'\rangle \langle j', m' | e^{-i\frac{\xi}{\hbar}\hat{J}_\alpha} |j, m\rangle$$

Durch eine Rotation ist es nicht möglich die Quantenzahl  $j$  zu ändern, die Koeffizienten der Basistransformation mit  $j \neq j'$  sind also null. Betrachten wir nur noch die relevanten Basiszustände:

$$= \sum_{m'=-j}^{+j} |j, m'\rangle \langle j, m' | e^{-i\frac{\xi}{\hbar}\hat{J}_\alpha} |j, m\rangle$$

Da alle Drehimpulszustände Eigenfunktionen zum Rotationsoperator sind, können wir, wie oben geschehen, die Eigenwerte einsetzen:

$$= \sum_{m'=-j}^{+j} |j, m'\rangle \langle j, m' | e^{-i\xi m} |j, m\rangle$$

Die Entwicklungskoeffizienten dieser Basistransformation bilden eine Matrix, man nennt sie entsprechend Matrixelemente oder Übergangsmatrixelemente. Für diese spezielle Basistransformation der Drehung erhalten sie einen eigenen Namen:<sup>12</sup>

**Definition (Wigner-d-Funktion).** Die Entwicklungskoeffizienten der Basistransformation, die einen Basiszustand  $|j, m\rangle$  in den um eine Achse gedrehten Zustand  $|j, m'\rangle$  überführen, sind Funktionen des Drehwinkels  $\xi$ :

$$\boxed{d_{m'm}^j(\xi) := \langle j, m' | e^{-im\xi} |j, m\rangle} \quad \text{Wigner-d-Funktionen}$$

<sup>12</sup>[Sakurai-1, Seite 192–195] ist eines der Bücher, die auf die Wigner-Funktionen eingehen.

Dieses Ergebnis lässt sich auf eine beliebige Rotation der Basiszustände erweitern, indem der allgemeine Rotationsoperator eingesetzt wird:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j |j, m'\rangle \langle j, m' | e^{-i\frac{\gamma}{\hbar} \hat{J}_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar} \hat{J}_y} e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} \hat{J}_z} |j, m\rangle$$

Auch die hier auftretenden Koeffizienten erhalten einen Namen:

**Definition (Wigner-D-Funktion).** Die Entwicklungskoeffizienten einer allgemeinen Drehtransformation sind Funktionen der Euler'schen Winkel:

$$D_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) := \langle j, m' | e^{-i\frac{\gamma}{\hbar} \hat{J}_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar} \hat{J}_y} e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} \hat{J}_z} |j, m\rangle$$

Wigner-D-Funktionen

Die Wigner-D-Funktionen lassen sich mit Hilfe der  $d$ -Funktionen darstellen:

$$\begin{aligned} D_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{i\gamma m'} d_{m'm}^j(\beta) e^{-i\alpha m} \\ &= e^{i(\gamma m' - \alpha m)} d_{m'm}^j(\beta) \end{aligned}$$

## Drehung und Spin

Wir möchten nun das Gelernte anwenden, und betrachten dazu die Drehung von Spinzuständen. Wir betrachten also Zustände mit  $j = \frac{1}{2}$ , wobei der Drehwinkel  $\varphi$  eine Rotation um die  $y$ -Achse darstellen soll. Der Drehoperator  $\hat{R}_y(\varphi)$  hat, mit dem in Abschnitt 4.1.2 eingeführten Spinoperator  $\hat{S}_y$ , die Form  $e^{-i\frac{\varphi}{\hbar} \hat{S}_y}$ .

Entwickeln wir  $\hat{R}_y(\varphi)$ :

$$\hat{R}_y(\varphi) = e^{-i\frac{\varphi}{\hbar} \hat{S}_y}$$

nach Taylor, ausgedrückt mit der Pauli-Spinmatrix:

$$\begin{aligned} &= e^{-i\frac{\varphi}{2} \sigma_y} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\varphi}{2} \sigma_y\right)^n \end{aligned}$$

Die Terme enthalten jeweils Potenzen von  $\sigma_y$ . Das Quadrat einer Pauli-Matrix ergibt aber die Einheitsmatrix; für gerade Potenzen  $n$  können wir also die Einheitsmatrix aus der Klammer herausziehen, für ungerade Potenzen erhalten wir die einfache Spinmatrix wieder. Dazu teilen wir die Reihe in eine gerade und eine ungerade Teilreihe auf:

$$= \sum_{n \text{ gerade}} \mathbf{1}_2 \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\varphi}{2}\right)^n + \sum_{n \text{ ungerade}} \sigma_y \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\varphi}{2}\right)^n$$

Die Matrizen  $\mathbf{1}_2$  und  $\sigma_y$  hängen nicht von  $n$  ab, so dass man sie vor die Summen ziehen kann:

$$= \mathbf{1}_2 \sum_{n \text{ gerade}} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\varphi}{2}\right)^n + \sigma_y \sum_{n \text{ ungerade}} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\varphi}{2}\right)^n$$

Die gerade Reihe entspricht dabei dem Kosinus, während die ungerade die Taylorentwicklung des Sinus ist:

$$= \mathbb{1}_2 \cos \frac{\varphi}{2} + i \sigma_y \sin \frac{\varphi}{2}$$

„Ziehen“ wir noch das Vorzeichen aus der Sinus-Funktion heraus:

$$\begin{aligned} &= \mathbb{1}_2 \cos \frac{\varphi}{2} - i \sigma_y \sin \frac{\varphi}{2} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin \frac{\varphi}{2} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \sin \frac{\varphi}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sin \frac{\varphi}{2} \\ -\sin \frac{\varphi}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Diese Matrix ist der Rotationsoperator für eine Drehung eines Spinzustands um die  $y$ -Achse mit Drehwinkel  $\varphi$ .

Wenden wir dieses Ergebnis an: Sei  $|\phi\rangle = |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$  ein Spin-Up-Zustand. Drehen wir ihn um die  $y$ -Achse:

$$\begin{aligned} |\phi'\rangle &= \hat{R}_y(\varphi) |\phi\rangle \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit diesem Formalismus können wir also Spinzustände drehen.

Versuchen wir das Ergebnis mit den Wigner- $d$ -Funktionen darzustellen. Es ist in unserem Beispiel:

$$\begin{aligned} |\phi'\rangle &= \hat{R}_y(\varphi) |\phi\rangle \\ &= \hat{R}_y(\varphi) |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ &= \sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |\frac{1}{2}, m_s\rangle \langle \frac{1}{2}, m_s | \hat{R}_y(\varphi) | \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \rangle \\ &= \sum_{m_s = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |\frac{1}{2}, m_s\rangle d_{m_s, +\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Im Vergleich können wir Wigner- $d$ -Funktionen extrahieren:<sup>13</sup>

$$d_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\varphi) = \cos \frac{\varphi}{2} \qquad d_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\varphi) = \sin \frac{\varphi}{2}$$

Die beiden anderen Matrixelemente sind die Koeffizienten für den gedrehten Spin-Down-Zustand:

$$d_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\varphi) = -\sin \frac{\varphi}{2} \qquad d_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\varphi) = \cos \frac{\varphi}{2}$$

<sup>13</sup>Beachte die Indizierungsreihenfolge:  $d_{m_{\text{final}} m_{\text{initial}}}^s$ .

Die  $d$ -Funktionen kann man auch als Matrix schreiben:

$$d^{\frac{1}{2}}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Da diese „ $d$ -Matrix“ eine Basistransformation darstellt, gilt, dass die Spaltenvektoren die alten Basisvektoren in der neuen Basisdarstellung beinhalten. Der vordere Spaltenvektor ist also Spin-Up in der gedrehten Basis, der zweite stellt den Spin-Down-Zustand in der gedrehten Basis dar.



### 4.3 Experimente mit dem Stern-Gerlach-Magnet

Das Stern-Gerlach-Experiment ist eine Nachweismethode für ein Zweizustandensystem.<sup>14</sup>

Abbildung 4.12: Versuchsaufbau

#### 4.3.1 Einmalige Versuchsdurchführung und Operator $\hat{O}_{\text{App}}$

Die einlaufende Welle wird durch<sup>15</sup>

$$\begin{aligned} |\varphi_{\text{in}}\rangle &= A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \end{aligned}$$

beschrieben. Die auslaufende Welle durch

$$\begin{aligned} |\varphi_{\text{out}}\rangle &= \hat{O}_{\text{App}} |\varphi_{\text{in}}\rangle \\ &= \hat{O}_{\text{App}} \left( A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dabei beschreibt der Operator  $\hat{O}_{\text{App}}$  die Funktion der Apparatur. Der Stern-Gerlach-Magnet wirkt als Filter in  $z$ -Richtung  $\hat{F}_{z+}$ , der nur die  $+\frac{1}{2}$ -Teilchen<sup>16</sup> durchläßt.  $\varphi_{\text{out}}$  stellt einen polarisierten Strahl dar, der nur noch eine Amplitude für Spin-Up-Teilchen hat. Jedes experimentelle Setup wird durch die Angabe eines  $\varphi_{\text{out}}$  für ein  $\varphi_{\text{in}}$  beschrieben. Dies führt uns zum Operator  $\hat{O}_{\text{App}}$ :

**Definition.** Wir definieren den Apparaturoperator  $\hat{O}_{\text{App}}$  durch:

$$\hat{O}_{\text{App}} |\varphi_{\text{in}}\rangle = |\varphi_{\text{out}}\rangle.$$

Von dieser Definition aus berechnen wir nun die Form des Filteroperators  $\hat{F}_{z+}$ , der die  $(z+)$ -Komponente des Atomstrahls durchläßt und die  $(z-)$ -Komponente herausfiltert:

$$\begin{aligned} \hat{O}_{\text{App}} |\varphi_{\text{in}}\rangle &= |\varphi_{\text{out}}\rangle \\ \hat{O}_{\text{App}} &= |\varphi_{\text{out}}\rangle \langle \varphi_{\text{in}}| \\ \hat{F}_{z+} &= |\varphi_{\text{out}}\rangle \langle \varphi_{\text{in}}| \end{aligned}$$

<sup>14</sup>Vergleiche unbedingt mit [Sakurai-1, S. 2-6] und ausführlich [Cohen-1, S. 365-384ff].

<sup>15</sup> $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  sind die Basisvektoren unseres Systems.

<sup>16</sup> $+\frac{1}{2}$ -Teilchen werden durch die Wellenfunktion  $|+\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  beschrieben; dementsprechend  $-\frac{1}{2}$ -Teilchen durch  $|-\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Als Summe über das Produkt der Komponenten geschrieben:

$$\begin{aligned}\hat{F}_{z+} &= \sum_{i=1}^2 |\varphi_{\text{out } i}\rangle \langle \varphi_{\text{in } i}| \\ &= A_{\text{out}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} A_{\text{in}} (1 \ 0) + B_{\text{out}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} B_{\text{in}} (0 \ 1).\end{aligned}$$

Die Werte für die  $A$ 's und  $B$ 's eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned}&= 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} 1 (1 \ 0) + 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} 1 (0 \ 1) \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Filteroperator für die  $(z-)$ -Komponente  $\hat{F}_{z-}$ :

Abbildung 4.13: Filter  $\hat{F}_{z-}$

Mit  $A_{\text{out}} = 0$  und  $B_{\text{out}} = 1$  ergibt sich:

$$\begin{aligned}\hat{F}_{z-} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Damit haben wir die Filteroperatoren  $\hat{F}_{z+}$  und  $\hat{F}_{z-}$  bestimmt. Eine interessante Fragestellung ist, zu untersuchen, wie Ergebnisse ausfallen, wenn man mehrere Stern-Gerlach-Magneten hintereinander schaltet.

### 4.3.2 Sequenzielle Versuchsdurchführung

#### Zwei Filter hintereinandergeschaltet

**Der Filter  $\hat{F}_{z+}$ :**

**Behauptung.**  $\hat{F}_{z+}$  ist ein Projektionsoperator. Das heißt, es gilt

$$\hat{F}_{z+}^2 = \hat{F}_{z+}.$$

*Beweis.*

1. Experiment:  
Die Hintereinanderausführung des  $(z+)$ -Filters hat wieder zur Folge, daß nur die  $(z+)$ -Komponente durchgelassen wird.

Abbildung 4.14: Filter  $\hat{F}_{z+}$   $\hat{F}_{z+}$  nacheinander

2. Theorie:

Benutzen wir die bisher kennengelernte mathematische Methode:

$$\begin{aligned}\hat{F}_{z+}\hat{F}_{z+}|\varphi_{\text{in}}\rangle &= \hat{F}_{z+}|\varphi'\rangle \\ &= |\varphi_{\text{out}}\rangle\end{aligned}$$

oder in Matrixschreibweise:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Die experimentelle Vermutung wird bestätigt. Nur die  $(z+)$ -Komponente wird durchgelassen.

□

**Der Filter  $\hat{F}_{z-}$ :** Betrachten wir nun die Hintereinanderausführung von  $\hat{F}_{z+}$  und dann  $\hat{F}_{z-}$ :

$$\begin{aligned}\hat{F}_{z-}\hat{F}_{z+} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Abbildung 4.15: Filter  $\hat{F}_{z+}$   $\hat{F}_{z-}$  nacheinander

Es wird nichts durchgelassen.

**Der Filter  $\hat{F}_{x\pm}$ :** Der zweite Filter soll nun die  $x$ -Komponente selektieren<sup>17</sup>.

Abbildung 4.16: Filter  $\hat{F}_{z+}$   $\hat{F}_{x\pm}$  nacheinander

Der Operator  $\hat{F}_{x+}$  läßt sich folgendermaßen konstruieren:

$$\begin{aligned}\hat{F}_{x+} &= |x+\rangle\langle x+| \\ &= \hat{R}|z+\rangle\left(\hat{R}|z+\rangle\right)^\dagger \\ &= \hat{R}|z+\rangle\langle z+|\hat{R}^\dagger\end{aligned}$$

<sup>17</sup>Das heißt, das inhomogene Magnetfeld zeigt senkrecht zur Bewegungsrichtung in  $x$ -Richtung.

Da  $\hat{R}$  unitär ist, gilt  $\hat{R}^\dagger = \hat{R}^{-1}$ .

$$\begin{aligned}\hat{F}_{x+} &= \hat{R} |z+\rangle \langle z+| \hat{R}^{-1} \\ &= \hat{R} \hat{F}_{z+} \hat{R}^{-1}.\end{aligned}$$

Die Drehung wird durch  $\hat{R} \hat{F}_{z+} \hat{R}^{-1}$  generiert, wobei  $\hat{F}_{z+}$  der ungedrehte Filteroperator ist. Man kann nun mit Hilfe der bekannten Operatoren  $\hat{F}_{z+}$  und  $\hat{F}_{z-}$  die  $(x+)$ , bzw.  $(x-)$ -Komponente selektieren.

### Drei Filter hintereinandergeschaltet

Nun betrachten wir, was geschieht, wenn man einen weiteren Filter  $\hat{F}_{z\pm}$  in  $z$ -Richtung dahinterschaltet.

Abbildung 4.17: Filter  $\hat{F}_{z+}$   $\hat{F}_{x+}$   $\hat{F}_{z\pm}$  nacheinander

1. Anschaulich erwartet man, daß man an beiden Zweigen des Strahles ( $m_{s_{x+}}$ ,  $m_{s_{x-}}$ ) des zweiten Filters nur  $m_{s_z} = +\frac{1}{2}$  messen kann, da vom ersten Filter die  $m_{s_{z-}}$ -Komponente entfernt wurde.
2. Berechnen wir das erwartete Ergebnis mit der Operatoren-Methode:  
Zuerst den zweiten Filter  $\hat{F}_{x+}$ :

$$\begin{aligned}\hat{F}_{x+} &= |m_{s_x} = \frac{1}{2}\rangle \langle m_{s_x} = \frac{1}{2}| \\ &= \hat{R}(90^\circ) \hat{F}_{z+} \hat{R}^{-1}(90^\circ).\end{aligned}$$

Wir benötigen nun die folgende Nebenrechnung:

Transformation der  $z$ -Komponente in die  $x$ -Komponente durch Drehung um die  $y$ -Achse um  $90^\circ$ :

$$\begin{aligned}\hat{R}(\phi) |z+\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \phi S_y} |z+\rangle \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -\sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Mit  $\phi = \frac{\pi}{2}$  ergibt sich

$$\hat{R}(90^\circ) |z+\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Ende der Nebenrechnung.

$$\begin{aligned}\hat{F}_{x+} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Und nun die gesamte Hintereinanderausführung:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A \\ A \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der Strahl bleibt nicht polarisiert. Man erhält als Messergebnis ein Amplitude von  $\frac{1}{2}A$  für  $m_{s_z} = \frac{1}{2}$  und  $\frac{1}{2}A$  für  $m_{s_z} = -\frac{1}{2}$ .  $\hat{S}_x$  und  $\hat{S}_z$  vertauschen nicht. Das Ergebnis des ersten Experimentes wird durch das zweite Experiment zerstört.

## 4.4 Kopplung von zwei Drehimpulsen

### 4.4.1 Einleitung

Zuerst betrachten wir zwei Beispiele für Drehungen von Zuständen mit zwei Drehimpulsen.

**Beispiel.** Elektron im Wasserstoffatom:

Zustände bestehend aus Bahn- und Spinanteil kann man wie folgt schreiben:

$$\underbrace{|n, l, m_l\rangle}_{\text{Bahn}} \underbrace{|s, m_s\rangle}_{\text{Spin}},$$

wobei  $s = \frac{1}{2}$  ist. Die Drehungen werden durch folgenden Operator generiert:

$$\begin{aligned} \hat{R} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{S}_y} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(\hat{L}_y + \hat{S}_y)} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_y}. \end{aligned}$$

Dabei ist  $\hat{L}_y$  der Operator der  $y$ -Komponente des Bahndrehimpulses. In der Exponentialfunktion übernimmt  $\hat{L}_y$  die Aufgabe des Generators der Drehung um die  $y$ -Achse.

Wir gewinnen durch unsere Rechnung einen für Bahn- und Spinanteil gemeinsamen Operator der Drehung.

**Beispiel.** Zwei Teilchen ohne Spin:

In diesem Fall hat man zwei Zustände

$$\hat{R}(|n_1, l_1, m_1\rangle |n_2, l_2, m_2\rangle).$$

Den Generator der Drehung können wir wieder zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \hat{R}_1 \hat{R}_2 \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_{y1}} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_{y2}} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(\hat{L}_{y1} + \hat{L}_{y2})} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_y}. \end{aligned}$$

### 4.4.2 Drehimpulskopplung

#### Gekoppelter Drehimpuls

Wir möchten einen Zustand  $|n, l, m_l\rangle |s, m_s\rangle = |l, m_l, s, m_s\rangle$  drehen. Der Rotationsoperator für eine gemeinsame Drehung auf diesen Zustand angewandt lautet:

$$\hat{R}|l, m_l, s, m_s\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{S}_y} |l, m_l, s, m_s\rangle.$$

Den Drehwinkel  $\alpha$  können wir ausklammern, da er für  $\hat{S}$  und  $\hat{L}$  gleich ist und bekommen einen einzigen statt zwei Operatoren:

$$\begin{aligned} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(\hat{L}_y + \hat{S}_y)} |l, m_l, s, m_s\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_y} |l, m_l, s, m_s\rangle. \end{aligned}$$

Wir haben nun einen Operator, der Bahn- und Spindrehimpuls gleichzeitig um  $\alpha$  dreht und haben damit die beiden Anteile zusammengefaßt. Dies nehmen wir zum Anlaß für folgende Definition:

**Definition.** Wir definieren den gekoppelten Drehimpuls für ein Teilchen mit zwei Drehimpulsen:<sup>18</sup>

$$\hat{J} := \hat{L} + \hat{S},$$

beziehungsweise den gekoppelten Drehimpuls zweier Teilchen mit je einem Drehimpuls:

$$\hat{J} := \hat{L}_1 + \hat{L}_2.$$

Damit gilt auch für die einzelnen Komponenten:

$$\begin{aligned} \hat{J}_x &= \hat{L}_x + \hat{S}_x \\ \hat{J}_y &= \hat{L}_y + \hat{S}_y \\ \hat{J}_z &= \hat{L}_z + \hat{S}_z. \end{aligned}$$

### Eigenschaften des gekoppelten Drehimpulses

1. **Behauptung.** Die Operatoren  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  und  $\hat{J}_z$  sind Drehimpulsoperatoren, d.h. es gilt  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y]_- = i\hbar\hat{J}_z$ .

*Beweis.*

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y]_- &= [\hat{L}_x + \hat{S}_x, \hat{L}_y + \hat{S}_y]_- \\ &= [\hat{L}_x, \hat{L}_y]_- + [\hat{S}_x, \hat{L}_y]_- + [\hat{L}_x, \hat{S}_y]_- + [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_- \end{aligned}$$

Da die Operatoren in den gemischten Termen auf verschiedene Räume wirken, verschwinden diese Kommutatoren.

$$\begin{aligned} &= i\hbar\hat{L}_z + 0 + 0 + i\hbar\hat{S}_z \\ &= i\hbar\hat{J}_z \end{aligned}$$

□

Diese Beziehung gilt auch für zyklische Vertauschungen.

<sup>18</sup>Vergleiche mit [Fließbach, S. 296-304].

2. **Behauptung.** Die Operatoren<sup>19</sup>  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  besitzen ein gemeinsames Eigenfunktionssystem, das heißt ihre Kommutatoren verschwinden.<sup>20</sup>

*Beweis.*

$$[\hat{L}^2, \hat{S}^2]_- = 0,$$

da die Operatoren auf verschiedene Räume wirken. Wie bereits gezeigt:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z]_- = 0.$$

Bleibt noch zu zeigen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{J}^2]_- &= [\hat{L}^2, (\hat{L} + \hat{S})^2]_- \\ &= [\hat{L}^2, \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}]_- \\ &= \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{L}^2]_-}_{=0} + \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{S}^2]_-}_{=0} + 2[\hat{L}^2, \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}]_- \end{aligned}$$

$$\text{mit } [A, BC]_- = [A, B]_- C - B[A, C]_-$$

$$\begin{aligned} &= 2[\hat{L}^2, \hat{\vec{L}}]_- \hat{\vec{S}} - 2\hat{\vec{L}} \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{\vec{S}}]_-}_{=0} \\ &= 2 \left( [\hat{L}^2, \hat{L}_x]_- \hat{S}_x + [\hat{L}^2, \hat{L}_y]_- \hat{S}_y + [\hat{L}^2, \hat{L}_z]_- \hat{S}_z \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Analog:

$$[\hat{S}^2, \hat{J}^2]_- = 0.$$

Desweiteren gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{J}_z]_- &= \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{L}_z]_-}_{=0} + \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{S}_z]_-}_{=0} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Analog:

$$[\hat{S}^2, \hat{J}_z]_- = 0.$$

□

3. **Behauptung.** Allerdings vertauschen  $\hat{J}^2$  und  $\hat{S}_z$ , bzw.  $\hat{J}^2$  und  $\hat{L}_z$ , nicht.

<sup>19</sup>Man beachte, daß  $\hat{L}^2$  und  $\hat{S}^2$  das Quadrat eines Vektors darstellen.

<sup>20</sup>Für  $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2$  (Kopplung zweier Drehimpulse) muß  $\hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$  gewählt werden.



*Beweis.*

$$\begin{aligned}
[\hat{J}^2, \hat{S}_z]_- &= \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{S}_z]_-}_{=0} + \underbrace{[\hat{S}^2, \hat{S}_z]_-}_{=0} + 2[\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}, \hat{S}_z]_- \\
&= 2\hat{\vec{L}}[\hat{\vec{S}}, \hat{S}_z]_- + 2\underbrace{[\hat{\vec{L}}, \hat{S}_z]_-}_{=0} \hat{S}_z \\
&= 2\hat{L}_x[\hat{S}_x, \hat{S}_z]_- + 2\hat{L}_y[\hat{S}_y, \hat{S}_z]_- + 2\hat{L}_z \underbrace{[\hat{S}_z, \hat{S}_z]_-}_{=0} \\
&= 2\hat{L}_x(-i\hbar\hat{S}_y) + 2\hat{L}_y(i\hbar\hat{S}_x) \\
&\neq 0
\end{aligned}$$

Analog:

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_z]_- \neq 0$$

□

### Gekoppelte Zustände

Ausgehend von zwei kommutierenden Drehimpulsoperatoren  $\hat{\vec{L}}$  und  $\hat{\vec{S}}$  mit den Eigenzuständen

$$|l, m_l, s, m_s\rangle$$

suchen wir die gekoppelten Eigenzustände

$$|l, s, j, m\rangle$$

zu  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$ . Die neuen zum Gesamtdrehimpuls gehörenden Eigenzustände sind durch folgende Eigenwertgleichungen gegeben:

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 |l, s, j, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l, s, j, m\rangle \\
\hat{S}^2 |l, s, j, m\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |l, s, j, m\rangle \\
\hat{J}^2 |l, s, j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |l, s, j, m\rangle \\
\hat{J}_z |l, s, j, m\rangle &= m\hbar |l, s, j, m\rangle
\end{aligned}$$

Es gibt also zwei Basissysteme für einen Zustand mit zwei Drehimpulsen: Die ungekoppelte Basis

$$|l, m_l, s, m_s\rangle \text{ mit den Operatoren } \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$$

und die gekoppelte Basis

$$|l, s, j, m\rangle \text{ mit den Operatoren } \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z.$$

### Clebsch-Gordon-Koeffizienten

Gibt es zwei Basissysteme, in denen die Zustände dargestellt werden können, dann muß es auch eine Transformation zwischen den Basen geben:

Wir erarbeiten nun diese Transformation zwischen den Basissystemen.<sup>21</sup>

**Behauptung.** Es existiert eine lineare Transformation von  $|l, m_l, s, m_s\rangle$  nach  $|l, s, j, m\rangle$  und umgekehrt.

Wir entwickeln die neuen Zustände nach den alten Eigenzuständen:<sup>22</sup>

$$\underbrace{|l, s, j, m\rangle}_{\text{gekoppelter Zustand}} = \sum_{m_l=-l}^{+l} \sum_{m_s=-s}^{+s} |l, m_l, s, m_s\rangle \underbrace{\langle l, m_l, s, m_s | l, s, j, m\rangle}_{\text{Clebsch-Gordon-Koeffizient}}.$$

Aus

$$\begin{aligned} \hat{J}_z |l, s, m_l, m_s\rangle &= \hat{L}_z |l, s, m_l, m_s\rangle + \hat{S}_z |l, s, m_l, m_s\rangle \\ &= \hbar(m_l + m_s) |l, s, m_l, m_s\rangle \end{aligned}$$

sehen wir, daß die Basiszustände Eigenzustände von  $\hat{J}_z$  zum Eigenwert  $m_l + m_s$  sind. Daher ergibt sich der Eigenwert von  $\hat{J}_z$  zu:

$$\boxed{m = m_l + m_s}.$$

Für die Rücktransformation ergibt sich:

$$\underbrace{|l, s, m_l, m_s\rangle}_{\text{ungekoppelter Zustand}} = \sum_{j=|l-s|}^{l+s} \sum_{m=-j}^{+j} |l, s, j, m\rangle \underbrace{\langle l, s, j, m | l, s, m_l, m_s\rangle}_{\text{Clebsch-Gordon-Koeffizient}}.$$

$j$  kann nicht größer als die Summe der beiden Längen, aber auch nicht kleiner als die Differenz der beiden Längen sein. Daher ergibt sich

$$\boxed{|l - s| \leq j \leq |l + s|},$$

wobei  $j$  vom Typ<sup>23</sup>  $(l - s)$  also halb- oder ganzzahlig ist.

#### Abbildung 4.18: Drehimpulsvektoraddition

Bra und Ket vertauschen ist dasselbe, wie komplex konjugieren:

$$\langle l, s, j, m | l, s, m_l, m_s \rangle = \langle l, s, m_l, m_s | l, s, j, m \rangle^*.$$

Die Umkehrtransformation erhält man durch  $\hat{U}^{-1}$ .<sup>24</sup> Die Clebsch-Gordon-Koeffizienten sind aber reell, daher spielt die Konjugation keine Rolle. Die Clebsch-Gordon-Koeffizienten sind für die Hin- und Rücktransformation gleich.

<sup>21</sup>Vergleiche mit [Cohen-2, S. 197-227, besonders S. 211f.].

<sup>22</sup>Dies ist möglich, da beide Systeme ein vollständiges Orthonormalsystem darstellen.

<sup>23</sup>Oder vom Typ  $(l + s)$ , was auf dasselbe herausläuft.

<sup>24</sup>Für unitäre Transformationen gilt:  $U^{-1} = (U^*)^t = U^\dagger$ .

### 4.4.3 Zur Berechnung der Clebsch-Gordon-Koeffizienten

**Beispiel.** Betrachten wir ein System mit den Quantenzahlen

$$l = 1 \quad s = \frac{1}{2},$$

was zum Beispiel ein Elektron im Wasserstoffatom sein könnte. In der ungekoppelten Basis wird dieser Zustand durch  $|m_l, m_s\rangle$  charakterisiert; in der gekoppelten Basis durch  $|j, m\rangle$ .<sup>25</sup>

ungekoppelte Basis: $ m_l, m_s\rangle$	gekoppelte Basis: $ j, m\rangle$
$ 1, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$
$ 1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$
$ 0, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$
$ 0, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ -1, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$ -1, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$

Tabelle 4.2: Mögliche Zustände in gekoppelter und ungekoppelter Basis

In der ungekoppelten Basis gibt es sechs Zustände:

$$(2l + 1)(2s + 1) = 6.$$

In der gekoppelten Basis berechnet sich die Anzahl der Zustände folgendermaßen:  $2j + 1$  ergibt die Anzahl der Zustände, also zu  $j = \frac{3}{2}$  gibt es  $2\frac{3}{2} + 1 = 4$  Zustände und zu  $j = \frac{1}{2}$  gehören zwei Zustände:  $2\frac{1}{2} + 1 = 2$ . Insgesamt also auch sechs Zustände.

#### Konstruktion der Clebsch-Gordon-Koeffizienten

- Für  $m_l = 1, m_s = \frac{1}{2}$  besteht die Summe

$$|l, s, j, m\rangle = \sum_{m_l=-l}^{+l} \sum_{m_s=-s}^{+s} |l, m_l, s, m_s\rangle \langle l, m_l, s, m_s | l, s, j, m\rangle$$

nur aus einem Term<sup>26</sup>, und da beide Zustände normiert sind, muß der Clebsch-Gordon-Koeffizient = 1 sein:

$$\langle m_l = 1, m_s = \frac{1}{2} | j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2} \rangle = 1.$$

- Um die weiteren Zustände von der einen Basis in die andere zu transformieren müssen wir die „Mischungskoeffizienten“ bestimmen. Man spricht daher auch von gemischten Zuständen<sup>27</sup>:

$$|j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle = A |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle + B |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle.$$

<sup>25</sup> $l$  und  $s$  werden in den Zuständen nicht explizit genannt, da sie im Beispiel gleich bleiben.

<sup>26</sup> $j$  kann theoretisch die Werte  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{2}$  annehmen ( $|l - s| \leq j \leq |l + s|$ ). Allerdings kann der Zustand  $|j = \frac{1}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle$  nicht angenommen werden, da  $|m| \leq j$  sein muß.

<sup>27</sup>Die Zustände werden auf die neue Basis projiziert und haben dadurch Anteile der verschiedenen Basisvektoren. Ein Basisvektor der einen Basis wird in der anderen Basis durch eine Linearkombination mehrerer (hier zweier) Basisvektoren dargestellt.

Um

$$A = \langle m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2} | j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2} \rangle$$

und

$$B = \langle m_l = 0, m_s = \frac{1}{2} | j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2} \rangle$$

zu bestimmen benötigen wir noch diese Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} \hat{J}^- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y \\ &= \hat{L}_x + \hat{S}_x - i(\hat{L}_y + \hat{S}_y) \\ &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y + \hat{S}_x - i\hat{S}_y \\ &= \hat{L}^- + \hat{S}^- \end{aligned}$$

Ende der Nebenrechnung.

Mittels des Absteigeoperators können wir den Zustand<sup>28</sup>  $|j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle$  aus dem höheren Zustand bestimmen.<sup>29</sup>

$$\begin{aligned} |j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}} \hat{J}^- |j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{(\frac{3}{2} + \frac{3}{2})(\frac{3}{2} - \frac{3}{2} + 1)}} \hat{J}^- |j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3 \cdot 1}} \hat{J}^- |j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle \end{aligned}$$

Von diesem höheren Zustand wissen wir, wie er in der ungekoppelten Basis aussieht:  $|j = \frac{3}{2}, s = \frac{3}{2}\rangle = |m_l = 1, m_s = \frac{1}{2}\rangle$ . Wenn wir  $\hat{J}^-$  auf  $\hat{L}^-$  und  $\hat{S}^-$  umrechnen, wie in der Nebenrechnung bereits geschehen, können wir dies auf den Zustand problemlos anwenden:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} (\hat{L}^- + \hat{S}^-) |m_l = 1, m_s = \frac{1}{2}\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} \hbar\sqrt{(l+m_l)(l-m_l+1)} |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} \hbar\sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)} |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

Beachte Fußnote 29:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} \hbar\sqrt{(1 + \frac{1}{2})(1 - \frac{1}{2} + 1)} |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} \hbar\sqrt{(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1)} |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{3}} (\hbar\sqrt{2} |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle + \hbar\sqrt{1} |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

<sup>28</sup> $\hat{J}^-$  verändert  $j$  nicht, reduziert nur  $m$ .

<sup>29</sup>Die Quantenzahlen im Normierungsfaktor des Absteigeoperators beziehen sich auf den höheren Zustand.

Damit haben wir die Mischungskoeffizienten  $A = \sqrt{\frac{2}{3}}$  und  $B = \sqrt{\frac{1}{3}}$  bestimmt. Der Zustand  $|j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle$  wird durch die Zustände  $|m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle$  und  $|m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle$  gebildet.

- Nun betrachten wir den Zustand

$$|j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle = \tilde{A} |m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2}\rangle + \tilde{B} |m_l = 0, m_s = \frac{1}{2}\rangle.$$

Hier können wir  $\hat{J}^-$  nicht anwenden, da es keinen  $|j = \frac{1}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle$  Zustand gibt. Aber wir können Folgendes berechnen. Mit der Normierung

$$\langle j, m | j, m \rangle = 1$$

also

$$\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2 = 1$$

und

$$\langle j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2} | j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \rangle = 0$$

wegen der Orthogonalität folgt:

$$A\tilde{A} + B\tilde{B} = 0$$

Wir haben zwei Gleichungen aus denen

$$\tilde{A} = \sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \tilde{B} = -\sqrt{\frac{2}{3}}$$

folgt. Mit  $\tilde{A} = \sqrt{\frac{1}{3}}$  und  $\tilde{B} = -\sqrt{\frac{2}{3}}$  ergäben auch  $\tilde{A} = -\sqrt{\frac{1}{3}}$  und  $\tilde{B} = \sqrt{\frac{2}{3}}$  einen korrekten Zustand. Hier gibt es eine sogenannte Phasenkonvention, nach der entschieden wird, welcher Zustand dieser Phasenambiguität gewählt werden muß.

- Im nächsten Fall gilt das im ersten Fall Gesagte:

$$\langle m_l = -1, m_s = \frac{1}{2} | j = \frac{3}{2}, m = -\frac{3}{2} \rangle = 1.$$

**Vorgehensweise.** Man startet von bekannten Zuständen, deren Normierung schon die Lösung liefert und arbeitet mit der Orthogonalisierung weiter, wobei es mit größeren  $j$  immer komplizierter wird.

## 4.5 Beispiele für Drehimpulskopplung

### 4.5.1 Spin-Bahn-Wechselwirkung in der Atomphysik

Abbildung 4.19: Elektron und Proton kreisen umeinander

**Physikalischer Zugang.** Die potentielle Energie des magnetischen Momentes des Elektronendrehimpulses im Magnetfeld lautet:

$$\hat{V}_{\text{magn}} = -\hat{\mu} \cdot \hat{B} = C(r) \hat{S} \cdot \hat{L}$$

Der Erwartungswert  $\langle \hat{V}_{\text{magn}} \rangle$  ändert sich, wenn  $\hat{L}$  durch  $\hat{R}_{\hat{L}}$  gedreht wird. Der Erwartungswert  $\langle \hat{V}_{\text{magn}} \rangle$  ändert sich jedoch nicht, wenn  $\hat{L} + \hat{S}$  durch  $\hat{R}_{\hat{L}+\hat{S}}$  gedreht wird. Dies bedeutet für die Kommutatoren:

$$[\hat{V}_{\text{magn}}, \hat{R}_{\hat{L}}]_- \neq 0$$

und

$$[\hat{V}_{\text{magn}}, \hat{L}]_- \neq 0$$

aber

$$[\hat{V}_{\text{magn}}, \hat{R}_{\hat{J}}]_- = 0$$

und

$$[\hat{V}_{\text{magn}}, \hat{J}]_- = 0.$$

Diese Folgerungen für die Kommutatoren ergaben sich allein aus der Symmetrie von  $\hat{V}_{\text{magn}}$ .

**Mathematischer Zugang.** Der Hamilton-Operator für ein Elektron im Atom lautet:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m_e} + \frac{\hat{L}^2}{2m_e \hat{r}^2} - \frac{q^2}{\hat{r}} + C(r) \hat{L} \cdot \hat{S}.$$

In dem Operator haben wir nun die potentielle Energie des Elektronendrehimpulses im Magnetfeld berücksichtigt.

**Behauptung.** Der aus den Operatoren  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  folgende Zustand  $|l, s, j, m\rangle$  ist eine Eigenfunktion zu  $\hat{L}^2$  und  $\hat{S} \cdot \hat{L}$ .

*Beweis.*

1.  $l$  steht ja explizit in der „Liste“, dann ist  $|l, s, j, m\rangle$  Eigenfunktion zu  $\hat{L}^2$  mit Eigenwert  $\hbar^2 l(l+1)$ .

2. Es ist:

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &:= (\hat{L} + \hat{S})^2 \\ &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}.\end{aligned}$$

Umgeformt:

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2).$$

Für dies gilt wieder obiges:  $j, l, s$  stehen in der „Liste“ und damit

$$\begin{aligned}\hat{L} \cdot \hat{S} |l, s, j, m\rangle &= \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |l, s, j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |l, s, j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2}\frac{3}{2}) |l, s, j, m\rangle\end{aligned}$$

□

Wir machen den Ansatz zur Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{u(r)}{r} |l, s, j, m\rangle \\ &= \frac{u(r)}{r} \sum_{m_l, m_s} \langle m_l, m_s | l, s, j, m \rangle Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) |m_s\rangle\end{aligned}$$

Der Eigenwertgleichung  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  entspricht die radiale Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned}\left( -\frac{\hbar^2}{2m_\epsilon} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_\epsilon r^2} - \frac{q^2}{r} + C(r) \left( \frac{1}{2}\hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2}\frac{3}{2}) \right) \right) u(r) \\ = E_{lj} u(r)\end{aligned}$$

Die Feinstruktur hat ihre Ursache in der  $\hat{L} \cdot \hat{S}$ -Kopplung.

Abbildung 4.20: Wasserstoffspektrum mit Feinstruktur

Mit  $[\hat{J}, \hat{V}_{\text{magn}}]_- = 0$  und  $[\hat{L}, \hat{V}_{\text{magn}}]_- \neq 0$  ist entsprechend  $[\hat{H}, \hat{J}]_- = 0$  und  $[\hat{H}, \hat{L}]_- \neq 0$ . Es gibt also ein gemeinsames gekoppeltes Eigenfunktionssystem zu  $\hat{J}$  und  $\hat{H}$ , nicht aber zu  $\hat{L}$  und  $\hat{H}$ .

#### 4.5.2 Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen $p$ und $n$

Die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen  $p$  und  $n$  hängt von der Spineinstellung ab:

Der Spin des Neutrons kann parallel oder antiparallel zum Spin des Protons stehen:

$$\begin{aligned}\hat{V}_{\text{NN}} &= A(r) + \hat{B}(r) \hat{S}_1 \hat{S}_2 \\ &= A(r) + B(r) \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2,\end{aligned}$$

wobei  $\hat{S}_1$  den Spin des Protons darstellt und  $\hat{S}_2$  den des Neutrons und

$$B = \tilde{B} \frac{1}{4} \hbar^2$$

$$\hat{S}_i = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}_i$$

ist.  $\hat{V}_{\text{NN}}$  ändert sich nicht, wenn  $\hat{S}_1$  und  $\hat{S}_2$  gemeinsam gedreht werden:  
 $[\hat{V}_{\text{NN}}, \hat{S}]_- = 0$ , mit dem Gesamtspin  $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ .

Abbildung 4.21: Spinflip

Wir machen den Ansatz:

$$\psi = \frac{u_p(r)}{r} \frac{u_n(r)}{r} |s_1, s_2, s, m\rangle$$

$$= \frac{u_p(r)}{r} \frac{u_n(r)}{r} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, s, m \rangle$$

mit  $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ .

Für parallelen Spin gibt es diese Werte:  $s = 1, m = -1, 0, 1$ ;  
für antiparallelen Spin:  $s = 0, m = 0$ .

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |s_1, s_2, s, m\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (s(s+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) |s_1, s_2, s, m\rangle$$

Daraus folgt

$$s(s+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} = \begin{cases} 2 - \frac{3}{2} = \frac{1}{2} & \text{für } s = 1, \\ 0 - \frac{3}{2} = -\frac{3}{2} & \text{für } s = 0. \end{cases}$$

Einziges gebundenes Zweinukleonensystem ist das Deuteron d mit  $s = 1$  gebunden und  $s = 0$  ungebunden.

### 4.5.3 Quarkmodell

- Barionen bestehen aus drei Quarks.

Abbildung 4.22: Potentialtopf der Zustände

Für  $l = 0$  ist

$$\vec{S} = \vec{\frac{1}{2}} + \vec{\frac{1}{2}} + \vec{\frac{1}{2}}.$$

Damit kann  $s$  folgende Werte annehmen:

$$s = \begin{cases} \frac{1}{2} \\ \frac{3}{2} \end{cases}$$



beziehungsweise:

$$m_s = \begin{cases} -\frac{1}{2} \\ +\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \\ +\frac{3}{2} \end{cases}$$

$\frac{3}{2}$  ist die  $\Delta$ -Resonanz, die erste angeregte Barionen-Resonanz.  
 $\pm\frac{1}{2}$  sind Proton und Neutron.

- Mesonen bestehen aus zwei Quarks:

$$\vec{S} = \vec{\frac{1}{2}} + \vec{\frac{1}{2}}.$$

Also kann  $s$  die folgenden Werte annehmen:

$$s = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

beziehungsweise:

$$m_s = \begin{cases} -1 \\ 0 \\ +1 \end{cases}$$

# Kapitel 5

## Zeitunabhängige Störungstheorie

Wir interessieren uns dafür, was sich bei einem Quantensystem ändert, wenn es elektromagnetischen Feldern ausgesetzt wird. Konkret fragen wir, welche Zustände und Energien ein Teilchen(system) annehmen kann, und wie sich diese Zustände durch den Feldeinfluss und gegenseitige Wechselwirkungen ändern. Leider sind die meisten der dabei auftretenden Probleme nicht mehr exakt lösbar. Wir brauchen also Näherungsmethoden. Dabei wird vom freien System ausgehend ein zusätzliches Potential<sup>1</sup> als (zunächst kleine) Störung in die Theorie eingefügt. Wir betrachten diese Störungstheorie zunächst nur für statische Potentiale, vergleichen also, wie sich ein System bei „eingeschalteter“ Störung gegenüber dem freien System verhält. Davon handelt das gesamte 5. Kapitel.

### 5.1 Störungstheorie ohne Entartung

#### 5.1.1 Grundlagen

Betrachten wir zunächst nur gebundene Systeme, deren verschiedene Zustände auch unterschiedliche Energien besitzen. Bei diesen nicht-entarteten Systemen ist (bei gegebenem Hamilton-Operator) jedem Zustand  $|\phi_i\rangle$  eineindeutig ein Energieeigenwert  $\varepsilon_i$  zugeordnet. Betrachten<sup>2</sup> wir dazu ein

---

<sup>1</sup>Es hat sich in der Physik durchgesetzt, von  $V$ , als dem *Potential* zu reden, obwohl eigentlich mit  $V$  die *potentielle Energie* eines Systems in einem Potential  $\Phi$  gemeint ist. Wir möchten versuchen die Begriffe zu unterscheiden, auch wenn das nicht immer möglich ist (durch feststehende Begriffe, oder durch sich wiederholende, aufgeblähte Sätze). Des Weiteren sei darauf hingewiesen, dass in der quantenmechanischen Sprache  $\hat{V}$  der *Operator* der potentiellen Energie eines Systems im Potential  $\Phi$  ist (So wie der Hamilton-Operator der Operator der Gesamtenergie ist). Wir kennzeichnen das durch das „Dach“ in  $\hat{V}$ .

<sup>2</sup>Das Beispiel soll nur das Anwendungsgebiet der Störungsrechnung aufzeigen, es ist kein Beispiel im üblichen Sinn. Überhaupt sind dieser und der nächste Abschnitt „trocken“. Hier wird zunächst die Theorie aufgebaut; erst mit Abschnitt 5.3 folgen dann die Anwendungen.

**Beispiel (Wasserstoffatom).** Die Lösungen (mögliche Elektronenzustände)  $|\phi_i\rangle$  der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für das ungestörte Wasserstoffatom seien bekannt:

$$\hat{H}_0 |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\phi_i\rangle$$

Die  $i$ 's stehen für die verschiedenen Energieniveaus  $\varepsilon_i$  im Wasserstoffatom;  $i = 0$  stellt den Grundzustand dar,  $i > 0$  sind die angeregten Zustände.

Betrachten wir nun ein externes Magnetfeld  $\vec{B} = B\vec{e}_z$ . Die magnetischen Momente der Atome (die vom Gesamtdrehimpuls des Elektrons stammen) stellen sich parallel zu  $\vec{B}$  ein. Die Wechselwirkungsenergie eines magnetischen Moments  $\vec{\mu}$  mit dem Magnetfeld  $\vec{B}$  ist durch folgende Beziehung gegeben:

$$\hat{V} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

**Notation.** Zur Unterscheidung stellen wir den durch das Magnetfeld gestörten Zustand mit  $\psi_i$ , seine Energie mit  $E_i = \varepsilon_i + \langle \hat{V} \rangle$  dar. Der ungestörte Zustand sei  $\phi_i$  mit der Energie  $\varepsilon_i$ .

Der Hamilton-Operator des Elektrons im Wasserstoffatom ist gegeben durch:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{q^2}{\hat{r}}$$

Die Störung ist durch den Operator der potentiellen Energie des magnetischen Moments  $\hat{V}$  beschrieben, was zum vollständigen Hamilton-Operator aufaddiert werden muss:

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

### 5.1.2 Ansatz

#### Grundüberlegungen zum gestörten Zustand

Ziel ist es nun, für alle Zustände  $i$  die vollständige Eigenwertgleichung zu lösen:

$$\hat{H} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$$

Zur weiteren Untersuchung legen wir mit  $\lambda \in [0, 1] \in \mathbb{R}$  die Größe der Störung  $\hat{V}$  variabel an:<sup>3</sup>

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$$

wobei unser Ziel der Fall  $\lambda = 1$  ist. Wir suchen also die Lösung der Eigenwertgleichung als Funktion des Parameters  $\lambda$ :

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_i(\lambda)\rangle = E_i(\lambda) |\psi_i(\lambda)\rangle$$

Abbildung 5.1: Lösungen der Eigenwertgleichung in Abhängigkeit des Parameters  $\lambda$ .

Zu beachten ist, dass diese Gleichung für jedes  $\lambda$  eine andere Lösungsfunktion  $\psi_i(\lambda, x)$  besitzt.

Wir fordern in diesem Abschnitt, dass die Störung klein sei:

$$\Delta E_i = E_i - \varepsilon_i \ll \varepsilon_i - \varepsilon_j$$

eine Störung also, die weitaus kleiner ist, als die Differenz benachbarter Energieniveaus.<sup>4</sup>

Wir entwickeln nun die Energie  $E_i$  des gestörten Zustands als Funktion von  $\lambda$  in eine Taylorreihe. Dabei benutzen wir die Schreibkonvention:

$$E_{in} := \left. \frac{d^n E_i}{d\lambda^n} \right|_{\lambda \rightarrow 0}$$

wobei  $n = 0$  für den exakten, ungestörten Zustand steht:

$$E_{i0} = \left. \frac{d^0 E_i}{d\lambda^0} \right|_{\lambda \rightarrow 0} = \varepsilon_i$$

Für die Energie ergibt sich somit eine Reihe mit steigenden Potenzen von  $\lambda$ :

$$E_i(\lambda) = E_{i0} + E_{i1}\lambda + E_{i2}\lambda^2 + \cdots + E_{in}\lambda^n + \cdots$$

Die Werte  $E_{in}$  beschreiben darin, welche Korrektur am eigentlichen Energiewert  $\varepsilon_i$  in  $n$ -ter Ordnung vorgenommen werden muss, wenn die Störung wirkt. Auch der gestörte Zustand  $\psi_i$  kann nach Taylor entwickelt werden:

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = |\psi_{i0}\rangle + \lambda |\psi_{i1}\rangle + \lambda^2 |\psi_{i2}\rangle + \cdots + \lambda^n |\psi_{in}\rangle + \cdots$$

In dieser Notation ist der ungestörte Zustand:

$$|\psi_{i0}\rangle := \left. |\psi_i(\lambda)\rangle \right|_{\lambda \rightarrow 0} = |\phi_i\rangle$$

Die Zustandsvektoren  $|\psi_{in}\rangle$  beschreiben die Korrektur, die sich durch die Störung  $\hat{V}$  in  $n$ -ter Ordnung ergibt.

<sup>3</sup>Die Verallgemeinerung von  $\lambda$  auf das Intervall  $[0, 1]$  soll sicherstellen, dass die Störung uns keinen Streich spielt, wenn wir den Schritt von der kleinen Störung  $0 \approx \lambda \ll 1$  zur „normalen“ Störung  $\lambda = 1$  machen. Würden wir nur fordern, dass die Energien von ungestörtem und gestörtem Zustand an den „Eckpunkten“ 0 und 1 nah beieinander liegen, so könnten wir nicht mit den bei kleinem  $\lambda$  gefundenen Formeln auf  $\lambda = 1$  schließen, da die Energiewerte sich zwischen diesen Eckpunkten überschneiden könnten.

<sup>4</sup>Bei Entartung gäbe es Fälle mit  $\varepsilon_i = \varepsilon_j$ . Unsere Forderung könnte dann nicht erfüllt werden. Später gehen wir zum realen Fall mit Entartung über, jetzt möchten wir aber zuerst die Vorgehensweise kennenlernen.

**„Korrekturen“ am ungestörten Zustand**

Wie sehen die Korrekturzustände  $|\psi_{in}\rangle$  aus? Schreiben wir zunächst den vollständigen gestörten Zustand in Basisdarstellung der ungestörten Zustände:<sup>5</sup>

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \underbrace{\langle \phi_j | \psi_i(\lambda) \rangle}_{\alpha_{ji}(\lambda)}$$

Auch die Korrekturzustände können in dieser Basis dargestellt werden:

$$|\psi_{in}\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \underbrace{\langle \phi_j | \psi_{in} \rangle}_{c_{jn} \in \mathbb{R}}$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $c_{jn}$  sind reelle Zahlen, die ebenso wie die Zustandsstörungen  $|\psi_{in}\rangle$  nicht von  $\lambda$  abhängen. Eine Korrektur  $|\psi_{in}\rangle$  zum Zustand  $|\phi_i\rangle$  muss senkrecht zu diesem Zustand stehen und kann daher von  $|\phi_i\rangle$  nicht linear abhängig sein, so dass mit  $\langle \phi_i | \psi_{in} \rangle = 0$  nur noch über ungleiche  $i$  und  $j$  summiert werden muss:

$$= \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle$$

Diese Betrachtungen können wir nun zur Eigenwertgleichung des kompletten Systems zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi_i(\lambda)\rangle &= (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) (|\phi_i\rangle + \lambda |\psi_{i1}\rangle + \lambda^2 |\psi_{i2}\rangle + \dots) \\ &= (\varepsilon_i + \lambda E_{i1} + \lambda^2 E_{i2} + \dots) (|\phi_i\rangle + \lambda |\psi_{i1}\rangle + \lambda^2 |\psi_{i2}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (\text{EWG 1})$$

Die Eigenwertgleichung (EWG 1) gilt für alle  $\lambda$ , so dass wir einen Potenzvergleich vornehmen können. Wir multiplizieren die Faktoren aus, ordnen die Terme nach Potenzen von  $\lambda$  und vergleichen die zwei übereinander stehenden Zeilen von (EWG 1) miteinander.

Die Terme mit  $\lambda^0$  entsprechen der ungestörten Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}_0 |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\phi_i\rangle$$

Die Terme mit  $\lambda^1$  liefern uns eine gute Korrektur für sehr kleine Störungen:

$$\hat{H}_0 |\psi_{i1}\rangle + \hat{V} |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\psi_{i1}\rangle + E_{i1} |\phi_i\rangle \quad (\lambda_1)$$

Darauf aufbauend kann mit den  $\lambda^2$ -Termen eine etwas größere Störung beschrieben werden:

$$\hat{H}_0 |\psi_{i2}\rangle + \hat{V} |\psi_{i1}\rangle = \varepsilon_i |\psi_{i2}\rangle + E_{i1} |\psi_{i1}\rangle + E_{i2} |\phi_i\rangle$$

<sup>5</sup>Die (normierten) ungestörten Zustände  $|\phi_i\rangle$  bilden ein vollständiges Orthonormalsystem. Somit können sie jedem (Teil-)Zustand als Basis dienen.

Allgemein ( $\lambda^n$ ) erhalten wir durch den Vergleich:

$$\hat{H}_0 |\psi_{in}\rangle + \hat{V} |\psi_{i(n-1)}\rangle = \varepsilon_i |\psi_{in}\rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} |\psi_{i(n-k)}\rangle + E_{in} |\phi_i\rangle \quad (\lambda_n)$$

Störungstheorie  $n$ -ter Ordnung heißt nun alle Gleichungen für  $\lambda^1 \dots \lambda^n$ , aufbauend auf der ungestörten Eigenwertgleichung, zu berücksichtigen. Je größer dabei die Störung ist, desto mehr Gleichungen müssen wir lösen, um ein sinnvoll genaues Ergebnis zu erhalten.

### 5.1.3 „Störungstheorie“ 0. Ordnung

Setzt man  $n = 0$ , so wird mit  $\varepsilon_i = E_i$  und  $\psi_i = \phi_i$  die fiktive Störung einfach ignoriert. Hier kann also noch nicht von Störungsrechnung geredet werden. Interessant ist erst die

### 5.1.4 Störungstheorie 1. Ordnung

Unser Ziel ist es – für kleine Störungen, so dass  $(\lambda\hat{V})^2 \simeq 0$  ist – die Energieniveaus  $E_i$  und die Zustände  $\psi_i$  konkret berechnen zu können.

#### Energiekorrektur in 1. Ordnung

Multiplizieren wir Gleichung ( $\lambda_1$ ) von links mit  $\langle \phi_i |$ :<sup>6</sup>

$$\langle \phi_i | \hat{H}_0 | \psi_{i1} \rangle + \langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{i1} \rangle + E_{i1} \langle \phi_i | \phi_i \rangle$$

Lassen wir im ersten Term  $\hat{H}_0$  nach links wirken, so erhalten wir den Eigenwert  $\varepsilon_i$ , der vor das Skalarprodukt gezogen werden kann:

$$\varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{i1} \rangle + \langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{i1} \rangle + E_{i1} \langle \phi_i | \phi_i \rangle$$

Der entstandene Term steht aber auch auf der rechten Seite, kürzt sich also weg (Siehe auch Fußnote 7), übrig bleibt:

$$\langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle = E_{i1} \langle \phi_i | \phi_i \rangle$$

Da unsere Wellenfunktionen normiert sind, ergibt das Skalarprodukt auf der rechten Seite der Gleichung eins:

$$\langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle = E_{i1}$$

Wir erhalten somit als Ergebnis für die Energiekorrektur des Zustands  $|\psi_i\rangle$  in 1. Ordnung Störungstheorie:

$$E_{i1} = \langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle$$

<sup>6</sup>Diesen Trick wenden wir an, da wir nicht wissen was  $\hat{H}_0 |\psi_{i1}\rangle$  ist; den neu erhaltenen Teilterm  $\langle \phi_j | \hat{H}_0$  kennen wir aber.

Die Energie der Zustände  $|\psi_i\rangle$  ist dann für kleine Störungen bestimmt durch:

$$E_i = \varepsilon_i + \langle \phi_i | \hat{V} | \phi_i \rangle$$

### Zustandskorrektur in 1. Ordnung

Nun interessieren uns die Korrekturzustände. Multiplizieren wir wieder die Gleichung  $(\lambda_1)$  von links mit  $\langle \phi_j |$ , diesmal nur für  $j \neq i$ :<sup>7</sup>

$$\langle \phi_j | \hat{H}_0 | \psi_{i1} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle + E_{i1} \langle \phi_j | \phi_i \rangle$$

Lassen wir im ersten Term wieder  $\hat{H}_0$  nach links wirken, so erhalten wir den Energieeigenwert  $\varepsilon_j$ :

$$\varepsilon_j \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle + E_{i1} \langle \phi_j | \phi_i \rangle$$

Da  $i \neq j$  und somit  $\phi_j \perp \phi_i$ , ergibt das rechte Skalarprodukt null:

$$\varepsilon_j \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle$$

Zusammenfassen des Skalarprodukts  $\langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle$  liefert:

$$\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle$$

und somit erhalten wir die Entwicklungskoeffizienten von  $|\psi_{i1}\rangle$  in der Basis der ungestörten Zustände:

$$\langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle = \frac{\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}$$

Die Zustandskorrektur in der Basis der ungestörten Zustände ist gegeben durch:

$$|\psi_{i1}\rangle = \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle$$

Einsetzen der Entwicklungskoeffizienten dieser Basisdarstellung:

$$|\psi_{i1}\rangle = \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \frac{\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}$$

Die Energiekorrektur ist nach Voraussetzung klein:

$$|\Delta E| = |E_{i1} - \varepsilon_i| \ll |\varepsilon_i - \varepsilon_j|$$

Ist also das Matrixelement  $\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_i \rangle$  tatsächlich klein gegen die Energiedifferenz  $\varepsilon_i - \varepsilon_j$ , so ist die Zustandsstörung in 1. Näherung,  $\langle \phi_j | \psi_{i1} \rangle$ , auch klein. Das ist auch die Voraussetzung, damit die Störungstheorie 1. Ordnung zur Beschreibung des gestörten Systems ausreicht.

Hier sieht man, warum zunächst ohne Entartung gearbeitet wird:  $\varepsilon_i = \varepsilon_j$  wäre für die Berechnung von  $|\psi_{i1}\rangle$  katastrophal; der Bruch könnte nicht ausgewertet werden.

<sup>7</sup>Nach obigen Annahmen sind die Korrekturzustände  $|\psi_{i1}\rangle$  zum Zustand  $|\psi_i\rangle$  linear unabhängig vom ungestörten Zustand  $|\phi_i\rangle$ ; das Skalarprodukt ist also null.

### 5.1.5 Störungstheorie $n$ -ter Ordnung

Die Vorgehensweise ist die gleiche wie bei der 1. Ordnung; nur die Terme werden komplizierter.

#### Energiekorrektur in $n$ -ter Ordnung

Multiplizieren wir die Gleichung  $(\lambda_n)$  von links mit  $\langle \phi_i |$ :

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \hat{H}_0 | \psi_{in} \rangle + \langle \phi_i | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle = \\ \varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{in} \rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_i | \psi_{i(n-k)} \rangle + E_{in} \langle \phi_i | \phi_i \rangle \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt im letzten Term ist eins; wir ziehen außerdem den Eigenwert  $\varepsilon_i$  heraus:

$$\varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{in} \rangle + \langle \phi_i | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_i | \psi_{in} \rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_i | \psi_{i(n-k)} \rangle + E_{in}$$

Alle noch vorkommenden Skalarprodukte ergeben wieder null, weil die Zustandsstörungen  $|\psi_{il}\rangle$  linear unabhängig von  $|\phi_i\rangle$  sind, so dass übrigbleibt:

$$\boxed{E_{in} = \langle \phi_i | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle}$$

Um die  $n$ -te Energiekorrektur zu erhalten, müssen wir also den Korrekturzustand der nächstniedrigeren Ordnung kennen.

#### Zustandskorrektur in $n$ -ter Ordnung

Multiplizieren wir nochmals die Gleichung  $(\lambda_n)$  von links mit  $\langle \phi_j |$ , wobei wir uns wieder auf Zustände mit  $j \neq i$  beschränken können:

$$\begin{aligned} \langle \phi_j | \hat{H}_0 | \psi_{in} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle = \\ \varepsilon_i \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle + E_{in} \langle \phi_j | \phi_i \rangle \end{aligned}$$

Ziehen wir den Erwartungswert  $\varepsilon_j$  heraus und lassen  $\langle \phi_j | \phi_i \rangle = 0$  weg:

$$\varepsilon_j \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle = \varepsilon_i \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle$$

Zusammenfassen der  $\langle \phi_j | \psi_{in} \rangle$ -Terme ergibt:

$$(\varepsilon_j - \varepsilon_i) \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle + \langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle = \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle$$



Auflösen nach  $\langle \phi_j | \psi_{in} \rangle$  ergibt:

$$\langle \phi_j | \psi_{in} \rangle = \frac{\langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} - \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \sum_{k=1}^{n-1} E_{ik} \langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle$$

Die Skalarprodukte zwischen Basiszuständen  $\langle \phi_j |$  und den niedrigeren Korrekturzuständen  $|\psi_{il}\rangle$  ergeben sich aus der Störungsrechnung niedrigerer Ordnung, sie sind also im Prinzip bekannt. Setzen wir die Entwicklungskoeffizienten  $\langle \phi_j | \psi_{in} \rangle$  der noch unbekannt Zustandsstörungen  $|\psi_{in}\rangle$  in deren Basisdarstellung ein:

$$|\psi_{in}\rangle = \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \psi_{in} \rangle$$

so erhalten wir als Ergebnis:

$$|\psi_{in}\rangle = \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \left( \underbrace{\langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i(n-1)} \rangle}_{\text{Term A}} - \sum_{k=1}^{n-1} \underbrace{E_{ik} \langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle}_{\text{Term B}} \right)$$

**Behauptung.** Der Ausdruck für die Korrekturzustände  $|\psi_{in}\rangle$  enthält ausschließlich Terme der Ordnung  $\left(\frac{\langle \hat{V} \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}\right)^n$ .

*Beweis durch vollständige Induktion.*

**Induktionsanfang:** Zu zeigen ist, dass die Behauptung für  $n = 1$  gilt. Die hintere Summation  $\sum_1^0$  fällt aufgrund nicht überschneidender Summationsgrenzen weg, so dass wir das in 1. Ordnung schon errechnete Ergebnis reproduzieren können. Der Koeffizient kommt dann, wie behauptet, nur zur Potenz 1 vor:

$$|\psi_{i1}\rangle = \sum_{j \neq i} |\phi_j\rangle \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \langle \phi_j | \hat{V} | \psi_{i0} \rangle$$

**Induktionsannahme:** Sei die Behauptung für  $n - 1$  erfüllt.

**Induktionsschritt:** Machen wir den Schritt von  $n - 1$  nach  $n$ :

- Betrachten wir Term A. Dort ist ein  $\hat{V}$  direkt enthalten. Im Ket kommt aber für alle  $n - 1$  vorangegangenen Störungsterme jeweils ein weiteres (inklusive der Energiedifferenz als Zähler) hinzu. Wir erhalten den besagten Term damit zur  $n$ -ten Potenz:

$$\underbrace{\left(\frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}\right)^1}_{\text{Ein } \hat{V} \text{ direkt}} \cdot \underbrace{\left(\frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}\right)^{n-1}}_{(n-1) \text{ } \hat{V}'\text{s in } |\psi_{i(n-1)}\rangle} = \left(\frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}\right)^n$$

- Betrachten wir nun Term  $B$ . Dort steht die Energiekorrektur  $E_{ik}$ , die sich zu  $\langle \phi_i | \hat{V} | \psi_{i(k-1)} \rangle$  ergab. Damit erhalten wir, wie bei Term  $A$  diskutiert, die Potenz  $k$ . Das Skalarprodukt  $\langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle$  enthält  $n - k$  Faktoren, so dass sich insgesamt wieder  $n$  ergeben:

$$\underbrace{\frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \left( \frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \right)^{k-1}}_{E_{ik}} \cdot \underbrace{\left( \frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \right)^{n-k}}_{\langle \phi_j | \psi_{i(n-k)} \rangle} = \left( \frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \right)^n$$

Der  $n$ -te Korrekturzustand enthält also, wie behauptet, die Matrixelemente der Wechselwirkungsenergie  $\hat{V}$  nur zur  $n$ -ten Potenz.  $\square$

Das vereinfacht Konvergenzprüfungen.

Mit der Voraussetzung, dass die potentielle Energie der Störung klein ist gegenüber den Differenzen der ungestörten Energieniveaus:

$$\left( \frac{\langle \hat{V} \rangle_{ji}}{\Delta \varepsilon} \right) \ll 1$$

ist gesichert, dass die Störungsreihe konvergiert. Dies muss im konkreten Fall (mit gegebenem  $\hat{V}$ ) geprüft werden.



bei der nur die Diagonalelemente nicht verschwinden. Die Untermatrizen in der Diagonalen haben dabei jeweils die Dimension  $m_k \times m_k$ . Die Diagonalelemente sind die Eigenwerte des ungestörten Systems.

Der Raum der hierbei, zum Beispiel durch die  $\phi_{0k}$  aufgespannt wird, ist ein Teilraum des Hilbertraums.

Uns interessiert nun, wie die Übergangsmatrix für den gestörten Hamilton-Operator aussieht. Kommt ein Störpotential hinzu, so ändern sich die Diagonalelemente, wenn die Störung auf die entsprechenden Zustände Einfluss nimmt.

**Beispiel (zur Bedeutung der Matrix).** Das Matrixelement  $\langle \phi_{ik} | \hat{H} | \phi_{jk} \rangle$  beschreibt, ob durch die Störung  $\hat{V}$  der Zustand  $|\phi_{jk}\rangle$  eine zusätzliche Komponente in „Richtung“  $|\phi_{ik}\rangle$  erhält. Das Matrixelement selbst gibt den Faktor (Koeffizienten) dieser neuen Komponente an. Die Spalte  $j$  der Matrix (bzw. der  $k$ -ten Untermatrix) ist somit die Darstellung des gestörten Zustands  $|\psi_{jk}\rangle$  in der Basis der ungestörten Zustände  $|\phi_{ik}\rangle$ .

Sicher ist, dass in  $\mathcal{H}$  Werte  $\neq 0$  außerhalb der Diagonalen auftreten können (sonst ist das System nicht sensitiv auf die Störung). Durch die Störung kann sich jedoch auch der ursprüngliche (ungestörte) Energiewert ändern, also die Diagonalelemente. Zur Lösung der Eigenwertgleichung von  $\hat{H}$  suchen wir letztendlich die Diagonalisierung von  $\mathcal{H}$  (die im Allgemeinen von der Dimension „ $\infty \times \infty$ “ sein kann). Im Folgenden versuchen wir die Matrix in handlichere Pakete aufzuteilen.

### Projektionsoperatoren für den Hamilton-Operator

Wir versuchen das Problem zu vereinfachen, indem wir den Unterraum des Grundzustands vom restlichen Problem abkoppeln. Dazu geben wir zunächst zwei Definitionen:

**Definition (Grundzustandsprojektion).** Der Projektionsoperator  $\hat{P}$  projiziert einen Zustand auf die Basis der ungestörten Zustände zur niedrigsten Energie  $\varepsilon_0$ , also auf die (entarteten) Grundzustände:

$$\hat{P} := \sum_{k=1}^{m_0} |\phi_{0k}\rangle \langle \phi_{0k}|$$

**Definition (Projektor auf angeregte Zustände).** Der Projektionsoperator  $\hat{Q}$  bildet die Projektion auf die nicht durch  $\hat{P}$  erfassten Basiszustände; er projiziert auf die (entarteten) angeregten Zustände:

$$\hat{Q} := \sum_{j \neq 0} \sum_{k=1}^{m_j} |\phi_{jk}\rangle \langle \phi_{jk}|$$

### Eigenschaften der Projektionsoperatoren

1. Die Projektionen sind eindeutig, eine Projektion wird durch nochmalige Anwendung des Projektionsoperators nicht verändert:

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

$$\hat{Q}^2 = \hat{Q}$$

2. Zusammen bilden  $\hat{P}$  und  $\hat{Q}$  identisch auf den gesamten Raum ab:

$$\hat{P} + \hat{Q} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{m_j} |\phi_{jk}\rangle \langle \phi_{jk}| = \hat{\mathbb{1}}$$

3.  $\hat{P}$  und  $\hat{Q}$  sind disjunkt. Sie bilden auf zwei zueinander orthogonale (linear unabhängige) Unterräume des Hilbertraums ab:

$$\hat{P}\hat{Q} = \sum_{i=1}^{m_0} \sum_{j \neq 0} \sum_{k=1}^{m_j} |\phi_{0i}\rangle \underbrace{\langle \phi_{0i} | \phi_{jk} \rangle}_{=0} \langle \phi_{jk}| = 0$$

4. Die Basiszustände werden bei der Projektion auf sich selbst abgebildet. Die Operatoren sind bezüglich der jeweiligen Basiszustände Identitätsoperatoren;  $\hat{P}$  für den  $m_0 \times m_0$ -Unterraum mit  $j = 0$ :

$$\langle \phi_{jk} | \hat{P} | \phi_{ik} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & & 0 & & \\ & \ddots & & & \\ 0 & & 1 & & \\ & & & 0 & 0 \\ & & & & \ddots \\ & & 0 & & & 0 \end{pmatrix}$$

bzw.  $\hat{Q}$  für die Unterräume  $j \neq 0$ :

$$\langle \phi_{jk} | \hat{Q} | \phi_{ik} \rangle = \begin{pmatrix} 0 & & 0 & & \\ & \ddots & & & \\ 0 & & 0 & & \\ & & & 1 & 0 \\ & & & & \ddots \\ & & 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

5. Die Zustände  $|\phi_{jk}\rangle$  bilden ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu den Operatoren  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{P}$  und  $\hat{Q}$ ; diese Operatoren sind damit untereinander vertauschbar:

$$[\hat{H}_0, \hat{P}]_- = [\hat{H}_0, \hat{Q}]_- = [\hat{P}, \hat{Q}]_- = 0$$

## 5.2.2 Herleitung des effektiven Hamilton-Operators

### Ansatz

Wir suchen zunächst den effektiven<sup>8</sup> Hamilton-Operator  $\hat{H}_{\text{eff}}$  im Raum der (entarteten) Grundzustände  $|\phi_{0k}\rangle$ . Die Lösungszustände  $|\tilde{\psi}_{ik}\rangle := \hat{P}|\psi_{ik}\rangle$  der Eigenwertgleichung zum effektiven Hamilton-Operator erfüllen dessen zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}_{\text{eff}} |\tilde{\psi}_{ik}\rangle = E_{ik} |\tilde{\psi}_{ik}\rangle$$

<sup>8</sup>Dieser effektive Hamilton-Operator soll zwar das Problem mit der Störung ebenso beschreiben, wie der „echte“  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ; er bezieht sich jedoch nur auf den Unterraum, der durch  $\hat{P}$  erzeugt wird. Die Hoffnung ist, dass  $\hat{H}_{\text{eff}}$  leicht diagonalisierbar ist.

ebenso, wie die Eigenwertgleichung zum Grundzustands-Projektionsoperators:

$$\hat{P}|\tilde{\psi}_{ik}\rangle = 1|\tilde{\psi}_{ik}\rangle$$

Der nächste Schritt ist die Diagonalisierung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$ :  $\hat{P}\hat{H}_{\text{eff}}\hat{P}|\psi_{ik}\rangle$  liefert uns rechts die exakten Energiewerte  $E_{ik}$ , sowie die Projektionen  $\hat{P}|\psi_{ik}\rangle$  der exakten Zustände  $|\psi_{ik}\rangle$ . Die exakten Eigenzustände erhalten wir so allerdings leider nicht, denn zur Herleitung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  werden wir Näherungen machen müssen. Konkret suchen wir einen Operator  $\hat{H}_{\text{eff}}$ , der folgende Eigenwertgleichung besitzt:

$$\boxed{\hat{P}\hat{H}_{\text{eff}}\hat{P}|\psi_{ik}\rangle = E_{ik}\hat{P}|\psi_{ik}\rangle} \quad (\text{EWG 2})$$

$\hat{P}\hat{H}_{\text{eff}}\hat{P}$  ist im  $m_0$ -dimensionalen Hilbertraum definiert.

Der Trick der folgenden Herleitung ist, dass man mit  $\hat{P}$  nur eine  $(m_0 \times m_0)$ -Matrix diagonalisiert, und damit eigentlich nur  $m_0$  Eigenzustände erhalten sollte, tatsächlich aber alle Eigenzustände (genähert) erhält.

### Feshbach-Formalismus

Die nun folgende Herleitung des effektiven Hamilton-Operators ist für manche Gebiete der Physik ein zentrales Problem. Deswegen soll sie hier explizit vorgestellt werden.

Mit der allgemeinen Eigenwertgleichung:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

und der Eigenschaft  $\hat{P} + \hat{Q} = \hat{1}$  gilt auch:

$$\hat{H}(\hat{P} + \hat{Q})|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Multipliziert man die Projektionsoperatoren jeweils von links an die Gleichung:

$$\hat{P}\hat{H}(\hat{P} + \hat{Q})|\psi\rangle = E\hat{P}|\psi\rangle \quad (1)$$

$$\hat{Q}\hat{H}(\hat{P} + \hat{Q})|\psi\rangle = E\hat{Q}|\psi\rangle \quad (2)$$

und multipliziert die Klammer aus, so erhält man:

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle + \hat{P}\hat{H}\hat{Q}|\psi\rangle = E\hat{P}|\psi\rangle \quad (1')$$

$$\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle + \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}|\psi\rangle = E\hat{Q}|\psi\rangle \quad (2')$$

Separation des  $\hat{P}$ -Terms in Gleichung (2'):

$$\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle = E\hat{Q}|\psi\rangle - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}|\psi\rangle$$

Ausklammern:<sup>9</sup>

$$\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle = (E - \hat{Q}\hat{H})\hat{Q}|\psi\rangle$$

Mit der Eigenschaft  $\hat{Q}^2 = \hat{Q}$  kann ein weiteres  $\hat{Q}$  eingeschoben werden:

$$\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle = (E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q})\hat{Q}|\psi\rangle$$

Unter der Annahme, dass der inverse Operator zu  $(E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q})$  existiert, erhält man folgende Beziehung:

$$\hat{Q}|\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle$$

Diese Beziehung setzt man nun in Gleichung (1') ein:

$$E\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle + \hat{P}\hat{H}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle$$

Die erhaltene Gleichung enthält schon etwas in der (EWG 2)-Form, nämlich  $\hat{P}\mathcal{H}\hat{P}$ . Setzen wir jetzt den vollständigen Hamilton-Operator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  ein, und multiplizieren aus:

$$= \left( \hat{P}\hat{H}_0\hat{P} + \hat{P}\hat{V}\hat{P} + \hat{P}\hat{H}_0\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{H}_0\hat{P} + \hat{P}\hat{V}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{V}\hat{P} \right) |\psi\rangle$$

Aufgrund der Vertauschbarkeit der Projektionsoperatoren mit  $\hat{H}_0$  und der Disjunktheit von  $\hat{Q}$  und  $\hat{P}$  ist aber  $\hat{Q}\hat{H}_0\hat{P} = \hat{Q}\hat{P}\hat{H}_0 = 0$ . Der dritte Term entfällt damit:

$$= \left( \hat{P}\hat{H}_0\hat{P} + \hat{P}\hat{V}\hat{P} + \hat{P}\hat{V}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{V}\hat{P} \right) |\psi\rangle$$

Im Vergleich mit (EWG 2) können wir daraus  $\hat{H}_{\text{eff}}$  extrahieren:

$$\boxed{\hat{H}_{\text{eff}} := \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}\hat{Q}\hat{V}}$$

Der Operator im Nenner enthält noch den vollständigen Hamilton-Operator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ . Mit den Abkürzungen:

$$\alpha := E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}, \quad \epsilon := \hat{Q}\hat{V}\hat{Q}$$

lautet die Entwicklung dieses Bruchs (unter Beibehaltung der Reihenfolge der einzelnen Faktoren im Hinblick auf die einzusetzenden Operatoren) nach Taylor:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\alpha - \epsilon} = \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\epsilon\frac{1}{\alpha} + \dots$$

<sup>9</sup>Beachte, dass der in der Klammer auftretende Faktor  $E - \hat{Q}\hat{H}$  (Skalar - Matrixoperator) nur dann Sinn macht, wenn er auf einen Zustand (Vektor) angewandt wird.

Lösen wir  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  in der Taylorentwicklung auf:

$$\frac{1}{\underbrace{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}}_{\alpha} - \underbrace{\hat{Q}\hat{V}\hat{Q}}_{\epsilon}} = \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} + \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} \hat{Q}\hat{V}\hat{Q} \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} + \dots$$

Einsetzen in  $\hat{H}_{\text{eff}}$  liefert:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} \hat{Q}\hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} \hat{Q}\hat{V}\hat{Q} \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} \hat{Q}\hat{V} + \hat{V} \dots \hat{Q}\hat{V} + \dots$$

In dieser Entwicklung werden jetzt die Terme nach Potenzen von  $\hat{V}$  geordnet. Da  $\hat{V}$  die Störung darstellt, und somit als klein angenommen wird, liegt damit eine Näherungsmöglichkeit vor.

### 5.2.3 Anwendung

Zur Berechnung der Störungstheorie  $n$ -ter Ordnung wird folgendes Verfahren angewandt:

- 1. Ordnung:** Aufstellen von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  und Diagonalisierung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  im  $\hat{P}$ -Raum. Die Mischung von Zuständen mit verschiedenem Entartungsgrad ist bei dieser einfachen Störungsrechnung nicht aufzulösen.
- 2. Ordnung und höher** (Wigner-Störungstheorie<sup>10</sup>): Man entwickelt  $\hat{H}_{\text{eff}}$ , wie eben angedeutet. Dabei müsste  $E$  zur Diagonalisierung des Operators bekannt sein; ohne  $\hat{H}_{\text{eff}}$  lässt sich  $E$  aber nicht berechnen. Dieser Widerspruch wird mit Hilfe einer iterativen Vorgehensweise aufgelöst.

**Beispiel.** Sei  $N = 3$  die Dimension des Zustandsraums. Der Unterraum des Grundzustands ( $\hat{P}$ -Raum) habe die Dimension  $m = 1$ . Der Grundzustand ist also nicht entartet. Mit der oben hergeleiteten Entwicklung nimmt der effektive Hamilton-Operator dann folgende Form an:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \varepsilon_0 + \langle \phi_0 | \hat{V} | \phi_0 \rangle + \sum_{i=1}^2 |\langle \phi_0 | \hat{V} | \phi_i \rangle|^2 \langle \phi_i | \frac{1}{E - \varepsilon_i} | \phi_i \rangle$$

Diesen „Operator“ kann man jedoch berechnen, er ergibt eine Zahl  $\hat{H}_{\text{eff}} \in \mathbb{R}$ . Die zugehörige Eigenwertgleichung lautet:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(E) | \phi_0 \rangle = E | \phi_0 \rangle$$

Dies ist eine reine Zahlengleichung; sie ist graphisch lösbar: Man sucht die Punkte, bei denen die Funktion  $\hat{H}_{\text{eff}}(E)$  die Gerade  $E$  schneidet. Damit erhält man  $N$  Eigenwerte (Schnittpunkte), obwohl man nur einen  $m$ -dimensionalen Unterraum diagonalisiert hat. Es gibt also mehr Eigenwerte als das durch  $\hat{P}$  reduzierte System Basisfunktionen hat.

Der Ansatz ist somit gerechtfertigt. Er reduziert die Dimension des Problems, ohne die Mannigfaltigkeit der Lösungsmenge einzuschränken.

<sup>10</sup>Zur Wigner-Störungstheorie gibt es Alternativen, z.B. die Rayleigh-Schrödinger-Theorie.



Abbildung 5.2: Graphische Lösung des Eigenwertproblems.

## 5.3 Atome im elektrostatischen Feld

### 5.3.1 Grundlagen

#### Das Wasserstoffatom im elektrostatischen Feld

Wir betrachten ein Wasserstoffatom im elektrostatischen Feld, wobei der Feldvektor  $\vec{E}$  in  $z$ -Richtung zeigen soll:

$$\vec{E} = E_z \vec{e}_z$$

Durch das Feld wird sich der mittlere Aufenthaltsort des Elektrons etwas entgegen der Feldlinienrichtung verschieben, während das Proton in Richtung des Feldes gezogen wird. Proton und Elektron bilden ein elektrisches Dipolmoment, dabei ist  $\vec{r}$  der Abstandsvektor zwischen ihnen:

$$\vec{p}_{\text{Dipol}} = e\vec{r}$$

Die Wechselwirkungsenergie des Dipolmoments mit dem Feld ist:

$$V = -\vec{E} \cdot \vec{p}_{\text{Dipol}} = -e\vec{E} \cdot \vec{r} = eE_z z$$

Abbildung 5.3: Wasserstoffatom im elektrostatischen Feld.

Damit wir den Operator der Dipolwechselwirkungsenergie  $\hat{V}$  mit den Mitteln der Störungstheorie behandeln können, muss die Wirkung des Feldes klein sein. Wir fordern deswegen, dass die elektrostatische Feldenergie klein ist gegenüber der Coulomb-Energie  $\frac{e^2}{r}$  vom Proton.

In Abschnitt 3.6 wurde der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms aufgestellt und Lösungen der Schrödinger-Gleichung gefunden. Fassen wir das Wichtigste zusammen:

- Die Wellenfunktion des Elektrons stellt man durch die Quantenzahlen des Zustands dar. Damit ist das System vollständig beschrieben:<sup>11</sup>

$$|\phi\rangle := |n, l, m_l\rangle$$

- Die Ortswellenfunktion ist in einen Radial- und einen Winkelanteil separierbar:

$$\phi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$$

- Der Energieeigenwert des ungestörten Zustands ist unabhängig von den Quantenzahlen  $l$  und  $m_l$  (die Zustände sind entartet):

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}$$

wobei  $a_B$  der Bohr'sche Radius ist.

<sup>11</sup>Der Spin des Elektrons wird nicht berücksichtigt, da elektrostatische Kräfte keinen Einfluss auf ihn haben.

Abbildung 5.4: Energieschema für  $l = 0$ .

### Energiebeiträge der Matrixelemente

Betrachten wir zunächst Matrixelemente für eine feste Quantenzahl  $n$ , konkret die Übergangsmatrix der Störung  $\hat{V}$  zwischen entarteten Zuständen. Untersuchen wir, wann diese ungleich null werden können.

1. Beitrag durch die Quantenzahl  $m_l$ . Mit der potentiellen Energie:

$$\hat{V} = eE\hat{r} \cos \vartheta$$

ist:

$$\langle n, l_j, m_j | \hat{V} | n, l_i, m_i \rangle = 0, \quad \text{für } m_i \neq m_j.$$

Denn Folgendes gilt. Lösen wir  $\hat{V}$  auf:

$$\begin{aligned} \langle n, l_j, m_j | \hat{V} | n, l_i, m_i \rangle &= eE \int_0^{+\infty} r^3 \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} R_{Nl_j}^*(r) R_{Nl_i}(r) \\ &\cdot P_{l_j m_j}^*(\cos \vartheta) P_{l_i m_i}(\cos \vartheta) e^{-im_j \varphi} e^{im_i \varphi} d\varphi \cos \vartheta d(\cos \vartheta) dr \quad (\ddagger) \end{aligned}$$

Dabei ist:

$$\int_{-1}^{+1} e^{-im_j \varphi} e^{im_i \varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m_i m_j}$$

Dies ist für  $m_i \neq m_j$  gleich null.  $\square$

2. Beitrag durch die Quantenzahl  $l$ . Es gilt:

$$\langle n, l_j, m_j | \hat{V} | n, l_i, m_i \rangle = 0, \quad \text{für } l_i + l_j \text{ gerade.}$$

*Beweis.*

$$\int P_{l_i m_i}(\cos(\pi - \vartheta)) d(\cos \vartheta) = (-1)^{l_i} P_{l_i m_i}(\cos \vartheta)$$

Betrachte die Parität des Teilintegranden  $P_{l_i m_i}$  in Formel  $(\ddagger)$ . Für die Parität  $P$  des gesamten von  $\vartheta$  abhängigen Integranden gilt:

$$P = (-1)^{l_i + l_j + 1}$$

Das Integral verschwindet bei negativer Parität. Dies ist für ungerade Werte von  $l_i + l_j + 1$  und somit für gerade Werte von  $l_i + l_j$  gegeben.  $\square$

**Ergebnis:** Die Matrixelemente von  $\hat{V}$  liefern, für ein festes  $n$ , also nur dann einen Beitrag zum Matrixelement des Hamilton-Operators, wenn  $l_i + l_j$  ungerade ist, und wenn  $m_i = m_j$  ist.

### 5.3.2 Der Stark-Effekt

Mit obigen Überlegungen können wir nun die Energieverschiebungen im Wasserstoffatom mit konkreten Matrixelementen  $\langle n, l_j, m_j | \hat{H}_0 + \hat{V} | n, l_i, m_i \rangle$  des Hamilton-Operators betrachten.

#### Quadratischer Stark-Effekt

Im Grundzustand gilt:

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{V} | 1, 0, 0 \rangle = 0$$

weil  $l_i + l_j$  gerade ist. In der Störungsrechnung 1. Ordnung erhalten wir keine Energieänderung für den Grundzustand. Betrachten wir  $\hat{H}$  mit der Störungstheorie 2. Ordnung, so erhalten wir allerdings einen Beitrag:

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{V} \frac{\hat{Q}}{E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q}} \hat{V} | 1, 0, 0 \rangle \sim \bar{E}^2$$

Die Energieverschiebung geht quadratisch mit der Feldenergie. Dieser *quadratische Stark-Effekt* stammt vom (durch das angelegte elektrische Feld) induzierten Dipolmoment  $\vec{p}_{\text{Dipol}}$ . Er ist sehr klein (wodurch die Anwendung der Störungsrechnung gerechtfertigt ist), und liefert grundsätzlich seinen (kleinen) Beitrag zur Energie der Atomelektronen.

#### Linearer Stark-Effekt

Wir betrachten das erste angeregte Energieniveau,  $n = 2$ , also die Zustände  $|2, 0, 0\rangle$ ,  $|2, 1, 0\rangle$ ,  $|2, 1, 1\rangle$  und  $|2, 1, -1\rangle$ . Legt man die Reihenfolge der Zustände in der eben gewählten Art fest, so hat die Übergangsmatrix folgende Struktur:

$$\langle 2, l_j, m_j | \hat{H}_0 + \hat{V} | 2, l_i, m_i \rangle = \begin{pmatrix} E & W & 0 & 0 \\ W & E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E \end{pmatrix}$$

Da für die Diagonalelemente  $l_i + l_j$  gerade ist, liefern die Matrixelemente der Störung  $\hat{V}$  keinen Beitrag und beinhalten daher nur die ungestörte Energie  $E = E_{n=2}$ . Nur für die Matrixelemente zwischen  $|2, 0, 0\rangle$  und  $|2, 1, 0\rangle$  ist  $l_i + l_j$  ungerade und  $m_i = m_j$  erfüllt; sie liefern daher einen Beitrag zur Energieverschiebung. Für diese Energieverschiebung  $W$  ergibt sich:<sup>12</sup>

$$W = 3a_B e |\vec{E}|$$

Sie ist proportional zum Betrag des elektrischen Feldvektors. Dieser *lineare Stark-Effekt* kommt durch die Aufhebung der  $l$ -Entartung durch das elektrische Feld zustande. Er tritt nur dann auf, wenn eine Entartung vorhanden ist, die erst durch das externe  $\vec{E}$ -Feld aufgehoben wird, und nicht schon durch innere atomare Felder.

Abbildung 5.5: Wasserstoff-Spektroskopie: Lineare Aufspaltung der ( $n = 2$ )-Zustände im anwachsenden elektrischen Feld.

Abbildung 5.6: Linearer Stark-Effekt der ( $n = 2$ )-Zustände des Wasserstoffatoms; Vgl. [Fließbach, Seite 321, Abb. 39.2].

Abbildung 5.7: Abschirmung der Elektronen im Lithiumatom.

### Wie verhalten sich wasserstoffähnliche Systeme?

Durch die verschiedenen Elektronen im Atom wird die  $l$ -Entartung aufgehoben. Im ( $l = 0$ )-Zustand ist keine Abschirmung durch andere Elektronen vorhanden, während z.B. im ( $l = 1$ )-Zustand eine Abschirmung gegeben ist. Wird die  $l$ -Entartung durch diese Abschirmungseffekte aufgehoben, tritt der lineare Stark-Effekt nicht auf. Er ist einzig dem Wasserstoff vorbehalten, das durch sein einzelnes Elektron die Abschirmung nicht kennt.

---

<sup>12</sup>Nach Diagonalisierung der Matrix durch das Charakteristische Polynom . . . .

## 5.4 Atome im Magnetfeld

Im folgenden benötigen wir die reduzierte Masse für das System Elektron-Proton:<sup>13</sup>

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

Der vollständige Hamilton-Operator des Elektrons im Atom, das einem Magnetfeld ausgesetzt ist, setzt sich aus folgenden Anteilen zusammen:

- Kinetischer Radialanteil .....  $\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu}$
- Kinetischer Winkelanteil .....  $\frac{\hat{L}^2}{2\mu\hat{r}^2}$
- Coulomb-Anteil .....  $-\frac{e^2}{\hat{r}}$
- Spin-Bahn-Wechselwirkung<sup>14</sup> .....  $\hat{V}_{ls} = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{\hat{r}^3} \hat{L} \cdot \hat{S}$
- Anteil des magnetischen Moments .....  $\hat{V}_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

Dabei ist die zusätzliche Energie durch das  $B$ -Feld:

$$\hat{V}_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

für ein homogenes  $\vec{B} = B\hat{e}_z$ :<sup>15</sup>

$$\begin{aligned} &= -\mu_z B \\ &= -\mu_B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) B \end{aligned}$$

Die Ortsabhängigkeit und den Vorfaktor der Spin-Bahn-Wechselwirkung fassen wir zur übersichtlicheren Darstellung in  $\hat{W}_{ls}(\hat{r})$  zusammen:<sup>16</sup>

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ls} &= \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{\hat{r}^3} \hat{L} \cdot \hat{S} \\ &=: \hat{W}_{ls}(\hat{r}) \hat{L} \cdot \hat{S} \end{aligned}$$

Schreiben wir also den Hamilton-Operator aus:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu\hat{r}^2} - \frac{e^2}{\hat{r}} + \hat{W}_{ls}(\hat{r}) \hat{L} \cdot \hat{S} - \mu_B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) B$$

<sup>13</sup>Im Wasserstoffatom ist die reduzierte Masse schon fast gleich der Elektronenmasse. In Atomen mit mehr Nukleonen wird der Unterschied immer kleiner. Deswegen wird oftmals nur mit der Elektronenmasse gerechnet.

<sup>14</sup>Vgl. [Fließbach, Seite 323].

<sup>15</sup>Der Faktor 2 vor  $\hat{S}_z$  stammt vom anomalen magnetischen Moment des Spins; vgl. mit Seite 213.

<sup>16</sup>Wir wählen den Buchstaben  $W$ , um eine Verwechslung zwischen dem kompletten Wechselwirkungsterm  $\hat{V}_{ls}$  und dem ortsabhängigen Teilterm  $\hat{W}_{ls}(\hat{r})$  auszuschließen.

Abbildung 5.8: Energietermschema.

Wenn wir das Problem mit Hilfe der Störungsrechnung angehen möchten, müssen wir klären, welche Terme gegenüber welchen überwiegen. Wir unterscheiden im Folgenden drei Fälle:

1.  $B$  schwach:  $\hat{V}_{ls} \gg \hat{V}_B$ , *Zeeman-Effekt*.  
Mit  $\hat{V}_B$  als Störung ist der ungestörte Hamilton-Operator:

$$\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{e^2}{\hat{r}} + \hat{V}_{ls}$$

2.  $B$  relativ stark:  $\hat{V}_B \gg \hat{V}_{ls}$ , *Paschen-Back-Effekt*.  
Mit der Störung  $\hat{V}_{ls}$  ist der ungestörte Hamilton-Operator hier:

$$\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{e^2}{\hat{r}} + \hat{V}_B$$

3.  $B$  extrem stark:  $\hat{V}_B \gg \frac{e^2}{r}$ .  
Hier überwiegt  $\hat{V}_B$  alle anderen elektromagnetischen Anteile:

$$\hat{H}_0 = \hat{T} + \hat{V}_B$$

In diesem Fall<sup>17</sup> werden die Elektronen hauptsächlich von der Lorentz-Kraft geleitet. Ein Proton, das nur mit der Coulomb-Kraft zieht, wird das Elektron bei extrem starken  $B$  nur wenig beeinflussen können.

Abbildung 5.9: Elektron im extrem starken  $B$ -Feld. Das Elektron schraubt sich spiralförmig um die Magnetfeldlinien. Die Coulomb-Kraft des Kerns ist zu schwach, um es im Atom gebunden zu halten.

Die Fälle 1 und 2 möchten wir nun genauer betrachten.

### 5.4.1 Der Zeeman-Effekt

Der Zeeman-Effekt beschreibt die Aufspaltung der Energieniveaus von Atom-elektronen im schwachen Magnetfeld. Zustände kommt sie durch eine Präzession des Drehimpulses  $\vec{J}$  (und damit auch des magnetischen Moments  $\vec{\mu}_j$ ) um den externen Feldvektor.

Die Basis zum ungestörten Hamilton-Operator  $\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{e^2}{r} + \hat{V}_{ls}$  ist gegeben durch:

$$|\phi_\alpha\rangle = |N, l, s = \frac{1}{2}, j, m_j = m_\alpha\rangle$$

<sup>17</sup>So starke Magnetfelder sind auf der Erde experimentell nicht erzeugbar.

In 1. Ordnung Störungsrechnung suchen wir die Übergangswahrscheinlichkeiten des Störoperators  $\hat{V}_B$ , wobei wir zunächst  $\hat{V}_B$  und die Zustände ausschreiben:

$$\begin{aligned} \langle \phi_\alpha | \hat{V}_B | \phi_\beta \rangle &= -\mu_B B \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | \underbrace{\hat{L}_z + 2\hat{S}_z}_{=\hat{J}_z + \hat{S}_z} | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \\ &= -\mu_B B \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | \hat{J}_z | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \\ &\quad - \mu_B B \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | \hat{S}_z | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \end{aligned}$$

der  $\hat{J}_z$ -Anteil reduziert sich:<sup>18</sup>

$$= -\mu_B B \left( \hbar m_\beta \delta_{m_\alpha m_\beta} + \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | \hat{S}_z | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \right)$$

Den  $\hat{S}_z$ -Anteil müssen wir zunächst aufblähen, so dass wir der Übersichtlichkeit wegen nur ihn verfolgen (bis auch er sich wieder reduziert hat):

$$\langle \hat{S}_z \rangle_{\alpha\beta} := \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | \hat{S}_z | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle$$

Schieben wir zwei Einsen ein ( $\sum_{m_l, m_s} |l, m_l, \frac{1}{2}, m_s\rangle \langle l, m_l, \frac{1}{2}, m_s|$ ) – in der ungekoppelten Basis:

$$\begin{aligned} &= \sum_{m_s} \sum_{m_l} \sum_{m'_l} \sum_{m'_s} \underbrace{\langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | l, m_l, \frac{1}{2}, m_s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordon}} \\ &\quad \langle l, m_l, \frac{1}{2}, m_s | \hat{S}_z | l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s \rangle \langle l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \end{aligned}$$

Aufgrund von Beziehungen der Clebsch-Gordon-Koeffizienten reduzieren sich die 4 Summationen auf 2:

$$\begin{aligned} &= \sum_{\substack{m_\alpha - m_s \\ m_\beta - m_s}} \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | l, m_l, \frac{1}{2}, m_s \rangle \\ &\quad \underbrace{\langle l, m_l, \frac{1}{2}, m_s | \hat{S}_z | l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s \rangle \langle l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle}_{=\delta_{m_l m'_l} \cdot \hbar m'_s \cdot \delta_{m_s m'_s}} \end{aligned}$$

Durch das hier auftretende  $\hat{S}_z$ -Matrixelement bricht die Summation weiter zusammen:

$$\begin{aligned} &= \sum_{m_s} \hbar m_s \langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | l, m_l = m_\alpha - m_s, \frac{1}{2}, m_s \rangle \\ &\quad \langle l, m_l = m_\beta - m_s, \frac{1}{2}, m_s | l, \frac{1}{2}, j, m_\beta \rangle \end{aligned}$$

Da  $m_\alpha = m_\beta$ :

$$= \sum_{m_s} \hbar m_s |\langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | l, m_\alpha - m_s, \frac{1}{2}, m_s \rangle|^2$$

<sup>18</sup>Sowohl im Bra, als auch im Ket stehen Eigenzustände zu  $\hat{J}_z$ . Verschiedene Eigenzustände eines Operators sind aber orthogonal zueinander.



Damit können wir wieder alles zusammenfassen:

$$\langle \phi_\alpha | \hat{V}_B | \phi_\beta \rangle = -\mu_B B \left( \hbar m_\beta \delta_{m_\alpha m_\beta} + \sum_{m_s} \hbar m_s |\langle l, \frac{1}{2}, j, m_\alpha | l, m_\alpha - m_s, \frac{1}{2}, m_s \rangle|^2 \right)$$

Mit der Störmatrix  $\langle \phi_\alpha | \hat{V}_B | \phi_\beta \rangle$  können nun die Energiebeiträge des magnetischen Moments in Störungstheorie 1. Ordnung berechnet werden.

### 5.4.2 Der Paschen-Back-Effekt

Im Gegensatz zum Zeeman-Effekt ist beim Paschen-Back-Effekt das externe Magnetfeld so stark, dass Spin und Bahndrehimpuls nicht mehr gekoppelt, sondern einzeln um den Feldvektor  $\vec{B}$  präzedieren.

Der ungestörte Hamilton-Operator lautet (die Störung ist hier  $\hat{V}_{I_s}$ ):

$$\hat{H}_0 = \hat{T} - \frac{e^2}{\hat{r}} - \mu_B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) B$$

Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind:

$$E_\alpha = -\frac{13,5 \text{ eV}}{N} - \mu_B B (m_l + 2m_s)$$

wobei die Magnetquantenzahlen folgende Werte annehmen können:

$$m_l = -1, 0, 1$$

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

Die Kopplung ergibt im Energieterm folgende Faktoren für  $\mu_B B$ , womit die Entartung teilweise aufgehoben wird:

$m_l$	$m_s$	$(m_l + 2m_s)$
-1	$-\frac{1}{2}$	-2
-1	$+\frac{1}{2}$	0
0	$-\frac{1}{2}$	-1
0	$+\frac{1}{2}$	+1
+1	$-\frac{1}{2}$	0
+1	$+\frac{1}{2}$	+2

Dabei bleiben jedoch die zwei Zustände mit  $m_l + 2m_s = 0$  entartet.

### Berechnung von $\hat{V}_{I_s}$ mit der Störungstheorie

Bevor wir die Matrixelemente berechnen, betrachten wir noch einen kleinen

**Einschub zum Skalarprodukt  $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ .**

- Drehe ich z.B.  $\hat{\vec{L}}$ , so ändert sich das Produkt  $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ ; eine ungekoppelte Basis  $|l, m_l\rangle |s, m_s\rangle \equiv |l, m_l, s, m_s\rangle$  ist also ungeeignet. Wir müssen zum Gesamtdrehimpuls  $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$  bzw. zur gekoppelten Basis  $|l, s, j, m_j\rangle$  übergehen.
- $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ , oder anders ausgedrückt  $[\vec{L}, \vec{S}]_- = 0$ ; die Operatoren vertauschen. Dies gilt, weil sie auf zwei völlig verschiedene Räume wirken.
- Folgender Zusammenhang gilt für die drei Drehimpulsoperatoren:<sup>19</sup>

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}\right)^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$$

Damit ist:

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\right)$$

- Wenn wir wissen, wie ein Operator auf einen Zustand wirkt, können wir den entsprechenden Eigenwert einsetzen:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}\right) |l, s, j, m_j\rangle &= \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\right) |l, s, j, m_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |l, s, j, m_j\rangle \end{aligned}$$

Ende des Einschubs.

Der Operator  $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$  ist in der Basis der Eigenzustände zu den Eigenwerten  $j, l$  und  $s$  diagonal. Dies benötigen wir im Folgenden. Damit können wir uns an die Berechnung der Matrixelemente von  $\hat{V}_{ls}$  wagen:

$$\langle l, m_l, \frac{1}{2}, m_s | \hat{V}_{ls} | l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s \rangle = \hat{V}_{ls} \langle l, m_l, \frac{1}{2}, m_s | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | l, m'_l, \frac{1}{2}, m'_s \rangle$$

Berechnen wir die Matrixelemente des Skalarprodukts mit diesem Wissen:

$$\langle \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \rangle := \langle l, m_l, s, m_s | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | l, m'_l, s, m'_s \rangle$$

Die ungekoppelte Basis ist ungeeignet, also müssen wir in die gekoppelte wechseln. Dazu schieben wir eine Eins ein, die in der gewünschten gekoppelten Basis steht:

$$= \sum_j \langle l, m_l, s, m_s | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | l, s, j, m_j \rangle \langle l, s, j, m_j | l, m'_l, s, m'_s \rangle$$

<sup>19</sup>Die Vektorpfeile für quadratische Drehimpuls(vektor)operatoren lassen wir auch hier wieder weg. Gemeint ist das Skalarprodukt.

wobei durch die Kopplung  $m_j = m'_l + m'_s$  vorgegeben ist. Setzen wir jetzt die Eigenwerte für  $\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$  ein, so erhalten wir Zahlen die wir vorziehen dürfen:

$$= \sum_j \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \\ \langle l, m_l, s, m_s | l, s, j, m_j \rangle \langle l, s, j, m_j | l, m'_l, s, m'_s \rangle$$

Die übrigbleibenden Skalarprodukte sind von der Form:

$$\langle \text{Basiszustand gekoppelt} | \text{Basiszustand ungekoppelt} \rangle$$

oder umgekehrt, und somit Clebsch-Gordon-Koeffizienten, die in Tabellen<sup>20</sup> nachgeschlagen werden können.

Mit den Matrixelementen des Störoperators  $\hat{V}_s$  können nun die Energieverschiebungen in Störungsrechnung 1. Ordnung berechnet werden.

### 5.4.3 Zusammenfassung (zur Vorgehensweise)

Bei Systemen deren Hamilton-Operator aus vielen Termen zusammengesetzt ist, muss man sich Gedanken über die *Energieverhältnisse* machen:

- Was nehme ich in den ungestörten Hamilton-Operator rein?
- Was betrachte ich als Störung?

Ziel ist letztlich die Berechnung der Matrixelemente des Störoperators in der ungestörten Basis.

---

<sup>20</sup>Z.B. in [Particles].

## 5.5 Ununterscheidbare Teilchen, Pauli-Prinzip

### 5.5.1 Unterscheidungskriterien für Teilchen

Zur Erläuterung der (Un-)Unterscheidbarkeit von Teilchen ist das Heliumatom mit seinen beiden Elektronen prädestiniert, da es übersichtlich ist. O.B.d.A. werden die zwei Einzelwellenfunktionen der beiden Heliumelektronen verwendet, um die Grundlagen zur Theorie der Teilchenunterscheidung aufzubauen.

Abbildung 5.10: Heliumatom.

Der Hamilton-Operator für ein Elektron im Heliumatom setzt sich aus der kinetischen Energie, der potentiellen Energie durch die Coulombanziehung des Kerns, sowie dem abstößenden Coulombterm der Wechselwirkung mit dem anderen Elektron zusammen. Fasst man beide Elektronenenergien in einem gemeinsamen Hamilton-Operator zusammen, so lautet dieser:

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{T}_1 - \frac{2e^2}{\hat{r}_1}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\hat{T}_2 - \frac{2e^2}{\hat{r}_2}}_{\hat{H}_2} + \hat{V}_{12}$$

Betrachten wir die zwei Elektronen ohne die gegenseitige Wechselwirkung  $\hat{V}_{12}$ , so lässt sich der Hamilton-Operator in zwei unabhängige Teile aufspalten. Wir fassen  $\hat{V}_{12}$  als Störung auf, während der ungestörte Hamilton-Operator  $\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  ist. Ihn betrachten wir im Folgenden. Dazu müssen wir unterscheiden, auf welchen Ort und auf welches Elektron sich eine Wellenfunktion bezieht.

**Notation.** Zur Unterscheidung von Wellenfunktion und Aufenthaltsort der beiden Elektronen vereinbaren wir folgende Notation:

- Die Aufenthaltsorte der Elektronen nummerieren wir mit 1 und 2. Damit sind die Ortsvektoren  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  gemeint. Der Ort wird als Argument der Wellenfunktion mitgeführt.
- Die Wellenfunktion indizieren wir mit  $\alpha$  und  $\beta$ .  $\phi_\alpha$  ist die Wellenfunktion des ersten Elektrons,  $\phi_\beta$  die des zweiten Elektrons. Befindet sich das erste Elektron am Ort 2, so wird dies durch die Wellenfunktion  $\phi_\alpha(2)$  ausgedrückt.
- Die Gesamtwellenfunktion bestimmt die Position der Elektronen anhand der Stellung des Ortsindex' im Argument:

$$\begin{aligned}\psi(1, 2) &= \phi_\alpha(1) \phi_\beta(2) \\ \psi(2, 1) &= \phi_\alpha(2) \phi_\beta(1)\end{aligned}$$

Diese Unterscheidungen sind wichtig, da wir im Folgenden herausfinden möchten, ob ein Rollentausch der zwei Elektronen das System unverändert lässt:

$$\phi_\alpha(1) \phi_\beta(2) \stackrel{?}{=} \phi_\alpha(2) \phi_\beta(1)$$

Abbildung 5.11: Ortswellenfunktion zweier Elektronen im Helium-Atom.

Unser Problem ist also, dass wir zwar herausfinden können, ob ein Elektron Spin hoch oder Spin runter hat, oder sich am Ort 1 oder 2 befindet. Wir können jedoch nicht unterscheiden, welches der beiden Elektronen wir gerade observieren.

Die zwei Wellenfunktion überlagern sich derart, dass es unmöglich ist, die zwei Elektronen zu unterscheiden. Selbst wenn die Elektronen weit auseinander liegen, besteht am Ort (Erwartungswert) des einen immer noch eine (kleine) Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\neq 0$  für das andere.

Abbildung 5.12: Ein Elektron in Tübingen und ein Kollege in Sydney. Obwohl sehr weit auseinander, besteht in Tübingen immer noch eine kleine Restaufenthaltswahrscheinlichkeit für das Elektron aus Sydney. Man kann nicht feststellen, welches der beiden Elektronen gemessen wurde.

Für die separierten Hamilton-Operatoren gelten die Eigenwertgleichungen:

$$\begin{aligned}\hat{H}_1\phi_\alpha(1) &= \varepsilon_\alpha\phi_\alpha(1) \\ \hat{H}_2\phi_\beta(2) &= \varepsilon_\beta\phi_\beta(2)\end{aligned}$$

Die Gesamtwellenfunktion ist eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}\psi(1,2) = E\psi(1,2)$$

wobei  $E = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta$  ist.

Aus dem Experiment ergibt sich, dass keine Unterscheidung zwischen den beiden Elektronen möglich ist. Man kann keine Markierung 1 und 2 an die beiden Elektronen anbringen, um dann zu verfolgen, ob Elektron 1 im Zustand  $\phi_\alpha$  vorliegt, oder ob es Elektron 2 ist. Dieses Problem der Ununterscheidbarkeit soll nun genauer betrachtet werden.

Bezüglich einer beliebigen Observable  $\mathcal{O}$  wird das Experiment also keine Unterscheidung machen:

$$\begin{aligned}\langle \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) | \hat{\mathcal{O}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) \rangle &\stackrel{!}{=} \\ \langle \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) | \hat{\mathcal{O}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) \rangle\end{aligned}$$

oder (übersichtlicher) in Kurzschreibweise:

$$\langle \psi(1,2) | \hat{\mathcal{O}}(1,2) | \psi(1,2) \rangle = \langle \psi(2,1) | \hat{\mathcal{O}}(1,2) | \psi(2,1) \rangle$$

**Satz.** *Zwei Teilchen sind genau dann ununterscheidbar, wenn die Beziehung:*

$$\langle \psi(1,2) | \hat{\mathcal{O}}(1,2) | \psi(1,2) \rangle = \langle \psi(2,1) | \hat{\mathcal{O}}(1,2) | \psi(2,1) \rangle$$

*für alle physikalischen Operatoren  $\hat{\mathcal{O}}$  gilt. Insbesondere muss sie auch für den Hamilton-Operator gelten.*

### 5.5.2 Teilchen-Vertauschung

#### Der Teilchen-Vertauschungsoperator

**Definition (Permutationsoperator).** Der Permutationsoperator (oder auch Teilchen-Vertauschungsoperator)  $\hat{P}$  tauscht die Positionen zweier Teilchen:

$$\hat{P}\psi(1, 2) = \psi(2, 1)$$

**Satz.** Für den Teilchen-Vertauschungsoperator gilt:

- Er ist selbstadjungiert:

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}$$

- Zweimalige Vertauschung zweier Teilchen stellt den ursprünglichen Zustand wieder her:

$$\hat{P}\hat{P} = \hat{\mathbf{1}}$$

Mit Hilfe des Vertauschungsoperators können wir nun den Erwartungswert für unseren (allgemeinen) physikalischen Operator  $\hat{O}$  umschreiben:

$$\begin{aligned} \langle \psi(1, 2) | \hat{O}(1, 2) | \psi(1, 2) \rangle &= \langle \psi(1, 2) | \hat{O}(1, 2) \hat{P}\hat{P} | \psi(1, 2) \rangle \\ &= \langle \psi(1, 2) | \hat{P}^\dagger \hat{O}(1, 2) \hat{P} | \psi(1, 2) \rangle \\ &= \langle \psi(2, 1) | \hat{O}(1, 2) | \psi(2, 1) \rangle \end{aligned}$$

Wenn Ununterscheidbarkeit vorliegt, kann man die Ortsindizes 1 in 2, und 2 in 1 umbenennen, ohne dass sich das Ergebnis ändert:

$$= \langle \psi(1, 2) | \hat{O}(2, 1) | \psi(1, 2) \rangle$$

Also ist:

$$\begin{aligned} \hat{P}^\dagger \hat{O}(1, 2) \hat{P} &= \hat{O}(2, 1) \\ &= \hat{O}(1, 2) \end{aligned}$$

Aus der Ununterscheidbarkeit folgt also der

**Satz.** Für alle physikalischen Operatoren  $\hat{O}$  ununterscheidbarer Teilchen gilt:<sup>21</sup>

$$[\hat{P}, \hat{O}]_- = 0$$

Insbesondere gilt für den Hamilton-Operator ununterscheidbarer Teilchen:

$$[\hat{P}, \hat{H}]_- = 0$$

Das bedeutet, dass  $\hat{P}$  und  $\hat{H}$  ein gemeinsames Eigenfunktionssystem besitzen.

<sup>21</sup>Sind zwei Teilchen ununterscheidbar, so gilt diese Kommutatorregel wirklich für alle physikalisch sinnvollen Operatoren!

**Behauptung.** Die Eigenwerte einer beliebigen Eigenwellenfunktion zu  $\hat{P}$  sind:

$$\lambda = \pm 1$$

*Beweis.* Die zweimalige Vertauschung stellt den Ursprungszustand wieder her:

$$\hat{P}^2 |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Formal liefert die Anwendung von  $\hat{P}$  jedoch den Eigenwert:

$$\begin{aligned} \hat{P}^2 |\psi\rangle &= \hat{P}\lambda |\psi\rangle \\ &= \lambda^2 |\psi\rangle \end{aligned}$$

Also ist:

$$\lambda^2 = 1$$

und somit:

$$\lambda = \pm 1$$

□

Ist  $\lambda = +1$ , so ist die betrachtete Wellenfunktion symmetrisch unter Teilchenvertauschung:

$$\hat{P}\psi(1,2) = \psi(1,2)$$

Für  $\lambda = -1$  spricht man von einer bezüglich Teilchenvertauschung antisymmetrischen Wellenfunktion:

$$\hat{P}\psi(1,2) = -\psi(1,2)$$

Beachte, dass dieses  $\psi$  Eigenzustand zu  $\hat{P}$  ist,<sup>22</sup> sonst gilt  $\hat{P}\tilde{\psi}(1,2) = \tilde{\psi}(2,1)$ !

### Gemeinsames Eigenfunktionssystem zu $\hat{P}$ und $\hat{H}$

Bei der Suche nach einem gemeinsamen Eigenfunktionssystem für  $\hat{P}$  und  $\hat{H}$  muss beachtet werden, dass für  $\hat{P}$  nach obigen Ausführungen gilt:<sup>23</sup>

$$\begin{aligned} \hat{P}\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) &= \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \\ &= \pm\lambda\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \end{aligned}$$

Für  $\hat{H}$  lautet die Eigenwertgleichung:

$$\hat{H}\phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) = (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)\phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)$$

<sup>22</sup>Also ein ununterscheidbares Teilchen ist.

<sup>23</sup>Der Faktor  $\lambda$  ist wieder 1, wenn die Produktwellenfunktion normiert ist.

Derselbe Energieeigenwert ergibt sich auch für den permutierten Zustand, da wir im ersten Satz dieses Abschnitts gesehen haben, dass die Erwartungswerte für den Hamilton-Operator unabhängig von der Teilchenkonstellation sind:

$$\hat{H}\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) = (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2)$$

Somit ist auch jede Linearkombination dieser beiden Zustände wieder ein Eigenzustand zu  $\hat{H}$ . Man muss also eine solche Linearkombination suchen, die auch ein Eigenzustand zu  $\hat{P}$  ist. Man findet schließlich:

**Satz.** *Die Wellenfunktionen:*

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) + \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1))$$

und:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1))$$

sind gemeinsame Eigenzustände zu  $\hat{H}$  und  $\hat{P}$ .

Der Faktor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  dient dabei der Normierung.

### Fermionen und Bosonen

Wenden wir den Permutationsoperator  $\hat{P}$  auf diese Wellenfunktion an:

$$\hat{P}\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \pm \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \pm \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2))$$

für die „positive“ Wellenfunktion ist das:

$$= +\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) + \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1))$$

für die mit Minus:

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1))$$

Es wird sich zeigen, dass das Vorzeichen obiger  $\hat{P}$ -Anwendung zwei Klassen von Teilchen trennt. Ergibt die Anwendung von  $\hat{P}$  ein +, so haben die betrachteten Teilchen einen ganzzahligen Spin; man spricht von *Bosonen*. Ergibt sich ein –, so liegen Teilchen mit halbzahligen Spin vor; diese nennt man *Fermionen*. Das bedeutet für die Bildung der gemeinsamen Eigenzustände zu  $\hat{H}$  und  $\hat{P}$  der beiden Teilchensorten:

- Die Produktwellenfunktionen von **Fermionen** werden mit Minus „linear-kombiniert“:

$$\psi_{\text{Fermion}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1))$$

Die Wellenfunktion  $\psi_{\text{Fermion}}$  ist antisymmetrisch bezüglich Teilchentausch:

$$\hat{P}\psi_{\text{Fermion}}(1, 2) = -\psi_{\text{Fermion}}(2, 1)$$



- Die Produktwellenfunktionen von **Bosonen** werden mit einem + gebildet:

$$\psi_{\text{Boson}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\alpha}(1)\phi_{\beta}(2) + \phi_{\alpha}(2)\phi_{\beta}(1))$$

Die Wellenfunktion  $\psi_{\text{Boson}}$  ist symmetrisch bezüglich Teilchentausch:

$$\hat{P}\psi_{\text{Boson}}(1,2) = +\psi_{\text{Boson}}(2,1)$$

### 5.5.3 Pauli-Prinzip

Betrachten wir nun diese Wellenfunktion für zwei Fermionen, z.B. Elektronen. Nimmt man an, dass beide Elektronen denselben Einteilchenzustand besetzen, also  $\alpha = \beta$  ist, so ergibt sich für die (antisymmetrische) Wellenfunktion  $\psi$ :

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\alpha}(1)\phi_{\alpha}(2) - \phi_{\alpha}(2)\phi_{\alpha}(1)) \\ &= 0\end{aligned}$$

Die Wellenfunktion verschwindet identisch; es gibt also keinen physikalischen Zustand mit der von zwei identischen Fermionen besetzt werden kann. Dieses Verhalten nennt man Pauli-Prinzip.

**Satz (Pauli-Prinzip).** *Fermionen können nicht denselben Einteilchenzustand besetzen.*

In Ortsdarstellung bedeutet dies, dass sich zwei ununterscheidbare Fermionen niemals am selben Ort aufhalten können. Es wird also eine repulsive Kraft geben, die um so größer wird, je mehr sich zwei Fermionen, die sich im selben Zustand befinden, nähern (unabhängig von Eigenschaften wie der Ladung, die lediglich eine weitere abstoßende Komponente einbringen).

Dies gilt nicht für Bosonen!

### Beispiele zum Pauli-Prinzip

**Beispiel (Atomphysik).** Wir vernachlässigen die Wechselwirkung  $\frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}$  zwischen den Elektronen:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{Ze^2}{\hat{r}_1}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{Ze^2}{\hat{r}_2}}_{\hat{H}_2}$$

Aus dem Pauli-Prinzip folgert die Schalenstruktur der Atomelektronen, denn

Abbildung 5.13: Besetzung der Energieniveaus im Atom.

jeweils nur ein Spin-Up- und ein Spin-Down-Elektron können sich einen Zustand  $|n, l, m_l\rangle$  teilen. Entsprechend ist die Zahl der Elektronen für eine bestimmte Hauptquantenzahl  $n$  auf  $2n^2$  begrenzt.<sup>24</sup> Man spricht von der  $n$ -ten *Schale*.

<sup>24</sup>Vgl. [Haken/Wolf, Abschnitt 19.1].

**Beispiel (Freies Elektronengas).** Auch hier gilt das Pauli-Prinzip. Die Elektronen können sich nicht beliebig nahe kommen.<sup>25</sup>

**Beispiel (Helium-Atom).** Wir überlassen wieder

- Spin-Bahn-Terme und
- die Elektron-Elektron-Wechselwirkung

der Störungstheorie und betrachten nur die ungestörten Zustände mit:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

Wie sieht der Einteilchenzustand  $\phi_\alpha$  aus? Die Eigenwertgleichung für  $\phi_\alpha$  lautet:

$$\hat{H}_1 \phi_\alpha(\vec{r}) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\vec{r})$$

mit dem Eigenwert:

$$\varepsilon_\alpha = Z^2 \frac{R}{N^2}$$

wobei  $R$  die Rydbergzahl ist. Mit den Quantenzahlen  $N$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $s = \frac{1}{2}$  und  $m_s$  lässt sich der Zustand eines Elektrons formal schreiben als:

$$|\phi_\alpha\rangle = \underbrace{|N, l, m_l\rangle}_{\text{Bahn}} \underbrace{|\frac{1}{2}, m_s\rangle}_{\text{Spin}}$$

wobei wir die Bahnquantenzahlen zu  $n_\alpha$  zusammenfassen und die magnetische Spinquantenzahl  $m_s$  in  $m_\alpha$  umbenennen ( $s$  ist auf  $\frac{1}{2}$  festgelegt):

$$=: |n_\alpha, m_\alpha\rangle$$

Der Eigenzustand zu  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  sei:

$$|n_\alpha, m_\alpha, n_\beta, m_\beta\rangle$$

der sich auch als Produkt der Einteilchenzustände schreiben lässt:

$$= |n_\alpha, m_\alpha\rangle |n_\beta, m_\beta\rangle$$

Formal können wir jeweils die Bahn- und die Spineigenschaften zusammenfassen, so dass wir einen Bahn- (inklusive Ort) und einen Spinzustand des Zweiteilchensystems erhalten:

$$= |n_\alpha, n_\beta\rangle |m_\alpha, m_\beta\rangle$$

Diese Art der Aufspaltung ermöglicht es uns Spin und Bahn getrennt voneinander zu betrachten; die Rechnungen werden so etwas übersichtlicher.

<sup>25</sup>Vgl. [Fließbach, Kapitel 46].

Diese Separation nach Bahn und Spin können wir auch für den Permutationsoperator ansetzen, da eine Vertauschung der Spinkomponenten (bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung) keine Auswirkung auf die Bahn hat, und umgekehrt:

$$\hat{P}(|n_\alpha, n_\beta\rangle |m_\alpha, m_\beta\rangle) = \hat{P}_{\text{Ort}} |n_\alpha, n_\beta\rangle \hat{P}_{\text{Spin}} |m_\alpha, m_\beta\rangle$$

Wenden wir die  $\hat{P}$ -Komponenten an, so vertauschen die zugehörigen Zustandskomponenten:

$$= |n_\beta, n_\alpha\rangle |m_\beta, m_\alpha\rangle$$

Betrachten wir zunächst nur den

**Spinanteil**, und wechseln in die gekoppelte Basis  $|S = s_\alpha \pm s_\beta, M = m_S\rangle$  des Spins. Hierbei ist im Zweifermionensystem:

$$S = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \in \{0, 1\}$$

$$M \in \{-S, \dots, S\} \in \mathbb{N}$$

Bekanntlicherweise lässt sich ein Zustand in der gekoppelten Basis als Linearkombination von Basiszuständen der ungekoppelten Basis darstellen:

$$|S, M\rangle = \sum_{m_\alpha, m_\beta} |m_\alpha, m_\beta\rangle \langle m_\alpha, m_\beta | S, M\rangle$$

wobei die auftretenden Skalarprodukte gerade die Clebsch-Gordon-Koeffizienten sind. Nun lassen wir den Spin-Permutationsoperator darauf los:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\text{Spin}} |S, M\rangle &= \sum_{m_\alpha, m_\beta} \hat{P}_{\text{Spin}} |m_\alpha, m_\beta\rangle \langle m_\alpha, m_\beta | S, M\rangle \\ &= \sum_{m_\alpha, m_\beta} |m_\beta, m_\alpha\rangle \langle m_\alpha, m_\beta | S, M\rangle \end{aligned}$$

Vertauschen wir nun alle Indizes, so ändert sich nichts („stumme Indizes“) am physikalischen Zustand:

$$= \sum_{m_\alpha, m_\beta} |m_\alpha, m_\beta\rangle \langle m_\beta, m_\alpha | S, M\rangle$$

Betrachten wir nun die Eigenschaften der Clebsch-Gordon-Koeffizienten beim Tausch der beiden  $m_s$ 's (z.B. Tabelle in [Particles]), so finden wir, dass sich in Abhängigkeit von  $S$  ein Vorzeichenwechsel ergeben kann (Phasenfaktor):

$$= \sum_{m_\alpha, m_\beta} |m_\alpha, m_\beta\rangle (-1)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} - S} \langle m_\alpha, m_\beta | S, M\rangle$$

Verzichten wir wieder auf die Darstellung in der ungekoppelten Basis, so bleibt der Eigenwert von  $\hat{P}_{\text{Spin}}$  zurück:

$$= (-1)^{1-S} |S, M\rangle$$

Fassen wir das Ergebnis nochmals zusammen, und betrachten die zwei möglichen Fälle (Einzelspins stehen parallel oder antiparallel zueinander):

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\text{Spin}} |S, M\rangle &= (-1)^{1-S} |S, M\rangle \\ &= \begin{cases} + |S, M\rangle & \text{für } S = 1, \psi_{\text{Spin}} \text{ ist symmetrisch;} \\ - |S, M\rangle & \text{für } S = 0, \psi_{\text{Spin}} \text{ ist antisymmetrisch.} \end{cases}\end{aligned}$$

Oder „graphisch“ ausgedrückt: Die Wellenfunktion ist symmetrisch bezüglich Spinpermutation, wenn die Spins parallel zueinander sind:

$$\begin{array}{c} \uparrow_1 = \uparrow_2 \\ \uparrow_2 = \uparrow_1 \end{array}$$

Antisymmetrisch bezüglich Spinvertauschung ist die antiparallele Einstellung:

$$\begin{array}{c} \uparrow_1 \neq \uparrow_2 \\ \downarrow_2 \neq \downarrow_1 \end{array}$$

Führen wir die gleichen Überlegungen mit dem

**Ortsanteil** des Permutationsoperators durch, so erhalten wir als Ergebnis:

$$\hat{P}_{\text{Ort}} |n_\alpha, n_\beta\rangle = \begin{cases} + |n_\alpha, n_\beta\rangle & \text{für } S = 0, \psi_{\text{Ort}} \text{ ist symmetrisch;} \\ - |n_\alpha, n_\beta\rangle & \text{für } S = 1, \psi_{\text{Ort}} \text{ ist antisymmetrisch.} \end{cases}$$

**Der Gesamt-Permutationsoperator**  $\hat{P}_{\text{Gesamt}}$  unterscheidet also zwei Arten von Helium. Zwar ist die Gesamtwellenfunktion immer antisymmetrisch (es sind eben zwei Fermionen), man kann aber doch nachweisen, dass Helium zwei verschiedene Gesamtwellenfunktionen für die Elektronen besitzt:

**Orthohelium:**  $S = 1$ , die Spins stehen parallel zueinander ( $M$  kennt drei Einstellungen  $1, 0, -1$ , deswegen nennt man diesen Zustand auch den *Tripletzustand*);

**Parahelium:**  $S = 0$ , die Spins stehen antiparallel zueinander ( $S$  ist nicht entartet – *Singulettzustand*).

**Vergleich der beiden Heliumarten.** Was erwartet uns, wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung „eingeschaltet“ (berücksichtigt) wird? Zum einen werden die Energien nach oben verschoben, da die Wechselwirkung repulsiv ist. Wir werden aber auch Unterschiede zwischen Para- und Orthohelium feststellen.<sup>26</sup>

Abbildung 5.14: Vergleich der Energieniveaus von Para- und Orthohelium.

Im Parahelium können sich die beiden Elektronen am selben Ort aufhalten, da sie sich in ihrem Spin unterscheiden. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist entsprechend dem kleineren mittleren Abstand größer als im Orthohelium.

<sup>26</sup>Zur störungstheoretischen Unterscheidung siehe [Fließbach, Seite 385].

## 5.6 Modell des Festkörpers I

### 5.6.1 Beschreibungsgrundlage

Im Folgenden betrachten wir den Festkörper als starres Gerüst (Atomgitter) fest verbundener Atomrümpfe, zwischen denen sich die Elektronen (abgesehen vom Coulomb-Feld der Protonen) frei bewegen können. Genauer berücksichtigen wir nur eine Dimension, also eine *Atomkette*. Des Weiteren vernachlässigen wir Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Elektronen eines Atoms; behandeln also den einfachsten Fall von Atomen mit je einem Elektron. Die Idee der Vorgehensweise wird durch diese Idealisierungen klarer.

Die Wellenfunktion  $\phi_i$  bzw. der Zustand  $|\phi_i\rangle$  beschreibt den Bindungszustand (genauer den Grundzustand) eines Elektrons im Atom  $i$ , das außer der Kernanziehung keine weiteren Kräfte spürt.

### 5.6.2 Zweiatomiger Festkörper

Abbildung 5.15: Coulomb-Potential der zwei Atome, aus der Sicht eines Elektrons.

#### Hamilton-Operator der Atomkette

Betrachten wir zwei Atome mit einem festen Abstand  $a$ . Liegen die Atome weit auseinander, so können wir Wechselwirkungen zwischen den beiden Atomen vernachlässigen. Ist ein Elektron in diesem System, so kann es entweder an Atom (eigentlich Atomkern oder Ion) 1 oder an Atom 2 gebunden sein. Bei großem Abstand spürt es das Potential des anderen Atoms nicht. Man spricht auch hier von einer Entartung dieses Grundzustandes; die Energie für eine Bindung mit Atom 1 ist die gleiche wie die mit Atom 2. Bei großem Abstand sind  $\phi_1$  und  $\phi_2$  stationäre Zustände (ist das Elektron bei Atom 1 lokalisiert, so bleibt es dort).

Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems stellt sich nur aus zwei disjunkten Operatoren zusammen:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

Damit enthält die Übergangsmatrix von  $\hat{H}$  nur Diagonalelemente (diese entsprechen den ungestörten Energieeigenwerten):

$$= \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

Wenn nun die Atome so nah beieinander liegen, dass sich ihre Potentiale überlappen (Abstand von der Größenordnung  $a_B$ ), dann muss ein Einfluss  $\hat{V}$  des anderen Atoms beachtet werden. Die Elektronen können dadurch zwischen den Atomen wechseln (die Wellenfunktion der Elektronen ist im Mittelpunkt zwischen den Atomen größer 0; sie haben eine nichtverschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Atomen. Ist ihre Energie niedriger als die Potentialbarriere zwischen den Atomen, so geschieht ein Wechsel durch den Tunneleffekt). Der Hamilton-Operator berücksichtigt nun das Potential des anderen Atoms:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= \hat{H}_0 + \hat{V} \\ &= \begin{pmatrix} \varepsilon & V \\ V & \varepsilon \end{pmatrix}\end{aligned}$$

### Energieeigenwerte der Elektronen

Um die Energieeigenwerte der gestörten Elektronenzustände zu finden, müssen wir den effektiven Hamilton-Operator  $\hat{H}_{\text{eff}}$  diagonalisieren. Dazu lösen wir die Charakteristische Gleichung:

$$\det(\hat{H}_{\text{eff}} - \lambda \mathbf{1}_2) = 0$$

konkret also:

$$\begin{aligned}&= \begin{vmatrix} \varepsilon - \lambda & V \\ V & \varepsilon - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (\varepsilon - \lambda)^2 - V^2\end{aligned}$$

mit der Forderung:

$$= 0$$

Lösen wir die Gleichung nach  $\lambda$  auf, so erhalten wir die Eigenwerte von  $\hat{H}_{\text{eff}}$ :

$$\begin{aligned}\lambda_{1/2} &= \varepsilon \pm \sqrt{V^2} \\ &= \varepsilon \pm |V|\end{aligned}$$

Durch die Störung erhalten wir nun zwei verschiedene Energieeigenwerte. Das Störpotential des benachbarten Atoms hebt also die Entartung auf.

Abbildung 5.16: Energieaufspaltung bei kleiner werdenden Abständen zwischen den Atomen.

### Bestimmung der Eigenzustände

Die Wellenfunktion  $|\psi_1\rangle$  des Elektrons 1, bei sich überlappenden Atompotentialen, ist eine Linearkombination der beiden ungestörten Atomzustände:

$$|\psi_1\rangle = \alpha |\phi_1\rangle + \beta |\phi_2\rangle$$

Lösen wir die Eigenwertgleichung mit Hilfe der eben berechneten Eigenwerte:

1. Fall: Mit dem Eigenwert  $E_1 = \varepsilon - V$  liefert die Eigenwertgleichung folgende Bestimmungsgleichung für die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$ :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & V \\ V & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\varepsilon - V) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Sie liefert die Koeffizienten:

$$\alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Und damit den (energetisch tieferen) Zustand:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle)$$

Abbildung 5.17: Eigenzustand zum Eigenwert  $\varepsilon - V$ . Hier hat die Wellenfunktion im Mittelpunkt zwischen den Atomen einen Nulldurchgang.

2. Fall: Die Eigenwertgleichung des Eigenwerts  $E_2 = \varepsilon + V$  führt zur folgenden Zahlengleichung:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & V \\ V & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\varepsilon + V) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Dies führt zu den Lösungen:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Damit lautet der (energetisch höhere) Zustand:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle)$$

Abbildung 5.18: Eigenzustand zum Eigenwert  $\varepsilon + V$ . Die Wellenfunktion ist im Mittelpunkt größer 0.

Die beiden möglichen Zustände unterscheiden sich in ihrer Energie um den Wert  $2V$ ; außerdem sind sie orthogonal zueinander, es ist also  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ .

Durch die Überlappung der beiden Potentiale (theoretisch ausgedrückt: Durch die Störung  $\hat{V}$  des benachbarten Atomkerns) ist ein Elektron jetzt nicht mehr ausschließlich an seinem Atom lokalisiert. Seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist für beide Atome gleich groß; es kann den „Bindungspartner“ wechseln.

Abbildung 5.19: Potential eines dreiatomigen Festkörpers.

### 5.6.3 Dreiatomiger Festkörper

Versuchen wir uns nun langsam einem realeren Festkörper zu nähern.<sup>27</sup>

Bleiben wir bei der Atomkette, diesmal mit drei Atomen. Nimmt man an, dass zwei beieinanderliegende Atome sich gegenseitig etwas überlappen (die Potentiale, nicht die Atome selbst), die nicht-benachbarten jedoch nichts voneinander sehen, so hat der effektive Hamilton-Operator wieder die gleiche Struktur (bis auf die höhere Dimension) wie im zweiatomigen Fall. Ein Elektron sieht also außer „seiner“ Energie  $\varepsilon$  noch etwas vom benachbarten Atom (eine Störung  $\hat{V}$ , und das von zwei Seiten):

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \varepsilon & V & 0 \\ V & \varepsilon & V \\ 0 & V & \varepsilon \end{pmatrix}$$

Da Atom 1 und Atom 3 nicht miteinander gekoppelt sind, kann man das Problem in zwei Teile aufspalten (Atome 1 & 2, sowie Atome 2 & 3). Diese beinhalten die gleiche Störung (nur jeweils auf andere „Atomnummern“ bezogen). Man hat also zweimal die gleiche  $(2 \times 2)$ -Matrix wie im Fall des zweiatomigen Festkörpers. Man darf allerdings nicht vergessen, dass ein Elektron am mittleren Atom beide benachbarten Potentiale sieht. Die Wellenfunktion des gestörten Zustands muss das berücksichtigen ( $\alpha\phi_1 + \beta\phi_2 + \gamma\phi_3$ ).

### 5.6.4 $N$ -atomiger Festkörper

Abbildung 5.20:  $N$  Atome in gleichbleibendem Abstand.

Auch hier gilt es wieder die  $N \times N$ -Matrix (diesesmal für ein großes  $N$ ) zu diagonalisieren.<sup>28</sup>

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \varepsilon & V & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ V & \varepsilon & V & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & V & \varepsilon & V & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & V & \varepsilon & V \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & V & \varepsilon \end{pmatrix}$$

Wieder steht  $\varepsilon$  in der Diagonalen,  $V$  in den Nebendiagonalen. Alle anderen Elemente sind 0, solange sich zwei nicht-benachbarte Atome nicht überlappen. Ein Elektron kann nun von Atom zu Atom tunneln.

<sup>27</sup>Zwei zusammenhängende Atome bezeichnet man doch eher als Molekül. Die Eigenschaften eines Kristallgitters können damit noch nicht erforscht werden.

<sup>28</sup>Die Diagonalisierung überlässt man für hohe Dimensionen dem Computer.



Abbildung 5.21: Energieniveaus von Festkörpern mit unterschiedlicher Anzahl von Konstituenten.

Die Anzahl der Energieniveaus in einer Atomkette zu einem ursprünglichen Atomzustand (z.B. dem Grundzustand des Elektrons) entspricht der Anzahl der beteiligten Atome der Kette (im Fall großen Abstandes sind die Niveaus  $N$ -fach entartet, weil das Elektron nur sein „Wirtspotential“ sieht). Die maximale Aufspaltung eines Zustands ist, bei gegebenem Atomabstand, durch das benachbarte Potential bestimmt. Bei einer größeren Anzahl von Atomen in der Kette liegen viele Energieniveaus innerhalb dieses Intervalls. Die Differenz zwischen diesen wird also mit größerer Atomanzahl kleiner, damit steigt die Zustandsdichte. Bei sehr vielen Atomen spricht man vom *Quasikontinuum* (sehr viele Energieniveaus in einem begrenzten Energieintervall), oder von einem *Energieband*.

Besitzen die Atome mehrere Zustände, so hat der Festkörper entsprechend mehrere Energiebänder.

Was für Wellenfunktionen gibt es in einem Energieband?

**Beispiel** ( $N = 16$ ). Bezeichne  $\psi_j$  die Wellenfunktion des Elektrons im  $j$ -ten Zustand (der 16 möglichen);  $\phi_i$  beschreibt wieder den ungestörten Elektronenzustand für das  $i$ -te Atom. Bei Überlappung ist dann  $\psi_j$  wieder die Linearkombination der ungestörten Zustände  $\phi_i$ :

$$\psi_j = \sum_{i=1}^{16} a_{ji} \phi_i$$

Der Koeffizient  $a_{ji}$  gibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür an, dass das Elektron (das sich im  $j$ -ten der 16 möglichen Zustände befindet) sich am  $i$ -ten Atom aufhält.<sup>29</sup> Die möglichen Wellenlängen des Elektrons hängen von der Anzahl der beteiligten Atome, sowie von den Randbedingungen ab, denn die Wellenfunktion muss „vor“ dem ersten und „hinter“ dem letzten Atom der Kette verschwinden. Man findet folgenden Zusammenhang:

$$a_{1i} \hat{=} \text{Wellenfunktion mit Wellenzahl } k_1 = \frac{\pi}{Na}$$

$$a_{2i} \hat{=} \text{Wellenfunktion mit Wellenzahl } k_2 = \frac{2\pi}{Na}$$

$$a_{mi} \hat{=} \text{Wellenfunktion mit Wellenzahl } k_m = \frac{m\pi}{Na}$$

Abbildung 5.22: Besetzung der Energieniveaus.

### 5.6.5 Festkörper im elektrostatischen Feld

Es ist übersichtlicher, wieder eine zweiatomige Atomkette zu betrachten. Wir legen die Atomkette parallel zum  $\vec{E}$ -Feld. Atom 1 liege in Richtung des positiveren Potentialendes.

<sup>29</sup>Durch die Überlappung der Potentiale ist das Elektron *delokalisiert*, eine Messung kann es jedoch lokalisieren;  $a_{ji}^2$  ist die Wahrscheinlichkeit, es am  $i$ -ten Atom zu sehen.

Abbildung 5.23: Richtung des Kristalls zum  $E$ -Feld.

Ein Elektron wird entgegen der Feldlinienrichtung des  $\vec{E}$ -Felds verschoben. Das bedeutet, dass eine Position (im gewählten Modell) bei Atom 1 attraktiver ist. Im effektiven Hamilton-Operator wird also zur Energie des „freien“ Kristalls noch eine Komponente  $\Delta E$  des Felds hinzukommen, die den Energiezustand am Atom 1 erniedrigt sowie am Atom 2 erhöht:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \varepsilon - \Delta E & V \\ V & \varepsilon + \Delta E \end{pmatrix}$$

Die Diagonalisierung der Matrix liefert die Koeffizienten für die Superposition der Zustände, bzw. zunächst die Energieeigenzustände:

$$E_{1/2} = \varepsilon \mp \sqrt{V^2 + (\Delta E)^2}$$

Abbildung 5.24: Energieverschiebung des energetisch niedrigeren Zustands  $\psi_1$  durch das  $\vec{E}$ -Feld.

Abbildung 5.25: Energieverschiebung des energetisch höheren Zustands  $\psi_2$  durch das  $\vec{E}$ -Feld.

Wir müssen unterscheiden, wie viele Elektronen im Kristall sind (im Verhältnis zur Anzahl der „Wirtsatome“):

1 Elektron im System (das Band ist nicht vollständig gefüllt):

- Nur ein Zustand von zwei möglichen ist besetzt;
- Polarisierung durch das Feld;
- Ladungsträgerverschiebung, also Strom (zumindest im realen ausgedehnten Kristall).

2 Elektronen im System (das Band ist voll besetzt):

- Beide möglichen Zustände sind besetzt;
- es ist keine Polarisierung möglich,
- und damit findet keine Ladungsträgerverschiebung statt. Es gibt keinen Strom.

Vollgefüllte Bänder verhindern also einen Strom; die Elektronen können ihre Plätze nicht wechseln. Vollständig leere Bänder verhindern ebenso einen Strom, da keine Ladungsträger vorhanden sind, die verschoben werden könnten.

## 5.7 Modell des Festkörpers II

### 5.7.1 Ansatz: Periodisches Potential

Abbildung 5.26: Eindimensionaler, unendlich ausgedehnter Festkörper.

Als Ansatz wählen wir ein periodisches Potential. Bei einem Abstand  $a$  der (gleichen) Atome in der Kette wiederholt sich das Potential periodisch, so dass gilt ( $\forall x \in \mathbb{R}$ ):

$$V(x) = V(x + a) = V(x + 2a) = \dots = V(x + na)$$

Ein solches periodisches Potential lässt sich als Fourierreihe darstellen:

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{-i\frac{2\pi}{a}nx}$$

Statt einer Funktion  $V(x)$  hat man nun Zahlen  $V_n \in \mathbb{R}$ .

### 5.7.2 Lösungen des periodischen Potentials

#### Impulswellenfunktion im periodischen Potential

Sei  $|\psi\rangle$  eine zeitunabhängige Lösung für ein solches periodisches Potential, die zugehörige Impulsamplitude ist  $\psi(k) = \langle k | \psi \rangle$ , das Skalarprodukt  $\langle x | k \rangle$  ist die Ortsdarstellung der Impulseigenzustände:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x) &= \langle x | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | k \rangle \langle k | \psi \rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \psi(k) dk \end{aligned}$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lautet:

$$(\hat{T} + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

In Impulsdarstellung ist das:

$$\begin{aligned} \langle k | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle &= E \langle k | \psi \rangle \\ &= E \psi(k) \end{aligned}$$

Wir berechnen die Erwartungswerte für  $\hat{T}$  und  $\hat{V}$  einzeln:

$$= \langle k | \hat{T} | \psi \rangle + \langle k | \hat{V} | \psi \rangle$$

Zunächst den kinetischen Energieanteil:

$$\begin{aligned}
 \langle k | \hat{T} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k | \hat{T} | k' \rangle \langle k' | \psi \rangle dk' \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \delta(k - k') \langle k' | \psi \rangle dk' \\
 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle k | \psi \rangle \\
 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(k)
 \end{aligned}$$

Berechnen wir den potentiellen Energieanteil:

$$\begin{aligned}
 \langle k | \hat{V} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k | \hat{V} | k' \rangle \langle k' | \psi \rangle dk' \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k | x \rangle \langle x | \hat{V} | x' \rangle \langle x' | k' \rangle \langle k' | \psi \rangle dx' dx dk' \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k | x \rangle \hat{V}(x) \delta(x' - x) \langle x' | k' \rangle \langle k' | \psi \rangle dx' dx dk' \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k | x \rangle \hat{V}(x) \langle x | k' \rangle \langle k' | \psi \rangle dx dk' \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \hat{V}(x) e^{ik'x} \psi(k') dk'
 \end{aligned}$$

Das verbleibende Integral läuft über  $dk'$ , so dass  $\hat{V}(x)$  herausgezogen werden kann:

$$= \frac{1}{2\pi} \hat{V}(x) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k'-k)x} \psi(k') dk'$$

Einsetzen der Fourierreihe für das periodische Potential:

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k'-k-\frac{2\pi n}{a})x} \psi(k') dx dk' \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k' - k - \frac{2\pi n}{a}) \psi(k') dk' \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \psi(k + \frac{2\pi n}{a})
 \end{aligned}$$

Fassen wir die Ergebnisse für die kinetische und die potentielle Energie wieder zusammen, so erhalten wir eine algebraische Eigenwertgleichung für die Impulswellenfunktion  $\psi(k)$ :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(k) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \psi(k + \frac{2\pi n}{a}) = E \psi(k)$$

Zur Bestimmung von  $\psi(k)$  müsste man die Impulswellenfunktion an unendlich vielen weiteren Stellen  $(k + \frac{2\pi n}{a}, k - \frac{2\pi n}{a}, \dots)$  mitbestimmen. Wir werden aber gleich sehen, dass das Problem durch die Periodizität des Potentials vereinfacht wird.

### Bestimmung der Wellenfunktion; Bloch-Funktion

Wie sehen die Zustände im periodischen Potential aus? Um die Ortswellenfunktion  $\tilde{\psi}_k(x)$  für die möglichen  $k$  zu berechnen setzen wir  $k_n := k + \frac{2\pi n}{a}$ :

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_k(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \psi(k_n) e^{ik_n x} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(k_n) e^{ikx} e^{i\frac{2\pi n}{a}x}\end{aligned}$$

Diese Fourierreihe ist aber das Produkt aus einer periodischen Funktion (mit der Periode  $a$  des Gitters), multipliziert mit einer Phase:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} u(x)$$

*Beweis.* Addieren wir die Periode  $a$  im Argument:

$$\tilde{\psi}_k(x+a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(k_n) e^{ik(x+a)} e^{i\frac{2\pi n}{a}(x+a)}$$

Die hintere Exponentialfunktion ist  $a$ -periodisch, so dass sich dort nichts ändert:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(k_n) e^{ik(x+a)} e^{i\frac{2\pi n}{a}x}$$

Wieder zusammengefasst:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik(x+a)} u(x)$$

□

Die Funktion:

$$u(x) = u(x+na)$$

in unserem Fall konkret:

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(k_n) e^{i\frac{2\pi n}{a}x}$$

ist periodisch. Das Produkt einer solchen periodischen Funktion mit einer Phase:

$$\tilde{\psi}_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} u(x) \quad \text{Bloch-Funktion}$$

wird *Bloch-Funktion* genannt. Für sie gilt ( $\forall n \in \mathbb{N}$ ):

$$|\tilde{\psi}_k(x + na)|^2 = |\tilde{\psi}_k(x)|^2$$

Dank dieser Periodizität der Lösungsfunktion können wir nun  $k$  auf das Intervall  $]-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}]$  beschränken, und dort das Eigenwertproblem für  $\psi(k)$  lösen.

Wir stellen dabei fest, dass die Energiewerte in Energiebänder auffächern. Das Intervall  $k \in ]-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}]$  das Lösungen für das erste Energieband liefert, wird erste *Brillouin-Zone* genannt.

Abbildung 5.27: Erlaubte (mögliche) Energieeigenwerte, Bandstruktur mit verbotenen Zonen.

Wir erhalten also wieder die gleiche Bänderstruktur wie in Abschnitt 5.6.<sup>30</sup> Diese Struktur stammt von der Periodizität des Problems.

---

<sup>30</sup>Siehe auch [Cohen-2, Abschnitt 11.9].

## 5.8 Das Mesonenaustausch-Modell der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

Um etwas über die Kernkräfte (die starke Wechselwirkung) zu erfahren, macht man zunächst Streuexperimente mit den einfachsten Systemen, die die starke Kraft kennen, also Nukleonen. Das Target Wasserstoff beschießt man mit Protonen<sup>31</sup> oder Neutronen; eine Theorie der Wechselwirkung muss dann die experimentellen Ergebnisse<sup>32</sup> (Streuquerschnitt, Formfaktoren) möglichst gut widerspiegeln. Erste Experimente deuteten darauf hin, dass die Wechselwirkung durch den Austausch von Pionen stattfindet. Ein solcher Mesonenaustausch<sup>33</sup> soll in diesem Abschnitt behandelt werden.

### 5.8.1 Hamilton-Operator des Zweikörperproblems

#### Schwerpunktsystem

Wir behandeln das Zweinukleonensystem im Schwerpunkt der beiden Wechselwirkungspartner. Dann muss die Impulserhaltung gelten (die gestrichenen Variablen sind die nach dem Stoßprozess):<sup>34</sup>

$$\vec{q} + (-\vec{q}) = \vec{q}' + (-\vec{q}')$$

Abbildung 5.28: Impulskomponenten der Wechselwirkung zweier Nukleonen.

Wir betrachten eine elastische Streuung (wie bei Elementarteilchen, wir möchten also nicht die Struktur der Nukleonen untersuchen). Die kinetische Energie der Nukleonen bleibt damit erhalten. Somit gilt:

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = \frac{\hbar^2 q'^2}{2m}$$

und es folgt unmittelbar für die Impulse (Wellenvektoren):

$$\vec{q}^2 = \vec{q}'^2$$

Wir setzen die Wechselwirkung der beiden Nukleonen als Störung  $\hat{V}$  an, so dass der ungestörte Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  dem Operator der kinetischen Energie  $\hat{T}$  des Systems entspricht. Der effektive Hamilton-Operator  $\hat{H}_{\text{eff}}$  setzt sich aus  $\hat{H}_0$  und dem Operator der potentiellen (Wechselwirkungs-)Energie  $\hat{V}$  zusammen:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

<sup>31</sup>Die Coulomb-Wechselwirkung ist gut bekannt, so dass man sie herausrechnen kann.

<sup>32</sup>Siehe [Bergmann-4, Abschnitt 2.4.2].

<sup>33</sup>Die Pionen ( $\pi^+$ ,  $\pi^0$  und  $\pi^-$ ) bestehen aus einem Quark und einem Antiquark, sind also Mesonen (die leichtesten). Vgl. [Griffiths, Abschnitt 5.8].

<sup>34</sup>Weil Kernphysiker gerne in „natürlichen Einheiten“ ( $\hbar = c = 1$ ) rechnen, schleichen sich manchmal Probleme mit den Einheiten ein. In diesem Abschnitt ist zu beachten, dass wir mit Wellenvektoren  $\vec{q}$  und  $\vec{k}$  arbeiten, aber im SI-System (mit  $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ ) bleiben. Für Kernphysiker ist dagegen  $\vec{p} = \vec{q}$ .

### Mesonenaustausch

Wir betrachten nun den eigentlichen Wechselwirkungsprozess, also das Aussenden des Mesons durch das eine, und den Einfang des Mesons durch das andere Nukleon.

Betrachtet man die Wechselwirkung als einen solchen Austausch eines Mesons, so muss dessen Energie in die Rechnung einbezogen werden.

Abbildung 5.29: Feynman-Diagramm: Nukleon 1 sendet ein Meson aus.

Die Impulserhaltung fordert für das das Meson aussendende Nukleon:

$$\vec{q} = \vec{q}' + \vec{k}$$

wenn  $\vec{k}$  der Impuls des Mesons ist („Impulstransfer“). Die kinetische Energie des Systems lautet in diesem „Zwischenzustand“:

$$\hat{H}_0 = \hat{T}(\vec{q}') + \hat{T}(-\vec{q}) + E_{\text{Meson}}(|\vec{k}|)$$

Wobei sich die Energie des Mesons sowohl aus seiner Ruhemasse (es wird ja vom aussendenden Nukleon erzeugt!), als auch aus der kinetischen Energie (durch den Impuls  $\hbar\vec{k}$ ) zusammensetzt:

$$E_{\text{Meson}}(|\vec{k}|) = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + \mu_0^2 c^4}$$

Das ist die Einstein'sche Energie-Impuls-Beziehung für ein Teilchen mit Ruhemasse  $\mu_0$ . Im Folgenden setzen wir:

$$E_k := E_{\text{Meson}}(|\vec{k}|)$$

Für das „gestoßene“ Nukleon 2 gilt mit der Impulserhaltung dann für den Einfang des Mesons:

$$\vec{k} - \vec{q} = \vec{q}''$$

und somit letztlich:

$$\vec{q}'' = -\vec{q}'$$

Abbildung 5.30: Gesamtprozess des Mesonenaustausches als Feynman-Diagramm.

### 5.8.2 Yukawa-Potential

#### Ansatz für das Wechselwirkungspotential

Sei im Folgenden  $\hat{V}$  der Operator eines Teilprozesses des Austausches, also der Operator der potentiellen Energie für die Mesonenaussendung (oder den Einfang). Das Matrixelement von  $\hat{V}$  hat folgende Form (die  $\delta$ -Funktion drückt die



Impulserhaltung aus, der Rest ist ein Ansatz):

$$\langle \vec{q}' + \vec{k} | \hat{V} | \vec{q} \rangle = \delta(\vec{q}' + \vec{k} - \vec{q}) \frac{g}{\sqrt{E_{\text{Meson}}(k)}}$$

wobei  $g$  eine reelle Konstante ist, die die Kopplungsstärke beinhaltet. Dass die Energie des Austauschteilchens in den Potentialoperator der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung eingeht, macht sicher Sinn.

Das Wechselwirkungspotential des kompletten Prozesses setzt sich aus Aussendung und Einfang zusammen:

$$\hat{V}_{\text{Austausch}} = \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V}$$

wobei der Operator im Nenner folgendes Aussehen hat:<sup>35</sup>

$$\begin{aligned} E - \hat{H}_0 &= 2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \hat{T}(\vec{q}') - \hat{T}(-\vec{q}) - E_k \\ &= 2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E_k \\ &= -E_k \end{aligned}$$

Um das komplette Wechselwirkungspotential zu berechnen, müssen wir die Summe (das Integral) über alle möglichen Zwischenzustände (mögliche Kombinationen von Impuls und Impulsübertrag) des Gesamtprozesses berechnen:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \int \hat{V}_{\text{Austausch}} d^3k' \\ &= \int \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} d^3k' \\ &= \int \frac{g^2}{E_{k'}} \delta(\vec{q}' + \vec{k}' - \vec{q}) \frac{1}{-E_{k'}} d^3k' \\ &= \int \frac{g^2}{E_{k'}} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{1}{-E_{k'}} d^3k' \\ &= -\frac{g^2}{E_k} \\ &= -\frac{g^2}{\hbar^2 k^2 c^2 + \mu_0^2 c^4} \end{aligned}$$

Oder:

$$\hat{V} = -\frac{g^2}{\hbar^2 c^2 (\vec{q} - \vec{q}')^2 + \mu_0^2 c^4}$$

### Wechselwirkungspotential im Ortsraum

Wir beschreiben die Wechselwirkung nach wie vor im Schwerpunktsystem. Sei  $\vec{r}$  der Abstandsvektor der beiden Nukleonen,  $\frac{\vec{r}}{2}$  und  $-\frac{\vec{r}}{2}$  sind die beiden Nukleonenkoordinaten vor dem Wechselwirkungsprozess,  $\frac{\vec{r}'}{2}$  und  $-\frac{\vec{r}'}{2}$  die danach. Das

<sup>35</sup>Ihn kennen wir ja schon von der Störungsrechnung 2. Ordnung.

Matrizelement des Mesonenaustausches lautet dann im Ortsraum (Die Fouriertransformation liefert den Übergang in den Ortsraum):

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{rr'} &:= \langle \frac{\vec{r}'}{2}, -\frac{\vec{r}'}{2} | \hat{V} | \frac{\vec{r}}{2}, -\frac{\vec{r}}{2} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \frac{\vec{r}'}{2} | \vec{q}' \rangle \langle -\frac{\vec{r}'}{2} | -\vec{q}' \rangle \langle \vec{q}' | \hat{V} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \frac{\vec{r}}{2} \rangle \langle -\vec{q} | -\frac{\vec{r}}{2} \rangle d^3q d^3q' \\ &= \frac{1}{((2\pi)^3)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}'} \frac{-g^2}{E_k^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3q d^3q' \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $1 = e^{(-)} e^{(+)}$ :

$$= \frac{1}{(2\pi)^6} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}'} \frac{-g^2}{E_k^2} e^{-i(-\vec{q}') \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q}' \cdot (-\vec{r})} d^3q d^3q'$$

Umordnen der Exponentialfunktionen:

$$= \frac{1}{(2\pi)^6} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-g^2}{E_k^2} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q}' \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} d^3q d^3q'$$

Substitution  $d^3q \rightarrow d^3k$ :

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(2\pi)^6} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-g^2}{E_k^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q}' \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} d^3k d^3q' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^6} \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-g^2}{\hbar^2 c^2 k^2 + \mu_0^2 c^4} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3k \\ &= -\tilde{g}^2 \frac{e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|} \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \end{aligned}$$

Die Faktoren „verstecken“ wir in  $\tilde{g}$ . Die  $\delta$ -Funktion besagt, dass das Wechselwirkungspotential lokal ist, also nur das Potential am Wechselwirkungsort selbst eine Rolle spielt.

### Eigenschaften des Yukawa-Potentials

Die hier auftretende Potentialform:

$$-g^2 \frac{e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}$$

wird *Yukawa-Potential* genannt.<sup>36</sup>

Abbildung 5.31: Yukawa-Potential des Mesonenaustausches.

Einige Überlegungen zu der Massenabhängigkeit des Yukawa-Potentials:

1. Die Reichweite der Wechselwirkung wird durch den Term  $e^{-\mu|\vec{r}|}$  bestimmt; je größer die Masse des Wechselwirkungsteilchens, desto kürzer ist die Reichweite des Yukawa-Potentials.

<sup>36</sup>Zum Nukleon-Nukleon-Potential siehe auch [Bergmann-4, Abschnitt 2.4.4].

2. Für masselose Austauschteilchen,  $\mu = 0$ , geht das Yukawa-Potential in das  $\frac{1}{r}$ -Potential über (Coulomb-Wechselwirkungspotential, mit den masselosen Photonen als Austauschteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung).
3. Für  $\mu \gg 0$  muss beachtet werden, dass die Energieerhaltung bei der Wechselwirkung „kurzfristig“ verletzt wird. Das geht aber nur mittels der Energie-Zeit-Unschärfe:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar$$

Je größer der Energieübertrag, desto kürzer muss die Wechselwirkungszeit sein. Das bedeutet aber eine kürzere Reichweite.

Abbildung 5.32: Energieübertrag im zeitlichen „Ablauf“.

Bei massiven Austauschteilchen, wie z.B. den W- oder Z-Bosonen mit Massen  $\geq 80 \frac{\text{GeV}}{c^2}$ , ist die Wechselwirkung dementsprechend sehr kurzreichweitig und schwach.

## 5.9 Die Bell'sche Ungleichung

Unsere bisherige Deutung der Quantenmechanik birgt einen Indeterminismus, wenn wir sagen, dass durch eine Messung das System einen seiner Eigenzustände annimmt.<sup>37</sup> In den 30er Jahren kam die Frage auf, ob das alles ist, was über die Natur gesagt werden kann. Man überlegte sich, ob die bisherige Quantenmechanik nur ein Zwischenschritt zum vollständigen Naturverständnis ist; die dazu noch fehlenden Informationen nannte man *verborgene Parameter*, als Andeutung, dass es sie gibt, die Forschung sie nur noch nicht entdeckt hat. Die Bell'sche Ungleichung lieferte schließlich eine Theorie, die die Quantenmechanik und die verborgenen Parameter im Experiment gegeneinander stellte.<sup>38</sup>

### 5.9.1 Nicht-lokale Korrelation im Zweiteilchensystem

#### Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon

Betrachten wir die Streuung zweier Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen aneinander. Sei der Spin des Gesamtsystems (beim Streuprozess) 0:

$$s_z = s_{z_1} + s_{z_2} = 0$$

Als Zustandsvektor ausgedrückt:

$$|s = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = -\frac{1}{2}\rangle - |s_1 = -\frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2}\rangle \right)$$

Abbildung 5.33: Prinzip des Experiments der Spinmessung.

Im Experiment ist zunächst der Spin des Zweiteilchensystems bekannt,  $s = 0$ . Nun sollen die Einzelspins getrennt voneinander gemessen werden. Dazu bauen zwei Physiker *A* und *B* die gleiche Apparatur (in entgegengesetzter Richtung vom Streuzentrum) auf. Beide messen dieselbe Spinkomponente (z.B. die  $z$ -Richtung).

Das Experiment liefert folgende Ergebnisse für verschiedene Varianten des Experiments:

- *A* misst nicht.  
Dann misst *B* mit gleicher Wahrscheinlichkeit (50%) Spin-up oder Spin-down.
- *A* misst  $s_z = \frac{1}{2}$ .  
*B* misst mit 100%  $s_z = -\frac{1}{2}$ .

<sup>37</sup>Die Wahrscheinlichkeitsdeutung kritisierte Einstein durch seine Aussage:

„Gott würfelt nicht.“

Den Indeterminismus hinterfragte er schelmisch:

„Ist der Mond da, wenn man nicht hinschaut?“

<sup>38</sup>Siehe hierzu [Schwabl-1, Abschnitt 20.4].

- $A$  misst nun den Spin in  $x$ -Richtung  $s_x = \frac{1}{2}$ .  
 $B$  misst weiterhin den Spin in  $z$ -Richtung und erhält mit jeweils 50%-Wahrscheinlichkeit  $s_z = \frac{1}{2}$  oder  $s_z = -\frac{1}{2}$ .

Offensichtlich gibt es eine „nicht-lokale Verschränkung“ der Spineinstellungen beider Teilchen. Dieses unerwartete Ergebnis wird *Einstein-Rosen-Podolsky-Paradoxon* (manchmal auch als *ERP* abgekürzt) genannt.

### Verborgene Parameter

Hat das eine Teilchen die Spineinstellung  $s_z = \frac{1}{2}$  so hat das andere  $s_z = -\frac{1}{2}$ . Einstein, Podolsky und Rosen führten dieses Ergebnis jedoch nicht auf die Nicht-lokalität der Quantenmechanik zurück, sondern gingen davon aus, dass der Spinzustand beider Teilchen schon von Anfang an festgelegt ist<sup>39</sup> (durch die Trennung der beiden Teilchen kann die Messung des einen Teilchens das andere nicht direkt beeinflussen). Man spricht deswegen von verborgenen Parametern.

## 5.9.2 Die Bell'sche Ungleichung

### Allgemeines Zweiteilchensystem mit Spin

Da die verborgenen Parameter (zusammen mit den messbaren) die gesamte Natur beschreiben sollen, verallgemeinern wir das Experiment auf die drei Spinrichtungen (um sie allgemein zu halten, nennen wir sie  $a$ ,  $b$ , und  $c$ ). Die Behauptung ist, dass alle 6 Spinkomponenten des Zweiteilchensystems von Anfang an festliegen, allerdings nur jeweils eine pro Teilchen messbar ist.

### Vorhersage für verborgene Parameter

Die Behauptung Einsteins ist, dass das Zweiteilchensystem in 8 Klassen von Spineinstellungen eingeteilt ist:

Spinklasse	Teilchen 1			Teilchen 2		
	$\vec{s}_{a1}$	$\vec{s}_{b1}$	$\vec{s}_{c1}$	$\vec{s}_{a2}$	$\vec{s}_{b2}$	$\vec{s}_{c2}$
1	↑	↑	↑	↓	↓	↓
2	↑	↑	↓	↓	↓	↑
3	↑	↓	↑	↓	↑	↓
4	↑	↓	↓	↓	↑	↑
5	↓	↑	↑	↑	↓	↓
6	↓	↑	↓	↑	↓	↑
7	↓	↓	↑	↑	↑	↓
8	↓	↓	↓	↑	↑	↑

Tabelle 5.1: Mögliche Spinkombinationen des Zweifermionen-Spin-0-Systems.

<sup>39</sup> Welches der beiden Teilchen Spin-Up hat, wird dabei der Statistik überlassen, entscheidend ist bei der Behauptung nur die Korrelation.

Bei einer Messreihe sei  $N_i$  die Häufigkeit der Spinklasse  $i$ . Dann liefert die Bell'sche Ungleichung<sup>40</sup> die Voraussage für das Experiment:

$$N_3 + N_4 \leq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_7)$$

Betrachten wir die Wahrscheinlichkeiten  $P$  der beteiligten Spineinstellungen:

$$P(s_{a1} \uparrow, s_{b2} \uparrow) = P(s_{b1} \downarrow, s_{a2} \downarrow) = \frac{N_3 + N_4}{\sum_{i=1}^8 N_i}$$

Die Bell'sche Ungleichung fordert für die Wahrscheinlichkeiten:

$$P(s_{a1} \uparrow, s_{b2} \uparrow) \leq \frac{(N_2 + N_4) + (N_3 + N_7)}{\sum_{i=1}^8 N_i} = P(s_{a1} \uparrow, s_{c2} \uparrow) + P(s_{c1} \uparrow, s_{b2} \uparrow)$$

Wir berechnen nun die Vorhersage der Quantenmechanik und vergleichen dann die Ergebnisse miteinander.

### Vorhersage der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik kennt bezüglich einer Spinkomponente nur zwei Möglichkeiten:  $|+1\rangle| -2\rangle$  oder  $| -1\rangle| +2\rangle$ . Wenn Teilchen 1 bezüglich der  $a$ -Richtung auf  $\uparrow$  eingestellt ist, dann muss Teilchen 2 in dieser Komponente  $\downarrow$  haben, d.h.  $P(s_{a1} \uparrow, s_{a2} \uparrow) = 0$ .

Drehen wir einen Spin-Up um den Winkel  $\vartheta$ , so ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} R \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} R^{-1} &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} & -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} & \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} & \sin \frac{\vartheta}{2} \\ -\sin \frac{\vartheta}{2} & \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} & -\sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ -\sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} & \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

die gedrehte Spin-Up-Komponente zu  $\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$ .

Die Quantenmechanik liefert damit als Voraussage für den  $b$ -Erwartungswert:

$$\langle \vec{s}_b \uparrow \rangle = \sin^2 \frac{\vartheta_{ab}}{2}$$

bzw. für die Wahrscheinlichkeiten jeweils die Hälfte, da von den 4 Möglichkeiten, nur die 2 genommen werden, bei denen das andere Teilchen auch Spin-Up besitzt:

$$\begin{aligned} P(s_{a1} \uparrow, s_{b2} \uparrow) &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{ab}}{2} \\ P(s_{c1} \uparrow, s_{b2} \uparrow) &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{bc}}{2} \\ P(s_{a1} \uparrow, s_{c2} \uparrow) &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{ac}}{2} \end{aligned}$$

<sup>40</sup>Die Bell'sche Ungleichung muss dem Experiment angepasst werden; sie ist keine allgemein niederschreibbare Zahlenungleichung. Eine Theorie, die verborgene Parameter enthält, muss jedoch diese Ungleichung erfüllen (die Gültigkeit der Bell'schen Ungleichung ist mathematisch bewiesen).

Eingesetzt in die Bell'sche Ungleichung:

$$P(s_{a1} \uparrow, s_{b2} \uparrow) \leq P(s_{a1} \uparrow, s_{c2} \uparrow) + P(s_{c1} \uparrow, s_{b2} \uparrow)$$

erhalten wir:

$$\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{ab}}{2} \leq \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{ac}}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\vartheta_{cb}}{2}$$

Wählen wir nun konkrete Winkel:

$$\vartheta_{ab} = \frac{\pi}{2}, \quad \vartheta_{ac} = \vartheta_{cb} = \frac{\pi}{4}$$

und setzen die Werte ein, so erhalten wir die Ungleichung für Zahlen:

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \leq 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 0,146 \dots$$

also:

$$0,25 \leq 0,146 \dots$$

Die Ungleichung ist nicht erfüllt, also ein Widerspruch!

### Fazit des Widerspruchs

Die Bell'sche Ungleichung muss für eine Theorie mit verborgenen Parametern erfüllt sein, wenn diese Theorie der Natur entspricht. Die Ungleichung liefert allerdings einen Widerspruch. Da sie eine bewiesene Tatsache ist, ist die Theorie der verborgenen Parameter widerlegt.

QM II - Sommersemester  
1998





# Kapitel 6

## Quantendynamik

Unser Ziel ist Vorhersagen über die zeitliche Entwicklung eines Systems zu machen. Dazu werden wir verschiedene Methoden kennenlernen.

### 6.1 Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild

#### 6.1.1 Einleitung

In der Klassischen Mechanik hat man ein System mit  $3N$  Freiheitsgraden, die durch Zwangs- und Anfangsbedingungen eingeschränkt sind. Man hat einen Punkt im Phasenraum zum Zeitpunkt  $t_0$  und kann durch Lösung der Differentialgleichung voraussagen, wie sich das System in der Zukunft verhält. Die generalisierten Koordinaten  $q_i$  und  $p_i$  stellen diese Punkte im Phasenraum dar. Wenn die  $q_i(t_0)$  und  $p_i(t_0)$  bekannt sind, kann man  $q_i(t)$  und  $p_i(t)$  für  $t_0 < t$  mit den Bewegungsgleichungen  $\dot{q}_i = \frac{H}{p_i}$  und  $\dot{p}_i = -\frac{H}{q_i}$  berechnen.

In der Quantenmechanik ist der Ausgangspunkt ein Zustand  $|\psi(t_0)\rangle$  im Hilbertraum zum Zeitpunkt  $t_0$ . Die Frage, wie  $|\psi(t)\rangle$  aussieht, wird durch Lösen der Schrödinger-Gleichung beantwortet. Wir erhalten einen Erwartungswert einer physikalischen Observablen durch  $\langle \psi(t_0) | \hat{O} | \psi(t_0) \rangle$ . Für die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes ergibt sich  $\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$ .

Um die Zeitentwicklung darzustellen führen wir einen *Zeitentwicklungsoperator* ein:

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

Kennen wir den Zeitentwicklungsoperator, so ist das Problem gelöst. Bisher haben wir allerdings nur zeitunabhängige Probleme betrachtet.<sup>1</sup> Wir haben für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung<sup>2</sup> Lösungen des Eigenwertproblems

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

---

<sup>1</sup>Wir haben Entwicklungen nach Energieeigenzuständen betrachtet.

<sup>2</sup>Mit  $\hat{H}(\mathcal{X})$ . Beachte Seite 50.

erhalten. Nun könnte man eine Zeitentwicklung einführen, indem man die Eigenzustände zeitabhängig macht:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} |\psi_n\rangle.$$

Wenn wir die Wellenfunktion nach den Eigenzuständen entwickeln erhalten wir:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi(t_0)\rangle.$$

Mit  $\langle \psi_n | \psi(t_0)\rangle =: c_n(t_0)$  ergibt sich:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\psi_n\rangle e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)}.$$

Das Problem ist, daß dieser Weg nur dann gangbar ist, wenn der Zustand  $|\psi(t_0)\rangle$  nicht explizit von der Zeit abhängt. Suchen wir elegantere Wege um eine Zeitentwicklung zu beschreiben.<sup>3</sup>

### 6.1.2 Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$

#### Gewünschte Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators

Listen wir zu Anfang auf, welche Eigenschaften wir für den Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}$  erwarten.

1. Das Teilchen soll erhalten bleiben und nicht verschwinden. Daher muß gelten:

**Behauptung.**  $\hat{U}$  ist unitär.

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

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0)\rangle &= 1 \\ \langle \psi(t) | \psi(t)\rangle &= 1 \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Also gilt, daß  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{\mathbf{1}}$  ist. □

2. Der Zeitentwicklungsoperator muß, wenn keine Zeit verstrichen ist, wieder den Ursprungszustand liefern.

**Behauptung.**

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbf{1}}.$$

3. Es muß egal sein, ob man den Zeitentwicklungsoperator der globalen Anfangszeit bis zur globalen Endzeit anwendet, oder ob man die Zeit in einzelne Abschnitte trennt und für jeden Abschnitt den Zeitentwicklungsoperator anwendet.

**Behauptung.** Für  $t_0 < t_1 < t_2$  gilt:

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

<sup>3</sup>Vergleiche mit [Sakurai-1, S. 68-76].

**Bestimmung des infinitesimalen Zeitentwicklungsoperators**

Wir werden in den folgenden Abschnitten aus diesen Vorgaben Schritt für Schritt den Zeitentwicklungsoperator bestimmen.

**Behauptung.** Für einen infinitesimalen Zeitschritt  $dt$  gilt:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt$$

dabei ist  $\hat{\Omega}$  hermitesch:  $\hat{\Omega} = \hat{\Omega}^\dagger$ .

*Beweis.* Wir entwickeln  $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{A} + \hat{B}dt + \hat{C}dt^2 + \dots$$

Der  $\hat{C}$ -Term verschwindet, da  $dt^2$  klein ist. Geht  $dt$  gegen null, so folgt mit Bedingung 2, daß  $\hat{A} = \hat{\mathbf{1}}$  ist. Setzen wir dies in die Taylorentwicklung ein und benutzen die Bedingung 1:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{1}} &= \hat{U}^\dagger \hat{U} \\ &= (\hat{\mathbf{1}} + \hat{B}^\dagger dt)(\hat{\mathbf{1}} + \hat{B}dt) \\ &= \hat{\mathbf{1}} + \hat{B}^\dagger dt \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \hat{B}dt + \hat{B}^\dagger \hat{B}dt^2. \end{aligned}$$

Wieder verschwindet der quadratische Term nach Taylor, es folgt:

$$\hat{0} = \hat{B}^\dagger + \hat{B}$$

Definieren wir nun  $\hat{B} := -i\hat{\Omega}$ , so ist  $\hat{\Omega} = \hat{\Omega}^\dagger$ .  $\hat{B}$  ist antihermitesch und  $\hat{\Omega}$  somit hermitesch.  $\square$

Wir testen noch, ob die dritte Bedingung erfüllt ist.

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_0 + 2dt, t_0) &= \hat{U}(t_0 + 2dt, t_0 + dt)\hat{U}(t_0 + dt, t_0) \\ &= (\hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt)(\hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt) \\ &= \hat{\mathbf{1}} - 2i\hat{\Omega}dt - \hat{\Omega}^2 dt^2 \end{aligned}$$

Der quadratische Term verschwindet. Damit ist auch die dritte Bedingung erfüllt:

$$\hat{U}(t_0 + 2dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}} - 2i\hat{\Omega}dt.$$

Für den infinitesimalen Zeitentwicklungsoperator ergibt sich also formal:

$$\boxed{\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt.}$$

**Bestimmung von  $\hat{\Omega}$** 

Wir sind einen Schritt weiter und betrachten nun  $\hat{\Omega}$ .

**Behauptung.**  $\hat{\Omega}$  hat die Gestalt

$$\hat{\Omega} := \frac{1}{\hbar} \hat{H},$$

wobei  $\hat{H}$  der Hamilton-Operator zu  $|\psi(t)\rangle$  ist.

*Beweis.* Wir zeigen die Behauptung in drei Teilbeweisen:

1.  $\hat{\Omega}$  ist hermitesch.

*Beweis.* Der Hamilton-Operator ist hermitesch:

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger,$$

und damit auch  $\frac{1}{\hbar} \hat{H}$ . □

2. Die Dimension muß stimmen:

*Beweis.*  $\hat{\Omega} = \frac{1}{\hbar} \hat{H}$  hat die Dimension  $\frac{1}{\text{Zeit}}$ . Dies paßt in die Taylorentwicklung. □

3. Die Schrödinger-Gleichung soll weiterhin gelten.

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\ &= i\hbar \left( \frac{|\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle}{dt} \right) \\ &= i\hbar \left( \frac{\hat{U}(t+dt, t) |\psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{dt} \right) \\ &= i\hbar \left( \frac{(\hat{U}(t+dt, t) - \hat{\mathbb{1}}) |\psi(t)\rangle}{dt} \right) \end{aligned}$$

Infinitesimalen Zeitentwicklungsoperator einsetzen:

$$\begin{aligned} &= i\hbar \left( \frac{(\hat{\mathbb{1}} - i\hat{\Omega}dt - \hat{\mathbb{1}}) |\psi(t)\rangle}{dt} \right) \\ &= i\hbar \left( \frac{-i\hat{\Omega}dt}{dt} \right) |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Vermutetes  $\hat{\Omega}$  einsetzen:

$$= \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

□

Diese Definition von  $\hat{\Omega}$  hat die gewünschten Eigenschaften. □

**Der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t)$  für  $\hat{H}(\mathcal{X})$** 

**Satz.** Ist der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  zeitunabhängig, so gilt:

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

*Beweis.* Dazu unterteilen wir das Intervall  $\Delta t := t - t_0$  in  $n$  Teilintervalle:

$$t_j = t_0 + j\frac{\Delta t}{n}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Damit können wir  $\hat{U}(t, t_0)$  umschreiben:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_{n-1}) \cdots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

Mit  $\lim_{n \rightarrow \infty}$  ergibt sich  $\frac{\Delta t}{n} = dt$ , und wir können  $\hat{U}(t, t_0)$  nochmals umschreiben:

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \hat{\mathbb{1}} - i\Omega \frac{\Delta t}{n} \right)^n.$$

An dieser Stelle wurde davon Gebrauch gemacht, daß  $\hat{H}$  beziehungsweise  $\hat{\Omega}$  zeitunabhängig ist.<sup>4</sup> Mit  $\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$  und sodann den Grenzübergang machen:

$$= \hat{\mathbb{1}} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t + \frac{1}{2!} \left( -i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t \right)^2 + \cdots$$

Dies ist die gewünschte Exponentialfunktion.<sup>5</sup> □

Nun können wir  $|\psi(t)\rangle$  auf diese Weise schreiben:

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

**Bemerkung.**

1. Für  $\hat{H}(\mathcal{X})$  erfüllt

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

die drei Forderungen, die wir im Anfang gestellt haben.

2.  $\hat{U}$  liefert uns das schon aus der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung bekannte Ergebnis:

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

<sup>4</sup>Man kann das  $\hat{\Omega}$  in die Potenz ziehen, da es für jeden kleinen Zeitschritt gleich ist. Dies wurde auch schon an der Stelle gemacht, an der wir getestet haben, ob  $\hat{\Omega}$  die Bedingung 3 erfüllt.

<sup>5</sup>Zur Definition der Exponentialfunktion siehe auch [Kaul-1, S. 52 und S. 196].

Taylor-Entwicklung:

$$= \left( \hat{\mathbf{1}} - i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t - t_0) + \frac{1}{2!} \left( -i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t - t_0) \right)^2 + \dots \right) |\psi(t_0)\rangle$$

$\hat{H}$  durch den Eigenwert  $E_a$  ersetzt und zurück:

$$= e^{-i \frac{E_a}{\hbar} (t - t_0)} |\psi(t_0)\rangle.$$

3. Der infinitesimale Zeitentwicklungsoperator hat die Form  $\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt$ . Wir können nun auch

$$\begin{aligned} \hat{U}(t + dt, t_0) &= \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0) \\ &= \left( \hat{\mathbf{1}} - i\hat{\Omega}dt \right) \hat{U}(t, t_0) \\ &= \hat{U}(t, t_0) - i\hat{\Omega}dt \hat{U}(t, t_0) \end{aligned}$$

schreiben, wobei  $t - t_0$  nicht infinitesimal sein muß. Wenn man nun auf beiden Seiten noch  $\hat{U}(t, t_0)$  subtrahiert erhält man

$$\hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) = -i \frac{\hat{H}}{\hbar} dt \hat{U}(t, t_0).$$

Dies kann man als Differentialgleichung für  $\hat{U}$  umschreiben und erhält die sogenannte Schrödinger-Gleichung des Zeitentwicklungsoperators:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0).}$$

Diese Gleichung hat allerdings nur dieselbe Form, wie die Schrödinger-Gleichung; sie wirkt nicht auf Zustände. Sie ist eine Bestimmungsgleichung für den Operator  $\hat{U}$ .

4.  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t - t_0)}$  hat ähnliche Eigenschaften wie ein Rotations- oder Translationsoperator  $\hat{T}(a) = e^{-i \frac{\hat{p}}{\hbar} a}$ :

$$|\tilde{\psi}\rangle = \hat{T}(a) |\psi\rangle.$$

Abbildung 6.1: Translation

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x) &= \langle x | \tilde{\psi} \rangle \\ &= e^{-i \frac{\hat{p}}{\hbar} a} \psi(x) \end{aligned}$$

Mit dem Impulsoperator  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ :

$$\begin{aligned} &= e^{-i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\hbar} a} \psi(x) \\ &= \psi(x - a) \end{aligned}$$

$\frac{\hat{p}}{\hbar}$  ist der Generator der Translation. Dementsprechend ist  $\frac{\hat{H}}{\hbar}$  der Generator der Zeitentwicklung.

**Entwicklung der Erwartungswerte mit der Zeit**

Mit  $c_n(t_0) := \langle \psi_n | \psi(t_0) \rangle$ , wie oben bereits definiert, ergibt sich:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\psi_n\rangle.$$

Mit  $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n \hat{U}(t, t_0) |\psi_n\rangle \\ &= \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} |\psi_n\rangle. \end{aligned}$$

Sei  $\hat{O}(t)$  ein zeitunabhängiger Operator für eine Observable, dann sieht der Erwartungswert so aus:

$$\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_{nn'} \langle \psi_{n'} | \hat{O} | \psi_n \rangle c_n c_{n'}^* e^{-i\frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}(t-t_0)}.$$

**Betrachten wir noch einige Spezialfälle:**

1. Verschwindet der Kommutator  $[\hat{H}, \hat{O}]_- = 0$ , dann existiert ein gemeinsames Eigenfunktionssystem und  $|\psi_n\rangle$  ist auch eine Eigenfunktion zu  $\hat{O}$ .

$$\langle \psi_{n'} | \hat{O} | \psi_n \rangle = o_n \delta_{nn'}$$

Die Doppelsumme bricht zusammen; die Matrix hat also Diagonalgestalt. Damit erhalten wir, daß der Erwartungswert

$$\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_n \hat{O} |c_n|^2$$

zeitunabhängig ist. Somit ist die Observable von  $\hat{O}$  eine Erhaltungsgröße.

2. Ist  $\hat{O}$  beliebig und es gilt

$$c_n = \begin{cases} 1 & \text{für } n = 0 \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

also falls  $\psi$  selbst ein Eigenzustand (eine stationäre Lösung; nicht eine Überlagerung stationärer Zustände) ist, dann sind die Erwartungswerte konstant für diese stationäre Lösungen  $\psi$ .



## 6.2 Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild

### 6.2.1 Einleitung

Wir wollen eine andere Möglichkeit der Darstellung der Zeitentwicklung kennenlernen. Im nächsten Abschnitt begegnet uns dann noch eine „Mischform“ der Darstellung.

### 6.2.2 Operator mit Zeitabhängigkeit

Der Hamilton-Operator sei zeitunabhängig. Wir berechnen den Erwartungswert zu  $\hat{A}(\mathcal{X})$ .<sup>6</sup>

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle(t) &= \langle \psi(t) | \hat{A}(\mathcal{X}) | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}(\mathcal{X}) \hat{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle\end{aligned}$$

Wir definieren nun einen Operator im Heisenberg-Bild  $\hat{A}^H(t)$ , der die Zeitabhängigkeit beinhaltet<sup>7</sup>:

**Definition.**

$$\hat{A}^H(t) := \hat{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}^S(\mathcal{X}) \hat{U}(t, 0)$$

Im Heisenberg-Bild steckt die Zeitabhängigkeit im Operator  $\hat{A}^H(t)$  und die Zustände  $|\psi\rangle$  sind zeitunabhängig. Im Schrödinger-Bild ist es genau umgekehrt und somit benutzt man die Schrödinger-Gleichung:

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

Der Zeitentwicklungsoperator wirkt im Heisenberg-Bild nicht auf die Zustände, sondern auf den angewendeten Operator. Dementsprechend gilt für die Zustände im Heisenberg-Bild:

$$|\psi\rangle^H = |\psi(0)\rangle^S.$$

### 6.2.3 Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

Wir suchen nun das Pendant zur Schrödinger-Gleichung im Heisenberg-Bild. Dies ist eine Art Bewegungsgleichung für einen Operator im Heisenberg-Bild.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^H = \frac{d(\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{U})}{dt}$$

Da  $\hat{A}^S$  unabhängig von  $t$  ist:

$$= \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \hat{A}^S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}^S \frac{d\hat{U}}{dt}$$

<sup>6</sup>Vergleiche mit [Sakurai-1, S. 82-89] und [Cohen-1, S. 293-295].

<sup>7</sup>Der Index  $H$  steht für Heisenberg und  $S$  für Schrödinger.

Mit der Schrödinger-Gleichung des Zeitentwicklungsoperators:

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}\right)^\dagger \hat{A}^S \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{A}^S \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}$$

Mit  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ :

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H}^\dagger \hat{A}^S \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{A}^S \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}$$

Da  $\hat{H}$  hermitesch ist:

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A}^S \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{A}^S \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U} \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A}^S \hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{H}\hat{U} \end{aligned}$$

Einsen einfügen:

$$= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H}\hat{U}$$

Es ist  $\hat{U}^\dagger \hat{A}^S \hat{U} = \hat{A}^H$  und  $\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \hat{H} e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} = \hat{H}$ :<sup>8</sup>

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\hat{A}^H - \hat{A}^H\hat{H}) \\ &= \frac{1}{i\hbar}(\hat{A}^H\hat{H} - \hat{H}\hat{A}^H) \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^H, \hat{H}]_- \end{aligned}$$

Die Gleichung

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}^H = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^H, \hat{H}]_-}$$

wird *Heisenberg'sche Bewegungsgleichung* genannt. Sie beschreibt die Änderung des Operators mit der Zeit, während die Schrödinger-Gleichung die Änderung des Zustandes mit der Zeit ergibt.

### 6.2.4 Poisson-Klammern und Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

In der Klassischen Mechanik gilt für eine Funktion  $A(\mathcal{X})$ , also mit  $\frac{\partial}{\partial t}A(t) = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \\ &= \{A, H\} \end{aligned}$$

<sup>8</sup>Der Kommutator  $[\hat{U}^\dagger, \hat{H}]_-$  vertauscht, weil  $[\hat{H}, \hat{H}]_-$  vertauscht.

In der Quantenmechanik entspricht die Funktion  $A$  dem Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle$ . Es gibt für die klassischen dynamischen Variablen  $A$  und  $B$  im Heisenberg-Bild die Entsprechung (Operatorenidentität):

$$\{A, H\} = B \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^H, \hat{H}]_- = \hat{B}^H$$

Dies wird auch die Quantisierungsbedingung der Quantenmechanik genannt.

## 6.3 Wechselwirkungsdarstellung nach Dirac

### 6.3.1 Einleitung

Zwischen Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild gibt es noch eine andere Darstellung, nämlich die Dirac-Darstellung. Wir betrachten dazu eine Störung  $\hat{V}(t)$ , die explizit von der Zeit abhängig ist:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ . Solange  $\hat{H} = \hat{H}_0$  ist ändert sich am Zustand nichts. Erst wenn  $\hat{V}(t)$  „eingeschaltet“ wird, kann sich etwas ändern.

**Beispiel.** Ein Elektron bleibt in seinem Grundzustand. Erst wenn das Licht eingeschaltet wird kann es sich in einen angeregten Zustand begeben oder sich gar gänzlich vom Atom entfernen.

### 6.3.2 Zeitentwicklung in den verschiedenen Bildern

Benutzen wir dazu die verschiedenen Betrachtungsweisen.

1. Schrödinger-Bild:

Die gesamte Zeitabhängigkeit ist im Zustand  $|\psi^S(t)\rangle$  enthalten.

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

Der Observablenoperator  $\hat{A}^S$  hat dabei keine Zeitabhängigkeit. Ist  $\hat{H}(\mathcal{A})$ , dann kann man

$$\begin{aligned} |\psi^S(t)\rangle &= \hat{U} |\psi^S(t_0)\rangle \\ &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |\psi^S(t_0)\rangle \end{aligned}$$

schreiben.

2. Heisenberg-Bild:

Hier ist der Zustand  $|\psi^H(\mathcal{A})\rangle$  zeitunabhängig und entspricht somit dem Anfangszustand  $|\psi^S(t_0)\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\psi^H(t)\rangle &= |\psi^S(t_0)\rangle \\ &= \hat{U}^\dagger |\psi^S(t)\rangle \\ &= \hat{U}^\dagger \hat{U} |\psi^S(t_0)\rangle \\ &= e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |\psi^S(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Aus den Berechnungen in den beiden verschiedenen Bildern kommt derselbe Erwartungswert für die Observable heraus. Dies muß auch für andere Betrachtungen gefordert werden, denn die Theorie muß sich an den Meßwerten messen lassen:

$$\langle \psi^S(t) | \hat{\mathcal{O}}^S | \psi^S(t) \rangle = \langle \psi^H | \hat{\mathcal{O}}^H(t) | \psi^H \rangle.$$

3. Wechselwirkungsbild:<sup>9</sup>

Im Wechselwirkungsbild geben wir die Bedingung, daß der Hamilton-Operator zeitunabhängig sein muß, auf:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ , wobei wir formal einen Wechselwirkungszustand nur mit dem ungestörten Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  definieren.<sup>10</sup>

$$|\psi^I(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi^S(t)\rangle$$

Damit können wir nun schreiben:

$$\begin{aligned} \langle \psi^S | \hat{O}^S | \psi^S \rangle &= \langle \psi^S | \hat{U}_0 \hat{U}_0^\dagger \hat{O}^S \hat{U}_0 \hat{U}_0^\dagger | \psi^S \rangle \\ &= \langle \psi^S | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{O}^I e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} | \psi^S \rangle \\ &= \langle \psi^I | \hat{O}^I | \psi^I \rangle \end{aligned}$$

Wobei  $\hat{U}_0$  den Zeitentwicklungoperator für den ungestörten Zustand darstellt.

## 6.3.3 Das Wechselwirkungsbild

**Definition.** Wir definieren den Zustand im Wechselwirkungsbild:

$$|\psi^I\rangle := \hat{U}_0^\dagger |\psi^S\rangle$$

und den Observablenoperator:

$$\hat{A}^I := \hat{U}_0^\dagger \hat{A}^S \hat{U}_0.$$

Damit ist die Forderung, daß der Erwartungswert der Observablen in allen Bildern gleich ist, erfüllt.

Betrachten wir den Grenzfall:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}, \quad \hat{V} = 0.$$

Dann entspricht das Wechselwirkungsbild dem Heisenberg-Bild. Wenn

$$\hat{H}_0 = 0, \quad \hat{V} = \hat{H}$$

gilt, dann entspricht das Wechselwirkungsbild dem Schrödinger-Bild. Rechnet man beide Wege durch, so erhält man das Ergebnis sowohl für den gestörten, als auch für den ungestörten Zustand.

<sup>9</sup>Vergleiche mit [Sakurai-1, S. 316-322].

<sup>10</sup>Der Index  $I$  steht für Interaction.

### 6.3.4 Bewegungsgleichung im Wechselwirkungsbild

#### Zustandsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^I(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left( e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi^S(t)\rangle \right)$$

Da der Zustand  $|\psi^S(t)\rangle$  von der Zeit abhängig ist, müssen wir die Produktregel anwenden.

$$\begin{aligned} &= i\hbar \frac{d}{dt} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{-i\frac{\hat{H}_0 + \hat{V}^S}{\hbar}t} |\psi^S(t_0)\rangle \\ &= i\hbar i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{-i\frac{\hat{H}_0 + \hat{V}^S}{\hbar}t} |\psi^S(t_0)\rangle \\ &\quad + i\hbar e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} (-) \frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}_0 + \hat{V}^S \right) e^{-i\frac{\hat{H}_0 + \hat{V}^S}{\hbar}t} |\psi^S(t_0)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi^S(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} (\hat{H}_0 + \hat{V}^S) |\psi^S(t)\rangle \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} (-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \hat{V}^S) |\psi^S(t)\rangle \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}^S |\psi^S(t)\rangle \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}^S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi^S(t)\rangle \end{aligned}$$

und damit gilt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^I(t)\rangle = \hat{V}^I |\psi^I(t)\rangle$$

Die Zustandsgleichung im Wechselwirkungsbild ist durch eine Art Schrödinger-Gleichung gegeben, wobei allerdings der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  durch die Störung  $\hat{V}$  ersetzt ist.

	Heisenberg-Bild	Wechselwirkungsbild	Schrödinger-Bild
Zustand	keine Änderung	Entwicklung durch $\hat{V}$	Entwicklung durch $\hat{H}$
Observable	Entwicklung durch $\hat{H}$	Entwicklung durch $\hat{H}_0$	keine Änderung

Tabelle 6.1: Die verschiedenen Bilder im Überblick

#### Observablengleichung

**Behauptung.** Für den Operator einer Observable  $\hat{O}$  (der ja im Schrödinger-Bild zeitunabhängig ist) gilt:

$$\frac{d\hat{O}^I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}^I, \hat{H}_0]_-.$$

Dies ist eine Gleichung, die der Heisenberg'schen Bewegungsgleichung ähnelt, nur daß  $\hat{H}$  durch  $\hat{H}_0$  ersetzt ist.

*Beweismittel.* Mit den folgenden Beziehungen kann man die Behauptung beweisen.

$$\begin{aligned} |\psi^I(t)\rangle &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi^S(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^I(t)\rangle &= \hat{V}^I(t) |\psi^I(t)\rangle \\ \hat{V}^I(t) &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}^S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \end{aligned}$$

□

### 6.3.5 Zustände im Wechselwirkungsbild

Unser Ziel ist die Bestimmung der Zustände im Wechselwirkungsbild. Dafür entwickeln wir sie nach dem Basissystem der Eigenzustände des ungestörten Zustandes  $|\psi_n\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\psi^I(t)\rangle &= \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi^I(t)\rangle \\ &= \sum_n |\psi_n\rangle c_n(t) \end{aligned}$$

Diese Beziehung brauchen wir in der folgenden Rechnung. Wir ersetzen damit die  $|\psi^I(t)\rangle$  in der Bewegungsgleichung.

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^I(t)\rangle = \hat{V}^I(t) |\psi^I(t)\rangle$$

Von links mit  $\langle \psi_n |$  multiplizieren:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_n | \psi^I(t)\rangle = \langle \psi_n | \hat{V}^I(t) | \psi^I(t)\rangle$$

Eine Eins,  $\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m |$ , einfügen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_n | \psi^I(t)\rangle &= \sum_m \langle \psi_n | \hat{V}^I(t) | \psi_m\rangle \langle \psi_m | \psi^I(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) &= \sum_m \langle \psi_n | \hat{V}^I(t) | \psi_m\rangle c_m(t) \\ &= \sum_m \langle \psi_n | e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}^S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} | \psi_m\rangle c_m(t) \end{aligned}$$

$\langle \psi_n |$  und  $|\psi_m\rangle$  sind Lösungen des ungestörten Hamilton-Operators  $\hat{H}_0$ , daher kann man die Eigenwerte einsetzen:

$$= \sum_m \langle \psi_n | e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \hat{V}^S e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} | \psi_m\rangle c_m(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = \sum_m e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t} \langle \psi_n | \hat{V}^S | \psi_m\rangle c_m(t)$$

Der Faktor  $e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t}$  wird in Zukunft öfter vorkommen, daher werden wir ihn so schreiben:  $e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t} =: e^{i\omega_{nm}t}$ .

Nun können wir diese gekoppelte Differentialgleichung zur Bestimmung der  $c_n$  in Matrixform schreiben:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \cdots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \cdots \\ & & V_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

**Beispiel.** Wir betrachten ein System von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Dies ist ein Zweizustandssystem.<sup>11</sup> Im entfernten Magnetfeld stellen sich die Teilchen entweder parallel oder antiparallel ein. Dies entspricht den Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$ .

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

Anfangs soll das Teilchen im energetisch günstigeren Zustand  $|1\rangle$  sein. Das Einstrahlen einer elektromagnetischen Welle entspricht einer zeitabhängigen Störung des Systems. Diese schreiben wir nun

$$\hat{V}(t) = \gamma e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1|,$$

dabei hat der zweite Term die Funktion,  $\hat{V}$  selbstadjungiert zu machen. Dies hat die Wirkung, daß derselbe Operator sowohl von  $|1\rangle$  nach  $|2\rangle$ , als auch von  $|2\rangle$  nach  $|1\rangle$  wirken kann.

$$\hat{V}^\dagger(t) = \gamma^* e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1| + \gamma^* e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2|$$

Da  $\gamma$  reell ist, entsprechen sich die beiden Operatoren; sie sind selbstadjungiert. Eine exakte Lösung kann man bekommen, wenn zur Zeit  $t_0$  nur der Zustand  $|1\rangle$  existiert. Dann ist  $c_1(0) = 1$  und  $c_2(0) = 0$ .<sup>12</sup> Aus der Normierungsbedingung folgt, daß  $c_1^2 + c_2^2 = 1$  gilt. Als Differentialgleichung für die  $c_n(t)$  erhalten wir:<sup>13</sup>

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) = \langle 1 | \hat{V}^I(t) | 1 \rangle c_1(t) + \langle 1 | \hat{V}^I(t) | 2 \rangle c_2(t)$$

mit einer Nebenrechnung<sup>14</sup>

$$= 0 + \gamma e^{i\omega_{12}t} e^{i\omega t} c_2(t)$$

<sup>11</sup>Zum Beispiel Elektronen.

<sup>12</sup>Aus  $|\psi\rangle = \sum_n c_n(0) |\psi_n\rangle$ .

<sup>13</sup>Beachte dazu die Matrixgleichung.



und

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) = +\gamma e^{-i\omega_{12}t} e^{i\omega t} c_1(t)$$

Die Wahrscheinlichkeit das System in einem der beiden Zustände zu finden, ist dann durch die *Rabi-Formel* gegeben:<sup>15</sup>

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \sin^2 \left( \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} t \right)$$

Dabei sind die Wahrscheinlichkeiten der Zustände verknüpft durch

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2.$$

Das elektromagnetische Feld sorgt dafür, daß das System einen energetisch höheren Zustand annehmen kann, indem es Energie dafür zur Verfügung stellt. Ist die Störung maximal<sup>16</sup>, so kann das System dem Wechselfeld wieder in den Grundzustand folgen.

Abbildung 6.2:  $c_2^2$

Abbildung 6.3: Maximum von  $c_2^2$

Mit dieser Methode läßt sich klären, wie das System ohne Störung aussieht, also bevor man die Störung einschaltet und wie sich das System mit der Störung ändert. Bei realistischeren Problemen, wie sie in der Natur vorkommen, ist die Lösung oftmals nicht mehr geschlossen anzugeben, da man mit einem System von unendlich vielen gekoppelten Differentialgleichungen zu rechnen hat. Dann muß man Näherungsmethoden benutzen.

---

<sup>14</sup>Nebenrechnung:

$$\langle 1 | \hat{V}^I(t) | 1 \rangle = \gamma e^{i\omega t} \underbrace{\langle 1 | 1 \rangle \langle 2 | 1 \rangle}_{=0} + \gamma e^{-i\omega t} \underbrace{\langle 1 | 2 \rangle \langle 1 | 2 \rangle}_{=0}$$

beziehungsweise

$$\langle 1 | \hat{V}^I(t) | 2 \rangle = \gamma e^{i\omega t} \underbrace{\langle 1 | 1 \rangle \langle 2 | 2 \rangle}_{\neq 0} + \gamma e^{-i\omega t} \underbrace{\langle 1 | 2 \rangle \langle 1 | 2 \rangle}_{=0}$$

<sup>15</sup>Ohne weitere Herleitung.

<sup>16</sup>Resonanzbedingung.

## 6.4 Zeitabhängige Störungstheorie

### 6.4.1 Einleitung

Nun wollen wir Näherungsmethoden für die Fälle kennenlernen, in denen man keine geschlossenen Lösungen mehr angeben kann. Für diese muß gelten, daß  $\hat{V}(t)$  klein sein soll, damit wir Näherungen ansetzen können:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathcal{I}) + \hat{V}(t) \quad \text{mit } \hat{V}(t) \ll \hat{H}_0.$$

### 6.4.2 Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild

Wir betrachten nun den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild mit zeitabhängigem Hamilton-Operator.

Im Schrödinger-Bild haben wir den Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^S(t, 0) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}$  kennengelernt:<sup>17</sup>

$$|\psi^S(t)\rangle = \hat{U}^S(t, 0)|\psi^S(0)\rangle.$$

Wie sieht aber nun der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild aus, der die Zeitentwicklung des Zustandes  $|\psi^I\rangle$  beschreibt?<sup>18</sup>

$$\begin{aligned} |\psi^S(t)\rangle &= \hat{U}^S(t, 0)|\psi^S(0)\rangle \\ e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\psi^S(t)\rangle &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{U}^S(t)|\psi^S(0)\rangle \\ &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{U}^S(t)e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}|\psi^S(0)\rangle \\ |\psi^I(t)\rangle &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{U}^S(t)e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}|\psi^I(0)\rangle \end{aligned}$$

Durch Vergleich mit dem Gewünschten

$$|\psi^I(t)\rangle = \hat{U}^I(t, 0)|\psi^I(0)\rangle$$

folgt:

$$\boxed{\hat{U}^I(t, 0) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{U}^S(t)e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}}$$

Zur Zeit  $t_0 = 0$  ist  $|\psi^S\rangle = |\psi^I\rangle$ ; für  $t \neq t_0$  müssen wir den Wechselwirkungsoperator (Zeitentwicklungsoperator)  $\hat{U}^I(t, t_0)$  anwenden.

Wir möchten den Zeitentwicklungsoperator genauer bestimmen. Betrachten wir dazu die auf die Störung reduzierte Schrödinger-Gleichung, die uns die Zeitentwicklung von  $|\psi^I(t)\rangle$  im Wechselwirkungsbild liefern soll:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^I(t)\rangle &= \hat{V}^I(t) |\psi^I(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \left( \hat{U}^I(t, t_0) |\psi^I(t_0)\rangle \right) &= \hat{V}^I(t) \hat{U}^I(t, t_0) |\psi^I(t_0)\rangle \end{aligned}$$

<sup>17</sup>Der Eigenwert des Zeitentwicklungsoperators zum Hamilton-Operator kann als komplexe Phase, die an einen Zustand anmultipliziert wird, aufgefaßt werden.

<sup>18</sup>Vergleiche mit [Sakurai-1, S. 327-335].

Diese Gleichung gilt für alle Startzustände  $|\psi^I(t_0)\rangle$  und muß daher auch für die Operatoren gelten, so daß man die Gleichung auf eine Operatoridentität reduzieren kann.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^I(t, t_0) = \hat{V}^I(t) \hat{U}^I(t, t_0)$$

Aus dieser Gleichung erhalten wir eine Entwicklung für  $\hat{U}^I(t, t_0)$ , indem wir eine Variablenumbenennung durchführen:

$$i\hbar \frac{d}{dt'} \hat{U}^I(t', t_0) = \hat{V}^I(t') \hat{U}^I(t', t_0)$$

und integrieren

$$\int_{t_0}^t i\hbar \frac{d}{dt'} \hat{U}^I(t', t_0) dt' = \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') \hat{U}^I(t', t_0) dt'.$$

Ein Integral über die Ableitung einer Funktion liefert gerade die Differenz der Funktionswerte an den Grenzen:

$$i\hbar \left( \hat{U}^I(t, t_0) - \underbrace{\hat{U}^I(t_0, t_0)}_{=\hat{\mathbf{1}}} \right) = \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') \hat{U}^I(t', t_0) dt'.$$

Umformung:

$$\hat{U}^I(t, t_0) = \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') \hat{U}^I(t', t_0) dt'$$

Wenn man nun das Integral auf der rechten Seite lösen möchte, bekommt man eine Iteration

$$= \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') \left( \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \hat{V}^I(t'') \hat{U}^I(t'', t_0) dt'' \right) dt'$$

Und so weiter. Man erhält dann durch Aufteilen der Integrale auf die einzelnen Summanden:

$$\begin{aligned} &= \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') dt' + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \hat{V}^I(t') \hat{V}^I(t'') dt'' dt' + \dots \\ &+ \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} \hat{V}^I(t') \hat{V}^I(t'') \dots \hat{V}^I(t^{(n)}) dt^{(n)} dt'' dt' + \dots \end{aligned}$$

Scheinbar schieben wir die eigentliche Lösung vor uns her, aber wenn wir die einzelnen Terme genauer anschauen, dann sehen wir, daß die Potenz von  $\hat{V}(t)$  mit jedem Term um eins angehoben wird.  $\hat{U}^I(t, t_0)$  wird in Potenzen von  $\hat{V}(t)$  entwickelt. In der Störungstheorie soll aber  $\hat{V}(t)$  klein sein, daher kann man die Reihe irgendwann abbrechen. Wo man dies tut hängt davon ab, wie klein  $\hat{V}(t)$  ist und wieviel Zeit man in die Lösung stecken möchte, beziehungsweise wie genau die Lösung sein soll.

Bei dem eben angegebenen Integral müssen wir beachten, daß das Produkt von  $\hat{V}$  zu verschiedenen Zeiten mit einer Zeitordnung integriert wird:

$$t \geq t' \geq t'' \dots \geq t^{(n)} \geq t_0$$

### 6.4.3 Übergangswahrscheinlichkeit

Wir wollen nun Voraussagen über die Zeitentwicklung eines Erwartungswerts mit Hilfe dieses Integrals machen.

Sei die Störung vor der Anfangszeit  $t_0$  abgeschaltet, also  $\hat{H} = \hat{H}_0$  für  $t \leq t_0$ , dann hat der Anfangszustand in allen Darstellungen die gleiche Form, da erst der Zeitentwicklungsoperator in den verschiedenen Bildern mit unterschiedlichen komplexen Phasen den Zustand ändert.

$$|\psi^S(t_0)\rangle = |\psi^H(t_0)\rangle = |\psi^I(t_0)\rangle$$

Wir benutzen als Startzustand den Grundzustand  $|\psi_i\rangle = |\psi^I(t_0)\rangle$  eines Atoms, um die Übergangswahrscheinlichkeiten in einen angeregten Zustand  $|\psi_n\rangle$  zu berechnen.<sup>19</sup>

$$\begin{aligned} |\psi^I(t)\rangle &= \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi^I(t) \rangle \\ &= \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle \end{aligned}$$

Wie sieht das  $c_n(t)$  aus?

$$\begin{aligned} c_n(t) &= \langle \psi_n | \psi^I(t) \rangle \\ &= \langle \psi_n | \hat{U}^I(t, t_0) | \psi^I(t_0) \rangle \end{aligned}$$

$|c_n(t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeit, daß das System nach der Zeit  $t$  von  $|\psi_i\rangle$  nach  $|\psi_n\rangle$  übergeht.

Kehren wir nun zu dem vorher bestimmten Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^I(t)$  zurück und fügen ihn in die Gleichung für  $c_n(t)$  ein.

Wobei beachtet werden muß, daß sich das exakte  $c_n(t)$  als Summe der einzelnen Störungsrechnungsglieder  $c_n^m(t)$  ergibt:

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

1. Wenden wir Störungstheorie 0. Ordnung an.

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t) &= \langle \psi_n | \hat{U}^{I(0)}(t, 0) | \psi_i(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi_n | e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{U}^{S(0)} e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | \psi_i(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi_n | e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{-i\frac{\hat{H}_0 + \hat{V}^{(0)}}{\hbar}(t-t_0)} e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | \psi_i(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Mit  $\hat{V}^{(0)} = 0$ :

$$\begin{aligned} &= \langle \psi_n | \hat{\mathbf{1}} | \psi_i(t_0) \rangle \\ &= \delta_{ni} \end{aligned}$$

---

<sup>19</sup>Der Startzustand und der Endzustand sollten Eigenzustände zu  $\hat{H}_0$  sein. Vergleiche mit [Sakurai-1, S. 327].

2. Wenden wir Störungstheorie 1. Ordnung an.

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= \langle \psi_n | \hat{U}^{(1)}(t, 0) | \psi_i(t_0) \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \psi_n | \hat{V}^I(t') | \psi_i(t_0) \rangle dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\frac{E_n - E_i}{\hbar}t'} \langle \psi_n | \hat{V}^S(t') | \psi_i(t_0) \rangle dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'} \langle \psi_n | \hat{V}^S(t') | \psi_i(t_0) \rangle dt' \end{aligned}$$

3. Wenden wir Störungstheorie 2. Ordnung an.

$$\begin{aligned} c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} e^{i\omega_{nm}t'} e^{i\omega_{mi}t''} \\ &\quad \langle \psi_n | \hat{V}^S(t') | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \hat{V}^S(t'') | \psi_i(t_0) \rangle dt'' dt' \end{aligned}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit für  $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$  ist durch

$$P(i \rightarrow n) = |c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots|^2$$

gegeben.

### Beispiel einer konstanten Störung

Wir berechnen nun für eine konstante Störung die Übergangswahrscheinlichkeit mit Hilfe der Störungsrechnung 1. Ordnung.

$$\hat{V}^S(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_0 = 0 \\ \hat{V} & \text{für } t \geq t_0 \end{cases}$$

Wir erhalten:

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} \\ c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'} \langle \psi_n | \hat{V}^S(t') | \psi_i(t_0) \rangle dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle \frac{1}{i\omega_{ni}} (e^{i\omega_{ni}t} - 1) \\ &= \frac{1}{E_n - E_i} \langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle (1 - e^{i\omega_{ni}t}) \end{aligned}$$

Die „reduzierte“ Übergangswahrscheinlichkeit berechnet sich so:

$$\begin{aligned} |c_n^{(1)}(t)|^2 &= \frac{|\langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) (1 - e^{-i\omega_{ni}t}) \\ &= \frac{|\langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} (1 - e^{i\omega_{ni}t} - e^{-i\omega_{ni}t} + 1) \\ &= \frac{|\langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} (2 - 2 \cos(\omega_{ni}t)) \\ &= \frac{|\langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} 4 \sin^2 \left( \frac{\omega_{ni}t}{2} \right) \end{aligned}$$

Die Endzustände befinden sich in der Nähe des Anfangszustandes, da die Störung klein sein soll ( $E_n \simeq E_i$ ). Daher kann man von einem (Beinah-)Kontinuum sprechen. Experimentell können wir nicht erwarten, daß wir einen ganz bestimmten Endzustand ansprechen. Wir müssen also die Übergangswahrscheinlichkeit für alle Endzustände summieren<sup>20</sup>.

$$\sum_n |c_n|^2 \quad \text{oder} \quad \int \varrho(E_n) |c_n(t)|^2 dE_n$$

Wobei  $\varrho(E_n) dE_n$  die Dichte der Endzustände im Intervall  $(E, E + dE)$  ist. Mit der Gleichung für  $|c_n^{(1)}(t)|^2$  erhalten wir:

$$\sum_n |c_n^{(1)}(t)|^2 \simeq \int \varrho(E_n) \frac{|\langle \psi_n | \hat{V}^S(t) | \psi_i(t_0) \rangle|^2}{|E_n - E_i|^2} 4 \sin^2 \left( \frac{\omega_{ni}t}{2} \right) dE_n.$$

Betrachten wir nun den zeitabhängigen Teil  $\frac{\sin^2(\frac{\omega_{ni}t}{2})}{|E_n - E_i|^2}$ . Für große Zeiten  $\lim_{t \rightarrow \infty}$  gibt es keine Einschaltphänomene.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \left( \frac{\omega_{ni}t}{2} \right)}{|E_n - E_i|^2} = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_n - E_i) \quad \text{mit } E_n \simeq E_i$$

Damit ergibt sich

$$\sum_n |c_n^{(1)}(t)|^2 \simeq \frac{2\pi t}{\hbar} \varrho(E_n) |\langle \psi_n | \hat{V}^S | \psi_i \rangle|^2$$

Die Störung geht für große Zeiten linear mit der Zeit in die Übergangswahrscheinlichkeit ein.<sup>21</sup>

### Fermis goldene Regel

Wir haben nun die Gesamtübergangswahrscheinlichkeit  $\sum_n |c_n^{(1)}(t)|^2$  berechnet. Üblicherweise interessiert aber die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit:

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{d}{dt} \left( \sum_n |c_n^{(1)}(t)|^2 \right).$$

Wir erhalten also:

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_n | \hat{V}^S | \psi_i \rangle|^2 \varrho(E_n), \quad \text{mit } E_n \simeq E_i$$

Diese Formel wird *Fermi's Goldene Regel* genannt.

Anders formuliert lautet sie auch:

$$W_{i \rightarrow n} = \sum_{\text{Zustände mit } E_n} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_n | \hat{V}^S | \psi_i \rangle|^2.$$

<sup>20</sup>Beziehungsweise integrieren.

<sup>21</sup>Die Energie  $E_i$  beinhaltet nicht nur die Energie des Grundzustandes, sondern auch des elektromagnetischen Feldes, also des Gesamtsystems.  $E_i = E_{\text{Grundzustand}} + E_{\text{Feld}}$ .

Diese Formel ist von großer praktischer Bedeutung. Fermis Goldene Regel wird als vollständig gültig angesehen; sie stammt aber nur aus erster Ordnung Störungstheorie. Die Auswahlregeln in der Experimental-Physik basieren auf dieser Regel. In der Störungstheorie höherer Ordnung können diese Übergänge aber erlaubt sein.

**Beispiel.** Wasserstoffatom:

Abbildung 6.4: Termschema für das Wasserstoffatom

zweifach entartet

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{|c_n|^2}{t}$$

### Beispiel einer oszillierenden Störung

Wir betrachten die oszillierende Störung

$$\hat{V}(t) = \tilde{V} e^{i\omega t} + \tilde{V}^\dagger e^{-i\omega t}.$$

Dann berechnet sich

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left( \langle \psi_n | \tilde{V} | \psi_i \rangle e^{i\omega t'} + \langle \psi_n | \tilde{V}^\dagger | \psi_i \rangle e^{-i\omega t'} \right) e^{-i\omega_{ni} t'} dt' \\ &= \frac{1}{\hbar} \left( 1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t} \frac{\langle \psi_n | \tilde{V} | \psi_i \rangle}{\omega + \omega_{ni}} + 1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t} \frac{\langle \psi_n | \tilde{V}^\dagger | \psi_i \rangle}{-\omega + \omega_{ni}} \right) \end{aligned}$$

so, mit  $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$ . Die Gleichungen sind denen vom Fall mit konstantem Potential sehr ähnlich. Es muß nur  $\omega_{ni}$  durch  $\omega_{ni} \pm \omega$  ersetzt werden.

Für  $t \rightarrow \infty$  muß

$$\begin{aligned} \omega_{ni} + \omega &\simeq 0 \quad \text{oder} \quad E_n \simeq E_i - \hbar\omega \\ \omega_{ni} - \omega &\simeq 0 \quad \text{oder} \quad E_n \simeq E_i + \hbar\omega \end{aligned}$$

für  $|c_n^{(1)}(t)|^2$  sein.

Es gibt zwei verschiedene Übergangsmechanismen:

#### 1. Induzierte Emission:

Der Anfangszustand  $|\psi_a\rangle$  setzt sich zusammen aus dem (angeregten) Zustand  $|\psi_i\rangle$  des Atoms und dem unangeregten Zustand  $|\psi_0\rangle$  des Feldes und geht über in  $|\psi_n\rangle |\hbar\omega\rangle$ , wobei  $|\hbar\omega\rangle$  das Photon ist.

Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_n | \tilde{V} | \psi_i \rangle|^2$$

mit  $E_n = E_i - \hbar\omega$ .

## 2. Spontane Emission:

Der Anfangszustand  $|\psi_b\rangle = |\psi_i\rangle |\hbar\omega\rangle$  geht über in  $|\psi_n\rangle |0\rangle$ . Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_n | \tilde{V}^\dagger | \psi_i \rangle|^2$$

mit  $E_n = E_i + \hbar\omega$ .

Beachte, daß der Operator der Störung selbstadjungiert ist. Daher sind die Raten für Absorbtion und Emission gleich wahrscheinlich.

Anwendung: LASER (stimulierte Emission)



## 6.5 Green'sche Funktion

Zunächst ist dieses formale Kapitel nur eine Wiederholung der Quantenmechanik I mit Einführung neuer Begriffe. Im Weiteren werden wir aber sehen, daß man mit diesen Begriffen spätere Problemstellungen einfacher angehen kann.

### 6.5.1 Propagator und Green'sche Funktion

Wir wollen die Zeitentwicklung des Zustandes  $|\psi(t)\rangle$  in Ortsdarstellung mit Hilfe der Dirac'schen Notation schreiben:<sup>22</sup>

$$\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle := \psi(\vec{x}, t).$$

Mit der Vollständigkeitsrelation  $\hat{\mathbb{1}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}'| d\vec{x}'$  ergibt sich:

$$\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \psi(t_0) \rangle d\vec{x}'.$$

Das Integral kann kompakter geschrieben werden:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) \psi(\vec{x}', t_0) d\vec{x}'$$

Damit haben wir die Green'sche Funktion definiert:

**Definition.** *Green'sche Funktion:*

$$\boxed{G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) := \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}' \rangle}$$

Die Green'sche Funktion stellt eine Bezugsfunktion dar, um von  $\psi(\vec{x}', t_0)$  nach  $\psi(\vec{x}, t)$  zu kommen.

Abbildung 6.5:  $\psi(\vec{x}'(t_0))$  zu  $\psi(\vec{x}(t))$

Um für die Ortsabhängigkeit zu einer beliebigen Zeit  $t$  Aussagen zu erhalten, integriert man die Wellenfunktion über alle  $x'$ . Damit erhält man Wichtungen an der Stelle  $x$ . Das Ergebnis gilt dann für alle  $x$ .

In der Green'schen Funktion sind also Informationen über die zeitliche und räumliche Entwicklung des Zustandes enthalten.

Befindet sich das Teilchen z.B. bei  $t_0$  an  $\vec{x}_0$ , so ergibt  $G(\vec{x}, t, \vec{x}_0, t_0)$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude das Teilchen zur der Zeit  $t$  an der Stelle  $\vec{x}$  zu finden.

Anders:

Die Green'sche Funktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß sich ein Teilchen vom Punkt  $(\vec{x}_0, t_0)$  in der Raum-Zeit zum Punkt  $(\vec{x}, t)$  bewegt. Dies stellt einen Propagator dar. Die Green'sche Funktion wird daher auch Propagator des Teilchens genannt.

<sup>22</sup>Vergleiche [Cohen-1, S. 310-314] und [Sakurai-1, S. 109-123].

Schauen wir uns noch einmal die Definition von  $G$  an:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}' \rangle \\ &= \langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle \end{aligned}$$

Letzteres ist der Überlapp zwischen den Zuständen und stellt eine Übergangswahrscheinlichkeit dar.

### Vergleich mit der Elektrodynamik

Warum heißt  $G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0)$  Green'sche Funktion?

In der Elektrodynamik soll das elektrostatische Potential  $\phi(\vec{x})$  aus der Ladungsverteilung  $\rho(\vec{x})$  berechnet werden.

$$\phi(\vec{x}) = \int G(x, x') \rho(x') d^3 x'$$

Wenn  $G$  bekannt ist, kann man für jede Ladungsverteilung das Potential berechnen. Im freien Fall (ohne Randbedingung) bekommt man die freie Green'sche Funktion

$$G = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|}.$$

Mit Randbedingung ändert sich nur die Green'sche Funktion; das Integral bleibt formelmäßig erhalten.

Die Struktur der Funktionen ist ähnlich. In der Quantenmechanik gibt es zusätzlich die Zeitabhängigkeit. Die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}_0, t_0)$  ist die Ursache für  $\psi(\vec{x}, t)$ . Daher betrachten wir nur Zeitentwicklungen „in Zukunftsrichtung“, was die kausale Green'sche Funktion ist:

$$G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) \text{ mit } t > t_0.$$

Mit der Stufenfunktion:

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

geschrieben:

$$G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) \Theta(t - t_0).$$

### 6.5.2 Eigenschaften der Green'schen Funktion als Propagator

1. **Satz.** Sei  $\vec{x}_0, t_0$  fest, dann ist die Green'sche Funktion eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung.<sup>23</sup>

---

<sup>23</sup> $\psi(t), \hat{H}(\mathcal{L})$ .

*Beweis.*

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} G(\vec{x}, t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x_0 \rangle \\
 &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} | x_0 \rangle \\
 &= \langle x | \hat{H} \hat{U}(t, t_0) | x_0 \rangle \\
 &= \hat{H} G(\vec{x}, t)
 \end{aligned}$$

□

Dies ist eine wichtige Eigenschaft. Ansonsten könnte uns die Green'sche Funktion nicht nützlich sein.

2. Für einen infinitesimalen Zeitschritt, also dem Grenzübergang  $t \rightarrow t_0$ , ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \lim_{t \rightarrow t_0} G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) &= \delta(\vec{x} - \vec{x}') \\
 \lim_{t \rightarrow t_0} \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}' \rangle &= \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle
 \end{aligned}$$

Mit der Definition von  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}$  wird der linke Term nach dem Grenzübergang eins.

### 6.5.3 Lehmandarstellung der kausalen Green'schen Funktion

#### Stufenfunktion

Zuerst befassen wir uns mit einer Darstellung der Stufenfunktion  $\Theta$ , um diese in einer Rechnung zu benutzen.

**Satz.** Die Stufenfunktion läßt sich folgendermaßen schreiben:

$$\Theta(t) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} \frac{1}{2\pi i} d\omega.$$

*Beweis.*

1.  $t > 0$

Abbildung 6.6: Integration um Polstelle

Es existiert eine Polstelle bei  $\omega = i\eta$ , daher benutzen wir den Residuensatz:

$$\begin{aligned}
 I &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} \frac{1}{2\pi i} d\omega \\
 &= - \int_{\gamma} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} \frac{1}{2\pi i} d\omega
 \end{aligned}$$

mit  $\omega = i\alpha$ <sup>24</sup>

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2\pi i}(2\pi i) \\ &= 1 \end{aligned}$$

2.  $t < 0$

Dies bedeutet, daß der Weg in der oberen Halbebene geschlossen wird. Da kein Pol eingeschlossen ist gilt:

$$I = 0$$

Damit haben wir die komplexe Darstellung der Stufenfunktion bewiesen.  $\square$

Wir formen nun die Green'sche Funktion um und erhalten sie in der Energiedarstellung:

Sei  $\hat{H}$  zeitunabhängig. Wählen wir<sup>25</sup>  $t_0 = 0$ , dann ist  $\hat{U}(t, 0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ .

$$G(\vec{x}, t, \vec{x}', 0)\Theta(t) = \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | x' \rangle \Theta(t)$$

Zwei Einsen einfügen:

$$\begin{aligned} &= \sum_{nn'} \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | \psi_n' \rangle \langle \psi_n' | x' \rangle \Theta(t) \\ &= \sum_{nn'} \langle x | \psi_n \rangle \delta_{nn'} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \langle \psi_n' | x' \rangle \Theta(t) \end{aligned}$$

$\psi_n$  und  $\psi_n'$  sind orthogonal zueinander:

$$= \sum_n \langle x | \psi_n \rangle e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \langle \psi_n | x' \rangle \Theta(t)$$

$$G(\vec{x}, t, \vec{x}', 0)\Theta(t) = \sum_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x' \rangle (-) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i(\omega + \frac{E_n}{\hbar})t}}{\omega + i\eta} d\omega$$

Mit  $\omega' = \omega + \frac{E_n}{\hbar}$

$$= \sum_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x' \rangle (-) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega' t}}{\omega' - \frac{E_n}{\hbar} + i\eta} d\omega'$$

Mit  $\omega' \rightarrow \omega$

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x' \rangle}{\omega - \frac{E_n}{\hbar} + i\eta} e^{-i\omega t} d\omega \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \check{G}(\vec{x}, \vec{x}', 0) e^{-i\omega t} d\omega \end{aligned}$$

<sup>24</sup>Aus  $\omega = i\alpha$  folgt  $e^{-i\omega t} = e^{-i(-i\alpha)t} = e^{-\alpha t}$ . Für  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} (\alpha \in \mathbb{R}^+)$  verschwindet dieser Term. Es bleibt das Residuum von  $i\eta = 2\pi i$ .

<sup>25</sup>Das Experiment ist dasselbe, egal ob es jetzt oder nächste Woche ausgeführt wird. Es gibt keine absolute Zeit, die Heute von Morgen unterscheidet, nur die Zeitdifferenz ist relevant.

Die letzte Gleichung stellt eine Fouriertransformation dar. Die Fouriertransformierte einer Green'schen Funktion liefert unsere „eigentliche“ Green'sche Funktion. Häufig interessiert nämlich die frequenzabhängige<sup>26</sup> Green'sche Funktion  $\tilde{G}$ .

$$\tilde{G}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \sum_n \frac{\langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x' \rangle}{\omega - \frac{E_n}{\hbar} + i\eta}$$

$\tilde{G}$  hat Polstellen für alle  $\omega$ , die  $\frac{E_n}{\hbar}$  entsprechen, also an den Energieeigenwerten.

**Einschub.**  $\langle x | \psi_n \rangle$  ist eine formale Schreibweise für den Zustand  $\psi_n(x)$  in Ortsdarstellung. Die  $\psi_n$ 's sind die Energieeigenzustände des Hamilton-Operators.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \psi_n(x') dx' = \psi_n(x)$$

Beachte, daß die  $\delta$ -Funktion nicht dimensionslos ist:  $\frac{1}{\text{Dimension des Argumentes}}$ .

$$\hat{\mathbb{1}} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

Im Allgemeinen wird die  $\hat{\mathbb{1}}$  mit Summenzeichen geschrieben (Vollständigkeitsrelation), kann aber durchaus auch für kontinuierliche Zustände gemeint sein.<sup>27</sup>

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| dE_n$$

Ende des Einschubs.

Bei diskreten Energien gelten die Orthogonalitätsbeziehungen:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_m \rangle &= \delta_{nm} \\ \sum_{nm} \langle \psi_n | \psi_m \rangle &= \sum_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

Bei kontinuierlichem Spektrum bekommen die Orthogonalitätsbeziehungen die Form:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_m \rangle &= \delta(E_n - E_m) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(E_n - E_m) dE_n dE_m &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE_n \end{aligned}$$

In der Energiedarstellung der Green'schen Funktion hat man mittels der Polstellen sofort Zugriff auf die Energieeigenwerte.

<sup>26</sup>Dies ist wegen  $\hbar\omega = E$  gleichbedeutend mit der Energie.

<sup>27</sup>Die  $\hat{\mathbb{1}}$  mit Summenzeichen geschrieben geht nur für diskrete Energien.

### Reihenentwicklung der Green'schen Funktion mittels Lehmandarstellung

Lehmandarstellung mit  $t - t_0 > 0$ .

Wir betrachten diese alternative Form der Darstellung, nämlich die Energiedarstellung der Green'schen Funktion  $\tilde{G}(\omega)$ . Wodurch sie uns nützlich sein wird, wird sich später noch zeigen. Sie wird zum Beispiel beim Confinement in der QCD angewandt.<sup>28</sup>

$\hat{U}_0$  ist der Zeitentwicklungsoperator des ungestörten Hamilton-Operators  $\hat{H}_0$ .

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \\ \hat{U}_0 &= e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}(t-t_0)}\end{aligned}$$

$G$  ist das Matrixelement des Zeitentwicklungsoperators:

$$G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) = \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x' \rangle$$

$\hat{U}_0$  wirkt nur auf  $\hat{H}_0$ .

Wir wählen den Zeitentwicklungsoperator in der Wechselwirkungsdarstellung, da er sich dort schön als Reihenentwicklung nach Potenzen des Störpotentials  $\hat{V}$  darstellen läßt.<sup>29</sup>

$$\begin{aligned}G(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) &= \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x' \rangle \\ &= \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{U}^I(t, t_0) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | x' \rangle \\ &= \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \\ &\quad \left( \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}^I(t') dt' + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \hat{V}(t') \hat{V}(t'') dt'' dt' \right) \\ &\quad e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | x' \rangle\end{aligned}$$

### Interpretation als Störungsreihe der Green'schen Funktion

1. 0. Ordnung:

$$G^{(0)}(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) = \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}(t-t_0)} | x' \rangle$$

stellt die Green'sche Funktion ohne Störung dar.

2. 1. Ordnung:

$$\begin{aligned}G^{(1)}(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}^I(t, t_0) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | x' \rangle dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t'} \hat{V}^S(t, t_0) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t'} e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0} | x' \rangle dt'\end{aligned}$$

<sup>28</sup>Kann ein einzelnes Quark propagieren oder nur drei zusammen? Dies führt zur Gitterrechnung.

<sup>29</sup>Entwicklung nach zeitabhängiger Störungstheorie.

Zwei Einsen einfügen

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \hat{U}_0(t, t') | y \rangle \langle y | \hat{V}^S(t, t_0) | z \rangle \langle z | \hat{U}_0(t', t_0) | x' \rangle dz dy dt'$$

Mit  $\hat{V} = \hat{V}(\vec{y})\delta(\vec{y} - \vec{z})$ <sup>30</sup>

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} G(\vec{x}, t, \vec{y}, t') \hat{V}(\vec{x}) G(\vec{y}, t', \vec{x}', t_0) dy dt'$$

3. 2. Ordnung:

$$G^{(2)} = -\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{t_0}^{t'} \int_{-\infty}^{+\infty} G^{(0)}(\vec{x}, t, \vec{y}, t') \hat{V}(\vec{y}) G^{(0)}(t', \vec{y}, t'', \vec{z}) \hat{V}(\vec{z}) G(\vec{z}, t'', x_0, t_0) dz dt'' dy dt'$$

#### 6.5.4 Beschreibung unserer Vorgehensweise durch Feynmandiagramme

Beschreibung eines Feynmandiagramms (leider fehlt das Bild dazu):

- vollständiges  $G$  bei eingeschalteter Störung
- Propagation ohne Potential zu spüren zu einem Zwischenzustand
- Teilchen spürt instantan ein Potential
- und fliegt danach weiter, als ob es kein Kraftfeld mehr spürt. Zwischen den Zwischenzuständen propagiert das Teilchen ungestört (Insgesamt gibt es nur „Störstellen“.)

Normalerweise schreibt man Feynmandiagramme nicht nur für ein Teilchen auf, sondern nur für Wechselwirkungen zwischen mehreren Teilchen.

Zusatzbemerkung:

$$\hat{V}(\vec{y})G^{(0)}(t', \vec{y}, t'', \vec{z})\hat{V}(\vec{z})$$

Man kann die Diagramme in die Sprechweise der Green'schen Funktion mit Lehmannarstellung für  $G_0$  zurückübersetzen:

$$\hat{V}(\vec{y})\hat{V}(\vec{z})\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega(t'-t'')} \sum_n \frac{\langle y | \psi_n \rangle \langle \psi_n | z \rangle}{\omega - \frac{E_n}{\hbar} + i\eta} d\omega$$

Auch in der zeitunabhängigen Störungstheorie 2. Ordnung haben wir einen ähnlichen Term mit Energienenner gesehen.

<sup>30</sup>Dies bedeutet eine Reduktion auf ein „einfaches“ lokales Potential. Ein nicht lokales Potential ist nicht mit der Relativitätstheorie verträglich, da es ein Teilchen instantan von  $\vec{z}$  nach  $\vec{y}$  bringen würde.

Abbildung 6.7: Green'sche Funktion durch Addition der verschiedenen Ordnungen mit Feynmandiagrammen

Abbildung 6.8: Feynmandiagramm



## 6.6 Formulierung der Quantenmechanik über Wegintegrale

### 6.6.1 Einleitung

Zur Veranschaulichung und Lösung vieler Probleme ist es elegant Wegintegrale<sup>31</sup> in der Quantenmechanik zu benutzen. Die Feynman'sche Wegintegralbeschreibung ist nur ein anderer Zugang zur Definition der Grundbegriffe der Quantenmechanik, wie Hamilton zur Newton'schen Mechanik.

### 6.6.2 Propagator

Der Propagator  $G(x_N, t_N, x_1, t_1)$  gibt die Wahrscheinlichkeit (Wahrscheinlichkeitsamplitude) an, daß von einem Zustand  $t_1 x_1$  nach einem Zustand  $t_N x_N$  gewechselt wird. Das Matrixelement bestimmt sich zu:

$$\begin{aligned} G(x_N, t_N, x_1, t_1) &= \langle x_N | \hat{U}(t_N, t_1) | x_1 \rangle \\ &= \langle x_N t_N | x_1 t_1 \rangle. \end{aligned}$$

Faktorisieren<sup>32</sup> wir den Zeitentwicklungsoperator:  $\hat{U}(t_N, t_1) = \hat{U}(t_N, t') \hat{U}(t', t_1)$ . Dies geschieht dann auch für die Green'sche Funktion:

$$G(x_N, t_N, x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_N | \hat{U}(t_N, t') | x' \rangle \langle x' | \hat{U}(t', t_1) | x_1 \rangle dx'$$

Es gilt also:

$$\langle x_N t_N | x_1 t_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_N t_N | x' t' \rangle \langle x' t' | x_1 t_1 \rangle dx'$$

Dies gilt für jedes  $t'$  mit  $t_N \geq t' \geq t_1$ . Dieses Faktorisieren läßt sich auch in  $N$  Schritten machen. Mit  $N \rightarrow \infty$  wird der einzelne Zeitschritt  $\Delta t$  infinitesimal.

Sei  $t_j = t_1 + (j-1)\Delta t$  mit  $\Delta t = \frac{t_N - t_1}{N-1}$ , dann wird die Wahrscheinlichkeitsamplitude durch  $N-1$  Integrale berechnet, wobei man also über alle Zwischenschritte der Koordinaten integriert:

$$\begin{aligned} \langle x_N t_N | x_1 t_1 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle \cdots \langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle dx_{N-1} \cdots dx_1 \\ &= \sum_{\text{alle Wege}} \langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle \cdots \langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle \end{aligned}$$

Die Amplitude ist zerlegt in alle möglichen Amplituden, die von 1 nach  $N$  zugelassen sind.

<sup>31</sup>Vergleiche mit [Cohen-1, S. 315-317].

<sup>32</sup>Hintereinanderausführung der „Teil“-Zeitentwicklungsoperatoren

Abbildung 6.9: Wegintegrale in Teilschritten (klassisch und quantenmechanisch)

### 6.6.3 Vergleich mit der Klassischen Mechanik

Dort gibt es einen einzigen Weg:

**Beispiel.**  $(x_1, t_1) = (h, 0)$   $h$  ist die Höhe

$$V = mgx$$

daraus folgt

$$x = -\frac{1}{2}gt^2$$

$x_i$  und  $t_i$  sind genau definiert. Den Weg, den das Teilchen zurücklegt, ist durch eine Parabel bestimmt. Dieser Weg hat die Wahrscheinlichkeit eins!

In der Quantenmechanik gibt es auch andere Wege mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit, so daß das Teilchen auch neben dem klassischen Ziel auftreffen kann, wobei für das klassische Ziel jedoch die Wahrscheinlichkeit am größten ist.

**Hamiltonprinzip.** In der Klassischen Mechanik ist der Weg durch das Hamiltonprinzip bestimmt:

$$\delta \int_{t_1}^{t_N} L(x, \dot{x}, t) dt = 0$$

Die Wirkung wird also minimiert.

### 6.6.4 Übertragung in die Quantenmechanik

**Behauptung.** Für die Wahrscheinlichkeit eines infinitesimalen Wegelementes gilt:

$$\begin{aligned} \langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle &= \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{i\frac{1}{\hbar} \int_{t_{N-1}}^{t_N} L(x, \dot{x}, t) dt} \\ &= \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{i\frac{1}{\hbar} S(n, n-1)}, \end{aligned}$$

wobei  $S$  die Wirkung von  $(n-1)$  nach  $n$  ist und  $\frac{1}{\omega(\Delta t)}$  ein Proportionalitätsfaktor.

Wir möchten diese Proportionalität plausibel machen.

$$\langle x_N t_N | x_1 t_1 \rangle \sim \sum_{\text{alle Wege}} \prod_{n=2}^N e^{i\frac{1}{\hbar} S(n, n-1)}$$

mit der Rechenregel siehe Fußnote<sup>33</sup>

$$\begin{aligned} &= \sum_{\text{alle Wege}} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S(n, n-1)} \\ &= \sum_{\text{alle Wege}} e^{\frac{i}{\hbar} S(N, 1)} \end{aligned}$$

Für viele Wege wird die Wirkung nicht Null sein, jedoch werden sich die Wirkungen vieler Wege bei der Summation gegenseitig wegheben. Nur in der Nähe des klassischen Weges unterscheiden sich die Integrale lediglich schwach und liegen somit nahe beim Minimum.

*Beweis.* Wir betrachten nur ein eindimensionales Problem.

### 1. Bestimmung des Proportionalitätsfaktors $\frac{1}{\omega(\Delta t)}$

Es soll also

$$\langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle = \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(n, n-1)}$$

gelten. Die gesamte Dynamik steckt in der Exponentialfunktion, der Vorfaktor enthält nur Information über die Größe des Zeitintervalls.  $\omega(\Delta t)$  hängt nur von  $\Delta t$  ab und nicht von  $S(n, n-1)$ .

Aus

$$S(n, n-1) = \int_{t_{N-1}}^{t_N} \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) dt$$

mit

$$\dot{x} = \frac{x_N - x_{N-1}}{\Delta t}$$

ergibt sich

$$S(n, n-1) = \Delta t \left( \frac{m}{2} \left( \frac{x_N - x_{N-1}}{\Delta t} \right)^2 - V \left( \frac{x_N + x_{N-1}}{2} \right) \right)$$

für  $\Delta t$  klein.

Betrachten wir  $V = 0$ , so erhalten wir einerseits:

$$\begin{aligned} \langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle &= \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(n, n-1)} \\ &= \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\Delta t}} \end{aligned}$$

---

<sup>33</sup>  $e^x e^y = e^{x+y}$  beziehungsweise  $\prod_{n=1}^N e_n^S = e^{\sum_{n=1}^N S_n}$ .

mit  $\xi = x_N - x_{N-1}$ :

$$= \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{i \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}}$$

und andererseits:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle x_N t + \Delta t | x_{N-1} t \rangle &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle x_N | \hat{U}(t + \Delta t, t) | x_{N-1} \rangle \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle x_N | \hat{\mathbf{1}} | x_{N-1} \rangle \\ &= \delta_{x_N - x_{N-1}}. \end{aligned}$$

Integrieren wir nun beide Ergebnisse über  $d\xi$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega(\Delta t)} e^{i \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\xi) d\xi$$

mit [Bronstein, S. 66] Integral Nummer 3 (Integral über die komplexwertige Gaußfunktion), so erhalten wir:

$$\frac{1}{\omega(\Delta t)} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \Delta t}{m}} = 1.$$

Daraus folgt

$$\frac{1}{\omega(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}$$

$\omega(\Delta t)$  ist ein Normierungsfaktor.

## 2. Berechnung des Wegintegrals

$$\begin{aligned} \langle x_N t_N | x_1 t_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi \hbar \Delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \\ &\dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{N=2}^N e^{i S(n, n-1)} dx_{N-1} \dots dx_2 \end{aligned}$$

Wir betrachten nur das letzte Wegstück:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_N t_N | x_{N-1} t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} t_{N-1} | x_1 t_1 \rangle dx_{N-1} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar \Delta t}} e^{i \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t} - i V \Delta t} \left( \frac{m}{2} \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{(\Delta t)^2} - V \right) \\ &\quad \langle x_{N-1} t_{N-1} | x_1 t_1 \rangle dx_{N-1} \end{aligned}$$

Nach Variablenumbenennung  $x_N = x$ ,  $t_N = t + \Delta t$ ,  $x_N - x_{N-1} = \xi$ :

$$\langle x t + \Delta t | x_1 t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t} - i V \Delta t} \langle x - \xi t | x_1 t_1 \rangle d\xi$$

Wir entwickeln die linke Seite nach Taylor:

$$\langle xt + \Delta t | x_1 t_1 \rangle = \langle xt | x_1 t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial t}{\partial t} \langle xt | x_1 t_1 \rangle + \dots$$

Und nun die rechte Seite:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} \left( 1 - iV \frac{\Delta t}{\hbar} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial x} \langle xt | x_1 t_1 \rangle (-\xi) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \xi^2 + \dots \right) d\xi \end{aligned}$$

Der ungerade Term fällt wegen der Integration weg. Der quadratische Term ist linear in der Zeit; daher nehmen wir ihn noch mit. Wir betrachten den Term ohne infinitesimale Größen von der linken Seite:

$$\langle xt | x_1 t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} d\xi \langle xt | x_1 t_1 \rangle$$

Das heißt:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} d\xi = 1$$

Es bleibt also von der Gleichung folgendes übrig: Der zweite Term der linken Seite und die rechte Seite:

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{\partial t}{\partial t} \langle xt | x_1 t_1 \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \xi^2 d\xi \\ &+ \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} \left( -iV \frac{\Delta t}{\hbar} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \right) d\xi \end{aligned}$$

Mit

$$\frac{i\hbar\Delta t}{m} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{\xi^2}{\Delta t}} \xi^2 d\xi$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle xt | x_1 t_1 \rangle &= \frac{i\hbar\Delta t}{m} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle xt | x_1 t_1 \rangle - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} \langle xt | x_1 t_1 \rangle &= \frac{i\hbar}{m} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle xt | x_1 t_1 \rangle - \frac{iV}{\hbar} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle xt | x_1 t_1 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle xt | x_1 t_1 \rangle + \frac{V}{\hbar} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \\ &= \hat{H} \langle xt | x_1 t_1 \rangle \end{aligned}$$

Dies ist die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für die Green'sche Funktion (die rechte Seite ist gerade der Hamilton-Operator). Dies hat sich aus der Feynman'schen Beschreibung ergeben. Die Forderung, daß die Übergangsamplituden aus dem Integral der Wegintegrale gegeben ist, ist äquivalent mit der Schrödinger-Gleichung!  $\square$

Man muß einen „Schlauch“ um den klassischen Weg betrachten. Dies führt zu einem neuen Verständnis der quantenmechanischen Unschärfe. Lösung quantenmechanischer Probleme am Computer sind durch Diskretisierung von Zeit und Ort möglich: Gitterrechnung.

# Kapitel 7

## Streutheorie

### 7.1 Problemstellung

In diesem Abschnitt möchten wir die Ablenkung von Teilchen an einem „Streuzentrum“ als elastischen Stoßprozess beschreiben.<sup>1</sup> Das Streuzentrum selbst soll hierbei nur durch ein einfaches Zentralpotential<sup>2</sup> beschrieben werden. Des Weiteren soll das Zentralpotential (das Target) ortsfest sein, kinematische Betrachtungen müssen so nur für das Projektil gemacht werden.

#### 7.1.1 Grundlagen

Abbildung 7.1: Schematischer Aufbau eines Streuexperiments.

Das zu streuende Teilchen soll das Potential des Streuzentrums nur kurzfristig spüren, dazu setzen wir die Potentialreichweite auf eine endliche Größe:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V(r), & \text{für } r \leq r_0; \\ 0, & \text{für } r > r_0. \end{cases}$$

Der Streuwinkel sei  $\vartheta$ ; der Raumwinkelbereich, bzw. die Ringzone die durch  $\vartheta + d\vartheta$  erfasst wird, sei  $d\Omega$ . Da ein Zentralpotential rotationssymmetrisch zur Strahlachse (sei dies die  $z$ -Achse) ist, spielt der Winkel  $\varphi$  keine Rolle.

Wir betrachten nur die elastische Streuung, so dass die kinetischen Energien von einfallendem Teilchen  $E_i$  und auslaufendem Teilchen  $E_f$  außerhalb des Wirkungsbereichs unseres Potentials gleich sind; auch der Impulsbetrag des Geschosses bleibt bei elastischer Streuung (für ein ortsfestes Target) erhalten:

$$E_i = \frac{(\hbar\vec{k}_i)^2}{2m} \stackrel{!}{=} \frac{(\hbar\vec{k}_f)^2}{2m} = E_f$$

---

<sup>1</sup>Wir suchen im Folgenden nur die allgemeine Form der Lösung für das Streuproblem. Z.B. [Fließbach, Seite 201–203] behandelt (nach ähnlicher Herleitung) konkrete Beispiele.

<sup>2</sup>Zum Begriff des Potentials siehe Fußnote 1 auf Seite 250.

Was während des Streuprozesses passiert, interessiert uns bei dieser Herangehensweise nicht. Wir möchten nur die Ergebnisse des Wechselwirkungsprozesses betrachten.

Entgegen der Diskretisierung der Energie in gebundenen Systemen haben wir hier durch die feste Energie vor und nach dem Stoß, asymptotische Randbedingungen vorliegen. Wir betrachten das Teilchen vor dem Stoß als einlaufende Welle  $|\phi_i\rangle$ , entsprechend hinterher als auslaufende Welle  $|\phi_f\rangle$ . Ziel ist es nun, die Schrödinger-Gleichung zu finden, die uns bei gegebenem  $|\phi_i\rangle$  ein  $|\phi_f\rangle$  liefert, das trotz der Idealisierungen die experimentellen Ergebnisse möglichst gut reproduziert.

Im Experiment messen wir die Anzahl der Teilchen  $a(r, \vartheta, \varphi)$ , die im Detektor pro Zeit auftreffen. Übersetzt in die quantenmechanische Sprache suchen wir also die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen in einen bestimmten Raumwinkelbereich hineingestreut wird.<sup>3</sup>

Bei einem rotationssymmetrischen Potential ist  $a = a(r, \vartheta)$  unabhängig von  $\varphi$ . Wir stellen unseren Detektor außerhalb der Reichweite  $r_0$  des Potentials auf,  $r_{\text{det}} > r_0$ ; somit können wir die Teilchenzahl pro Zeit schreiben als  $a = a(\vartheta) r_{\text{det}}^2 d\Omega$ . Damit ist der im Folgenden zu berechnende Teil  $a(\vartheta)$  von den Abmessungen des experimentellen Aufbaus getrennt.

### 7.1.2 Wirkungsquerschnitt

Wahrscheinlichkeiten sind Verhältnisgrößen; zur Anzahl  $a$  der detektierten Teilchen pro Zeiteinheit benötigen wir noch die Zahl der zur Verfügung stehenden Teilchen des Primärstrahls, um eine Wahrscheinlichkeit zu erhalten. Sei  $b$  die Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeiteinheit und (Strahl-)Fläche.

Damit können wir nun eine Größe definieren, die uns sagt, welcher Anteil der Teilchen nahe genug an das Target herankommt, um, in eine bestimmte Richtung  $\vartheta$ , gestreut zu werden. Mit obigen Definitionen von  $a$  und  $b$  ist die Wahrscheinlichkeit der Streuung in einen infinitesimalen Raumwinkelbereich durch folgende Beziehung gegeben:

$$d\sigma(\vartheta) = \frac{a(\vartheta)}{b} r^2 d\Omega$$

oder umgeformt:

**Definition (Differentieller Wirkungsquerschnitt).** *Der differentielle Wirkungsquerschnitt (oder auch differentieller Streuquerschnitt) ist definiert durch folgendes Verhältnis von aus- zu einlaufendem Teilchenstrom:*

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) := \frac{\frac{\text{Auslaufender Teilchenstrom in Richtung } \vartheta}{\text{Raumwinkel}}}{\frac{\text{Einlaufender Teilchenstrom}}{\text{(Strahl-)Fläche}}}}$$

*Er besitzt die Dimension einer Fläche.*

<sup>3</sup>In einem solchen rotationssymmetrischen Fall stellen wir uns den Detektor nicht als Punkt, sondern als Ring vor.



Drückt man den Quotienten mittels der Stromdichten<sup>4</sup> aus, so lautet er:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \frac{j^f(\vartheta) r^2}{j^i}} \quad \text{Differenzieller Wirkungsquerschnitt}$$

Summieren wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt über alle Richtungen, in die die Teilchen gestreut werden können, so erhalten wir den totalen Wirkungsquerschnitt:

**Definition (Totaler Wirkungsquerschnitt).** *Integriert man den differentiellen Wirkungsquerschnitt über alle Raumwinkel  $d\Omega$ , so erhält man den totalen Wirkungs- oder Streuquerschnitt:*

$$\boxed{\sigma_{tot} := \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega} \quad \text{Totaler Wirkungsquerschnitt}$$

*Er beschreibt die effektive Fläche, an der die Teilchen gestreut werden.*

### Interpretation der Begriffe

Betrachten wir Stöße in der Klassischen Mechanik, so arbeiten wir mit dem *Stoßparameter* „ $b$ “. Er gibt die Startringfläche an, durch die ein Teilchen fliegen muss, um, auf der klassisch zu berechnenden Trajektorie, genau in den Detektor (Raumwinkelbereich) zu treffen.

Abbildung 7.2: Stoßparameter „ $b$ “ bei klassischer Behandlung der Streuung.

Auch der Stoßparameter hat die Dimension einer Fläche. Wir schließen aus dem Vergleich:

**Satz.** *Der totale Wirkungsquerschnitt ist die Startfläche, durch die ein Projektil fliegen muss, um eine Ablenkung durch das Streuzentrum zu erfahren. Der differentiellen Wirkungsquerschnitt ist die Startfläche (Ring), durch die ein Projektil fliegen muss, damit es um einen bestimmten Winkel abgelenkt wird.*

### 7.1.3 Zeitunabhängige, asymptotische Betrachtung

Wir möchten zunächst nicht das Schicksal eines einzelnen Teilchens verfolgen, sondern nur die Statistik vieler Teilchen (einen konstanten Teilchenstrahl) betrachten. Deswegen stellen wir hier keine Zeitbetrachtungen an; uns interessiert nur der Ortswellenanteil der Lösung außerhalb des Streupotentials, also die stationäre Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. Die Abspaltung des Zeitanteils  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  ist bei dieser asymptotischen Betrachtungsweise möglich, da hier die Energie eine Konstante der Bewegung ist. Die Lösungswellenfunktion

<sup>4</sup>Nochmals zur Begriffsetablierung: Die Teilchenstromdichte ist in Worten (vom Betrag)  $\frac{\text{Teilchenanzahl}}{\text{Zeit} \cdot (\text{durchströmte}) \text{ Fläche}}$ , was dasselbe ist wie  $\frac{\text{Teilchenanzahl}}{(\text{durchströmtes}) \text{ Volumen}} \cdot \frac{(\text{durchströmter}) \text{ Weg}}{\text{Zeit}}$ , also eine Teilchendichte mal der Teilchengeschwindigkeit. Der Stromdichtevektor zeigt in die Wegrichtung der Teilchen, bzw. in die Richtung der Flächennormalen der durchströmten Fläche.

dieser Sichtweise des Streuproblems nennt man auch die *stationäre Streuwelle* oder *stationäre Streulösung*.

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung unseres zu streuenden Teilchens lautet formal:

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

### Ansatz für die einlaufende Welle

Da wir den Beobachtungsbereich außerhalb der Potentialreichweite gelegt haben, setzen wir zunächst mit einer ebenen Welle an, die die einlaufenden Teilchen genauso beschreiben kann wie die gestreuten, aber wieder freien, auslaufenden Teilchen (bis auf Vorfaktoren). Dieser Ansatz<sup>5</sup> fordert also eine asymptotische Proportionalität<sup>6</sup> der stationären Streulösung  $\psi(\vec{r})$  mit einer ebenen Welle  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  für  $|\vec{r}| > r_0$ :<sup>7</sup>

$$\phi_\infty^i = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Legen wir den einlaufenden Strahl auf die  $z$ -Achse, so gilt mit  $\vec{k} = k\vec{e}_z$  für die einlaufende Welle, außerhalb von  $r_0$ :

$$\boxed{\phi_\infty^i = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ikz}}$$

Wir berechnen mit diesem Ansatz die Stromdichte der einlaufenden Welle:

$$\begin{aligned} \vec{J}_\infty^i &= \frac{\hbar}{2im} \left( (\phi_\infty^i)^* \vec{\nabla} \phi_\infty^i - \phi_\infty^i \vec{\nabla} (\phi_\infty^i)^* \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} (2\pi)^{-3} \left( e^{-ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ ik \end{pmatrix} e^{ikz} - e^{ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -ik \end{pmatrix} e^{-ikz} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \left( ik \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + ik \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3} \vec{e}_z \end{aligned}$$

Der einlaufende Strom besitzt, gemäß unserer Festlegung, nur eine Komponente in die  $z$ -Richtung.

<sup>5</sup>Wir idealisieren hier, indem wir nur die stationäre Lösung betrachten, ebene Wellen anstatt Wellenpakete streuen und Interferenzen der (Teilchen-)Wellen untereinander ignorieren. [Messiah-1, Abschnitte 10.1.2 – 10.1.4] geht auf die Problematik dieser Vereinfachungen ein. Er kommt zu dem Ergebnis, dass die Idealisierung gerechtfertigt ist, wenn die Größenordnungen stimmen, vor allem die gestreute Welle weit außerhalb des Wechselwirkungsbereichs betrachtet wird ( $r \gg r_0$ ).

<sup>6</sup>Der Normierungsfaktor ist beim Ansatz im Prinzip unnötig, soll aber dafür sorgen, dass die ebene Welle „auf die Fouriertransformation“ normiert ist.

<sup>7</sup>Zur Nomenklatur: Asymptotische Lösungen kennzeichnen wir mit  $\infty$ . Die Indizes  $i$  (für *initial*) und  $f$  (für *final*) stellen wir hoch, um nicht mit dem Index  $\infty$  in Konflikt zu geraten.

### Ansatz für die auslaufende Welle

Für die auslaufende Welle fordern wir eine Amplitude  $A$  die den Einfluss des Streuzentrums auf das gestreute Teilchen widerspiegelt, also die Winkelverteilung der Projektile beinhaltet,  $A = A(\vartheta)$ . Eine solche *Streuamplitude* muss in den Ansatz für die auslaufende Streuwelle eingehen.

Mit ansonsten gleichen Annahmen wie bei der einlaufenden Welle, machen wir folgenden Ansatz, der die Teilchen radial vom Streuzentrum wegfliegen lässt:

$$\boxed{\phi_{\infty}^f = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}}$$

Dieser Ansatz beschreibt eine Kugelwelle. Sie ist eine Lösung der zeitunabhängigen freien Schrödinger-Gleichung. Die Frage ist nun, ob die Kugelwelle für das Streuproblem physikalisch sinnvolle Lösungen liefert, also die Winkelabhängigkeit  $A(\vartheta)$  des Streuprozesses korrekt behandelt.

Zur Klärung betrachten wir auch für die auslaufende Welle die Stromdichte:

$$\begin{aligned} \vec{j}_{\infty}^f &= \frac{\hbar}{2im} \left( (\phi_{\infty}^f)^* \vec{\nabla} \phi_{\infty}^f - \phi_{\infty}^f \vec{\nabla} (\phi_{\infty}^f)^* \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} (2\pi)^{-3} \left( A^*(\vartheta) \frac{e^{-ikr}}{r} \vec{\nabla} A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} - A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} A^*(\vartheta) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \end{aligned}$$

Da die auftretenden Funktionen nicht von  $\varphi$  abhängig sind, brauchen wir nur die Differentiationen nach  $dr$  und  $d\vartheta$  betrachten:

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \left( A^*(\vartheta) \frac{e^{-ikr}}{r} \left( \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \left( A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right. \\ &\quad \left. - A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \left( \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \left( A^*(\vartheta) \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \left( A^*(\vartheta) \frac{e^{-ikr}}{r} \left( \vec{e}_r A(\vartheta) \left( \frac{e^{ikr}(ikr-1)}{r^2} \right) + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r} \frac{\partial A(\vartheta)}{\partial \vartheta} \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right. \\ &\quad \left. - A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \left( \vec{e}_r A^*(\vartheta) \left( \frac{e^{-ikr}(-ikr-1)}{r^2} \right) + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r} \frac{\partial A^*(\vartheta)}{\partial \vartheta} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \left( \vec{e}_r \frac{1}{r^3} |A(\vartheta)|^2 (ikr-1) + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r^3} A^*(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} A(\vartheta) \right. \\ &\quad \left. + \vec{e}_r \frac{1}{r^3} |A(\vartheta)|^2 (ikr+1) - \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r^3} A(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} A^*(\vartheta) \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \left( \vec{e}_r \frac{|A(\vartheta)|^2}{r^2} 2ik + \vec{e}_{\vartheta} \frac{1}{r^3} \left( A^*(\vartheta) \frac{d}{d\vartheta} A(\vartheta) - A(\vartheta) \frac{d}{d\vartheta} A^*(\vartheta) \right) \right) \end{aligned}$$

Abbildung 7.3: Zusammensetzung der auslaufenden Stromdichte.

Die Stromdichte der auslaufenden Kugelwelle setzt sich also zusammen aus einem reellen Radialanteil:

$$j_r^f \vec{e}_r = \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3} \frac{|A(\vartheta)|^2}{r^2} \vec{e}_r$$

und einem imaginären Winkelanteil:

$$j_\vartheta^f \vec{e}_\vartheta = \frac{\hbar}{2im(2\pi)^3} \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r^3} \left( A^*(\vartheta) \frac{d}{d\vartheta} A(\vartheta) - A(\vartheta) \frac{d}{d\vartheta} A^*(\vartheta) \right)$$

Der Strom hat also einen (gutartig reellen) Anteil in Radialrichtung. Unerwartet ist der Winkelanteil; der Strom für unseren Ansatz „läuft“ also etwas aus der erwarteten Richtung heraus.

Wenn unsere Detektoren „weit draußen“ (idealisiert im Unendlichen) stehen, so macht sich die unterschiedliche  $r$ -Abhängigkeit bemerkbar: Der Winkelanteil geht proportional zu  $\frac{1}{r^3}$  mit  $r$ , und ist damit für  $r \rightarrow \infty$  vernachlässigbar gegenüber dem Radialanteil, der proportional zu  $\frac{1}{r^2}$  ist.

Fassen wir die Ergebnisse im differentiellen Wirkungsquerschnitt zusammen, so wie wir ihn auf Seite 345, ausgedrückt durch die Stromdichten, gefunden haben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \frac{j^f(\vartheta) r^2}{j^i}$$

Für  $r \rightarrow \infty$  wird daraus:

$$\begin{aligned} &= \frac{j_\infty^f r^2}{j_\infty^i} \Big|_{r \rightarrow \infty} \\ &= \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3} \frac{|A(\vartheta)|^2}{r^2} r^2 \left( \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3} \right)^{-1} \Big|_{r \rightarrow \infty} \end{aligned}$$

Die Faktoren kürzen sich gegenseitig weg, übrig bleibt:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = |A(\vartheta)|^2}$$

Die Beziehung zeigt, dass die *Streuamplitude*  $A(\vartheta)$  etwas über die Wahrscheinlichkeit besagt, unter welchem Winkel ein Teilchen gestreut wird. Damit erfüllt der Ansatz unsere Erwartung.

Dass die Stromdichte der gestreuten Welle nur von der Streuamplitude abhängt macht durchaus Sinn. Zu unserem Streuwellenansatz  $\psi_\infty^f$  müssen wir jedoch noch den Wellenanteil hinzunehmen, der ungestreut durchläuft. Damit erhalten wir als vollständige (formale)<sup>8</sup> asymptotische Streulösung:

$$\boxed{\psi_\infty(r, \vartheta) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left( e^{ikz} + A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right)} \quad (\psi_\infty)$$

<sup>8</sup>Wir wissen ja noch nicht, wie die Streuamplitude  $A(\vartheta)$  aussieht. Diese Unbekannte werden wir in Abschnitt 7.2 berechnen.

Abbildung 7.4: Streuung der einlaufenden Welle am Target.

### Zusammenfassung zur asymptotischen Streulösung

- Die asymptotische Streuwellenfunktion  $\psi_\infty$  löst die freie, zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\infty = E\psi_\infty$$

- Sie erfüllt die Randbedingungen (Energieerhaltung, Asymptotik) für eine einlaufende sowie eine gestreute, auslaufende Welle.
- Sie liefert einen sinnvollen Wirkungsquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = |A(\vartheta)|^2$  der die vom Potential abhängige Winkelverteilung der gestreuten Teilchen wiedergibt.

Diese Lösung gilt jedoch nur außerhalb des Wirkungsbereichs des Potentials; was innerhalb von  $r_0$  passiert, ist mit diesem einfachen Ansatz nicht zu klären. Außerdem behandelt unsere Rechnung nur ein einzelnes Streuzentrum. Im realen Experiment wird man eine Folie, also (beliebig) viele Atome in einem Festkörper als Target benutzen. Wo aber einige Atomlagen hintereinander geschichtet sind, ist Mehrfachstreuung nicht auszuschließen.

#### 7.1.4 Streuung im realen Experiment

Abbildung 7.5: Verschiedene Streuwinkel beim Atomgitter.

Unter realen Bedingungen gibt es einige Punkte zu beachten:

- Bei einem parallel einfallenden Projektilstrahl, gelangen Teilchen in denselben Detektor, die von verschiedenen Atomen unter verschiedenen Winkeln gestreut wurden. Steht ein Detektor unter einem bestimmten Winkel  $\vartheta$  zur Mittelachse, so weist er gegenüber einem außen liegenden Atom einen anderen Winkel  $\vartheta'$  auf. Die Abstände der Streuzentren sind jedoch sehr klein (Größenordnung Å). Stellen wir die Detektoren weit genug vom Streuobjekt auf, so fallen in einen Detektor nur Teilchen ein, die zwar an verschiedenen Atomen, jedoch jeweils unter dem gleichen Winkel gestreut wurden:  $\vartheta \approx \vartheta'$ . Das Problem ist (für große  $r$ ) durch die Geometrie (die Randbedingungen) gelöst.
- Entgegen makroskopischen Versuchen, haben wir es bei Streuprozessen von Elementarteilchen mit Welleneigenschaften zu tun. Man muss also Interferenzen beachten. Wenn die Teilchen an den Atomen kohärent gestreut werden, die Streuwellen sich also überlagern, so erhalten wir ein Interferenzbild, das uns den Abstand der Atome im Gitter liefert (Streuung am Gitter liefert die Gitterkonstante). Damit können wir die *Atomabstände*

messen. Möchten wir den *Atomdurchmesser* messen, müssen wir die Wellenlänge so wählen, dass die Kohärenz bei der Streuung an benachbarten Atomen gestört ist.

Mit einem Projektil kann man durch die Wahl der Energie (bzw. der Wellenlänge) unterschiedliche Strukturen (Maßstäbe) betrachten:

- Schnelle Protonen mit kleinem  $\lambda$  können Atomkerne auflösen.
- Langsame Protonen mit großem  $\lambda$  lösen Atomabstände auf.
- Mit zunehmender Targetdicke nimmt die Zahl der Streuzentren zu. Damit kann man zwar schnelle Messergebnisse erzielen, jedoch erhält man in zunehmendem Maße Mehrfachstreuungen, die schwer zu behandeln sind (Dem detektierten Teilchen sieht man schwerlich an, wie oft es gestreut wurde). Man muss also die optimale Targetdicke für sinnvolle Ergebnisse festlegen.
- Ist das Target ein Gas, so sind die Streuzentren nicht mehr im Laborsystem „festgenagelt“. Man muss ins Schwerpunktsystem übergehen. Macht man dort jedoch die Annahme einer nur geringen thermischen Bewegung der Targetteilchen, so lässt sich der Wirkungsquerschnitt ins Laborsystem zurückrechnen.

## 7.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung

### 7.2.1 Grundlagen

Für die Streuung an einem Potential versuchen wir nun die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung zu finden. Sie muss für  $r \rightarrow \infty$  die in Kapitel 7.1 gefundene asymptotische Form annehmen. Konkret suchen wir dabei die Darstellung der Streuamplitude  $A(\vartheta)$  in der formalen asymptotischen Streulösung  $\psi_\infty$  von Seite 348.

Der Hamilton-Operator des Problems lautet mit der kinetischen Energie  $\frac{p^2}{2m}$  des Projektils:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Für  $r \gg r_0$  fällt der Potentialterm weg, der Hamilton-Operator beschreibt dann ein freies Teilchen:

$$\hat{H} \Big|_{r \rightarrow \infty} = \hat{H}_0$$

Die Schrödinger-Gleichung für das Streupotential lautet in der asymptotischen Betrachtungsweise:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi(r) = E\psi(r)$$

Bringen wir  $\hat{H}_0$  auf die andere Seite:

$$\hat{V}\psi(r) = (E - \hat{H}_0)\psi(r)$$

Deuten wir die Differentialgleichung durch Substitution  $\hat{U}(r) := \hat{V}(r)\psi(r)$  um:

$$\hat{U}(r) = (E - \hat{H}_0)\psi(r) \quad (U_{\text{inhomogen}})$$

so haben wir eine inhomogene ( $\hat{U}(r) \neq 0$ ) Differentialgleichung zur Bestimmung von  $\psi$ . Die zugehörige homogene Differentialgleichung lautet:

$$(E - \hat{H}_0)\psi(r) = 0 \quad (U_{\text{homogen}})$$

Ist nun  $\psi_{\text{inhomogen}}$  eine Lösung der inhomogenen Gleichung,  $\psi_{\text{homogen}}$  eine Lösung der zugehörigen homogenen Gleichung, so löst die Linearkombination  $\psi = \psi_{\text{inhomogen}} + \psi_{\text{homogen}}$  wieder die inhomogene Differentialgleichung.<sup>9</sup>

*Beweisskizze.*

$$(E - \hat{H}_0)\psi \stackrel{!}{=} (E - \hat{H}_0)\psi_{\text{inhomogen}} + (E - \hat{H}_0)\psi_{\text{homogen}}$$

<sup>9</sup>Siehe hierzu [Heuser-3, Seite 62] und auch [Heuser-1, Abschnitt 55].

$\hat{H}_0$  auf die homogene Lösung  $\psi_{\text{homogen}}$  angewandt liefert definitionsgemäß den Eigenwert  $E$ :

$$\begin{aligned} &= (E - \hat{H}_0)\psi_{\text{inhomogen}} + \underbrace{E\psi_{\text{homogen}} - E\psi_{\text{homogen}}}_{=0} \\ &= (E - \hat{H}_0)\psi_{\text{inhomogen}} \\ &= \hat{U}(r) \end{aligned}$$

□

$\psi$  wird auch *allgemeine* Lösung genannt, während  $\psi_{\text{inhomogen}}$  eine *spezielle* oder *partikuläre* Lösung der inhomogenen Gleichung ist.

Eine ebene Welle:

$$\psi_{\text{homogen}} = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ikz}$$

löst die homogene Differentialgleichung. Wenn wir zeigen können, dass der Kugelwellenansatz aus dem letzten Abschnitt eine spezielle Lösung ist, so haben wir damit die allgemeine Lösung, die die Form von  $\psi_\infty$  annehmen sollte, gefunden.

## 7.2.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung

### Ansatz: Umformen der Schrödinger-Gleichung

Multiplizieren wir die Differentialgleichung  $(E - \hat{H}_0)\psi_{\text{inhomogen}} = \hat{U}(r)$  von links mit dem Kehrwert<sup>10</sup> des Operators  $(E - \hat{H}_0)$ :

$$\frac{1}{E - \hat{H}_0}(E - \hat{H}_0)\psi_{\text{inhomogen}} = \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{U}(r)$$

So erhalten wir eine formale Lösung:

$$\psi_{\text{inhomogen}} = \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{U}(r)$$

bzw. eine Differentialgleichung für die partikuläre Streulösung:

$$\psi_{\text{inhomogen}} = \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{V}(r)\psi_{\text{inhomogen}}$$

Unser Ansatz für die allgemeine Lösung lautet damit:

$$\psi = \psi_{\text{homogen}} + \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{U}(r)$$

<sup>10</sup>Diese Herangehensweise ist gefährlich, da der Operator  $\frac{1}{E - \hat{H}_0}$  durch seine Singularität nicht einfach das Inverse von  $(E - \hat{H}_0)$  ist. [Sakurai-1, Abschnitt 7.1.] z.B. beschreibt das Problem im Rahmen der Lippmann-Schwinger-Gleichung. Wir gehen dazu noch konkreter ein, wenn die Green'sche Funktion auftritt; siehe auch Fußnote 18 auf Seite 358.



Dies ist eigentlich nur eine Umschreibung der Schrödinger-Gleichung für die gesuchte Streuwellenfunktion  $\psi$ :

$$\psi = \psi_{\text{homogen}} + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} \psi_{\text{inhomogen}}$$

Um das Problem der Singularität im Operator zu umgehen, führen wir ein infinitesimales Element  $+i\varepsilon$  ein:<sup>11</sup>

$$\boxed{\psi = \psi_{\text{homogen}} + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \psi_{\text{inhomogen}}} \quad \text{Lippmann-Schwinger-Gleichung}$$

Als umgeformte Schrödinger-Gleichung ist die Lippmann-Schwinger-Gleichung eine Differentialgleichung (eigentlich eine Integralgleichung, wie wir noch sehen werden) zur Bestimmung von  $\psi$ . Man kann sie jedoch auch als formale Lösung der Differentialgleichung ( $U_{\text{inhomogen}}$ ) auffassen.

### Green'sche Funktion als Darstellungsmatrix eines Operators

Betrachten wir nun den Operator  $\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}$ . Um ihn deuten zu können, betrachten wir zunächst, was er für den Basiswechsel zwischen verschiedenen Ortskoordinaten ergibt:

$$\langle r | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} | r' \rangle =$$

Schieben wir die Identität  $\hat{1} = \sum |\alpha\rangle \langle \alpha|$  ein, so gilt mit der Eigenwertgleichung  $\hat{H}_0 |\alpha\rangle = \eta_\alpha |\alpha\rangle$ :

$$= \sum_{\alpha} \langle r | \alpha \rangle \frac{1}{E - \eta_\alpha + i\varepsilon} \langle \alpha | r' \rangle$$

Bilden wir noch den Limes (der genau genommen immer vor dem Operator mit dem infinitesimalen Element stehen müsste):

$$= \sum_{\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle r | \alpha \rangle \frac{1}{E - \eta_\alpha + i\varepsilon} \langle \alpha | r' \rangle$$

Das ist die Green'sche Funktion für ein freies Teilchen ( $\hat{V} = 0$ ) der Energie  $E$ , das sich von  $\vec{r}$  nach  $\vec{r}'$  bewegt („frei propagiert“):

$$= \mathcal{G}_0^+(\vec{r}', \vec{r}, E)$$

Damit können wir den Operator  $\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}$  als den Propagator für das auslaufende (Index +) freie (Index 0) Teilchen der Energie  $E$  deuten.<sup>12</sup>

<sup>11</sup> ... „making  $E$  slightly complex“, wie [Sakurai-1] es ausdrückt.

<sup>12</sup> Die Indizes werden später zur Unterscheidung dienen, wenn wir zeigen, dass die Green'sche Funktion mit Index + für eine auslaufende Kugelwelle steht, während der negative Index eine einlaufende Kugelwelle beschreiben soll. Genau genommen steht das + für die positive Zeitachse, das - für einen in der Zeit rückwärtslaufenden Prozess.

Formal bezeichnet man die Green'sche Funktion  $\mathcal{G}_0^+$  auch als die *Darstellungsmatrix* eines Operators  $\hat{G}_0^+$ , wie es die folgende Beziehung nahelegt:

$$\mathcal{G}_0^+(\vec{r}', \vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{G}_0^+ | \vec{r}' \rangle$$

wobei dieser Operator gerade der „Bruchoperator“ ist:

$$\hat{G}_0^+ := \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}$$

Den Operator  $\hat{G}_0^+$  mit seiner Singularität erhielten wir durch die Umformung der Schrödinger-Gleichung. Bei diesem Schritt war noch nichts über die Brauchbarkeit des Operators ausgesagt. Mit der Verbindung zur Green'schen Funktion können wir jedoch davon ausgehen, daß der Operator physikalisch Sinn macht.

### 7.2.3 Lippmann-Schwinger in Impulsdarstellung

Wir zeigen nun, dass die Lippmann-Schwinger-Gleichung in der Impulsdarstellung auf eine Integralgleichung<sup>13</sup> zur Bestimmung von  $\psi$  führt. Dazu wechseln wir in die Bracket-Darstellung. Die ursprüngliche Differentialgleichung lautet:

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{hom.}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi_{\text{inh.}}\rangle$$

Multiplikation mit  $\langle \vec{k} |$ :

$$\langle \vec{k} | \psi \rangle = \langle \vec{k} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \langle \vec{k} | \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi_{\text{inh.}} \rangle$$

Schieben wir noch eine Identität ein:

$$\langle \vec{k} | \psi \rangle = \langle \vec{k} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \int \langle \vec{k} | \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3k'$$

Setzen wir den Eigenwert für  $\hat{H}_0 | \vec{k}' \rangle = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} | \vec{k}' \rangle$  ein:

$$\langle \vec{k} | \psi \rangle = \langle \vec{k} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \int \langle \vec{k} | \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}} \hat{V} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3k'$$

Nun haben wir das Problem, dass es bei Integration über alle  $k'$  Polstellen im Integranden geben wird. Deswegen fügen wir, wie oben, ein infinitesimales  $i\varepsilon$  im Nenner ein:<sup>14</sup>

$$\langle \vec{k} | \psi \rangle = \langle \vec{k} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \int \langle \vec{k} | \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + i\varepsilon} \hat{V} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3k'$$

Nun können wir den Limes für  $\varepsilon \rightarrow 0$  bilden und mittels Residuensatz integrieren.<sup>15</sup>

Damit besitzen wir, wie behauptet, eine Integralgleichung zur Lösung des Problems.

<sup>13</sup>Bei einer Integralgleichung ist die zu lösende Funktion auf einer Seite der Gleichung selbst unter dem Integral zu finden. Eine Integralgleichung bietet gegenüber einer Differentialgleichung den Vorteil, dass Randbedingungen besser zu handhaben sind.

<sup>14</sup>Anschaulich machen wir durch das  $i\varepsilon$  einen Bogen um die (reelle) Polstelle.

<sup>15</sup>In der folgenden Ortsdarstellung werden wir das konkret ausführen.

### 7.2.4 Lippmann-Schwinger in Ortsdarstellung

Zur Lösung der Integralgleichung gehen wir in den Ortsraum. Prinzipiell ändert das nichts an unserer Vorgehensweise. Die Differentialgleichung:

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{hom.}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi_{\text{inh.}}\rangle$$

wird von links mit  $\langle \vec{r} |$  multipliziert:

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi_{\text{inh.}} \rangle$$

Dann schieben wir eine  $\hat{\mathbb{1}}$  ein, diesmal in Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \int \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3 r''$$

Fügen wir noch eine weitere  $\hat{\mathbb{1}}$  ein, um die Operatoren  $\hat{G}_0^+$  und  $\hat{V}$  zu trennen, und setzen dabei für  $\hat{H}_0 | \vec{r}' \rangle$  den Energieeigenwert  $\eta'$  im Nenner ein:

$$\begin{aligned} &= \langle \vec{r} | \psi_{\text{hom.}} \rangle \\ &+ \iint \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \eta' + i\varepsilon} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3 r' d^3 r'' \end{aligned}$$

Wenn das Potential *lokal* ist, es also an der Stelle  $\vec{r}$  alleine eine Funktion von  $\vec{r}$  ist, so verschwinden alle Matrixelemente  $\langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle$  für  $\vec{r}' \neq \vec{r}''$ . Wir drücken das durch die  $\delta$ -Funktion aus:

$$\begin{aligned} &= \langle \vec{r} | \psi_{\text{hom.}} \rangle \\ &+ \iint \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \eta' + i\varepsilon} | \vec{r}' \rangle \hat{V}(\vec{r}') \delta(\vec{r}', \vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3 r' d^3 r'' \end{aligned}$$

Integration über  $d^3 r''$ :

$$= \langle \vec{r} | \psi_{\text{hom.}} \rangle + \int \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \eta' + i\varepsilon} | \vec{r}' \rangle \hat{V}(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi_{\text{inh.}} \rangle d^3 r'$$

Auch in Ortsdarstellung haben wir nun eine Integralgleichung vorliegen:

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{hom.}}(\vec{r}) + \int \mathcal{G}_0^+(\vec{r}', \vec{r}, E) \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3 r'}$$

#### Nebenrechnung: Bestimmung der Green'schen Funktion

Das Matrixelement unter dem Integral deuten wir als die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein Teilchen mit der Energie  $E$  sich frei von  $\vec{r}'$  nach

$\vec{r}$  bewegt. Einen solchen Propagator drücken wir, wie oben angesprochen, als Green'sche Funktion aus, hier nun in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_0^+(\vec{r}, \vec{r}', E) &= \langle \vec{r} | \hat{G}_0^+ | \vec{r}' \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} | \vec{r}' \rangle\end{aligned}$$

Können wir die Green'sche Funktion berechnen, so können wir die Integralgleichung lösen. Dazu schieben wir zunächst eine  $\hat{1}$  in der Impulsbasis  $|\vec{q}\rangle$  ein, schreiben den zugehörigen Energieeigenwert  $\frac{\hbar^2 q^2}{2m}$  hin, und drücken die Energie  $E$  mittels der Wellenzahl  $k$  aus:

$$= \int \langle \vec{r} | \vec{q} \rangle \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + i\varepsilon} \langle \vec{q} | \vec{r}' \rangle d^3q$$

Schreiben wir die Skalarprodukte aus und ziehen den Faktor  $\frac{2m}{\hbar^2}$  aus dem Integral heraus:

$$= \frac{2m}{\hbar^2} \left( (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \right)^2 \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d^3q$$

wobei  $\tilde{\varepsilon} := \varepsilon \frac{2m}{\hbar^2}$  ist (wenn wir den Limes bilden spielt diese Umfaktorierung keine Rolle mehr). Als Abkürzung normieren wir die Green'sche Funktion um:

$$\mathcal{G}_0^+(\vec{r}, \vec{r}', k) =: \frac{2m}{\hbar^2} \tilde{\mathcal{G}}_0^+$$

Wir fordern von diesem Propagator, dass er translationsinvariant ist, also anstatt von zwei Ortsvektoren nur von deren Differenz abhängt:<sup>16</sup>

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_0^+ &= \tilde{\mathcal{G}}_0^+(\vec{x} := \vec{r} - \vec{r}', k) \\ &= (2\pi)^{-3} \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d^3q\end{aligned}$$

Ersetzen wir die Differenz durch den Abstandsvektor  $\vec{x}$ :

$$= (2\pi)^{-3} \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d^3q$$

Wählen wir das Koordinatensystem so, dass  $\vec{x} = x\vec{e}_z$  ist, und setzen den Winkel  $\vartheta = \angle(\vec{q}, \vec{x})$  zwischen den Vektoren:

$$= (2\pi)^{-3} \int \frac{e^{iqx \cos \vartheta}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d^3q$$

Um dieses Integral über Skalare berechnen zu können müssen wir  $d^3q$  in seine Bestandteile  $d^3q = q^2 dq d(\cos \vartheta) d\varphi$  auflösen:

$$= (2\pi)^{-3} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^1 q^2 \frac{e^{iqx \cos \vartheta}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d(\cos \vartheta) dq d\varphi$$

<sup>16</sup>  $\hat{H}_0$  hängt nicht von der absoluten Position ab, also darf  $\mathcal{G}_0$  auch nicht davon abhängen.

Das Integral über  $d\varphi$  liefert nur einen Faktor  $2\pi$ :

$$= (2\pi)^{-2} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^1 q^2 \frac{e^{iqx \cos \vartheta}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} d(\cos \vartheta) dq$$

Integration über  $d(\cos \vartheta)$ :

$$= (2\pi)^{-2} \int_0^{+\infty} q^2 \frac{1}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} \frac{1}{iqx} \left( e^{iqx1} - e^{iqx(-1)} \right) dq$$

Aufspalten des Integrals über eine Differenz in die Differenz zweier Integrale:

$$= \frac{1}{4ix\pi^2} \left( \int_0^{+\infty} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{iqx} dq - \int_0^{+\infty} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{-iqx} dq \right)$$

Ziehen wir das negative Vorzeichen in der Exponentialfunktion heraus, so müssen wir die Integrationsgrenzen entsprechend anpassen:

$$= \frac{1}{4ix\pi^2} \left( \int_0^{+\infty} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{iqx} dq + \int_{-\infty}^0 \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{iqx} dq \right)$$

Die zwei Integranden sind gleich, die Grenzen schließen aneinander an, so dass wir die Integrale zusammenziehen können:

$$= \frac{1}{4ix\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{iqx} dq$$

Ist  $q$  positiv imaginär, so geht die Exponentialfunktion für  $q \rightarrow \infty$  gegen null. Wir legen den Integrationsweg (Bogen „ $\frown$ “ um die Polstellen) deswegen in die positive Halbebene:

$$= \frac{1}{4ix\pi^2} \int_{\frown} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{iqx} dq$$

Anwenden des Residuensatzes bedeutet, dass die Summe der Residuen, die an den Polstellen  $q_j$  des Integranden gebildet werden, den Wert des Integrals ergibt:

$$= \frac{1}{4ix\pi^2} 2\pi i \sum_{\substack{\text{Polstellen} \\ j \text{ in } \frown}} \text{Res} \left( \frac{q e^{iqx}}{k^2 - q^2 + i\tilde{\varepsilon}}, q_j \right)$$

Betrachten wir die Funktion, deren Residuum berechnet werden soll, bzw. die „Polstruktur“. Zunächst Erweitern wir mit  $\frac{-1}{-1}$ , um dann den 3. Binomischen Satz anzuwenden:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2x\pi} \sum_{\substack{\text{Polstellen} \\ j \text{ in } \frown}} \text{Res} \left( \frac{-q e^{iqx}}{q^2 - (k^2 + i\tilde{\varepsilon})}, q_j \right) \\ &= \frac{1}{2x\pi} \sum_{\substack{\text{Polstellen} \\ j \text{ in } \frown}} \text{Res} \left( \frac{-q e^{iqx}}{(q + \sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}})(q - \sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}})}, q_j \right) \end{aligned}$$

Die einzige Polstelle in der positiven Halbebene ist  $q_0 = +\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}$ . Die Summe zur Berechnung von  $\tilde{\mathcal{G}}_0^+$  liefert mit dem Residuum an dieser Polstelle nur einen Term:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_0^+ &= \frac{1}{2x\pi} \operatorname{Res} \left( \frac{-q e^{iqx}}{q^2 - (k^2 + i\tilde{\varepsilon})}, q_0 \right) \\ &= \frac{1}{2x\pi} \frac{-q_0 e^{iq_0 x}}{q_0 + \sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}}\end{aligned}$$

Setzen wir den Wert der Polstelle  $q_0 = \sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}$  in das Residuum ein:

$$= \frac{1}{2x\pi} \frac{-\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{ix\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}}}{\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}} + \sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}}$$

Bei der Herleitung der Lippmann-Schwinger-Gleichung auf Seite 354 führten wir das infinitesimale  $i\varepsilon$  ein. Genau genommen müsste zur Berechnung von  $\tilde{\mathcal{G}}_0^+$  in jeder Formel der Limes für  $\varepsilon \rightarrow 0$  stehen. Dies holen wir jetzt nach, da wir kurz vor dem Ziel stehen:

$$\begin{aligned}&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2x\pi} \frac{-\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}} e^{ix\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}}}{2\sqrt{k^2 + i\tilde{\varepsilon}}} \\ &= \frac{1}{4x\pi} \frac{-k e^{ikx}}{k} \\ &= \frac{-e^{ikx}}{4x\pi}\end{aligned}$$

Damit<sup>17</sup> erhalten wir die Green'sche Funktion<sup>18</sup> in Abhängigkeit des Abstands der beiden Ortskoordinaten und der Energie des Teilchens:

$$\mathcal{G}_0^+(x, E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikx}}{x}$$

Die Energieabhängigkeit steckt dabei in der Wellenzahl  $k$ :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

<sup>17</sup>Zur Berechnung von Integralen der in dieser Nebenrechnung gegebenen Form  $\int_{-\infty}^{\infty} f(q) dq$  mit Hilfe des Residuensatzes siehe [Kaul-1, § 28:5 und § 28:7.1]

<sup>18</sup>Zum Problem des Kehrwertoperators sei mit dieser Formel für die Green'sche Funktion auf [Messiah-2, Abschnitt 19.1.4] verwiesen. Demnach gilt generell:

$$(\Delta + k^2) \frac{-e^{ikx}}{x} = -\delta(x)$$

(Der Hamilton-Operator und die Energie sind hier in Einheiten des Wellenvektors geschrieben). Setzt man für die Kugelwelle die Green'sche Funktion ein:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + k^2) \mathcal{G}_0^+(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

so sieht man, daß der Kehrwert des Klammeroperators (ausgedrückt als  $\mathcal{G}_0^+$ ) nicht dessen inverser Operator ist; sonst müsste sich bei der Multiplikation  $\mathbb{1}$  ergeben. Dass die  $\delta$ -Funktion herauskommt zeigt, dass die Singularität nicht zu vernachlässigen ist.

**Fortsetzung der Berechnung von  $\psi$** 

Die eben errechnete Green'sche Funktion können wir nun in unsere Integralgleichung einsetzen. Für die stationäre Streuwelle in Ortsdarstellung  $\psi(\vec{r})$  fanden wir auf Seite 355 folgende Beziehung:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{hom.}}(\vec{r}) + \int \mathcal{G}_0^+(\vec{r}, \vec{r}', E) \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3r'$$

Setzen wir das Ergebnis der Nebenrechnung mit  $\mathcal{G}_0^+ = \frac{2m}{\hbar} \tilde{\mathcal{G}}_0^+$  und  $x = |\vec{r} - \vec{r}'|$  ein, so erhalten wir:

$$= \frac{e^{ikz}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3r'$$

Abbildung 7.6: Ortsvektoren beim Streuprozess.

Unter der Annahme, dass  $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$  gilt,<sup>19</sup> betrachten wir den Abstandsbetrag:

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}'| &= \sqrt{\vec{r}^2 - 2r r' \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}') + \vec{r}'^2} \\ &= r \sqrt{1 - 2 \frac{r'}{r} \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}') + \frac{r'^2}{r^2}} \end{aligned}$$

Der letzte Term unter der Wurzel kann aufgrund unserer Annahme  $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$  vernachlässigt werden:

$$= r \sqrt{1 - 2 \frac{r'}{r} \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}')}$$

Entwickelt man nun die Wurzel unter derselben Annahme, so erhält man als Näherung:

$$\approx r \left( 1 - \frac{r'}{r} \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}') \right)$$

Damit vereinfacht sich der Integrand in der Hauptrechnung, wobei wir davon ausgehen, dass für große  $r$  der Term  $r - r' \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}')$  im Nenner eine weitaus geringere Rolle spielt, als im Exponenten:

$$\begin{aligned} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} &\approx \frac{e^{ikr \left( 1 - \frac{r'}{r} \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}') \right)}}{r} \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ikr' \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}')} \end{aligned}$$

<sup>19</sup>Siehe dazu Abbildung 7.6:  $\vec{r}'$  ist der Ort, ab dem das Teilchen das Potential nicht mehr spürt (und frei propagieren kann), also  $r' = r_0 + \Delta r$ . Am Ort  $\vec{r}$  ist der Detektor aufgestellt, weit weg vom Streuzentrum gelegen. Durch diese Geometrie ist die Beziehung gerechtfertigt.

Mit dieser Vereinfachung rechnen wir weiter:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \frac{e^{ikz}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3r' \\ &= \frac{e^{ikz}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ikr' \cos \angle(\vec{r}, \vec{r}')} \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3r'\end{aligned}$$

Vergleichen wir dieses Ergebnis nun mit unserer „Wunschform“, der asymptotischen Streulösung  $\psi_\infty$  von Seite 348, die eine einlaufende ebene Welle mit auslaufender Kugelwelle darstellt:

$$\psi_\infty(r, \vartheta) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left( e^{ikz} + A(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

so können wir daraus die Streuamplitude  $A(\vartheta)$  extrahieren:

$$A(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^{\frac{3}{2}} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \hat{V}(\vec{r}') \psi_{\text{inh.}}(\vec{r}') d^3r'$$

Dabei ist der Impuls des auslaufenden Teilchens gegeben durch  $\vec{k}' := |\vec{k}'| \vec{e}_r$ , in dem auch die  $\vartheta$ -Abhängigkeit steckt. Fassen wir das Ergebnis in Bracketschreibweise zusammen:

$$\boxed{A(\vartheta) = -\frac{m(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^2} \langle k' | \hat{V} | \psi_{\text{inh.}} \rangle} \quad \text{Streuamplitude}$$

Die Streuamplitude ist also (bis auf Vorfaktoren) das „Matrixelement“ des Streupotentials mit der noch unbekanntem Streuwellenlösung  $\psi$  und einer ebenen Welle in Richtung  $\vec{k}'$  (Streuwinkel  $\vartheta$ ) als konkretem Endzustand. Anschaulich drückt die Streuamplitude also aus, welcher Anteil der Projektile in Richtung von  $\vec{k}'$  gestreut wird.

Damit hat man nun eine Integralgleichung, die mit gegebenem Streupotential  $\hat{V}$  nur noch die Unbekannte  $\psi$  enthält, und somit (im Prinzip – exakt oder wenigstens numerisch) lösbar ist. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung beantwortet uns damit (formal – denn das Matrixelement müssen wir noch bestimmen) die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein gestreutes Teilchen mit einem bestimmten Impuls  $\vec{k}'$  (und damit unter einem bestimmten Winkel  $\vartheta$ ) im Detektor ankommt.

### 7.2.5 Zusammenfassung

Die vorangegangene Rechnung ist ziemlich lang und voller Nebenrechnungen. Fassen wir zur Übersicht nochmals die wichtigsten Schritte zusammen:

1. Wir suchen die Wellenfunktion  $\psi$ , die die Streuung an einem Potential, das durch  $\hat{V}$  beschrieben wird, für ein asymptotisch ( $r \rightarrow \infty$ ) freies Teilchen beschreibt.  $\psi$  heißt die (asymptotische) stationäre Streuwelle.



2. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{homogen}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} |\psi_{\text{inhomogen}}\rangle$$

ist eine Umformung der Schrödinger-Gleichung dieses Problems. Sie wird zur Lösung bevorzugt weil sie (z.B. in Ortsdarstellung) Vorteile bietet:

- Man hat die Freiheit, die einlaufende Welle  $\psi_0$  (dem konkreten Problem angepasst) zu wählen.
  - Man kann den freien Propagator der Ortsänderung  $\mathcal{G}_0$  so wählen, dass er eine Vorwärtsbewegung in der Zeit beschreibt ( $+i\varepsilon$ ):  $\mathcal{G}_0^+$ .
  - Sie liefert die richtige Asymptotik für die auslaufende Welle.<sup>20</sup>
3. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung ist eine Integralgleichung. Das bietet den Vorteil, dass die Randbedingungen schon „eingebaut“ sind.
4. Mit der Streuamplitude  $A(\vartheta)$  erhalten wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Streuung:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\vartheta)|^2$$

wobei das in der Streuamplitude:

$$A(\vartheta) = -\frac{m(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^2} \langle k' | \hat{V} | \psi \rangle$$

vorkommende Matrixelement<sup>21</sup> zu verstehen ist als die „Projektion“ der an  $\hat{V}$  gestreuten Welle  $\psi$  auf Richtung und Impuls  $\vec{k}'$ . Die Richtung des Impulsvektors gibt auch den Streuwinkel  $\vartheta$  an.

Abbildung 7.7: Impulsvektoren und Winkel bei der Streuung.

5. Nun kann man die Integralgleichung (versuchen zu) lösen.

Auf die Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung kommen wir später noch zurück. Davor führen wir jedoch die  $T$ -Matrix ein, die das „Matrixelement“  $\langle k' | \hat{V} | \psi \rangle$  berechenbar machen soll.

<sup>20</sup>Setzt man statt  $+i\varepsilon$  den negativen infinitesimalen Faktor  $-i\varepsilon$  ein, was durch  $\mathcal{G}_0^-$  abgekürzt wird, so erhält man zwar eine Lösung der Schrödinger-Gleichung; diese weist jedoch die falsche Asymptotik auf.

<sup>21</sup>[Messiah-2, Abschnitt 19.1.2] weist darauf hin, daß  $\langle k' | \hat{V} | \psi \rangle$  streng genommen kein Matrixelement des Operators  $\hat{V}$  ist, weil in Bra und Ket nicht die Basisvektoren derselben Darstellung stehen. Dieses Problem besprechen wir im nächsten Abschnitt.

## 7.3 Die $T$ -Matrix und das Optische Theorem

### 7.3.1 Die „Transition“-Matrix

#### Motivation

Betrachten wir nochmals die Streuamplitude aus dem letzten Abschnitt:

$$A(\vartheta) = -\frac{m(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle$$

Ihr Betragsquadrat liefert den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\vartheta)|^2$$

Der Wirkungsquerschnitt ist die Schnittstelle zwischen der Theorie und dem Experiment. Seine Berechnung ermöglicht den Vergleich der Theorie mit dem Experiment, bzw. Voraussagen für noch ausstehende Versuche und ist die Motivation für dieses Kapitel.

Die formale Beziehung für das Streupotential ist im „Matrixelement“ von  $\hat{V}$  nicht symmetrisch, was den Physiker stört. Im Bra steht eine ebene Welle, also die Lösung der freien zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$\hat{H}_0 | \vec{k}' \rangle = E | \vec{k}' \rangle$$

Im Ket hingegen steht die Lösung des durch das Streupotential gestörten Systems, die Streuwelle  $\psi$ :

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) | \psi \rangle = E | \psi \rangle$$

Das Ziel ist nun, auch im Ket die einfachste Lösung der freien zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung stehen zu haben, während das gesamte Streuproblem in einer Matrix  $\hat{T}$  untergebracht ist. Wir suchen also einen Operator  $\hat{T}$  mit der folgenden Eigenschaft:

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle \equiv \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$

Damit ist die Darstellung symmetrisch<sup>22</sup>, sowohl im Bra, als auch im Ket, stehen Zustände desselben Basissystems.

**Welche Vorteile bringt die  $T$ -Matrix?** Auf den ersten Blick gewinnt man weder neue Informationen, noch eine Vereinfachung der Rechnung. Bei der ursprünglichen Herangehensweise muss  $\psi$  berechnet werden, bei gegebenem  $\hat{V}$ . Nun verlagert sich die Unbekannte in die neue Matrix  $\hat{T}$ , während die vorkommenden Wellenfunktionen einfach sind (ebene Wellen).

<sup>22</sup>Im Sinne der Fußnote 21 auf Seite 361 wird durch die Symmetrie, die durch die Einführung von  $\hat{T}$  erreicht wird, das „Matrixelement“ erst zum echten Matrixelement, das wir *Übergangsamplitude* nennen.

Der Vorteil ist, wie wir noch sehen werden, dass  $\hat{T}$  alle Prozesse beinhaltet, die bei dem Problem auftreten können, auch eine Aufsummierung von Vielfachstreuprozessen (Streuung, freie Propagation, Streuung, usw. ...). Die  $T$ -Matrix ist damit die Blackbox, die den gesamten Übergang des Zustands von vor der Streuung bis nach der Streuung durchführt. Daher der Name *Transition-* oder auch *Übergangsmatrix*. Das zu  $\hat{T}$  gehörende Matrixelement nennen wir *Übergangsamplitude*.

Die  $T$ -Matrix beschreibt also im Prinzip einen unbekannt Operator  $\mathcal{T}$ , von dem einzig bekannt ist, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein einlaufender Zustand  $|\vec{k}\rangle$  zu einem auslaufenden Zustand  $|\vec{k}'\rangle$  führt.

### Bestimmungsgleichung für $\hat{T}$

**Definition.** Die geforderte Eigenschaft der  $T$ -Matrix fassen wir in einer Definitionsgleichung zusammen:

$$\boxed{\hat{T}|\vec{k}\rangle := \hat{V}|\psi\rangle}$$

wobei der Zustand  $|\vec{k}\rangle$  einerseits – mit dem Betrag des Wellenvektors – für eine bestimmte Energie, andererseits – mit seiner Richtung – für einen konkreten Streuwinkel steht.

Führen wir die  $T$ -Matrix in die Lippmann-Schwinger-Gleichung ein. Sie lautet:

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{homogen}}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V}|\psi_{\text{inhomogen}}\rangle$$

Die homogene Lösung  $|\psi_{\text{homogen}}\rangle$  entspricht einer ebenen Welle, die wir weiterhin durch  $|\vec{k}\rangle$  bezeichnen. Multiplizieren wir noch den Operator  $\hat{V}$  des Potentials von links an die Gleichung, so erhalten wir:

$$\hat{V}|\psi\rangle = \hat{V}|\vec{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V}|\psi_{\text{inhomogen}}\rangle$$

Setzen wir die Definition von  $\hat{T}$  ein:

$$\hat{T}|\vec{k}\rangle = \hat{V}|\vec{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}|\vec{k}\rangle$$

Diese Gleichung soll für alle Zustände  $|\vec{k}\rangle$  erfüllt sein, so dass wir folgende Operator-Gleichung erhalten, die eine rekursive Bestimmungsgleichung für  $\hat{T}$  darstellt:

$$\boxed{\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}} \quad (\text{T1})$$

Dies ist die *Lippmann-Schwinger-Gleichung für die T-Matrix*.

**Bedeutung der  $T$ -Matrix**

Die  $T$ -Matrix erlaubt es, auf einfache Weise Mehrfachstreuprozesse zu beschreiben. Dazu wird  $\hat{T}$  rekursiv in die Operator-Gleichung (T1) eingesetzt:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \left( \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \left( \hat{V} + \dots \right) \right)$$

Geordnet nach Potenzen von  $\hat{V}$ :

$$= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} + \dots$$

Abbildung 7.8: Blackbox  $\mathcal{T}$  zur Beschreibung von Mehrfachstreuprozessen.

**Behauptung.** Die Bestimmungsgleichung für die  $T$ -Matrix lässt sich so umschreiben, dass  $\hat{T}$  direkt bestimmt werden kann,  $\hat{T}$  also nur noch auf einer Seite der Gleichung vorkommt:

$$\boxed{\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V}} \quad (\text{T2})$$

Der Preis für diese Bestimmungsgleichung ist allerdings, dass jetzt der komplette Hamilton-Operator im Nenner vorkommt. Auch diesem „Bruchoperator“ geben wir eine Abkürzung:

$$\hat{G}^+ := \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon}$$

Ist das Vorzeichen vor dem infinitesimalen Imaginärteil negativ, so nennen wir den Operator entsprechend  $\hat{G}^-$ . Durch das Weglassen des Index' 0 wird ausgedrückt, dass nicht mehr der ungestörte Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  im Nenner steht, sondern der komplette, gestörte  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ .

*Beweis.* Zunächst benötigen wir einen Ausdruck für  $\hat{V}$ , der sich als nützlich erweisen wird. Bringen wir in Formel (T1) den gesamten Ausdruck  $\hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{T}$  auf die andere Seite:

$$\hat{V} = \hat{T} - \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

Erweitern wir das linke  $\hat{T}$  mittels einer „ $\hat{\mathbf{1}}$ “:

$$= \frac{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T} - \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

und klammern  $\hat{G}_0^+ \hat{T}$  zusammen aus:

$$= \left( E - \hat{H}_0 + i\varepsilon - \hat{V} \right) \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

Umordnen des Klammersausdrucks:

$$= \left( E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon \right) \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T} \quad (V')$$

Diesen Ausdruck ( $V'$ ) werden wir bald einsetzen können.

Berechnen wir nun  $\hat{T}$  indem wir zunächst eine „ $\hat{\mathbb{1}}$ “ vorschoben:

$$\hat{T} = \left( E - \hat{H}_0 + i\varepsilon \right) \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

Und noch eine „ $\hat{\mathbb{1}}$ “ einschieben:

$$= \left( E - \hat{H}_0 + i\varepsilon \right) \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \left( E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon \right) \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

Die rechte Hälfte ist, wie in Formel ( $V'$ ) berechnet,  $\hat{V}$ ; wir erhalten damit:

$$= \left( E - \hat{H}_0 + i\varepsilon \right) \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V}$$

Addieren von  $0 = \hat{V} - \hat{V}$  im linken Ausdruck:

$$\begin{aligned} &= \left( E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon + \hat{V} \right) \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V} \\ &= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V} \end{aligned}$$

Womit bewiesen ist, dass  $\hat{T}$  sich nur mit Hilfe der Operatoren  $\hat{V}$  und  $\hat{H}_0$  darstellen lässt.<sup>23</sup>  $\square$

Mit dieser Bestimmungsgleichung können wir zeigen, dass  $\hat{T}$  nicht selbstadjungiert ist; diese Eigenschaft ist entscheidend für das folgende Optische Theorem.

**Behauptung.** Die  $T$ -Matrix ist nicht hermitesch.

*Beweis.* Beginnen wir mit der Bestimmungsgleichung (T2):

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V}$$

und adjungieren sie:

$$\hat{T}^\dagger = \hat{V}^\dagger + \left( \hat{V} \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V} \right)^\dagger$$

<sup>23</sup>Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die  $\hat{\mathbb{1}}$ en, die wir im Beweis eingeschoben haben, eigentlich eine Art  $\delta$ -Funktion sind, da der Bruchoperator durch seine Singularität *nicht* das Inverse zum entsprechenden Ausdruck im Zähler ist.

Beim Adjungieren eines Produkts vertauscht sich die Reihenfolge der einzeln adjungierten Operatoren; hier spielt dies jedoch keine Rolle, weil dasselbe  $\hat{V}$  auf beiden Seiten steht, die Vertauschung also am Gesamtoperator nichts ändert:

$$= \hat{V}^\dagger + \hat{V}^\dagger \left( \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \right)^\dagger \hat{V}^\dagger$$

Bis auf das imaginäre  $i$  enthält  $\hat{G}^+$  nur reelle Zahlen und Operatoren; Adjunktion ändert also nur das Vorzeichen des  $i$ , so dass wir  $\hat{G}^-$  erhalten:

$$= \hat{V}^\dagger + \hat{V}^\dagger \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) - i\varepsilon} \hat{V}^\dagger$$

Da  $\hat{V}$  ein hermitescher Operator ist, ist er gleich seinem Adjungierten:

$$= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) - i\varepsilon} \hat{V}$$

Damit haben wir die Ausgangsbeziehung, bis auf das geänderte Vorzeichen des infinitesimalen Imaginärteils im Nenner.  $\hat{T}$  ist also nicht hermitesch.<sup>24</sup>  $\square$

Wenn der Operator  $\hat{T}$  nicht selbstadjungiert ist, kann er nicht für eine normale physikalische Observable stehen, denn sein Erwartungswert ist damit nicht reell. Trotzdem macht er physikalisch Sinn. Zwar kann der Imaginärteil der Matrix von null verschieden sein:

$$\hat{T} \neq \hat{T}^\dagger \quad \Leftrightarrow \quad \text{Im}\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k} \rangle \neq 0$$

Die Übergangsamplitude (das Matrixelement von  $\hat{T}$ ) kommt im Wirkungsquerschnitt jedoch im Betragsquadrat vor, so dass man letztlich eine reelle Größe erhält. Aber auch der Imaginärteil hat eine physikalische Bedeutung, wie das *Optische Theorem*<sup>25</sup> zeigt. Dieses Theorem wird den Rest des Abschnitts einnehmen.

### 7.3.2 Optisches Theorem

**Satz (Optisches Theorem).** *Das Optische Theorem bringt den Imaginärteil der Übergangsmatrix für die durchlaufenden (in Vorwärtsrichtung gestreuten)*

<sup>24</sup>Man kann aus  $\hat{T}$  einen hermiteschen Operator gewinnen. In der Literatur wird dieser als  $S$ -Matrix bezeichnet:

$$\hat{S} := \hat{\mathbf{1}} - 2\pi i \hat{T}$$

Die  $S$ -Matrix ist nicht nur hermitesch, sondern sogar unitär:

$$\hat{S} \hat{S}^\dagger = \hat{S}^\dagger \hat{S} = \hat{\mathbf{1}}$$

Vgl. [Messiah-2, Abschnitt 19.5.1].

<sup>25</sup>Auch *Bohr-Peierls-Placzek-Relation* genannt; siehe [Messiah-2, Abschnitt 19.5.2].

Teilchen in Relation zum totalen Wirkungsquerschnitt:<sup>26</sup>

$$\boxed{\operatorname{Im}\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k} \rangle = -\frac{\hbar^2 k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \sigma_{tot}} \quad \text{Optisches Theorem}$$

In „Vorwärtsrichtung“ heißt  $\vartheta = 0$ , bzw.  $\vec{k} = \vec{k}' = k\vec{e}_z$ .

Das Optische Theorem liefert uns eine Formel, mit der wir mittels der  $T$ -Matrix berechnen können, welcher Anteil von Teilchen nach der Streuung in Vorwärtsrichtung fehlt, also herausgestreut wurde. Das Verhalten lässt sich mit einer Milchglasscheibe in der Optik vergleichen. Dort wird der Absorptionskoeffizient durch einen imaginären Anteil im Propagator der Lichtwellen beschrieben. Daher der Wortzusatz *optisches* im Theorem.

Abbildung 7.9: In Vorwärtsrichtung „gestreute“ Teilchen.

### Beweis des Optischen Theorems

Bevor wir das Optische Theorem beweisen, benötigen wir noch mathematisches Handwerkszeug:

**Einschub: Das Hauptwertintegral.** Wir werden wieder auf das Problem stoßen, über eine Funktion mit Polstellen integrieren zu müssen. Dabei wird uns der Hauptsatz für solche Integrale helfen.<sup>27</sup> Er beschreibt wie man mittels Grenzwertbildung an der Polstelle das Integral über unbeschränkte Funktionen aufspalten kann, sofern bestimmte Bedingungen erfüllt sind.<sup>28</sup>

Abbildung 7.10: Limesbildung an der Polstelle einer Funktion.

Die Grundidee dieser Integralbildung ist (sei dabei  $x_0$  die Polstelle):

1. Integration von links bis  $x_0 - i\varepsilon$  bzw. von rechts bis  $x_0 + i\varepsilon$ . Damit ist die Funktion innerhalb des Integrationsintervalls noch beschränkt.
2. Limesbildung  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$  des eben gebildeten Integrals.

Mit dem infinitesimalen Term  $\pm i\varepsilon$  im Nenner unseres Operators liegt die Anwendung dieser Limesbildung nahe.

**Satz (Hauptwertintegral P.V., Principal Value).** *Konvergiert das Hauptwertintegral und existiert der Funktionswert von  $f(x)$  an der Stelle  $x_0$ , so kann folgender Limes über ein Integral an einer Polstelle gebildet werden:*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \pm 0} \int \frac{f(x)}{x - x_0 \pm i\varepsilon} dx = \text{P.V.} \int \frac{f(x)}{x - x_0} dx \mp i\pi \int f(x) \delta(x - x_0) dx$$

Dieser Satz wird uns helfen; zusätzlich benötigen wir aber noch den

<sup>26</sup>Der „ $2\pi$ “-Vorfaktor variiert in der Literatur. Er hängt davon ab, wie die ebene Welle normiert ist. Hier ist sie  $\phi = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ .

<sup>27</sup>Zum Hauptwert von Integralen siehe [Bronstein, Abschnitt 3.1.7.7].

<sup>28</sup>Tatsächlich müssen wir das Hauptwertintegral nicht berechnen, da es sich im Laufe unserer Rechnung selbst weghebt. Die so erhaltene Vereinfachung ist der eigentliche Trick der Anwendung; deswegen behandeln wir das Hauptwertintegral nicht allzu ausführlich.

**Einschub:  $\delta$ -Funktion einer Funktion.** Im Beweis wird die  $\delta$ -Funktion:

$$\delta(E_a - E_b) =$$

auftauchen. Sie steht in einem Integral  $\int dk_b$ , so dass die Energiewerte ausgeschrieben werden müssen, um integrieren zu können:

$$= \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_b^2}{2m}\right)$$

In Abschnitt 1.1.6 behandelten wir die  $\delta$ -Funktion. Wir benötigen die Eigenschaft 5 von Seite 24, die die  $\delta$ -Funktion einer Funktion behandelt:

$$= \delta(f(k_b))$$

Die  $\delta$ -Funktion der Funktion  $f(k_b)$  ergibt demnach, über die Nullstellen  $i$  summiert:

$$= \sum_i \frac{1}{f'(k_i)} \delta(k_b - k_i)$$

Unsere Funktion  $f(k_b)$  besitzt die Nullstellen  $k_a$  und  $-k_a$ . Die Ableitung ist:  $f'(k_b) = -2\frac{\hbar^2 k_b}{2m}$ . Setzen wir das ein:

$$= \frac{1}{\left|-\frac{\hbar^2(-k_a)}{m}\right|} \delta(k_b - (-k_a)) + \frac{1}{\left|-\frac{\hbar^2 k_a}{m}\right|} \delta(k_b - k_a)$$

Im Intervall  $k_b \in [0; +\infty[$ , das in unserer Rechnung vorkommen wird, wird das Argument von  $\delta(k_b - (-k_a))$ , für positives  $k_a$ , nie null, so dass die linke  $\delta$ -Funktion verschwindet; übrig bleibt:

$$= \frac{m}{\hbar^2 k_a} \delta(k_b - k_a) \quad (\delta_{k_b})$$

Die Beziehung  $(\delta_{k_b})$  werden wir im Beweis einsetzen.

Mit diesen Hilfsmitteln können wir das Optische Theorem beweisen.

*Beweis des Optischen Theorems.* Sei der Zustand  $|\vec{k}\rangle$  mit  $\vec{k} = k\vec{e}_z$  in Strahlrichtung gelegen, im Folgenden durch  $|a\rangle$  beschrieben; er hat den Energieeigenwert  $E$ . Sei außerdem  $|b\rangle := |\vec{k}'\rangle$  eine ebene Welle in der Streurichtung. Die asymptotische Streulösung  $|\psi_b\rangle$  besitzt den Energieeigenwert  $E_b$ , sie ist, wie auch  $|b\rangle$ , eine Funktion von  $\vec{k}'$ .

Der Imaginärteil einer komplexen Zahl  $c$  lässt sich durch  $\frac{1}{2i}(c - c^*)$  darstellen:

$$\begin{aligned} 2i \operatorname{Im}\langle a | \hat{T} | a \rangle &= \langle a | \hat{T} | a \rangle - \langle a | \hat{T} | a \rangle^* \\ &= \langle a | \hat{T} | a \rangle - \langle a | \hat{T} a \rangle^* \\ &= \langle a | \hat{T} | a \rangle - \langle \hat{T} a | a \rangle \\ &= \langle a | \hat{T} | a \rangle - \langle a | \hat{T}^\dagger | a \rangle \end{aligned}$$



Setzen wir für  $\hat{T}$  die Bestimmungsgleichung (T2), sowie davon die konjugiert komplexe Beziehung, wie wir sie oben gefunden haben, ein:

$$= \langle a | \hat{V} + \hat{V} \hat{G}^+ \hat{V} | a \rangle - \langle a | \hat{V} + \hat{V} \hat{G}^- \hat{V} | a \rangle$$

Ziehen wir den Erwartungswert für das vordere  $\hat{V}$  jeweils heraus, so heben sich die zwei Terme  $\langle a | \hat{V} | a \rangle$  gegenseitig weg, übrig bleibt:

$$= \langle a | \hat{V} \hat{G}^+ \hat{V} | a \rangle - \langle a | \hat{V} \hat{G}^- \hat{V} | a \rangle$$

Schieben wir eine  $\hat{\mathbb{1}}$  mit dem Eigenzustand  $|\psi_b\rangle$  von  $\hat{H}$  ein:

$$\begin{aligned} &= \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \langle \psi_b | \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) + i\varepsilon} \hat{V} | a \rangle d^3k_b \\ &\quad - \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \langle \psi_b | \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}) - i\varepsilon} \hat{V} | a \rangle d^3k_b \end{aligned}$$

Im Nenner können wir den Eigenwert  $E_b$  von  $\hat{H}$  bezüglich  $|\psi_b\rangle$  einsetzen, und somit das Bra durch  $\hat{G}^+$  bzw.  $\hat{G}^-$  „durschieben“:

$$\begin{aligned} &= \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \frac{1}{E - E_b + i\varepsilon} \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle d^3k_b \\ &\quad - \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \frac{1}{E - E_b - i\varepsilon} \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle d^3k_b \end{aligned}$$

Wenden wir nun den Hauptsatz an:

$$\begin{aligned} &= \text{P.V.} \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \frac{1}{E - E_b} \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle d^3k_b \\ &\quad - i\pi \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle \delta(E - E_b) d^3k_b \\ &\quad - \text{P.V.} \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \frac{1}{E - E_b} \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle d^3k_b \\ &\quad - i\pi \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \langle \psi_b | \hat{V} | a \rangle \delta(E - E_b) d^3k_b \end{aligned}$$

Die zwei Hauptwertintegrale heben sich gegenseitig auf, übrig bleibt:

$$= -2\pi i \int \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle \langle a | \hat{V} | \psi_b \rangle^* \delta(E - E_b) d^3k_b$$

Wechseln wir in Kugelkoordinaten und schreiben die Energieterme aus; Zusammenfassen der Skalarprodukte zum Betragsquadrat, mit  $\hat{T}|b\rangle = \hat{V}|\psi_b\rangle$  liefert:

$$= -2\pi i \int_0^{+\infty} k_b^2 \int |\langle a | \hat{T} | b \rangle|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k_a^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_b^2}{2m}\right) d\Omega dk_b$$

Umschreiben der  $\delta$ -Funktion, wie oben gezeigt, ergibt den Ausdruck ( $\delta_{k_b}$ ) von Seite 368, wobei der Vorfaktor vor das Integral gezogen werden kann:

$$= -2\pi i \frac{m}{\hbar^2 k_a} \int_0^{+\infty} k_b^2 \int |\langle a | \hat{T} | b \rangle|^2 \delta(k_b - k_a) d\Omega dk_b$$

Integration nach  $dk_b$ :

$$\begin{aligned} &= -2\pi i \frac{m}{\hbar^2 k_a} k_a^2 \int |\langle a | \hat{T} | a \rangle|^2 d\Omega \\ &= -2\pi i \frac{m}{\hbar^2} k_a \int |\langle a | \hat{T} | a \rangle|^2 d\Omega \\ &= -2\pi i \frac{m k_a}{\hbar^2} \frac{\hbar^4}{m^2 (2\pi)^4} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \end{aligned}$$

Das Integration des differentiellen Wirkungsquerschnitts über alle Raumwinkelbereiche  $d\Omega$  ergibt den totalen Wirkungsquerschnitt:

$$= -i \frac{\hbar^2 k_a}{m} \frac{1}{(2\pi)^3} \sigma_{\text{tot}}$$

Und damit erhalten wir schließlich:

$$\text{Im} \langle a | \hat{T} | a \rangle = -\frac{\hbar^2 k_a}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \sigma_{\text{tot}}$$

die Formel die das Optische Theorem vorhersagt.  $\square$

### Interpretation des Optischen Theorems

Betrachten wir die Kontinuitätsgleichung für ein komplexes Potential. Sie besagt:

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div } \vec{j} = \frac{2}{\hbar} \text{Im } \hat{V} \rho$$

Für ein komplexes Potential ist die „klassische“ reelle Kontinuitätsgleichung  $\frac{d\rho}{dt} + \text{div } \vec{j} = 0$  nicht erfüllt; die Teilchenzahl ist nicht erhalten. Dies ist jedoch physikalisch nur sinnvoll, wenn Absorption oder Erzeugung von Teilchen stattfindet.

Besitzt das Potential einen negativen Imaginärteil, so deuten wir dies als Absorption von Teilchen, ein positiver Imaginärteil bedeutet Erzeugung von Teilchen. Das macht für das Streupotential Sinn. Stellen wir uns direkt hinter das Target (auf die  $z$ -Achse), so sehen wir nur die nicht-gestreuten Teilchen. Der Rest scheint für uns vom Streupotential absorbiert worden zu sein.

Nehmen wir in die komplexe Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{2}{\hbar} \text{Im } \hat{V} \rho = \frac{d\rho}{dt} + \text{div } \vec{j}$$

und setzen statt dem Operator des Streupotentials den Erwartungswert der zugehörigen  $T$ -Matrix ein:

$$\frac{2}{\hbar} \text{Im} \langle k | \hat{T} | k \rangle \rho = -\frac{\hbar k}{m} \frac{1}{(2\pi)^3} \sigma_{\text{tot}} \rho$$

so muss diese Beziehung eine Kontinuitätsgleichung für unseren Streuprozess darstellen. Wir erhalten einen Ausdruck für die Dichteänderung unseres Teilchenstroms, bzw. für die „Absorption“ aus der Vorwärtsrichtung.

Der Faktor  $\frac{\hbar k}{m}$  ist die Teilchengeschwindigkeit, der Wirkungsquerschnitt ist eine Fläche, zusammengenommen (mit der Dichte  $\varrho$ ) steht rechts also ein Teilchenstrom. Dieser Strom beschreibt den Abfluss von Teilchen der proportional zum Wirkungsquerschnitt, und damit proportional zum Erwartungswert der  $T$ -Matrix ist.

## 7.4 Die Born'sche Reihe

### 7.4.1 Darstellung der $T$ -Matrix als Reihe

Ausgehend von der Bestimmungsgleichung (T1):

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{T}$$

hatten wir schon im Abschnitt 7.3.1 gesehen, dass die  $T$ -Matrix es erlaubt, Mehrfachstreuprozesse zu beschreiben. Dazu wurde  $\hat{T}$  rekursiv in die Operatorgleichung eingesetzt:

$$= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \left( \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \left( \hat{V} + \dots \right. \right.$$

Die so entstandene Reihe kann nach Potenzen von  $\hat{V}$  geordnet werden (wobei die Reihenfolge der Operatoren  $\hat{V}$  und  $\hat{G}_0^+$  eingehalten werden muss):

$$= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} + \dots$$

und in eine kompakte Reihenform gebracht werden:

$$= \hat{V} + \hat{V} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \right)^n$$

In dieser Reihenform nennt man die  $T$ -Matrix auch *Born'sche Reihe*:

$$\boxed{\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \right)^n} \quad \text{Born'sche Reihe}$$

Die Born'sche Reihe ist also zunächst nichts anderes, als eine Darstellungsform der  $T$ -Matrix. In Kurznotation lautet sie:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \hat{G}_0^+ \hat{V} \right)^n$$

### Konvergenz der Born'schen Reihe

Ziel dieser Darstellungsform ist – wenn sie konvergiert – ein Näherungsverfahren zur Berechnung der  $T$ -Matrix zu erhalten. Im Extremfall einer „starken“ Konvergenz (bei der schon die ersten Glieder sehr klein werden, weil  $\hat{V}$  eine sehr kleine Störung darstellt) setzt man  $\hat{T} \simeq \hat{V}$ . Von dieser *Born'schen Näherung* handelt der gesamte nächste Abschnitt 7.5. Da hier nur die physikalische Bedeutung der  $T$ -Matrix (anhand der Reihenform) gezeigt werden soll, und keine bestimmten Potentiale gewählt werden, gehen wir nicht auf die Konvergenz ein.

### 7.4.2 Møller-Operator

Bisher interessierte uns nur, wie die  $T$ -Matrix formal dargestellt werden kann. Eine nächster Schritt ist, die Wirkung des Operators auf Zustände zu betrachten. Erinnern wir uns daran, dass mit dem Hamilton-Operator der Streuung:

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

der durch das Streupotential gestörte Zustand (die stationäre asymptotische Streuwelle)  $|\psi\rangle$  die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung löst:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Die ungestörte Wellenfunktion wird durch die ebene Welle  $|\vec{k}\rangle$  beschrieben:

$$\hat{H}_0|\vec{k}\rangle = E|\vec{k}\rangle$$

Setzt man nun in die Definitionsgleichung der  $T$ -Matrix:

$$\hat{V}|\psi\rangle = \hat{T}|\vec{k}\rangle$$

die Born'sche Reihe ein:

$$= \hat{V}|\vec{k}\rangle + \hat{V} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \right)^n |\vec{k}\rangle$$

und klammert den Operator  $\hat{V}$  aus:

$$= \hat{V} \left( \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \right)^n \right) |\vec{k}\rangle$$

so erhält man eine kompaktere Darstellung der  $T$ -Matrix, wenn man den Operator in der Klammer als neuen Operator  $\hat{\Omega}$  zusammenfasst:

$$= \hat{V} \hat{\Omega} |\vec{k}\rangle$$

**Definition (Møller Operator).** Mit dem Møller-Operator:

$$\hat{\Omega} := \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \right)^n \quad \text{Møller-Operator}$$

schreibt sich die Bestimmungsgleichung für die Streulösung in kompakter Form:

$$|\psi\rangle = \hat{\Omega} |\vec{k}\rangle$$

Die  $T$ -Matrix lautet, ausgedrückt mit  $\hat{\Omega}$ :

$$\hat{T} = \hat{V} \hat{\Omega}$$

Auch der Møller-Operator kann kompakt geschrieben werden:

$$\hat{\Omega} = \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \hat{G}_0^+ \hat{V} \right)^n$$

### 7.4.3 Die Born'sche Reihe im Ortsraum

Möchten wir die Ortspropagation der  $T$ -Matrix betrachten, so multiplizieren wir die Born'sche Reihe von links mit dem Zielort  $\langle \vec{r}' |$ , und von rechts mit der Startkoordinate  $|\vec{r}\rangle$  des Teilchens:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | \hat{T} | \vec{r} \rangle &= \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r} \rangle + \langle \vec{r}' | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} | \vec{r} \rangle \\ &+ \langle \vec{r}' | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} | \vec{r} \rangle + \dots \end{aligned}$$

Schieben wir  $\hat{\mathbb{1}}$ en zwischen die Operatoren der potentiellen Energie und  $\hat{G}_0^+$  und betrachten, der Übersichtlichkeit wegen, nur noch die ersten zwei Reihenglieder:

$$\begin{aligned} &= \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r} \rangle \\ &+ \iint \langle \vec{r}' | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \hat{G}_0^+ | \vec{r}''' \rangle \langle \vec{r}''' | \hat{V} | \vec{r} \rangle d^3r''' d^3r'' \\ &+ \dots \end{aligned}$$

Bei lokalem Potential ist das Matrixelement von  $\hat{V}$  nur dann ungleich null, wenn  $\vec{r}_i = \vec{r}_f$  ist; ersetzen wir also das Matrixelement durch  $\hat{V}$  und die  $\delta$ -Funktion:

$$\begin{aligned} &= \hat{V}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ &+ \iint \hat{V}(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \hat{G}_0^+ | \vec{r}''' \rangle \hat{V}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}''') d^3r''' d^3r'' \\ &+ \dots \end{aligned}$$

Durch die Integration fallen die  $\delta$ -Funktionen weg, die Übergangsamplitude des Operators  $\hat{G}_0^+$  ist die Green'sche Funktion  $\mathcal{G}_0^+$  für die freie Propagation des Teilchens zwischen den Orten  $\vec{r}$  und  $\vec{r}'$ :

$$= \hat{V}(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}') \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \hat{V}(\vec{r}) + \dots$$

#### Deutung der einzelnen Reihenglieder

Betrachten wir das zweite Glied der umgeformten Reihe, so stellen wir fest, dass, obwohl  $\hat{V}$  ein lokales Potential ist,  $\hat{T}$  nicht lokal ist. Denn  $\hat{T}$  hängt im zweiten Glied von zwei Ortsvektoren ab; im dritten stehen drei verschiedene Ortsvektoren, usw. Diese Terme drücken die Mehrfachstreuung aus. Konkret stellt der erste Term die einfache Streuung dar, der zweite die Folge von Streuung – freier Propagation – Streuung. Die freie Propagation zwischen den einzelnen Streuprozessen wird durch  $\mathcal{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r}' | \hat{G}_0^+ | \vec{r} \rangle$  ausgedrückt. Dies entspricht einer Kugelwelle  $\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ , die von der Position  $\vec{r}$  startet, und am Ort  $\vec{r}'$  ankommt. In diesem Bereich zwischen  $\vec{r}$  und  $\vec{r}'$  spürt das Teilchen nichts vom Potential.

Abbildung 7.11: Zweifachstreuprozess.

Naiv ausgedrückt bedeutet der Term:

$$\hat{V}(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \hat{G}_0^+ | \vec{r} \rangle \hat{V}(\vec{r})$$

folgendes: Ein Teilchen am Ort  $\vec{r}$  spürt das Potential  $\hat{V}(\vec{r})$  und wird dadurch in seiner Bahn instantan abgelenkt, bewegt sich dann frei vom Ort  $\vec{r}$  zur Position  $\vec{r}'$ , wo es plötzlich das Potential  $\hat{V}(\vec{r}')$  spürt und wieder instantan abgelenkt wird.

Entsprechend der Zweifachstreuung wird eine Dreifachstreuung im dritten Term dargestellt durch die Prozessfolge Streuung – freie Propagation – Streuung – freie Propagation – Streuung. Dieser dritte Term hat die Form:

$$\hat{V}(\vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \hat{G}_0^+ | \vec{r}' \rangle \hat{V}(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \hat{G}_0^+ | \vec{r} \rangle \hat{V}(\vec{r})$$

Abbildung 7.12: Dreifachstreuprozess.

### Beschreibung der Born'schen Reihe mittels Feynman-Diagrammen

Jedem Reihenglied in der Born'schen Darstellung der Transition-Matrix wird ein *Feynman-Diagramm* zugeordnet, das graphisch ausdrückt, um was für einen Streuprozess es sich handelt. Wenn, wie bei unserer Behandlung der Streuung als Blackbox  $\mathcal{T}$ , der einzelne Streuprozess nicht durchleuchtet werden soll, sondern nur das Ergebnis der Streuung, dann stellt man die Einzelstreuungsprozesse als „Leitersprossen“ in den Graphen dar. Die  $T$ -Matrix ist dann – da zu jedem Feynman-Diagramm der entsprechende Term der Born'schen Reihe gehört – die Summe über alle Leiter-Diagramme:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \dots$$

Abbildung 7.13: Feynman-Diagramme („Leiterdiagramme“) als Darstellungsform der Born'schen Reihe. Die einzelne Sprosse stellt den Wechselwirkungsprozess zwischen dem (Projektil-)Teilchen und dem ortsfesten Target (Streuzentrum) dar, die Verbindung zwischen den Sprossen ist der Teilchenweg, also die freie Propagation zwischen den Wechselwirkungsorten.

Auch die Feynman-Diagramme beschreiben die Mehrfachstreuung mit dem einfachen Bild, dass das Teilchen an verschiedenen Stellen (den einzelnen Streuzentren) ein Potential spürt, sich zwischen diesen Orten jedoch frei bewegt.

## 7.5 Born'sche Näherung

### 7.5.1 Grundidee

Wir suchen nun einen berechenbaren Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt  $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\vartheta)|^2$  und damit für die  $T$ -Matrix. Für ein  $\hat{V}$ , das klein genug ist, um Potenzen davon vernachlässigen zu können, kann man als Näherung die Born'sche Reihe:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \dots$$

gleich nach dem ersten Glied abbrechen. Die so weggelassenen Terme enthalten nur Potenzen  $\geq 2$  von  $\hat{V}$ :

$$\approx \hat{V}$$

Das ist die Born'sche Näherung.

**Definition (Born'sche Näherung).** *Bei kleinen Potentials wird zur näherungsweise Berechnung der  $T$ -Matrix (und damit des differentiellen Wirkungsquerschnitts) die Born'sche Reihe nach dem ersten Glied abgebrochen:*

$$\boxed{\hat{T} = \hat{V}} \quad \text{Born'sche Näherung}$$

Um die Näherung guten Gewissens machen zu können, muss  $\hat{V}$  klein genug sein. Im Fall eines schwachen Potentials unterscheidet sich aber die stationäre Streuwelle  $|\psi\rangle$  nur gering von der einfallenden ebenen Welle  $|\vec{k}\rangle$ . Man ersetzt also genaugenommen den Wellenvektor in der Übergangsamplitude des Potentials:

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle \approx \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle$$

was aber mit der Definition der  $T$ -Matrix:

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle = \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$

einer Ersetzung von  $\hat{T}$  durch  $\hat{V}$  gleichkommt.

### Lokalität

Der vollständige Operator  $\hat{T}$  ist nicht-lokal. In Ortsdarstellung lautet er:

$$\hat{T}(\vec{r}, \vec{r}') = \iint |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \hat{T} | \vec{r}\rangle \langle \vec{r} | d^3r d^3r'$$

Im Falle der Born'schen Näherung mit einem lokalen Potential ist auch  $\hat{T}$ , wie  $\hat{V}(\vec{r})$ , nur noch lokal:

$$\hat{T}(\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$



### Impulsübertrag

Bei Stößen (vor allem in der Kern- und Teilchenphysik) spricht man vom *Impulsübertrag* als dem Anteil des Impulses, der beim Stoß abgegeben wurde:

**Definition (Impulsübertrag).** Die Differenz des Impulses eines stoßenden (gestreuten) Teilchens vor und nach dem Streuprozess wird Impulsübertrag  $\vec{q}$  genannt:

$$\vec{q} := \vec{k} - \vec{k}'$$

Im Folgenden benötigen wir den Betrag  $q$  des Impulsübertrags:

$$q = \sqrt{\vec{q} \cdot \vec{q}}$$

Setzen wir  $\vec{q} := \vec{k} - \vec{k}'$  ein und multiplizieren aus, wobei  $\vartheta := \angle(\vec{k}, \vec{k}')$  wieder der Streuwinkel ist:

$$= \sqrt{\vec{k}^2 - 2kk' \cos \vartheta + \vec{k}'^2}$$

Da wir davon ausgehen, dass unser Target ortsfest ist, ist der Betrag des Impulses vor und nach dem Stoß derselbe:

$$\begin{aligned} &= \sqrt{2k^2 - 2k^2 \cos \vartheta} \\ &= \sqrt{2k^2(1 - \cos \vartheta)} \\ &= \sqrt{4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \\ &= 2k \sin \frac{\vartheta}{2} \end{aligned}$$

Damit haben wir einen Ausdruck für den Betrag  $q$  des Impulsübertrags.

### 7.5.2 Streuamplitude in Born'scher Näherung

Da wir mit der Born'schen Näherung einen einfachen Ausdruck für  $\hat{T}$  haben, können wir die Streuamplitude  $A(\vartheta)$  mit dieser Näherung berechnen. Danach bleibt zu prüfen, ob der gewonnene Ausdruck sinnvoll ist, die Näherung also berechtigt war.

Bleiben wir beim wichtigen Spezialfall des radialsymmetrischen Potentials:<sup>29</sup>

$$A(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$

Wechsel in die Ortsdarstellung:

$$= \iint \langle \vec{k}' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{T} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle d^3r d^3r'$$

<sup>29</sup>Die hier verwendete Streuamplitude  $A$  ist auf den „Normal“-Standard normiert, mit der ebenen Welle  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  ohne Vorfaktor. Das ist in den meisten Lehrbüchern so. Bezüglich dem bisherigen  $\tilde{A}$  bedeutet diese Normierung:  $A = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \tilde{A}$ .

$\hat{T}(r) = \hat{V}(r) \delta(\vec{r} - \vec{r}')$  eingesetzt und über  $d^3r'$  integriert:

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \hat{V}(r) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r$$

Zusammenfassen der Exponentialfunktionen mit der Definition des Impulsübertrags,  $\vec{q} := \vec{k} - \vec{k}'$ :

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{V}(r) d^3r \quad A_r^{\text{B.N.}}(q)$$

In der Beziehung  $A_r^{\text{B.N.}}(q)$  ist das Integral von der Form einer Fouriertransformation:

**Satz.** In erster Born'scher Näherung ist die Streuamplitude  $A(\vartheta)$  (bis auf Vorfaktoren) die Fouriertransformierte des Streupotentials:

$$A(q) = -\frac{m}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \text{F.T.}(\hat{V}(r))$$

Rechnen wir noch etwas mit dem Ausdruck für die Streuamplitude:

$$A(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{V}(r) d^3r$$

indem wir in Kugelkoordinaten wechseln:

$$\begin{aligned} &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \vartheta e^{-iqr \cos \vartheta} \hat{V}(r) d\varphi d\vartheta dr \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^{+\infty} \int_0^\pi r^2 \hat{V}(r) \sin \vartheta e^{-iqr \cos \vartheta} d\vartheta dr \end{aligned}$$

Substitution mit  $\frac{d}{d\vartheta} \cos \vartheta = -\sin \vartheta$ :

$$= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^{+1} (-) r^2 \hat{V}(r) e^{-iqr \cos \vartheta} d(\cos \vartheta) dr$$

Integration über  $d(\cos \vartheta)$ :

$$= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} r^2 \hat{V}(r) \frac{1}{iqr} (-) (e^{-iqr} - e^{iqr}) dr$$

Subtraktion der Exponentialfunktionen zu  $2i \sin qr$ , wobei sich das  $(-)$  mit dem Vorzeichen des erhaltenen Sinus-Ausdrucks weghebt. Das Ergebnis lautet:

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} r^2 \hat{V}(r) \frac{\sin qr}{qr} dr$$

Die Born'sche Näherung liefert uns damit einen Ausdruck für die Streuamplitude, den wir für eine gegebenes  $\hat{V}$  berechnen können:

$$A(q) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} r^2 \hat{V}(r) \frac{\sin qr}{qr} dr$$

### Güte der Näherung

Um abschätzen zu können, wie gut die Näherung ist, betrachten wir die Korrektur die sich in 2. Näherung ergeben würde, wir vergleichen also den quadratischen Term größenordnungsmäßig mit  $\hat{V}$ . Ergibt sich die folgende Beziehung:

$$\hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \ll \hat{V}$$

so ist die Näherung gerechtfertigt. In Ortsdarstellung muss dafür gelten:<sup>30</sup>

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \hat{V}(r') \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \hat{V}(r) d^3r' \ll \hat{V}(r)$$

Der Fall großer Abstände  $r$  ist für den Vergleich uninteressant, da dort  $\hat{V} = 0$  ist. Gehen wir also mit  $r = 0$  ins Zentrum des Potentials, und kürzen  $\hat{V}(r = 0)$ , was sicher ungleich null ist, heraus:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \hat{V}(r') \frac{e^{i\vec{k}\cdot(-\vec{r}')}}{|-\vec{r}'|} d^3r' \ll 1$$

Wechseln wir in Kugelkoordinaten, so lautet die „Akzeptanzbedingung“ für die Born'sche Näherung (Rechnung analog zu oben):

$$\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} \hat{V}(r') \sin(kr') dr' \ll 1$$

Bei kleinem  $\hat{V}$  ist dieses Integral klein und somit ist die Born'sche Näherung akzeptabel. Den Test kann man aber erst durchführen, wenn eine konkrete Potentialform, und damit ein  $\hat{V}(r)$ , vorliegt.

Statt die ersten beiden Reihenglieder zu vergleichen, kann man die Differenz von Streuwellenfunktion  $|\psi\rangle$  und der ebenen Welle  $|k\rangle$  betrachten. Bei einem schwachen Potential muss diese Differenz ebenfalls klein sein.<sup>31</sup>

### 7.5.3 Anwendung: Elektrischer Formfaktor

#### Streuamplitude und Elektrodynamik

Betrachten wir die Streuung geladener Teilchen an einer beliebigen Ladungsverteilung. Es gilt die Maxwell-Gleichung, die die elektrische Ladung als Quelle oder Senke des elektrischen Feldes identifiziert:

$$\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r}) = 4\pi \varrho(\vec{r})$$

wobei die elektrische Feldstärke der negative Gradient des Potentials ist:

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\operatorname{grad} \Phi(\vec{r})$$

<sup>30</sup> Vgl. mit Abschnitt 7.4.3 auf Seite 374.

<sup>31</sup> Siehe dazu [Messiah-2, Abschnitt 19.1.6].

Diese Beziehungen fasst man in der *Poisson-Gleichung* zusammen:

$$\Delta\Phi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$$

Die potentielle Energie, die eine (auf die Elektronenladung  $e_0$  normierte) Probeladung durch das Potential besitzt, ist:

$$\hat{V}(\vec{r}) = -e_0\Phi(\vec{r})$$

Betrachten wir nun die Streuung am elektrischen Potential unter Nutzung der Poisson-Gleichung. Die Fouriertransformierte des Operators der potentiellen Energie ist mit  $\hat{V}(q) := \text{F.T.}(\hat{V}(r))$ :

$$\hat{V}(q) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{V}(r) d^3r$$

Setzt man für  $\hat{V}$  die potentielle Energie  $-e_0\Phi(\vec{r})$  ein, integriert zweimal partiell, so kann man die Poisson-Gleichung einsetzen und erhält damit eine Beziehung für die Ladungsdichte:

$$\hat{V}(q) = -\frac{4\pi e_0}{q^2} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int e^{-iqr} \rho(r) dr$$

Vergleicht man diese Beziehung mit  $A_r^{\text{B.N.}}(q)$  von Seite 378, wo sich die Streuamplitude in Born'scher Näherung als die Fouriertransformierte der potentiellen Energie ergab:

$$A(q) = -\frac{m}{\hbar^2} (2\pi)^{-1} \int e^{-iqr} \hat{V}(r) dr$$

So folgt, dass die Streuamplitude  $A(q)$  die Fouriertransformierte der Ladungsverteilung  $\rho(r)$  ist:

$$A(q) = \frac{1}{q^2} \frac{m}{2\pi\hbar^2} 4\pi e_0 \int e^{-iqr} \rho(r) dr$$

Diese Beziehung ist wichtig, da sie eine experimentell messbare Größe (die Streuamplitude  $A$  im Betragsquadrat – über den Wirkungsquerschnitt) mit der Ladungsverteilung zusammenbringt; einer Größe, die im mikroskopischen Bereich nicht direkt experimentell messbar ist, jedoch für Aussagen über die Struktur der subatomaren Teilchen von äußerster Wichtigkeit ist.

**Definition (Elektrischer Formfaktor).** Die Beziehung von elektrischer Ladungsverteilung und der Streuamplitude fasst man im elektrischen Formfaktor zusammen. Er ist definiert als die Fouriertransformierte der Ladungsverteilung:

$$\boxed{F(q) := \text{F.T.}(\rho(\vec{r}))}$$

Elektrischer Formfaktor

Durch diese Definition ist er folgendermaßen mit der Streuamplitude verknüpft:

$$A(q) = \frac{1}{q^2} \frac{2me_0}{\hbar^2} F(q)$$

Um die Ladungsverteilung, z.B. eines Nukleons zu bestimmen, macht man Streuexperimente. Die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen kann im Formfaktor als experimentellem Ergebnis zusammengefasst werden. Daraus kann mit obiger Beziehung auf die Ladungsverteilung geschlossen werden.

Der Formfaktor beinhaltet zweierlei:

- Die Gesamtladung des (Target-)Teilchens.
- Die Ladungsverteilung des (Target-)Teilchens.

### Beispiele elektrischer Formfaktoren

Vergleichen wir die Coulomb-Streuung für verschiedene Ladungsverteilungen.

**Beispiel (Punktladung).** Eine Punktladung ist dadurch ausgezeichnet, dass Ladung und Masse in einem mathematischen Punkt, also ohne Ausdehnung, vereinigt sind:

$$\varrho(r) = Ze_0\delta(r)$$

Die Fouriertransformierte der  $\delta$ -Funktion ist eine Konstante:

$$F(q) = Ze_0 = \text{const.}$$

*Ein strukturloses Teilchen hat einen konstanten Formfaktor.* Das heißt, egal welcher Impulsübertrag stattfindet, der Formfaktor ändert sich durch diesen experimentellen Parameter nicht.

Somit hat man einen Indikator dafür, ob man an einem echten Elementarteilchen (punktförmig), oder an einem zusammengesetzten Teilchen streut.

**Beispiel (Proton).** Bei Nukleonen liegt eine ausgedehnte Ladungsverteilung vor. Variiert man die Strahlenergie – und damit den Impulsübertrag – so variiert der Formfaktor. Aus der Abhängigkeit  $F(q)$  muss man versuchen auf den inneren Aufbau des Protons zu schließen. Dazu entwickelt man eine Theorie, berechnet den Formfaktor dieses Modells, und prüft ihn durch das Experiment.

Abbildung 7.14: Formfaktor eines Protons in Abhängigkeit vom Impulsübertrag.

## 7.6 Streuamplitude und Streuphasen

In diesem Abschnitt versuchen wir Streulösungen zu gewinnen, also Zustände, die die Schrödinger-Gleichung des Streupotentials lösen. Bleiben wir dabei beim Zentralfeld mit  $\hat{V} = \hat{V}(|\vec{r}|)$  und verschwindendem Potential im Unendlichen,  $\lim_{r \rightarrow \infty} \hat{V}(r) = 0$ .

### 7.6.1 Betrachtungsweise des theoretischen Physikers

Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung lässt sich formal hinschreiben; separiert nach Orts- und Winkelanteil und nach Quantenzahlen:

$$\phi_E(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} R_{El}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Im Zentralfeld reduziert auf eine  $r$ - und  $\vartheta$ -Abhängigkeit:

$$= \sum_{l=0}^{\infty} c_l R_{El}(r) P_l(\cos \vartheta) \quad (\phi_E)$$

Diese Aufspaltung der Wellenfunktion in eine Reihe nach der Quantenzahl  $l$  wird als *Partialwellenmethode* bezeichnet, die einzelnen Reihenglieder als *Partialwellen*.

Der Radialanteil der Lösung,  $R_{El}(r)$ , ist dabei formal gegeben durch:<sup>32</sup>

$$R_{El}(r) = \frac{u_{El}(r)}{r}$$

Die darin enthaltene Wellenfunktion  $u_{El}(r)$  ist eine Lösung der radialen, zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} u_{El}(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} l(l+1) u_{El}(r) + \hat{V}(r) u_{El}(r) = E u_{El}(r)$$

Ein Ausdruck für die Funktion  $u_{El}(r)$  ist somit das Ziel der Überlegungen.

Der Term  $\frac{\hbar^2}{2Mr^2} l(l+1)$  im Hamilton-Operator wird als *Zentrifugalpotential* bezeichnet. Er beschreibt den Anteil der Energie des gestreuten Teilchens, der in seinem Bahndrehimpuls steckt.<sup>33</sup>

#### Spezialfall: Teilchen ohne Drehimpuls

Ist  $\hat{L} = 0$ , so entfällt der Zentrifugalterm. Der einfachste Fall ist dabei der, bei dem auch das Störpotential verschwindet,  $\hat{V} = 0$ . Dann ist die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung durch eine Sinusfunktion gegeben:

$$u_{El}(r) \sim \sin(kr), \quad \text{für } \hat{L} = 0 \wedge \hat{V} = 0$$

<sup>32</sup>Im Folgenden bezeichnet  $M$  die Masse des Teilchens, um keine Verwechslung mit Magnetquantenzahlen  $m$  aufkommen zu lassen.

<sup>33</sup>Den Spin betrachten wir hier ja nicht.

mit der Beziehung zwischen Wellenzahl  $k$  und Energie  $E$  des Teilchens:

$$\hbar k = \sqrt{2ME}$$

Liegt ein kurzreichweitiges Potential vor, z.B. ein Kastenpotential, so ist eine Lösung innerhalb der Reichweite  $r_0$  durch das Potential mitbestimmt. Außerhalb des Wirkungsbereichs ist die Form der Lösung aber wieder sinusförmig. Formal muss also bei  $r_0$  die „Potentiallösung“ stetig in die „freie“ Lösung übergehen; außerhalb des Potentials sieht die Streuwelle gleich aus wie die freie Wellenfunktion, bis auf eine Phasenverschiebung  $\delta_{l=0}$ , die für die Stetigkeit der Wellenfunktion im Übergangsbereich „sorgt“:

$$u_{El}(r) \sim \sin(kr + \delta_{l=0})$$

[Messiah-1, Abschnitt 10.2.1] fasst das Ergebnis so zusammen:

**Satz.** Die Wirkung des Streupotentials besteht in einer Phasenverschiebung  $\delta_l$  bei jeder auslaufenden Partialwelle  $u_l$ .

Die Phasenverschiebung gibt somit eine gewisse Auskunft über das streuende Potential. Man nennt sie *Streuphase*.

Abbildung 7.15: Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für  $l = 0$  und  $\hat{V} = 0$ , im Vergleich zur Lösung bei kurzreichweisem Potential mit  $\hat{V}(r \leq r_0)$ .

Das Vorzeichen der Phasenverschiebung (Streuphase) hängt dabei vom Vorzeichen des Potentials ab:

Potential	attraktiv ( $\hat{V} < 0$ )	$\hat{V} = 0$	repulsiv ( $\hat{V} > 0$ )
Streuphase	$\delta_l > 0$	$\delta_l = 0$	$\delta_l < 0$

Tabelle 7.1: Phasenverschiebung der asymptotischen Lösung bei kurzreichweisem Potential gegenüber der freien Lösung.

[Messiah-1, Abschnitt 10.5.2] verallgemeinert die Beziehung zwischen Potential und Streuphase in einem

**Satz.** Jede Vergrößerung des Potentials (d.h. eine größere Abstoßung) verringert die Streuphase, jede Abschwächung des Potentials (größere Anziehung) führt zu einer Vergrößerung der Streuphase.

### Teilchen mit Drehimpuls

Ist  $l > 0$ , so muss der Zentrifugalterm berücksichtigt werden. Man fasst diesen und den eigentlichen Potentialterm gerne zum *effektiven Potential* zusammen:

$$\frac{\hbar^2}{2Mr^2} l(l+1) + \hat{V}(r) =: \hat{V}_{\text{eff}}$$

Im Falle  $\hat{V} = 0$  ist die Lösung mit Drehimpuls durch die sphärische Besselfunktion gegeben:

$$\frac{u_{El}(r)}{r} = j_l(kr)$$

Wenn die Besselfunktion eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ohne Streupotentialterm ist, dann können wir sie für große Abstände  $r \gg r_0$  vom Streuzentrum als Lösungsform verwenden. Für großes  $r$  lassen sich die  $j_l(kr)$  jedoch näherungsweise durch die sinc-Funktion  $\frac{\sin kr}{kr}$  bestimmen, so dass wir, für die asymptotische Streuwelle mit Drehimpuls, folgende Lösungsform erhalten:

$$\left. \frac{u_{El}(r)}{r} \right|_{r \rightarrow \infty} = \lim_{r \rightarrow \infty} j_l(kr) = \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{l\pi}{2})$$

Durch den Drehimpuls erhalten wir damit eine Phasenverschiebung um  $-\frac{l\pi}{2}$  für den asymptotischen Bereich. Schalten wir zusätzlich noch das Potential ein, so müssen wir in der asymptotischen Lösung sowohl die Streuphase des Potentials, als auch die Phasenverschiebung des Zentrifugalterms berücksichtigen. Unsere allgemeine Streuwelle ist also proportional zu folgendem Sinus:

$$\boxed{u_{El}(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \quad (u_{\infty}^{El})$$

Abbildung 7.16: Zusätzliches „Zentrifugalpotential“ durch den Drehimpuls des Teilchens.

### Vorteile der Darstellungsart

- $u_{El}(r)$  ist einfach zu berechnen; daraus lässt sich dann die Streuphase  $\delta_l$  bestimmen.
- Aus den Streuphasen  $\delta_l$  lassen sich Informationen über das Potential gewinnen. Dies ist vor allem dann wichtig, wenn man nichts über die dem Streuprozess zugrunde liegende Wechselwirkung weiß.

**Beispiel (Informationen aus der Streuphase).** Bei der Nukleon-Nukleon-Streuung ist das Potential durch die starke Wechselwirkung gegeben. Betrachtet man die Streuphase in Abhängigkeit der Strahlenergie (wie man sie experimentell gewinnt, dazu gleich mehr), so findet man einen Nulldurchgang; d.h. durch die Streuphase erkennt man bei welcher Energie man dem Target nahe genug kommt, dass das Potential repulsiv wird. Damit hat man einen wichtigen Eckpunkt der Wechselwirkung gefunden.

Abbildung 7.17: Streuphase  $\delta_l$  in Abhängigkeit der Projektilenergie.

Betrachten wir  $u_{\infty}^{El}$ . Ist die Strahlenergie klein, so ist auch  $k$  klein; damit wirkt sich eine Ortsänderung nur wenig auf die Lösungswelle aus, der attraktive Anteil dominiert,  $\delta_l > 0$ . Ist dagegen die Energie und damit  $k$  groß, so liegt, mit der Variation von  $r$ , eine schnelle Oszillation vor. Durch den starken Anstieg der Wellenfunktion schon für kleine Ortsänderungen ist das System viel sensitiver für den repulsiven Anteil;  $\delta_l < 0$ .



Abbildung 7.18: Wellenfunktion in Abhängigkeit der Projektilenergie.

### 7.6.2 Betrachtung aus der Sicht des Experimentators

Während der theoretische Physiker im Allgemeinen die Wellenfunktion des Problems betrachtet:

$$\psi_{\infty}(r) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left( e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} A(\vartheta) \right) \quad (\psi_{\infty})$$

bzw. davon die Streuamplitude  $A(\vartheta)$ , wird im Experiment der differentielle Wirkungsquerschnitt gemessen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\vartheta)|^2$$

und damit das Betragsquadrat der Streuamplitude. Die Frage ist nun, wie man aus dem Experiment die Streuphase gewinnen kann.

Betrachten wir dazu  $e^{ikz}$  in Kugelkoordinaten:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta}$$

wobei  $\vartheta$  wieder der Streuwinkel ist. Da die Legendre-Polynome ein vollständiges Funktionensystem bilden, kann man die gegebene Exponentialfunktion nach ihnen entwickeln:

$$= \sum_{l=0}^{\infty} f_l(kr) P_l(\cos \vartheta)$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $f_l(kr)$  ergeben sich als die Besselfunktionen mit einem dreimpulsabhängigen Vorfaktor:

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \vartheta)$$

Für große  $r$  lässt sich die Besselfunktion durch die sinc-Funktion nähern:

$$e^{ikr \cos \vartheta} \Big|_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \vartheta)$$

Damit haben wir einen Teil der Streuwelle in die Partialwellenform zerlegt.

Entwickeln wir auch die Streuamplitude nach Legendre-Polynomen:

$$A(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \vartheta)$$

So können wir die zwei Reihen in die asymptotische Lösung  $\psi_{\infty}$  einsetzen:

$$\psi_{\infty}(r) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) \left( i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} + \frac{e^{ikr}}{r} A_l \right)$$

Ersetzen wir  $i^l$  durch  $i^l = (e^{i\frac{\pi}{2}})^l = e^{il\frac{\pi}{2}}$ :

$$= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) \left( e^{il\frac{\pi}{2}} (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} + \frac{e^{ikr}}{r} A_l \right)$$

Umschreiben mit  $\sin x = \frac{1}{2i} (e^{ix} - e^{-ix})$ :

$$= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) \left( e^{il\frac{\pi}{2}} (2l+1) \frac{1}{2ikr} \left( e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) + \frac{e^{ikr}}{r} A_l \right)$$

$$\boxed{\psi_{\infty}(r) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) \left( (2l+1) \frac{1}{2ikr} \left( e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)} \right) + \frac{e^{ikr}}{r} A_l \right)}$$

Dieses Ergebnis ist die experimentelle Darstellung der asymptotischen Streuwelle als Entwicklung nach Legendre-Polynomen.

### 7.6.3 Vergleich der theoretischen mit der experimentellen Darstellung der Streulösung

Vergleichen wir das Ergebnis der experimentellen Sicht mit dem formalen Ansatz  $\phi_E$  von Seite 382:

$$\phi_E(r) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l R_{El}(r) P_l(\cos \vartheta)$$

in den wir den Radialanteil  $u_{\infty}^{El}$  von Seite 384, gemäß  $R_{El} = \frac{u_{\infty}^{El}}{r}$  einsetzen (wobei  $C_l := kc_l$  ist):

$$= \sum_{l=0}^{\infty} C_l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \vartheta)$$

Bringen wir noch die Sinus-Funktion in Exponentialform, so erhalten wir:

$$\boxed{\phi_E(r) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l \frac{1}{2ikr} \left( e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \right) P_l(\cos \vartheta)} \quad (\phi_{\infty})$$

Beide Darstellungen sind in der Basis desselben (orthogonalen) Funktionensystems dargestellt. Die Koeffizienten müssen also gleich sein. Ebenso müssen die Faktoren vor den Impulseigenfunktionen  $e^{\pm ikr}$  gleich sein; wir können also einen Koeffizientenvergleich von  $\psi_{\infty}$  mit  $\phi_{\infty}$  durchführen:

1. Koeffizienten bei  $P_l e^{-ikr}$ :

$$-C_l \frac{1}{2ikr} e^{-i(-\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} = -(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \frac{2l+1}{2ikr} e^{il\pi} \quad (1)$$

2. Koeffizienten bei  $P_l e^{ikr}$ :

$$C_l \frac{1}{2ikr} e^{i(-\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left( \frac{2l+1}{2ikr} + \frac{A_l}{r} \right) \quad (2)$$

Lösen wir (1) nach  $C_l$  auf:

$$C_l = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} (2l+1) e^{i(\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \quad (1')$$

Auflösen von (2) nach  $A_l$ :

$$A_l = \frac{1}{2ik} \left( (2\pi)^{\frac{3}{2}} C_l e^{i(-\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - (2l+1) \right) \quad (2')$$

(1') in (2') eingesetzt:

$$\begin{aligned} A_l &= \frac{1}{2ik} \left( (2\pi)^{\frac{3}{2}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} (2l+1) e^{i(\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} e^{i(-\frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - (2l+1) \right) \\ &= \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \end{aligned}$$

Schreiben wir das Ergebnis noch etwas kompakter, wozu wir zunächst die Eins umschreiben:

$$= \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - e^{i\delta_l} e^{-i\delta_l})$$

Ausklammern der positiven  $e^{i\delta_l}$ -Funktion:

$$= \frac{2l+1}{2ik} e^{i\delta_l} (e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l})$$

Wobei die Differenz in der Klammer einen Sinus ergibt; Ergebnis:

$$= \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

Damit haben wir eine Formel, die die experimentell bestimmbare Streuamplitude mit der für die Theorie interessanten Streuphase in Beziehung setzt:<sup>34</sup>

$$\boxed{A_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l}$$

<sup>34</sup>Als „Mittler“ dieser gemeinsamen Beziehung benötigt man die Entwicklung nach Legendre-Polynomen. Das macht die Umrechnung von  $A(\vartheta)$  nach  $\delta_l$  nicht trivial; sie ist aber prinzipiell möglich. Viele Experimentalphysiker bieten den Service, ihre Messergebnisse auch als Streuphase anzugeben.

### 7.6.4 Zusammenfassung der Phasenbetrachtung

Wir haben zwei verschiedene Darstellungen zur Beschreibung von Streuprozessen gefunden. Die eine ist eine theoretische Sicht, die die Streuphase  $\delta_l$ , als die Phasenverschiebung der asymptotischen Streuwelle gegenüber der freien Lösung betrachtet. Die andere Darstellung geht vom Experiment aus, in dem der differentielle Wirkungsquerschnitt, bzw. die Streuamplitude  $A(\vartheta)$  gemessen wird. Die Verknüpfung der Darstellungen geschieht über die Entwicklung nach Legendre-Polynomen, wobei die tatsächliche Parametrisierung der Messdaten als Koeffizienten der Legendre-Polynome nicht trivial ist, da theoretisch eine unendliche Summe gebildet werden muss.

Dieses Problem vereinfacht sich für kurzreichweitige Potentiale. In diesem Fall werden nämlich für große Drehimpulse  $l$  die Streuphasen  $\delta_l |_{l \rightarrow \infty} = 0$ . Damit braucht nur noch eine endliche Anzahl von Termen betrachtet werden.

Abbildung 7.19: Vereinfachung der Darstellung für kurzreichweitige Potentiale.

Der Grund für das Verschwinden „hoher“ Streuphasen ist, dass mit großem Drehimpuls der Zentrifugalterm groß wird. Damit halten sich solche Teilchen bevorzugt weiter vom Zentrum entfernt auf, wo das kurzreichweitige Potential nicht mehr gespürt wird.

Die Konsequenz davon sieht [Messiah-1, Abschnitt 10.2.2] folgendermaßen: Die Streuphasenmethode ist immer dann zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte besonders geeignet, wenn sich die Reichweite des Streupotentials nur über einige Wellenlängen (der Projektilteilchen) erstreckt.

### 7.6.5 Überprüfung des Optischen Theorems

Mit der eben gewonnenen Darstellung, mittels Legendre-Polynomen und dem Begriff der Streuphase, bietet es sich an das Optische Theorem nochmals zu überprüfen. Wir werden dabei auch eine Formel finden, die den totalen Wirkungsquerschnitt durch die Streuphasen ausdrückt.

*Beweisvariante für das Optische Theorem.* Fassen wir zunächst die Zutaten zusammen bevor wir alles in die  $T$ -Matrix rühren. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist durch das Betragsquadrat der Streuamplitude gegeben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\vartheta)|^2 = A(\vartheta) A^*(\vartheta)$$

so dass wir neben der Streuamplitude:

$$A(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta)$$

auch die konjugiert komplexe Streuamplitude benötigen:

$$A^*(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{-i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta)$$

Damit erhalten wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt als das Produkt zweier Legendre-Reihen über  $A_l$  und  $A_{l'}$ :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l} e^{-i\delta_{l'}} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta)$$

Außerdem benötigen wir folgende Eigenschaft der Legendre-Polynome:

$$\int P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta) d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Vergleichen wir das Ergebnis mit der Definition des totalen Wirkungsquerschnitts:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

Einsetzen des differentiellen Wirkungsquerschnitts und Integration mittels obiger Legendre-Regel führt zu:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Ausgedrückt mittels der  $T$ -Matrix lautet die Streuamplitude:

$$A(\vartheta) = -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$

Dies ist die Ausgangsgleichung die wir nach  $\hat{T}$  auflösen, wobei wir im Optischen Theorem nur den Imaginärteil und die Streuung in Vorwärtsrichtung, mit  $\vec{k}' = \vec{k}$ , bzw.  $\vartheta = 0$ , betrachten:

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 M} \text{Im} A(0) \\ &= -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 M} \text{Im} \left( \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(0) \right) \end{aligned}$$

$P_l(0) = 1$ , sowie von  $e^{i\delta_l} = \cos \delta_l + i \sin \delta_l$  den Imaginäranteil eingesetzt:

$$= -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 M} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} \sin \delta_l \sin \delta_l$$

Umordnen der Faktoren:

$$= -\frac{\hbar^2 k}{2(2\pi)^3 M} \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Hier steht aber der totale Wirkungsquerschnitt, ausgedrückt durch die Streuphasen, wie wir ihn oben gefunden haben, mit einem Vorfaktor:

$$= -\frac{\hbar^2 k}{2(2\pi)^3 M} \sigma_{\text{tot}}$$

Womit das Optische Theorem reproduziert ist.  $\square$

## 7.7 Die „Distorted Wave Born Approximation“ (DWBA)

### 7.7.1 Grundgedanke

Betrachten wir die Nukleon-Nukleon-Streuung. Schießen wir mit Protonen auf Atomkerne, so spielen zwei Wechselwirkungen eine Rolle: Die starke Wechselwirkung zwischen den Nukleonen als den Kernbausteinen, sowie die Coulomb-Wechselwirkung aufgrund der Ladung der Protonen.

Abbildung 7.20: Proton-Nukleokern-Streuexperiment: Nähert sich das Projektil Proton dem Kern, so spürt es zunächst die repulsive Coulomb-Wechselwirkung. Erst wenn es nahe genug an den Kern gelangt, kommt die attraktive starke Wechselwirkung hinzu.

Das effektive Potential, dass die Strahlprotonen sehen, vereinigt die zwei Wechselwirkungsarten unauflösbar. Das Coulomb-Potential ist jedoch bekannt, so dass sich die Frage stellt, ob aus den experimentellen Daten der berechenbare Coulomb-Anteil „ausgefiltert“ werden kann, um somit das unbekannte starke Potential untersuchen zu können. Die *Distorted Wave Born Approximation* versucht Potentialanteile durch Aufspaltung der  $T$ -Matrix zugänglich zu machen. Diesen Ansatz möchten wir verfolgen. Auch hier wird die Grundvorgehensweise der Störungsrechnung angewandt: Man tut zunächst so, als ob es nur das Coulomb-Potential gäbe und fügt dann den Ansatz für das starke Potential als Korrektur hinzu.

Abbildung 7.21: Gesamtpotential und Potentialanteile bei der Streuung von Protonen am Kern.

### 7.7.2 Aufspaltung des Potentials

Wir spalten die potentielle Energie in den bekannten Coulomb-Anteil  $\hat{V}_0$  und den unbekannt, aber interessanten starken Rest  $\hat{V}_R$  auf:

$$\hat{V} = \hat{V}_0 + \hat{V}_R$$

Der Hamilton-Operator des Systems ist in dieser Aufspaltung:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + \hat{V}_R$$

wobei  $\hat{H}_0$  der kinetischen Energie des Projektils entspricht. Zur Einsparung von Schreibarbeit ergänzen wir die Nomenklatur noch um den (für die hier gewählte Betrachtungsweise) ungestörten Anteil  $\hat{H}_1$ :

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V}_0$$

Durch das Experiment erhalten wir über den differentiellen Wirkungsquerschnitt die Übergangsamplitude  $\langle b | \hat{T} | a \rangle$  von  $\hat{T}$ , die beide Wechselwirkungen  $\hat{V}_0 + \hat{V}_R$  enthält. Also versuchen wir auch sie aufzuspalten:

$$\langle b | \hat{T} | a \rangle = \langle b | \hat{T}_0 | a \rangle + \text{Rest}$$

$\hat{T}_0$  ist dabei die Übergangsmatrix von  $\hat{V}_0$ . Für den Restterm „ $\hat{T} - \hat{T}_0$ “ müssen wir eine geeignete Näherungsmethode finden.

Für die drei Hamilton-Operatoren  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}_0$  und  $\hat{H}_1$  gibt es jeweils eine zugehörige Schrödinger- bzw. Eigenwertgleichung.

1. Die einfachste ist die freie mit der kinetischen Energie  $E$  des Projektils:

$$\hat{H}_0 | \phi_a \rangle = E | \phi_a \rangle$$

Dabei ist  $\phi_a$  eine (auslaufende) ebene Welle.

2. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für das einfache Streupotential  $\hat{V}_0$  (ohne  $\hat{V}_R$ ) mit einer auslaufenden Streuwelle  $\phi_a^+$  lautet:

$$\hat{H}_1 | \phi_a^+ \rangle = E | \phi_a^+ \rangle$$

Sie wandelten wir in die Lippmann-Schwinger-Gleichung um:

$$| \phi_a^+ \rangle = | \phi_a \rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V}_0 | \phi_a^+ \rangle$$

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung besitzt noch die unphysikalische Lösung der einlaufenden Kugelwelle  $| \phi_b^- \rangle$ . Diese müssen wir bei den Berechnung berücksichtigen, um ein vollständiges (Lösungs-)Funktionensystem zu erhalten. Sei  $| \phi_b \rangle$  eine einlaufende ebene Welle, dann gilt:

$$| \phi_b^- \rangle = | \phi_b \rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon} \hat{V}_0 | \phi_b^- \rangle$$

Adjungieren wir diese Gleichung, um sie in Bra-Schreibweise zu erhalten:

$$\langle \phi_b^- | = \langle \phi_b | + \langle \phi_b^- | \hat{V}_0 \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}$$

Der Bruchoperator mit dem negativen infinitesimalen Imaginärteil nennen wir  $\hat{G}_0^-$ , wenn er sich auf den Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  bezieht. Die Green'sche Funktion  $\mathcal{G}_0^-$  ist dann die Darstellungsmatrix dieses Operators, und steht für eine einlaufende Kugelwelle:

$$\mathcal{G}_0^-(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r}' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon} | \vec{r} \rangle =: \langle \vec{r}' | \hat{G}_0^- | \vec{r} \rangle$$

3. Was wir eigentlich suchen, ist die Streuwelle  $\psi_a^+$  mit dem kompletten Hamilton-Operator  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} | \psi_a^+ \rangle = E | \psi_a^+ \rangle$$

Auch diese Schrödinger-Gleichung können wir in die Lippmann-Schwinger-Form bringen:

$$|\psi_a^+\rangle = |\phi_a\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}(\hat{V}_0 + \hat{V}_R)|\psi_a^+\rangle$$

Damit besitzen wir genügend Wellenbeziehungen, um uns an die Separation von  $\hat{T}$  wagen zu können.

### 7.7.3 Aufspaltung der $T$ -Matrix

Versuchen wir die Übergangsamplitude von  $\hat{T}$  so umzuschreiben, dass sich die uns interessierende Aufspaltung in einen  $\hat{V}_R$ -Restterm ergibt:

$$\langle b|\hat{T}|a\rangle \equiv \langle \phi_b|\hat{T}|\phi_a\rangle$$

Mit obiger Nomenklatur in die Anteile zerlegt:

$$= \langle \phi_b|\hat{V}_0 + \hat{V}_R|\psi_a^+\rangle$$

Löst man die Lippmann-Schwinger-Gleichung der einlaufenden Kugelwelle  $\langle \phi_b^-|$  nach der ebenen Welle  $\langle \phi_b|$  auf ( $\langle \phi_b^-| = \langle \phi_b^-| - \langle \phi_b^-|\hat{V}_0\hat{G}_0^+$ ), und setzt dies ein, so erhält man:

$$= \langle \phi_b^-|\hat{V}_0 + \hat{V}_R|\psi_a^+\rangle - \langle \phi_b^-|\hat{V}_0\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}(\hat{V}_0 + \hat{V}_R)|\psi_a^+\rangle$$

Trennung der Potentialterme:

$$\begin{aligned} &= \langle \phi_b^-|\hat{V}_0|\psi_a^+\rangle - \langle \phi_b^-|\hat{V}_0\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}\hat{V}_0|\psi_a^+\rangle \\ &\quad + \langle \phi_b^-|\hat{V}_R|\psi_a^+\rangle - \langle \phi_b^-|\hat{V}_0\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}\hat{V}_R|\psi_a^+\rangle \end{aligned}$$

Ausklammern von  $\langle \phi_b^-|\hat{V}_0$ :

$$= \langle \phi_b^-|\hat{V}_R|\psi_a^+\rangle + \langle \phi_b^-|\hat{V}_0\left(|\psi_a^+\rangle - \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon}(\hat{V}_0 + \hat{V}_R)|\psi_a^+\rangle\right)$$

In der Klammer steht aber die Lippmann-Schwinger-Gleichung nach  $|\phi_a\rangle$  aufgelöst:

$$= \langle \phi_b^-|\hat{V}_R|\psi_a^+\rangle + \langle \phi_b^-|\hat{V}_0|\phi_a\rangle$$

Schreibt man die Lippmann-Schwinger-Gleichungen für  $\phi_a^+$  und  $\phi_b^-$  so um, dass der Hamilton-Operator  $\hat{H}_1$  im Nenner steht, erhält man (nach Nebenrechnung):

$$|\phi_a^+\rangle = |\phi_a\rangle + \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}_0) + i\varepsilon}\hat{V}_0|\phi_a\rangle$$



und:

$$|\phi_b^-\rangle = |\phi_b\rangle + \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}_0) - i\varepsilon} \hat{V}_0 |\phi_b\rangle$$

Letztere in Bra-Schreibweise:

$$\langle \phi_b^- | = \langle \phi_b | + \langle \phi_b | \hat{V}_0 \frac{1}{E - (\hat{H}_0 + \hat{V}_0) + i\varepsilon}$$

Verfolgen wir den hinteren Term der Übergangsamplitude  $\langle \phi_b | \hat{T} | \phi_a \rangle$  weiter, indem wir  $\langle \phi_b^- |$  einsetzen:

$$\begin{aligned} \langle \phi_b^- | \hat{V}_0 | \phi_a \rangle &= \langle \phi_b | \hat{V}_0 | \phi_a \rangle + \langle \phi_b | \hat{V}_0 \frac{1}{E - \hat{H}_1 + i\varepsilon} \hat{V}_0 | \phi_a \rangle \\ &= \langle \phi_b | \hat{V}_0 \left( | \phi_a \rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_1 + i\varepsilon} \hat{V}_0 | \phi_a \rangle \right) \\ &= \langle \phi_b | \hat{V}_0 | \phi_a^+ \rangle \\ &= \langle \phi_b | \hat{T}_0 | \phi_a \rangle \end{aligned}$$

Dieses Zwischenergebnis können wir nun einsetzen, womit aus:

$$\langle \phi_b | \hat{T} | \phi_a \rangle = \langle \phi_b^- | \hat{V}_R | \psi_a^+ \rangle + \langle \phi_b^- | \hat{V}_0 | \phi_a^+ \rangle$$

folgt:

$$\boxed{\langle \phi_b | \hat{T} | \phi_a \rangle = \langle \phi_b^- | \hat{V}_R | \psi_a^+ \rangle + \langle \phi_b | \hat{T}_0 | \phi_a \rangle}$$

Damit ist das Ziel erreicht: Der im Experiment bestimmbare Term  $\langle \phi_b | \hat{T} | \phi_a \rangle$  ist aufgespalten in den berechenbaren Term  $\langle \phi_b | \hat{T}_0 | \phi_a \rangle$ , der das Coulomb-Potential mitbeinhaltet, sowie den interessierenden Term  $\langle \phi_b^- | \hat{V}_R | \psi_a^+ \rangle$ , der uns Informationen über die starke Wechselwirkung liefern soll.

#### 7.7.4 Begriffsbildung

Unter der Annahme, dass das Coulomb-Potential erheblich stärker ist, als die starke Wechselwirkung,  $\hat{V}_R \ll \hat{V}_0$ , können wir die Störungstheorie in Form der Born'schen Reihe anwenden, indem  $\hat{V}_R$  (als Störung) entwickelt wird, während  $\hat{V}_0$  als fester Bestandteil des Hamilton-Operators betrachtet wird.<sup>35</sup>

Als Born'sche Näherung ersetzen wir dann die exakte Streuwellenfunktion  $|\psi_a^+\rangle$  durch die „Coulomb-Wellenfunktion“  $|\phi_a^+\rangle$ . Da diese Born'sche Näherung nicht mehr eine freie Welle behandelt, sondern eine (durch das Coulomb-Potential) gestörte, nennt man das Prinzip *Distorted Wave Born Approximation*, womit

<sup>35</sup>Die hier vorgestellte Herangehensweise an ein Potential mit Hilfe der Born'schen Näherung kann immer dann angewandt werden, wenn das Gesamtpotential zu groß ist, um die „einfache“ Näherung noch annehmen zu können. Dann muss das Potential aufgespalten werden in einen festen Anteil und einen Rest-Störanteil.

zum Ausdruck kommt, das man die Näherung mit einer schon *gestörten* Welle macht.<sup>36</sup>

Mit der Born'schen Näherung:<sup>37</sup>

$$|\psi_a^+\rangle \stackrel{!}{\simeq} |\phi_a^+\rangle$$

wird die zu durchleuchtende Übergangsamplitude einfacher:

$$\langle \phi_b^- | \hat{V}_R | \psi_a^+ \rangle \stackrel{!}{\simeq} \langle \phi_b^- | \hat{V}_R | \phi_a^+ \rangle$$

### 7.7.5 Beispiele aus der Kernphysik

Die DWBA erweitert den Anwendungsbereich der Born'schen Näherung. Mit ihr können Probleme näherungsweise berechnet werden, bei denen die einfache Störungstheorie nicht greift. Dazu betrachten wir noch zwei Beispiele.

**Beispiel (Niederenergetische Protonen).** Ist die Energie der Protonen zu gering, so kommen sie nicht über den Coulomb-Wall. Im Gegensatz zum klassischen Modell gelangt die (quantenmechanische) Welle jedoch etwas näher an den Kern heran. Dies wird durch die DWBA berücksichtigt, durch die einfache Born'sche Näherung nicht.

**Beispiel (Neutronen).** Schießt man mit Neutronen auf Atomkerne, so fällt, gegenüber den bisherigen Betrachtungen, das Coulomb-Potential weg. Das Neutron wechselwirkt somit nicht mit dem „Atom als Coulomb-Wall“, sondern mit jedem einzelnen Konstituenten (Nukleon) des Kerns über die starke Wechselwirkung.

Abbildung 7.22: Nukleonenprojektil auf Atomkern-Target.

Formal beschreibt man die Wechselwirkung  $\hat{V}$  dann als Summation der Einzelwechselwirkungen mit den Kernnukleonen  $n_i$ :

$$\hat{V}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \hat{V}_{n_i}(\vec{r})$$

<sup>36</sup>Dass man in der Näherung mit einem Potential arbeiten muss, erschwert die Lösung erheblich gegenüber der Born'schen Näherung mit ebenen Wellen, weswegen hier nicht näher darauf eingegangen wird. Das Prinzip soll genügen.

<sup>37</sup>Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Born'sche Näherung mit:

$$\hat{T} \simeq \hat{V}$$

dasselbe ist, wie die Näherung der Streulösung:

$$|\psi_a^+\rangle \simeq |\phi_a^+\rangle,$$

da mit:

$$\hat{V} |\psi_a^+\rangle = \hat{T} |\phi_a^+\rangle$$

in Born'scher Näherung auch:

$$\hat{V} |\psi_a^+\rangle \simeq \hat{V} |\phi_a^+\rangle$$

gilt.

Dies ist ein komplexer Ausdruck, mit vielen Parametern. Deshalb versucht man das Problem mit Hilfe eines mittleren Potentials wie ein Einteilchenpotential zu behandeln:

$$\approx \hat{U}(\vec{r})$$

Den Einteilchenpotential-Ansatz addiert man zum Hamilton-Operator als eine Null hinzu:

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{kin}} + \hat{U}(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}) - \hat{U}(\vec{r})$$

wobei dieses Potential  $\hat{U}(\vec{r})$  so gewählt werden muss, dass die hintere Differenz möglichst klein wird:

$$= \overbrace{\hat{T}_{\text{kin}} + \hat{U}(\vec{r})}^{\hat{H}_0} + \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{V}_{n_i}(\vec{r})}_{\text{Störung}} - \hat{U}(\vec{r})$$

Der vordere Teil  $\hat{H}_0$  kann mit einem konkreten Ansatz  $\hat{U}$  exakt berechnet werden:

$$\hat{H}_0 = \hat{T}_{\text{kin}} + \hat{U}(\vec{r})$$

wobei für die potentielle Energie  $\hat{U}(\vec{r})$  ein Ansatz gewählt werden muss, der einerseits dem Problem möglichst nahe kommt, andererseits eine leichte Rechnung ermöglicht. Außerdem muss das Restglied klein werden, damit man es mit der Störungstheorie (Born'sche Näherung) behandeln kann:

$$\left( \sum_{i=1}^N \hat{V}_{n_i}(\vec{r}) \right) - \hat{U}(\vec{r}) \ll \hat{H}_0$$

Diesen Ansatz  $\hat{U}(\vec{r})$  nennt man auch *optisches Potential*. Das Ziel ist es, ein möglichst „richtiges“  $\hat{U}(\vec{r})$  zu finden.

# Kapitel 8

## Vielteilchentheorie

Wir behandeln nun einen neuen Problembereich, nämlich das Verhalten von Vielteilchensystemen.<sup>1</sup> Vielteilchensysteme besitzen Eigenschaften, die aus der Ununterscheidbarkeit der Teilchen stammen. Diese Eigenschaften resultieren aus der Symmetrisierung (Bosonen) beziehungsweise der Antisymmetrisierung (Fermionen) von Wellenfunktionen.

Man kann Phänomene, die deutliche Auswirkungen auf die Natur haben, beobachten. Zum Beispiel stürzen Neutronensterne und weiße Zwerge nicht zusammen. Man spricht vom Fermidruck. Oder es gibt das Bose-Einstein-Kondensat, eine Vielteilchen-Wellenfunktion aus Bosonen. Diese Phänomene sind ausdrücklich keine Wechselwirkungseffekte, sondern entspringen der Quantenstatistik, die die Teilchen zusammenbringt. Daher braucht man bei der Messung sehr tiefe Temperaturen, um nicht durch die Braun'sche Bewegung gestört zu werden.

### 8.1 Systeme von unterscheidbaren Teilchen

Elektron und Proton sind ein Beispiel für unterscheidbare Teilchen. Sie unterscheiden sich durch Masse und Ladung.

Betrachten wir zuerst die

#### 8.1.1 Unabhängige Bewegung

Dabei läßt sich der Hamilton-Operator des Gesamtsystems so schreiben:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i,$$

wobei die  $\hat{H}_i$  Einteilchenoperatoren darstellen, die nur auf das jeweilige Teilchen wirken (Koordinaten, Spin, ...).

---

<sup>1</sup>Vergleiche mit [Cohen-2, S. 541-579], [Messiah-2, S. 82-125] und [Fließbach, S. 363-368].

Das Problem lautet nun:

Löse die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für die Einteilchenoperatoren  $\hat{H}_i$ :

$$\hat{H}_i |\psi_{ni}\rangle = E_{ni} |\psi_{ni}\rangle$$

Die  $|\psi_{ni}\rangle$  sind die Einteilchenwellenfunktionen.<sup>2</sup>

Das Produkt der Lösungen  $|\psi_{ni}\rangle$  der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$|\psi\rangle = |\psi_{k1}\rangle |\psi_{l2}\rangle \cdots |\psi_{mN}\rangle$$

ist dann Lösung der (Gesamt-)Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \text{ mit } E = E_k + E_l + \cdots + E_m.$$

Die Wellenfunktion in Ortsdarstellung schreibt sich als Produkt der Einteilchenwellenfunktionen:

$$\langle x_1 x_2 \dots x_n | \psi \rangle = \langle x_1 | \psi_{k1} \rangle \langle x_2 | \psi_{l2} \rangle \cdots \langle x_N | \psi_{mN} \rangle$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte berechnet sich als Produkt der Einteilchenwahrscheinlichkeitsdichten:

$$\rho(x_1 \dots x_N) = \rho_k(x_1) \cdots \rho_m(x_N).$$

Die Teilchen bewegen sich unabhängig voneinander, daher kann man die Zeitentwicklung faktorisieren.

**Beispiel.** Wir betrachten zwei freie Teilchen mit Masse  $m_1$  und  $m_2$ .

Dann ist  $\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1}$  und  $\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}$ .

Die Einteilchenwellenfunktion ist hierbei gerade eine ebene Welle:

$$\langle x_j | \psi_{hj} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_j x_j} \text{ mit } j = 1, 2.$$

Die Energien der Teilchen addieren sich:

$$\begin{aligned} E_{\text{ges}} &= \frac{1}{2m_1} p_1^2 + \frac{1}{2m_2} p_2^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_1} k_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} k_2^2. \end{aligned}$$

Die Gesamtwellenfunktion in Ortsdarstellung schreibt sich als Produkt:

$$\langle x_1 x_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2}.$$

Die Gesamtwellenfunktion wird durch die Quantenzahlen  $h_i$  der Einzelwellenfunktionen charakterisiert:

$$|\psi\rangle = |h_1 h_2\rangle.$$

---

<sup>2</sup>Im Abschnitt 8.2 werden wir den Index  $n$  weglassen, da er immer der Gleiche wäre und damit nur irritieren würde. Er stellt dar, daß jede Einteilchenwellenfunktion sich in einem konkreten Energieeigenzustand befindet.

Wenn die  $|\psi_i\rangle = |h_i\rangle$  Lösungen der zwei Einteilchenprobleme sind, dann ist die Produktwellenfunktion eine vollständige Basis für den Zweiteilchen-Zustand im Hilbertraum:

$$|\psi\rangle = \sum_{h_1 h_2} |h_1 h_2\rangle \langle h_1 h_2 | \psi \rangle.$$

Der Weg zur Lösung derartiger Probleme ist die Basis des Hilbertraumes aus Produktwellenfunktionen aufzubauen:

Also die Koeffizienten  $C_{h_1 h_2} = \langle h_1 h_2 | \psi \rangle$  zu bestimmen.

### 8.1.2 Abhängige Bewegung

Betrachten wir ein System aus zwei Teilchen, die aber nicht frei sein sollen, sondern durch ein Potential gekoppelt sind. Dazu nehmen wir die ursprüngliche freie Form und addieren noch einen Wechselwirkungsterm dazu:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \hat{w}^2 (x_1 - x_2)^2$$

Wir erhalten also eine Summe aus den Einteilchenoperatoren und einem Wechselwirkungsoperator. Wechseln wir das Bezugssystem, so können wir den Hamilton-Operator umschreiben:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 Y^2,$$

wobei  $X := \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$  die Schwerpunktskoordinate,  $Y := x_2 - x_1$  die Relativkoordinate und  $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  die reduzierten Masse ist.

Wir haben das Problem, wie beim Wasserstoff, nach Schwerpunktskoordinate und Relativkoordinate getrennt:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{SP}}(X, M) + \hat{H}_{\text{RE}}(Y, \mu).$$

Dabei ist  $\hat{H}_{\text{RE}}$  gerade der Hamilton-Operator des Harmonischen Oszillators. Nun haben wir  $\hat{H}$  als einen separierten Operator geschrieben, wobei beide Teile lösbar sind.

Die Gesamtwellenfunktion hat die Form:

$$\langle XY | \psi \rangle = \beta e^{ikX} \phi_{\mu}^{\text{HO}}(Y).$$

Die Energie berechnet sich zu:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \hbar \omega (n + \frac{1}{2}).$$

Wähle  $n = 0$ :

Die Lösungswellenfunktion lautet dann mit der Normierungskonstanten  $d$ :

$$\langle XY | \psi \rangle = d e^{ikX} e^{-\frac{Y^2}{2b^2}} \text{ mit der Oszillatorlänge } b = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}},$$

Und in der Basis der  $x_i$ :

$$\langle x_1 x_2 | \psi \rangle = d e^{ik \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}} e^{-\frac{(x_2 - x_1)^2}{2b^2}}.$$

$\langle x_1 x_2 | \psi \rangle$  ist nur von Null verschieden, wenn  $x_1$  nahe (relativ zur Oszillatorlänge) bei  $x_2$  liegt. Wegen  $e^{-\frac{(x_2 - x_1)^2}{2b^2}}$  sind also  $x_1$  und  $x_2$  korreliert, daher läßt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(x_1 x_2) = d^2 e^{-\frac{(x_2 - x_1)^2}{2b^2}}$$

nicht mehr faktorisieren.

Die Basis bleibt uns aber erhalten. Das neue  $\psi$  läßt sich in der Basis der Produktwellenfunktionen darstellen:

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_1 x_2 | h_1 h_2 \rangle \langle h_1 h_2 | \psi \rangle dh_1 dh_2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_1 x_2 | h_1 h_2 \rangle C_{h_1 h_2} dh_1 dh_2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_{h_1 h_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} dh_1 dh_2 \end{aligned}$$

Das Problem läuft darauf hinaus die Koeffizienten  $C_{h_1 h_2}$  der Basisdarstellung zu finden:

$$\begin{aligned} C_{h_1 h_2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle h_1 h_2 | x_1 x_2 \rangle \langle x_1 x_2 | \psi \rangle dx_1 dx_2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} \langle x_1 x_2 | \psi \rangle dx_1 dx_2. \end{aligned}$$

Für ein anderes Problem muß man eventuell ein anderes Näherungspotential wählen.

## 8.2 Symmetrisierung bei identischen Teilchen

### 8.2.1 Einleitung

Was heißt identisch, beziehungsweise ununterscheidbar?

Es darf keine Messmöglichkeit geben um die Teilchen zu unterscheiden. Die Erwartungswerte aller physikalischen Operatoren (zum Beispiel: Masse, Ladung, etc.) sind gleich, auch wenn die Teilchen  $i$  und  $h$  vertauscht werden. Man kann auch keine Markierung an den Teilchen anbringen. Es gibt keine Messgröße und damit kein Experiment, daß nicht gleiche Ergebnisse für die Teilchen liefert.

Abbildung 8.1: Viele Teilchen mit Ortsvektoren

Ein großes Problem ist die Aufstellung der Wellenfunktion für so viele Teilchen  $i$  an den Orten  $\vec{r}_i$ .

### 8.2.2 Nomenklatur

$|\psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle$  ist die Produktwellenfunktion, das heißt Teilchen 1 ist am Ort  $\vec{r}_1$  und Teilchen 2 ist am Ort  $\vec{r}_2$ .

Die Produktwellenfunktion in Ortsdarstellung hat die Form

$$\langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2).$$

Vertauscht man nun die beiden Teilchen mit Hilfe des Vertauschungsoperators  $\hat{P}_{12}$ , so erhält man:

$$\hat{P}_{12} |\psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\psi_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)\rangle$$

und in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \hat{P}_{12} | \psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle &= \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \psi_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \rangle \\ &= \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1) \end{aligned}$$

beziehungsweise:

$$\begin{aligned} &= \psi_2(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2) \\ &= \langle \vec{r}_1 \vec{r}_2 | \psi_{21}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \end{aligned}$$

Diese Schreibweisen bedeuten also das Gleiche!

Im Folgenden werden wir die letzte Schreibweise benutzen. Die Ortsvektoren bleiben immer in der gleichen Reihenfolge, so daß die Position der Teilchennummer eindeutig angibt, wo das Teilchen sich aufhält. Also:

$$|\psi_{21}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\psi(2, 1)\rangle$$

beziehungsweise:

$$|\psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\psi(1, 2)\rangle.$$



### 8.2.3 Operatoren in Vielteilchensystemen

Bisher haben wir nur eine kurze Nomenklatur für die Vertauschung entwickelt. Eine Vielteilchenwellenfunktion hat also die Form  $|\psi(1, \dots, i, h, \dots, N)\rangle$ . Das wirklich Interessante ist nun, wie Vertauschungsoperatoren auf Vielteilchensysteme wirken.

Der Vertauschungsoperator für  $i$  und  $h$  macht nun Folgendes:

$$\hat{P}_{ih} |\psi(1, \dots, i, h, \dots, N)\rangle = |\psi(1, \dots, h, i, \dots, N)\rangle.$$

Wir wollen herausfinden, wie sich physikalische Operatoren bei Teilchenvertauschung verhalten, also bei Anwendung des Vertauschungsoperators  $\hat{P}$ . Für identische Teilchen müssen sich die physikalischen Operatoren, wie oben diskutiert, gleich verhalten. Der Operator  $\hat{O}(1, \dots, N)$  ist gleich für den Zustand  $|\psi(1, \dots, N)\rangle$  und dessen Vertauschungen. Der Erwartungswert muß unabhängig von einer Teilchenvertauschung sein, da der Operator die Teilchen ja nicht unterscheiden kann.

**Behauptung.** Es gilt die Operatorgleichung:

$$\hat{O}(1, \dots, h, i, \dots, N) = \hat{P}_{ih}^\dagger \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) \hat{P}_{ih}.$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} & \langle \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle \\ & \stackrel{!}{=} \langle \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) | \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) | \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) \rangle. \end{aligned}$$

Dies war unsere Forderung. Beachte, daß keine Vertauschung beim Operator stattfindet. Formal stellen wir die Vertauschung mit  $\hat{P}$  dar:

$$= \langle \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \hat{P}_{ih}^\dagger \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) \hat{P}_{ih} | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle.$$

Anwendung der Operatoren auf Bra und Ket liefert:

$$= \langle \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) | \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) | \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) \rangle.$$

Umindizierung darf den Charakter des Systems nicht verändern. Wir erhalten daher:

$$= \langle \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \hat{O}(1, \dots, h, i, \dots, N) | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle.$$

Da diese Umformung für alle Zustände gelten soll, folgt für diese Gleichung eine Operatorgleichung:

$$\hat{O}(1, \dots, h, i, \dots, N) = \hat{P}_{ih}^\dagger \hat{O}(1, \dots, i, h, \dots, N) \hat{P}_{ih}.$$

□

### 8.2.4 Der Vertauschungsoperator $\hat{P}_{ih}$

#### Mathematische Eigenschaften

1. **Behauptung.**  $\hat{P}_{ih}$  ist selbstadjungiert:

$$\hat{P}_{ih} = \hat{P}_{ih}^\dagger.$$

*Beweis.*

$$\langle \phi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \hat{P}_{ih}^\dagger | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle$$

$\hat{P}_{ih}^\dagger$  wirkt auf den Bra-Zustand:

$$= \langle \phi(1, \dots, h, i, \dots, N) | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle.$$

Umindizieren ändert nichts am System wegen der Ununterscheidbarkeit:

$$= \langle \phi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) \rangle.$$

Um den Ket-Zustand in die richtige Reihenfolge zu bringen wenden wir  $\hat{P}_{ih}$  an:

$$= \langle \phi(1, \dots, i, h, \dots, N) | \hat{P}_{ih} | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle$$

Die Zustände sind die Gleichen, wie im Anfang, nur der Operator ist ein anderer. Dies gilt für alle  $|\psi\rangle$ ,  $|\phi\rangle$  und damit allgemein.  $\square$

2. **Behauptung.**  $\hat{P}_{ih}$  ist unitär:

$$\hat{P}_{ih}^\dagger = \hat{P}_{ih}^{-1}$$

beziehungsweise

$$\hat{P}_{ih}^2 = \hat{\mathbb{1}}.$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ih} \hat{P}_{ih} | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle &= \hat{P}_{ih} | \psi(1, \dots, h, i, \dots, N) \rangle \\ &= | \psi(1, \dots, i, h, \dots, N) \rangle \end{aligned}$$

$\square$

3. **Behauptung.** Die Eigenwerte von  $\hat{P}_{ih}$  sind  $\pm 1$ .

*Beweis.* Der Vertauschungsoperator  $\hat{P}_{ih}$  ist laut oben hermitesch. Damit sind seine Eigenwerte reell. Da  $\hat{P}_{ih}^2 = \hat{\mathbb{1}}$  ist, sind die Eigenwerte von  $\hat{P}_{ih}$   $\pm 1$ .  $\square$

4. **Behauptung.** Der Kommutator

$$[\hat{O}, \hat{P}_{ih}]_- = 0$$

verschwindet.

*Beweis.* Es gilt

$$\hat{P}_{ih}^\dagger \hat{O} \hat{P}_{ih} = \hat{O}.$$

Mit  $\hat{P}_{ih}^\dagger = \hat{P}_{ih} = \hat{P}_{ih}^{-1}$  auch:

$$\hat{P}_{ih}^{-1} \hat{O} \hat{P}_{ih} = \hat{O}.$$

Damit

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ih} \hat{P}_{ih}^{-1} \hat{O} \hat{P}_{ih} &= \hat{P}_{ih} \hat{O} \\ \hat{1} \hat{O} \hat{P}_{ih} &= \hat{P}_{ih} \hat{O} \\ \hat{O} \hat{P}_{ih} - \hat{P}_{ih} \hat{O} &= 0 \\ [\hat{O}, \hat{P}_{ih}]_- &= 0. \end{aligned}$$

Dies gilt für alle Operatoren  $\hat{O}$ . □

Es gibt also ein gemeinsames Eigenfunktionssystem zu  $\hat{O}$  und  $\hat{P}_{ih}$  und genauso zu  $\hat{H}$  und  $\hat{P}_{ih}$ . Dies bedeutet aber wiederum: Eine Eigenfunktion zu  $\hat{H}$  (stationäre Lösung zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung) ist auch eine Eigenfunktion zu  $\hat{P}_{ih}$  mit Eigenwert  $\pm 1$ .

**Konsequenzen.** Für ununterscheidbare Teilchen sind die folgenden Produktwellenfunktionen identisch:

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \psi(1, 2) \rangle = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2)$$

und

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{P}_{12} | \psi(2, 1) \rangle = \psi_2(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2).$$

Für unterscheidbare Teilchen gilt aber, daß die Produktwellenfunktionen zwar ein Eigenfunktionssystem zu  $\hat{H}$  sind, aber meist nicht zu  $\hat{P}$ . Man spricht bei identischen Teilchen von *Austauschertartung*, da die Energien für die einzelnen Permutationen gleich sind.<sup>3</sup>

**Behauptung.** Gilt  $\hat{P}_{12} | \psi(1, 2, \dots, N) \rangle = a_{12} | \psi(1, 2, \dots, N) \rangle$  mit dem Eigenwert  $a_{12} = \pm 1$ , dann gilt für identische Teilchen allgemein:

$$\hat{P}_{ih} | \psi(1, 2, \dots, N) \rangle = a_{12} | \psi(1, 2, \dots, N) \rangle.$$

Die Eigenwerte sind typisch für die ganze Wellenfunktion. Es gibt also einen „globalen“ Eigenwert für alle möglichen Vertauschungen.

<sup>3</sup>Vergleich mit [Messiah-2, S. 83].

*Beweis.* Wir konstruieren den Vertauschungsoperator  $\hat{P}_{ih}$ , indem wir das  $i$ -te Teilchen mit dem 1-ten vertauschen, dann das  $h$ -te mit dem 2-ten, dann das neue 1-te mit dem neuen 2-ten vertauschen und dann das alte 1-te und das alte 2-te wieder auf ihre angestammten Plätze bringen:

$$\hat{P}_{ih} = \hat{P}_{1i}\hat{P}_{2h}\hat{P}_{12}\hat{P}_{2h}\hat{P}_{1i}.$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ih}|\psi\rangle &= a_{1i}a_{2h}a_{12}a_{2h}a_{1i}|\psi\rangle \\ &= a_{12}a_{2h}^2a_{1i}^2|\psi\rangle \\ &= a_{12} \cdot 1|\psi\rangle.\end{aligned}$$

Es existiert also ein globaler Eigenwert mit  $\pm 1$ . □

Aus der Quantenfeldtheorie folgen die Eigenwerte:

$a_{12} = +1$  gilt für Bosonen (Spin ganzzahlig).

$a_{12} = -1$  gilt für Fermionen (Spin halbzahlig).

Für die Wellenfunktionen bedeuten sie:

$a_{12} = +1$  ergibt eine symmetrische Wellenfunktion.

$a_{12} = -1$  ergibt eine antisymmetrische Wellenfunktion.

### Aussehen der (anti-)symmetrischen Wellenfunktionen

Wie stellen wir solche (anti-)symmetrischen Zustände dar?

Sei  $|\psi(1, 2, \dots, N)\rangle$  ein Produktzustand, charakterisiert durch die Quantenzahlen  $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle$ , also  $\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle = \psi_{a_1}(\vec{r}_1)\psi_{a_2}(\vec{r}_2) \cdots \psi_{a_N}(\vec{r}_N)$ . Diese Wellenfunktionen bilden eine Basis des  $N$ -Teilchenraumes.

**Definition.** Ein Vektor  $|\psi\rangle$  heißt total symmetrisch, wenn gilt:

$$\hat{P}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle,$$

beziehungsweise antisymmetrisch, wenn gilt:

$$\hat{P}|\psi_A\rangle = (-)^{a_P}|\psi_A\rangle.$$

Bei geraden Permutationen gilt also das  $+$ -Zeichen und bei ungeraden Permutationen das  $-$ -Zeichen.

**Satz (Symmetrisierungspostulat).** Besteht ein System aus mehreren identischen Teilchen, dann können nur bestimmte Zustandsvektoren des Zustandsraumes die physikalische Natur beschreiben. Die physikalischen Vektoren sind je nach Natur der identischen Teilchen entweder total symmetrisch (Bosonen) oder total antisymmetrisch (Fermionen) in Bezug auf Permutationen.

Wir definieren daher die folgenden Operatoren:

**Definition.** Wir definieren den Operator der Symmetrisierung:

$$\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_p (+)^{a_p} \hat{P}_p.$$

Dabei ist  $\hat{P}_p$  eine Vertauschung der  $N$  Teilchen;  $a_p$  Zahl der Paarvertauschungen (daraus kann man bestimmen, ob es sich um eine gerade oder ungerade Permutation handelt);  $\sum_\alpha$  Summe über alle  $N!$  Vertauschungen. Beachte:  $p$  ist nicht einfach ein Laufindex.

**Beispiel.** Permutationen von drei Wellenfunktionen:  $3! = 6$

Ursprungszustand	Zustand	Zahl der Permutationen $a_\rho$
$ 1, 2, 3\rangle \rightarrow$	$ 1, 2, 3\rangle$	0
	$ 2, 1, 3\rangle$	1
	$ 3, 2, 1\rangle$	1
	$ 1, 3, 2\rangle$	1
	$ 2, 3, 1\rangle$	2
	$ 3, 1, 2\rangle$	2

Tabelle 8.1: Permutationen

Symmetrisierung: Die Summation über alle sechs Permutationen ergibt den Symmetrisierungsoperator  $\hat{S}$ .

**Definition.** Der Operator der Antisymmetrisierung:

$$\hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_\rho (-)^{a_\rho} \hat{P}_\rho.$$

Hier ist das Vorzeichen abhängig von der Anzahl der Vertauschungen.

**Behauptung.** Ausgehend von unserer ursprünglichen Produktwellenfunktion  $\psi$  gilt:

$\hat{S}|\psi\rangle =$  ergibt die symmetrischen Zustände

$\hat{A}|\psi\rangle =$  ergibt die antisymmetrischen Zustände

Aus der Basis der Produktzustände kann man jeden beliebigen Zustand entwickeln. Den zugehörigen symmetrischen/antisymmetrischen Zustand erhalten wir durch Anwendung von  $\hat{S}$  beziehungsweise  $\hat{A}$ .

*Beweisskizze.* Durch Induktion über  $N$  (Zahl der Teilchen):

*Induktionsanfang:* Für  $N = 2$  betrachte man  $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{S}\psi \rangle$ :

$\hat{P}_1 = \hat{1}$  und  $\hat{P}_2 |12\rangle = |21\rangle$ .

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{S}\psi \rangle = \frac{1}{2!} (\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1))$$

Wendet man den Vertauschungsoperator auf einen symmetrischen Zustand an, so ändert sich nichts.  $\hat{S}$  generiert einen Eigenzustand zu  $\hat{P}$ :

$$\begin{aligned} &= \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{P}_{12} \hat{S} | \psi \rangle \\ &= \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{S} \psi \rangle. \end{aligned}$$

Analog für den Antisymmetrisierer:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{A} \psi \rangle &= \frac{1}{2!} (\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)) \\ &= \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{P}_{12} \hat{A} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

$\hat{P}$  auf  $\hat{A}$  angewandt ändert das Vorzeichen:

$$= -\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \hat{A} \psi \rangle.$$

*Induktionsschluß:*

$N - 1 \rightarrow N$

$$\hat{S}_N = \frac{1}{N!} \sum_{j=1}^{N!} \hat{P}_{jh} \hat{S}_{N-1}$$

Es gilt für beide Basen

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \psi(1, \dots, N) \rangle = \psi_{\alpha 1}(1) \psi_{\alpha 2}(2) \cdots \psi_{\alpha N}(N).$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\rho} (-)^{a_{\rho}} \hat{P}_{\rho}$$

auf  $|\psi\rangle$  angewandt ergibt einen antisymmetrischen Zustand. □

**Behauptung.** Die Operatoren  $\hat{S}$  und  $\hat{A}$  sind hermitesch:

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$$

und

$$\hat{S} = \hat{S}^{\dagger}.$$

**Behauptung.** Die Operatoren  $\hat{S}$  und  $\hat{A}$  sind orthogonale Projektionsoperatoren: Es gilt:

$$\hat{A}^2 = \hat{A}$$

und

$$\hat{S}^2 = \hat{S}$$

und

$$\hat{A} \cdot \hat{S} = 0.$$

Projektionsoperatoren bedeutet, daß sie vom  $N$ -dimensionalen Hilbertraum der Produktfunktionen in einen Teilraum projizieren.

*Beweis.*

$$\langle \hat{A}\psi' | \hat{S} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{A}^\dagger \hat{S} | \psi \rangle$$

$\hat{\mathbb{1}} = \hat{P}_{ih}^2$  einfügen:

$$\begin{aligned} &= \langle \psi' | \hat{A}^\dagger \hat{P}_{ih}^2 \hat{S} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi' | \hat{A}^\dagger \hat{P}_{ih}^\dagger \hat{P}_{ih} \hat{S} | \psi \rangle \\ &= \langle \hat{A}\psi' | \hat{P}_{ih}^\dagger \hat{P}_{ih} \hat{S} | \psi \rangle \\ &= -\langle \hat{A}\psi' | \hat{P}_{ih} \hat{S} | \psi \rangle \\ &= -\langle \hat{A}\psi' | \hat{S} | \psi \rangle \\ &= -\langle \psi' | \hat{A}^\dagger \hat{S} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Daraus folgt  $\hat{A} \cdot \hat{S} = 0$ . □

Die Bosonen existieren im symmetrischen Teilraum und die Fermionen im dazu orthogonalen, antisymmetrischen Teilraum des Hilbertraumes.

### 8.2.5 Slater-Determinante

Gesucht ist eine Darstellung der antisymmetrischen Produktzustände (Fermionen) durch die Slater-Determinante.

**Definition.** *Wir definieren die Slater-Determinante:*

$$\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{A} | \psi \rangle := \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

Das Umschreiben der Summe der Produktfunktionen als formale Determinante ergibt eine kompakte Schreibweise.

**Eigenschaften der  $N$ -Teilchenzustände.** Zur Normierung:

1. **Behauptung.** Sei  $|\psi\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$ , dann ergibt sich:

$$\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{A} | \psi \rangle = 0.$$

*Beweis.* Die Determinante verschwindet, da zwei Zeilen der Determinante gleich sind. Dies entspricht dem Pauliprinzip. □

2. **Behauptung.** Die Produktwellenfunktion ist normiert:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle_A = \sqrt{N!} \hat{A} |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle$$

ist normiert, so daß gilt:

$${}_A \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle_A = 1.$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} {}_A \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle_A \\ &= N! \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle \end{aligned}$$

Mit  $\hat{A}^2 = \hat{A}$ :

$$\begin{aligned} &= N! \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \hat{A} | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle \\ &= N! \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \\ &\quad \hat{A} \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle dr_1 \dots dr_N \\ &= N! \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(r_1) \dots \psi_N^*(r_N) \\ &\quad \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} dr_1 \dots dr_N \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N!}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1^*(r_1)\psi_1(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N^*(r_N)\psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_1^*(r_1)\psi_2(\vec{r}_1) & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^*(r_1)\psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N^*(r_N)\psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} dr_1 \dots dr_N \\ &= \begin{vmatrix} \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \psi_N | \psi_1 \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \psi_1 | \psi_N \rangle & \dots & \langle \psi_N | \psi_N \rangle \end{vmatrix} \end{aligned}$$

wegen der Orthogonalität der Einteilchenzustände:

$$\begin{aligned} &= |\mathbf{1}_N| \\ &= 1 \end{aligned}$$

□

Ein Zweiteilchenzustand lautet mit Normierung:

$$|\psi_1 \psi_2\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2!}} (\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1))$$



### 8.2.6 Matricelement eines Einteilchenoperators

Wir berechnen die Matricelemente eines Einteilchenoperators<sup>4</sup>:

$$\hat{O}(1, \dots, N) = \sum_{i=1}^N \hat{O}(i).$$

Zum Beispiel:

$$\hat{O} = \hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}.$$

Es gilt:

$${}_A \langle \psi'_1, \dots, \psi'_N | \hat{O} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_A = N! \langle \psi'_1, \dots, \psi'_N | \hat{A}^\dagger \hat{O} \hat{A} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle$$

Wir betrachten  $\hat{A}^\dagger \hat{O} \hat{A}$ .

Es gilt weiterhin  $[\hat{A}^\dagger, \hat{O}]_- = 0$  und daher  $\hat{A}^\dagger \hat{O} \hat{A} = \hat{O} \hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{O} \hat{A}$ . Dies setzen wir ein:

$$\begin{aligned} & N! {}_A \langle \psi'_1, \dots, \psi'_N | \hat{O} \hat{A} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle \\ &= N! \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi'_1, \dots, \psi'_N | \hat{O} | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \\ & \quad \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{A} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle dr_1 \cdots dr_N \\ &= \sum_{i=1}^N N! \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi'_1, \dots, \psi'_N | \hat{O}(\vec{r}_i) | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle \\ & \quad \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \hat{A} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle dr_1 \cdots dr_N \\ &= \sum_{i=1}^N N! \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(\vec{r}_1) \cdots \psi_N^*(\vec{r}_N) \hat{O}(\vec{r}_i) \\ & \quad \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1^*(r_1) \psi_1(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_N^*(r_N) \psi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_1^*(r_1) \psi_N(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_N^*(r_N) \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} dr_1 \cdots dr_N \end{aligned}$$

Entwickeln der Determinate nach der  $i$ -ten Spalte:

$$= \sum_{i=1}^N N! \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \sum_{n=1}^N (-)^{i+n} \psi_n(\vec{r}_i)$$

Entwickeln nach der  $m$ -ten Zeile:

$$= \sum_{i,m=1}^N (-)^{i+m} \langle \psi'_i | \hat{O}(i) | \psi_n \rangle \begin{vmatrix} \langle \psi'_1 | \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \psi'_N | \psi_1 \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \psi'_1 | \psi_N \rangle & \cdots & \langle \psi'_N | \psi_N \rangle \end{vmatrix}$$

<sup>4</sup>Wenn der Operator unabhängig von der Anwesenheit anderer Teilchen jeweils nur auf die Koordinate eines Teilchens wirkt, spricht man von einem Einteilchenoperator.

Vereinfachung: Es gilt für die Diagonalelemente  $\psi'_i = \psi_i$ . Daher ist die Determinante gleich eins. Die Doppelsumme bricht zusammen:

$$= \sum_{m=1}^N \langle \psi_m | \hat{O} | \psi_m \rangle.$$

### Zusammenfassung

1. Produktzustände  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$  sind eine einfache Basis. Sie sind allerdings keine stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung.
2. Symmetrisierungsoperator und Antisymmetrisierungsoperator sind Projektionsoperatoren:

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_p (+)^{a_p} \hat{P}_p$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_p (-)^{a_p} \hat{P}_p.$$

3. Ein antisymmetrischer Zustand ist bereits normiert:

$$\sqrt{N!} \hat{A} |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle.$$

Die Slaterdeterminante stellt eine Basis dar:

$$\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle := \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & & & \vdots \\ \phi_N(\vec{r}_1) & \dots & \dots & \phi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

Ein korrelierter Zustand wäre eine Superposition von Slater-Determinanten. Slater-Determinanten sind recht kompliziert zu berechnen.

## 8.3 Fock-Darstellung

Wir beschreiben nun Vielteilchenzustände in der Fock-Darstellung.

### 8.3.1 Einleitung

Schauen wir zum eindimensionalen Harmonischen Oszillator zurück. Der Hamilton-Operator in Ortsdarstellung schreibt sich:

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

Die Lösungen  $\phi_n(x)$  erfüllen die Eigenwertgleichung:

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

Mit den Energieeigenwerten  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ :

$$\hat{H} \phi_n(x) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \phi_n(x).$$

Die  $\phi_n(x)$  stellen eine Basis für alle möglichen Lösungen dar.

Wir haben allerdings noch eine andere Methode der Darstellung kennengelernt: Wir beschreiben den Zustand  $|\phi_n\rangle$  in der Basis der Energieeigenzustände mit dem Energieeigenwert  $E_n$  durch

$$|\phi_n\rangle = C(\hat{b}^\dagger)^n |\phi_0\rangle.$$

Der Hamilton-Operator wird dann mit den Aufsteige- und Absteigeoperatoren dargestellt:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2}).$$

### Vielteilchensysteme

Diese Vorgehensweise wenden wir nun analog auf Vielteilchensysteme an. Wir antisymmetrisieren mit der Slater-Determinante:

$$|\phi_{\alpha_1}, \dots, \phi_{\alpha_N}\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_1}(1) & \cdots & \phi_{\alpha_N}(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\alpha_1}(N) & \cdots & \phi_{\alpha_N}(N) \end{vmatrix},$$

um Fermionenwellenfunktionen zu erhalten.

Gibt es zu dieser Ortsdarstellung eine alternative Darstellung? Lassen sich in dieser Basis die Eigenwerte beziehungsweise die Erwartungswerte einfacher berechnen?

Wir werden analog zu den Aufsteige- und Absteigeoperatoren Teilchenerzeugungs- und Teilchenvernichtungsoperatoren definieren und sehen, daß diese die Arbeit vereinfachen.

### 8.3.2 Fock-Darstellung

Wir einigen uns zunächst auf eine Basis von Einteilchenwellenfunktionen  $\phi_i$  mit  $i = 1, \dots, \infty$ . Dabei soll es sich um antisymmetrische Zustände handeln:  $|\psi\rangle_A$  sei ein antisymmetrischer Produktzustand, also in Ortsdarstellung gerade die Slater-Determinante.

Um die Zustände zu beschreiben benutzen wir folgende Notation:

**Notation.** Wir benutzen Besetzungszahlen, die die Anzahl der Teilchen angeben mit denen ein Zustand besetzt ist:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle.$$

Für Fermionen gilt:

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{Zustand ist besetzt} \\ 0 & \text{Zustand ist unbesetzt.} \end{cases}$$

Die Anzahl der Fermionen berechnet sich aus  $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ .

**Definition.** Wir definieren den Teilchenerzeugungsoperator durch folgende Eigenschaft:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots\rangle = a |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle.$$

$\hat{a}_i^\dagger$  bezieht sich auf eine bestimmte Teilchenwellenfunktion  $i$ ; das  $a$  sorgt für die Normierung.

Ein  $N$ -Teilchenzustand wird durch  $\hat{a}_i^\dagger$  vom Raum der antisymmetrischen  $N$ -Teilchenzuständen in den Raum der antisymmetrischen  $N+1$ -Teilchenzuständen überführt.

**Definition.** Wir definieren das Vakuum mit  $N = 0$ :

$$|0\rangle := |0, \dots, 0\rangle.$$

Die Anwendung des Teilchenerzeugungsoperators auf das Teilchenvakuum ergibt:

$$\hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |0, \dots, 1_i, \dots, 0\rangle.$$

Dies ergibt gerade eine Einteilchenwellenfunktion, die man nicht mehr antisymmetrisieren muß.

**Behauptung.** Wir bestimmen den Teilchenvernichtungsoperator durch den zu  $\hat{a}_i^\dagger$  adjungierten Operator:

$$\hat{a}_i = (\hat{a}_i^\dagger)^\dagger.$$

Woher wissen wir, daß dies ein Teilchenvernichtungsoperator ist?

*Beweis.* Wir wissen:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = a |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle.$$

Es gilt dann:

$$|a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle|^2 = |a|^2$$

Wir schreiben die linke Seite aus und formen sie dann um:

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \langle n_1, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle a.$$

Hier ist entscheidend, daß der Zustand absteigen muß, da sonst  $\langle n_1, \dots, n_i, \dots | n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$  verschwinden würde.

$$\begin{aligned} &= \langle n_1, \dots, n_i, \dots | a' |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle a \\ &= \langle n_1, \dots, n_i, \dots | n_1, \dots, n_i, \dots\rangle a' a \\ &= a' a \end{aligned}$$

Und dies muß nach obiger Gleichung:

$$= |a|^2$$

sein.

Damit die Gleichung oben erfüllt ist, muß also

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i + 1\rangle = a' |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

beziehungsweise

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i\rangle = \tilde{a}' |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$$

gelten.  $\hat{a}_i$  ist also ein Vernichtungsoperator. Für das Vakuum gilt:

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

□

### 8.3.3 Transformation

Nachdem man eine Einteilchenbasis gewählt hat, stellt sich die Frage, wie man zwischen verschiedenen Basen wechselt.<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle &= \sum_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k | \psi_i\rangle \\ &= \sum_k |\phi_k\rangle c_{ki} \end{aligned}$$

<sup>5</sup>Zum Beispiel zwischen Harmonischer Oszillator-Basis und Wasserstoffatom-Basis.

Man entwickelt die neue Basis  $|\psi_i\rangle$  nach den alten Basiszuständen  $|\phi_k\rangle$  mit Entwicklungskoeffizienten  $c_{ki}$ .

Eigenschaft einer unitären Transformation von einer Orthonormalbasis in eine andere ist:

$$\begin{aligned}\langle \psi_j | \psi_i \rangle &= \delta_{ji} \\ &= \sum_k \langle \psi_j | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \psi_i \rangle \\ &= \sum_k \tilde{c}_{jk} c_{ki},\end{aligned}$$

wobei die  $\tilde{c}_{jk}$  die Rücktransformationskoeffizienten sind.

Besetzungszahldarstellung:

- $\boxed{N = 0}$

$$|0\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle$$

- $\boxed{N = 1}$

$$\hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |0, \dots, 1, \dots\rangle$$

- $\boxed{N = 2}$

$$\begin{aligned}\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger |0\rangle &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger |0\rangle \\ &= |0, \dots, 1_i, \dots, 1_j, \dots\rangle\end{aligned}$$

**Behauptung.** Der Teilchenerzeugungsoperator transformiert sich so:<sup>6</sup>

$$\begin{aligned}\hat{d}_i^\dagger &= \sum_k \langle \phi_k | \psi_i \rangle \hat{a}_k^\dagger \\ &= \sum_k c_{ki} \hat{a}_k^\dagger.\end{aligned}$$

*Beweis.*

Da

$$|\psi_i\rangle = \sum_k c_{ki} |\phi_k\rangle$$

gilt und da das Vakuum in jeder Basis gleich ist, ergibt sich:

$$\hat{d}_i^\dagger |0\rangle = \sum_k c_{ki} \hat{a}_k^\dagger |0\rangle.$$

Dies definiert also die Art, wie sich die Erzeugungsoperatoren beim Übergang in eine andere Basis transformieren müssen.  $\square$

<sup>6</sup>Teilchenerzeugungsoperator in einer anderen Basis darstellen.

### 8.3.4 Zweiteilchensysteme

Wir möchten zunächst einige algebraische Eigenschaften der Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperatoren feststellen.

**Behauptung.** Die Reihenfolge der Erzeugung muß nicht beachtet werden.

1. Es werde dem Zweiteilchenzustand  $|\psi\rangle$  zwei Teilchen hinzugefügt:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\psi\rangle &\stackrel{?}{=} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle \\ &\stackrel{!}{=} \lambda_{ij} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle\end{aligned}$$

Die zwei Zustände sind quantenmechanisch gleich. Sie können sich nur durch eine Konstante unterscheiden (Beide Zustände beschreiben die gleiche Physik).

**Behauptung.**  $\lambda$  ist unabhängig vom Paar  $ij$ .

*Beweis.* Wir benutzen eine andere Basis:

$$\begin{aligned}\hat{d}_i^\dagger \hat{d}_j^\dagger |\psi\rangle &= \lambda_{ij} \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_i^\dagger |\psi\rangle \\ 0 &= \left( \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_j^\dagger - \lambda_{ij} \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_i^\dagger \right) |\psi\rangle.\end{aligned}$$

Dies gilt auch in einer anderen Basis:

$$0 = \sum_{k,l} c_{ki} c_{lj} \left( \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger - \lambda_{ij} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \right) |\psi\rangle$$

und zwar für alle unitären Transformationen  $\sum_k c_{ki}$ . Daher gilt:

$$= \left( \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger - \lambda_{ij} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \right) |\psi\rangle.$$

Wenn das für jede Linearkombination  $kl$  gilt, so gilt es auch für jeden Koeffizienten. Und damit ist gezeigt, daß  $\lambda_{ij}$  unabhängig von  $ij$  ist.  $\square$

#### 2. Behauptung.

$$\lambda = +1 \quad \text{oder} \quad \lambda = -1$$

*Beweis.* Es gilt:

$$\hat{d}_k^\dagger \hat{d}_l^\dagger - \lambda \hat{d}_l^\dagger \hat{d}_k^\dagger = 0,$$

und es gilt auch:

$$\hat{d}_l^\dagger \hat{d}_k^\dagger = \lambda \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_l^\dagger.$$

Zweite Gleichung in die erste eingesetzt:

$$\hat{d}_k^\dagger \hat{d}_l^\dagger = \lambda^2 \hat{d}_k^\dagger \hat{d}_l^\dagger$$

und daher  $\lambda^2 = \pm 1$ .  $\square$

3. **Behauptung.** Die Reihenfolge der Anwendung der Operatoren ist für Bosonen beliebig.

$$\lambda = 1.$$

*Beweis.* Für den Erzeugungsoperator gilt:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger = 0$$

Der Kommutator von  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger$  verschwindet:

$$\boxed{[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_- = 0.}$$

Für den Vernichtungsoperator gilt:

$$\begin{aligned} 0^\dagger &= [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]^\dagger \\ &= (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger)^\dagger \\ &= \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \\ &= \hat{a}_j \hat{a}_i - \hat{a}_i \hat{a}_j \\ &= [\hat{a}_j, \hat{a}_i]_- \end{aligned}$$

und da  $0^\dagger = 0$

$$= 0$$

Der Kommutator von  $\hat{a}_j \hat{a}_i$  verschwindet:

$$\boxed{[\hat{a}_j, \hat{a}_i]_- = 0.}$$

Die Operatoren vertauschen. □

4. **Behauptung.** Die Reihenfolge der Anwendung der Operatoren ist für Fermionen beliebig.

$$\lambda = -1.$$

*Beweis.* Für den Erzeugungsoperator gilt:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger = 0$$

Der Antikommutator von  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger$  verschwindet:

$$\boxed{[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_+ = 0.}$$

Für den Vernichtungsoperator gilt:

$$\hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$$

Der Antikommutator von  $\hat{a}_i \hat{a}_j$  verschwindet:

$$\boxed{[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0.}$$

□



Insbesondere gilt hier für  $i = j$ :

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger &= 0 \\ 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger &= 0\end{aligned}$$

Dies ist eine Formulierung des Pauli-Prinzips. Ein Zustand kann nicht zweimal besetzt sein.

5. **Behauptung.** Für Fermionen gilt weiterhin:

$$\boxed{[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}.}$$

*Beweis.* Wir werden den Beweis für die verschiedenen Fälle führen.

(a) Für  $i = j$ :

$$\begin{aligned}[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger]_+ &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \\ &= A\end{aligned}$$

Wobei  $A$  ein Konstante ist (unabhängig von  $i$ ; reell; positiv). Es gilt also:

$$(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger) | \dots, n_i, \dots \rangle = A | \dots, n_i, \dots \rangle$$

**Fallunterscheidung:**

i.  $n_i = 0$ :

$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  ist wirkungslos.<sup>7</sup>

$$\begin{aligned}\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger | \dots, 0, \dots \rangle &= \hat{a}_i a | \dots, 1, \dots \rangle \\ &= a a' | \dots, 0, \dots \rangle \\ &= |a|^2 | \dots, 0, \dots \rangle\end{aligned}$$

ii.  $n_i = 1$ :

$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger$  ist wirkungslos.<sup>8</sup>

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots, 1, \dots \rangle &= \hat{a}_i^\dagger a' | \dots, 0, \dots \rangle \\ &= a' a | \dots, 1, \dots \rangle \\ &= |a|^2 | \dots, 1, \dots \rangle\end{aligned}$$

Also  $A_i = |a|^2$ .

(b) Für  $i \neq j$ :

Wir wählen eine andere Basis:

$$\begin{aligned}\hat{A} | \psi \rangle &= (\hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i + \hat{d}_i \hat{d}_i^\dagger) | \psi \rangle \\ &= \sum_{k,l} c_{ki} c_{li} (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger) | \psi \rangle \\ &= \sum_{k=l} \underbrace{c_{ki} c_{li}}_{=1} (\underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger}_{=A}) | \psi \rangle + \sum_{k \neq l} c_{ki} c_{li} (\underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger}_{=0 \text{ für alle } k \neq l}) | \psi \rangle\end{aligned}$$

<sup>7</sup> Würde von nichts etwas wegnehmen.

<sup>8</sup> Dies würde das Pauli-Prinzip verletzen.

Und daher gilt:

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j]_+ = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger = A \delta_{ij}.$$

Bleibt noch zu zeigen, daß  $A = 1$  ist. Wir wenden  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  auf das Vakuum an:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |0\rangle &= \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |0\rangle \\ &= \hat{a}_i | \dots, 1, \dots \rangle \\ &= |0\rangle \end{aligned}$$

und daher gilt allgemein  $A = 1$ . □

6. Für Bosonen gilt entsprechend:

$$\boxed{[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_- = \delta_{ij}.}$$

7. Für Fermionen gilt:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i = 0, \dots \rangle &= a | \dots, n_i = 1, \dots \rangle \text{ mit } |a| = 1 \\ \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i = 1, \dots \rangle &= 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} |1, 1, \dots, n_N = 1\rangle &= \hat{a}_{n_N}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_2}^\dagger \hat{a}_{n_1}^\dagger |0\rangle \\ &= -\hat{a}_{n_N}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

Aus der Kommutatorbeziehung folgt, daß das Vorzeichen bei Vertauschung wechselt.

8. **Behauptung.**  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  ist der Besetzungszahloperator.

*Beweis.*

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots, n_i = 0, \dots \rangle = 0$$

und

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i = 1, \dots \rangle &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_{n_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_i}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_N}^\dagger |0\rangle \\ &= (-)^S \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_{n_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_i}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_N}^\dagger |0\rangle \\ &= (-)^S \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger | \dots, n_i = 0, \dots \rangle \end{aligned}$$

siehe Fußnote<sup>9</sup>

$$\begin{aligned} &= (-)^S \hat{a}_i^\dagger (1 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) | \dots, n_i = 0, \dots \rangle \\ &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots, n_i = 1, \dots \rangle \end{aligned}$$

Also gilt  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \begin{cases} | \dots, n_i = 1, \dots \rangle & \text{für } n_i = 1 \\ | \dots, n_i = 0, \dots \rangle & \text{für } n_i = 0. \end{cases}$  Daher sind die  $| \dots, n_i, \dots \rangle$  Eigenzustände zu  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  mit den Eigenwerten  $n_i$ .  $\square$

Der Besetzungszahloperator  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  liefert uns als Wert ob der Zustand besetzt ist oder nicht.

**Behauptung.**  $\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  ist der Gesamtzahloperator.

$$\begin{aligned} \hat{N} | \dots \rangle &= \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | \dots \rangle \\ &= \sum_i n_i | \dots \rangle \end{aligned}$$

### 8.3.5 Ausblick

Unser Ziel ist für beliebige physikalische Operatoren die Darstellung mittels Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren zu erarbeiten.

**Beispiel.** Fock-Darstellung an einem konkreten Beispiel: Fermionen besetzen ein Einteilchenniveau (z.B.: Wasserstoff):

Abbildung 8.2: Niveauschema

Der Zustand  $\uparrow\downarrow$  wird beschrieben durch:

- In Ortsdarstellung:

$$\frac{1}{\sqrt{2!}} (\phi_{1a}(\vec{r}_1) \phi_{1b}(\vec{r}_2) - \phi_{1a}(\vec{r}_2) \phi_{1b}(\vec{r}_1));$$

- In Fock-Darstellung:

$$\hat{a}_{1b}^\dagger \hat{a}_{1a}^\dagger | 0 \rangle.$$

Bei drei Zuständen ergeben sich in der Ortsdarstellung in der Slater-Determinante sechs Terme. Bei der Fockdarstellung hingegen ist der Zustand leichter zu beschreiben:

$$\hat{a}_{2a}^\dagger \hat{a}_{1b}^\dagger \hat{a}_{1a}^\dagger | 0 \rangle.$$

Allerdings stellt sich die Frage wie der Erwartungswert berechnet wird.

---

<sup>9</sup>Mit

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger &= 1 \\ \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger &= 1 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \end{aligned}$$

## 8.4 Operatoren in der Fock-Darstellung

### 8.4.1 Nomenklatur

Im vorherigen Abschnitt haben wir die Grundlagen dafür gelegt, um vereinfacht mit Vielteilchenzuständen rechnen zu können.

Wir rekapitulieren die Vorgehensweise:

1. Einteilchenwellenfunktion:

$$\phi_i(\vec{r}_i) = \langle \vec{r}_i | \phi_{k_i} \rangle.$$

2. Produktwellenfunktion:

$$\langle \vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N | \phi_{k_1} \cdots \phi_{k_N} \rangle = \phi_{k_1}(\vec{r}_1) \cdots \phi_{k_N}(\vec{r}_N).$$

Eigenschaften der Produktwellenfunktion:

- (a) Sie ist nicht antisymmetrisch und hat damit bezüglich Fermionen nicht die richtigen Eigenschaften für die Schrödinger-Gleichung.
- (b) Sie bildet eine Basis für den  $N$ -Teilchen Hilbertraum. Das heißt:

$$\mathbb{1} = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N=1}^{\infty} | \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} \rangle \langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} |.$$

Alle Einteilchenwellenfunktionen laufen über alle Indizes.

3. Antisymmetrische Wellenfunktion:

Wir lassen den Projektionsoperator<sup>10</sup> auf die nicht antisymmetrisierte Produktwellenfunktion wirken:

$$\hat{A} | \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} \rangle.$$

Der Projektionsoperator  $\hat{A}$  projiziert auf den antisymmetrischen Teilraum des Hilbertraumes. Allerdings reicht es nicht aus nur den Operator  $\hat{A}$  anzuwenden. Die Wellenfunktion muß auch wieder normiert werden:

$$| \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} \rangle_A = \sqrt{N!} \hat{A} | \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} \rangle.$$

Damit erhält man einen antisymmetrischen und normierten  $N$ -Teilchenzustand. Dieser läßt sich in Ortsdarstellung durch die Slater-Determinante schreiben:

$$\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N} \rangle_A = \frac{\sqrt{N!}}{N!} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi_{k_1}(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{k_N}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi_{k_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}.$$

<sup>10</sup>Die Summe über alle möglichen Permutationen.

## 4. Fock-Darstellung:

Man kann auch eine andere Darstellung (Basis) wählen um die Basiszustände des Hilbertraumes zu generieren. In der Fock-Darstellung zum Beispiel durch Hintereinanderausführung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

Aus dem Vakuum (Nullteilchenzustand) generiert der Erzeugungsoperator ein Teilchen dieses Zustands:

$$|\phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_N}\rangle = \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{k_N}^\dagger |0\rangle$$

Der Vernichtungsoperator ist durch:

$$(\hat{a}_{n_1}^\dagger)^\dagger = \hat{a}_{n_1}$$

gegeben. Er hat die Eigenschaft:

$$\hat{a}_{n_1} |0\rangle = 0.$$

## 5. Kommutatoren:

Die Kommutatoren der Operatoren beschreiben die Konsequenzen der Vertauschung von Teilchen. Der Antikommutator beschreibt das Pauli-Prinzip:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_h^\dagger, \hat{a}_l^\dagger]_+ &= \hat{a}_h^\dagger \hat{a}_l^\dagger + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_h^\dagger \\ &= 0 \end{aligned}$$

also:

$$\hat{a}_h^\dagger \hat{a}_l^\dagger = -\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_h^\dagger.$$

Für  $l = h$  ergibt sich

$$\hat{a}_h^\dagger \hat{a}_h^\dagger = 0,$$

was das Pauli-Prinzip ist. In einen schon besetzten Zustand kann kein weiteres Teilchen gebracht werden.

Ebenso gilt:

$$[\hat{a}_h, \hat{a}_l]_+ = 0$$

und

$$[\hat{a}_h, \hat{a}_l^\dagger]_+ = \delta_{hl}.$$

## 8.4.2 Operatoren

Bisher ging es mehr um die Symbolik, einen eleganteren Weg, etwas darzustellen. Jetzt wollen wir damit rechnen.

**Einteilchenoperatoren**

**Beispiel.** Der Operator der gesamten kinetischen Energie lautet:

$$\hat{T}_{\text{ges}} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2M} = \sum_i \hat{O}(\vec{r}_i)$$

Die einzelnen Einteilchenoperatoren wirken nur auf die Koordinaten eines einzelnen Teilchens.

**Behauptung.** Für alle  $\phi$  muß  $\psi$  bekannt sein, dann ist  $\hat{O}$  definiert:

$$|\psi\rangle = \hat{O}|\phi\rangle.$$

Haben wir es mit einem linearen Operator zu tun (in der Quantenmechanik immer), so werden wir nur schauen müssen, wie der Operator auf die Basiszustände wirkt. Mit

$$|\phi\rangle = \sum_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k | \phi \rangle$$

können wir in

$$|\psi\rangle = \hat{O}|\phi\rangle$$

zwei Einsen einschieben:

$$|\psi\rangle = \sum_{k,k'} |\phi_{k'}\rangle \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \phi \rangle$$

$|\phi_k\rangle$  ist ein Einteilchenzustand, so daß wir den Erzeugungsoperator auf das Vakuum wirken lassen können:

$$\begin{aligned} |\phi_k\rangle &= \hat{a}_k^\dagger |0\rangle \\ \langle \phi_k | &= \langle 0 | \hat{a}_k. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$|\psi\rangle = \sum_{k,k'} \hat{a}_{k'}^\dagger |0\rangle \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \langle 0 | \hat{a}_k | \phi \rangle.$$

$\langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{k'}^*(r) \hat{O}(r) \phi_k(r) d^3r$  ist eine Zahl, die man nach vorne ziehen kann (und die wir berechnen können):

$$= \sum_{k,k'} \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \hat{a}_{k'}^\dagger |0\rangle \langle 0 | \hat{a}_k | \phi \rangle.$$

Mit  $|0\rangle \langle 0| = \mathbf{1}$  im 0-Teilchensystem (Es gibt keine weiteren Zustände, über die aufsummiert werden müsste.):

$$|\psi\rangle = \sum_{k,k'} \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k | \phi \rangle.$$

Also läßt sich der Operator  $\hat{O}$  so darstellen:

$$\hat{O} = \sum_{k,k'} \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k.$$

$\hat{O}$  hilft uns nicht weiter, denn mit Einteilchenzuständen konnten wir schon vorher rechnen.

### Antisymmetrische Vielteilchenoperatoren

**Behauptung.** Auch für antisymmetrische Vielteilchenzustände gilt die Gleichung

$$|\psi\rangle = \sum_{k,k'} \langle \phi_{k'} | \hat{O} | \phi_k \rangle \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\phi\rangle$$

als Definition für den Operator  $\hat{O}$ .

*Beweis.*

$$\hat{O} = \sum_i^N \hat{O}(i)$$

Jeweils links und rechts eine  $\mathbb{1}$  im  $N$ -Teilchenraum einfügen:

$$= \sum_i^N \sum_{k,k'} |\phi_{k'} \dots \phi_{k'_N}\rangle \langle \phi_{k'} \dots \phi_{k'_N} | \hat{O}(i) | \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N}\rangle \langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} |$$

Der Operator  $\hat{O}$  soll nur auf antisymmetrische Zustände wirken, daher fügen wir den (selbstadjungierten) Antisymmetrisieroperator  $\hat{A}$  ein:

$$\begin{aligned} \hat{A} \hat{O} \hat{A} &= \sum_i^N \sum_{k,k'} \hat{A} |\phi_{k'} \dots \phi_{k'_N}\rangle \langle \phi_{k'} \dots \phi_{k'_N} | \hat{O}(i) | \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N}\rangle \langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} | \hat{A} \\ &= \sum_i^N \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{k,k'} |\phi_{k'} \dots \phi_{k'_N}\rangle_A \\ &\quad A \langle \phi_{k'} \dots \phi_{k'_N} | \hat{O}(i) | \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N}\rangle_{AA} \langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} | \end{aligned}$$

Betrachten wir  ${}_A\langle \phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_N} | \hat{O}(i) | \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} \rangle_A$  für keine Koordinate steht ein Operator dazwischen, weil  $\hat{O}(i)$  nicht auf  $\phi_j$  wirkt, mit Ausnahme der Koordinate  $i$ :

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N!} \sum_i \sum_{k, k'} |\phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_N} \rangle_A \\
&\quad \underbrace{{}_A\langle \phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_N} | \hat{O}(i) | \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} \rangle_A}_{{}_{\delta_{k'_i k_i}}} \underbrace{{}_A\langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} |}_{\phantom{\delta_{k'_i k_i}}} \\
&= \frac{1}{N!} \sum_i \sum_{k, k'} \langle \phi_{k'_i} | \hat{O}(i) | \phi_{k_i} \rangle |\phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_N} \rangle_A \underbrace{{}_A\langle \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N} |}_{\phantom{\delta_{k'_i k_i}}} \\
&= \frac{1}{N!} \sum_i \sum_{k, k'} \langle \phi_{k'_i} | \hat{O}(i) | \phi_{k_i} \rangle \hat{a}_{k'_1}^\dagger \dots \hat{a}_{k'_i}^\dagger \dots \hat{a}_{k'_N}^\dagger |0\rangle_A \underbrace{{}_A\langle 0 |}_{\phantom{\delta_{k'_i k_i}}} \hat{a}_{k_N} \dots \hat{a}_{k_i} \dots \hat{a}_{k_1}
\end{aligned}$$

Bei jedem Tausch entsteht ein Vorzeichenwechsel:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N!} \sum_i \sum_{k, k'} \langle \phi_{k'_i} | \hat{O}(i) | \phi_{k_i} \rangle \\
&\quad ((-)^{i-1})^2 \hat{a}_{k'_i}^\dagger \dots \hat{a}_{k'_1}^\dagger \dots \hat{a}_{k'_N}^\dagger |0\rangle \langle 0 | \hat{a}_{k_N} \dots \hat{a}_{k_i} \dots \hat{a}_{k_1}
\end{aligned}$$

Nach links angewandte Vernichtungsoperatoren sind Erzeugungsoperatoren:

$$\begin{aligned}
&= \frac{\sqrt{N-1}!}{N!} \sum_i \sum_{k, k'} \langle \phi_{k'_i} | \hat{O}(i) | \phi_{k_i} \rangle \\
&\quad \hat{a}_{k'_i}^\dagger \underbrace{\hat{A} | \phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_i} \dots \phi_{k'_N} \rangle \langle \phi_{k'_1} \dots \phi_{k'_i} \dots \phi_{k'_N} | \hat{A}}_{=1} \hat{a}_{k_i}
\end{aligned}$$

Mit dieser  $\mathbf{1}$  im  $N-1$ -Teilchenraum:

$$= \frac{1}{N} \sum_i \sum_{k, k'} \langle \phi_{k'_i} | \hat{O}(i) | \phi_{k_i} \rangle \hat{a}_{k'_i}^\dagger \hat{a}_{k_i}$$

Wir haben  $N$ -mal denselben Term. Daher kann man die Summe ausführen, wobei sich der Faktor  $\frac{1}{N}$  mit  $N$  weghebt:

$$= \sum_{k, k'} \underbrace{\langle \phi'_k | \hat{O} | \phi_k \rangle}_{\text{Zahl}} \underbrace{\hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k}_{\text{Operatorstruktur}}$$

□

Bleibt noch zu klären, was für eine Zahl  $\langle k' | \hat{O} | k \rangle$  ist, und wie man mit dem Operatorprodukt  $\hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k$  rechnet.



- Der Teilchenzahloperator ist ein Spezialfall:

$$\hat{N} = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_{k',k} \underbrace{\langle \phi'_{k'} | \hat{N} | \phi_k \rangle}_{\delta_{k'k}} \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k.$$

- Die kinetische Energie ist für ebene Wellen:<sup>11</sup>

$$\langle \phi'_{k'} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \phi_k \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{k'k}$$

Hier treten nur Diagonalelemente auf.

- Für die kinetische Energie des Harmonischen Oszillators gilt:<sup>12</sup>

$$\langle \phi'_{k'} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \phi_k \rangle = \delta_{k'k} \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$

Dort treten auch nichtdiagonale Elemente auf.

Wie die Einteilchenmatrixelemente aussehen hängt davon ab, in welcher Basis man die Einteilchenzustände darstellt.

### Zweiteilchenoperatoren

**Beispiel.** Die Coulomb-Energie ist gegeben durch:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c \frac{e_1 e_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Für jedes Teilchen  $i$  muß über alle anderen Teilchen  $j$  einmal summiert werden, damit die gesamte Wechselwirkung erfaßt wird. Dies gilt für alle  $N$ -Teilchen:  $\sum_{i,j}, \forall$  Paare  $(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ .

Um den Unterschied zu Einteilchenoperatoren herauszuarbeiten:

Das Coulomb-Potential wirkt auf je zwei Teilchen (bei einem Teilchen gibt es gar keine Wechselwirkung). In jeden Operator gehen die Koordinaten zweier Teilchen ein.

Der Operator hängt von den Koordinaten zweier Teilchen ab. Zum Beispiel bei der Coulomb-Energie:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &= \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &= \frac{1}{2} \left( \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right). \end{aligned}$$

Für Vielteilchenzustände ergibt sich als Darstellung die Summe über die Paare:

$$\hat{V} = \sum_{\substack{\text{alle} \\ \vec{r}_i, \vec{r}_j \\ \text{Paare}}} \hat{V}(\vec{r}_i, \vec{r}_j),$$

<sup>11</sup>Hier ist  $|\phi_k\rangle$  eine kontinuierliche Basis.

<sup>12</sup>Hier ist  $|\phi_k\rangle$  eine diskrete Basis.

oder die Darstellung als Doppelsumme, da  $\hat{V}$  völlig symmetrisch bezüglich der Vertauschung von  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  ist:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{r_i, r_j=1}^N \hat{V}(\vec{r}_i \vec{r}_j)$$

mit  $i \neq j$ .

**Behauptung.** Der Potentialoperator  $\hat{V}$  zwischen antisymmetrischen Zuständen schreibt sich als:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{k'_1, k'_2, k_1, k_2} \langle \phi_{k'_1} \phi_{k'_2} | \hat{V} | \phi_{k_1} \phi_{k_2} \rangle \hat{a}_{k'_1}^\dagger \hat{a}_{k'_2}^\dagger \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1}.$$

Man beachte die Reihenfolge. Eine Vertauschung würde ein Vorzeichenwechsel erzeugen.

*Beweisskizze.* Man betrachte ein Zweiteilchensystem:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} |ab\rangle \langle ab| \left( \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_2 \vec{r}_1) \right) |cd\rangle \langle cd| \\ \hat{A} \hat{V} \hat{A} &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \hat{A} |ab\rangle \langle ab| \left( \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_2 \vec{r}_1) \right) |cd\rangle \langle cd| \hat{A}. \end{aligned}$$

Solange die Wechselwirkung symmetrisch ist gilt die Nebenrechnung

$$\begin{aligned} \iint \phi_a^*(1) \phi_b^*(2) \left( \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_2 \vec{r}_1) \right) \phi_c^*(1) \phi_d^*(2) dr_1^3 dr_2^3 &= 2 \langle ab | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | cd \rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2!^2}} 2 \sum_{abcd} |ab\rangle_A \langle ab| \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) |cd\rangle_A \langle cd| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | cd \rangle |ab\rangle_{AA} \langle cd| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | cd \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger |0\rangle \langle 0| \hat{a}_d \hat{a}_c \end{aligned}$$

mit der Nebenrechnung in Fußnote<sup>13</sup>. Für den  $N$ -Teilchenraum geht das analog nach geschicktem Vertauschen der  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ :

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | c(1)d(2) \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_d \hat{a}_c \\ &= \frac{1}{4} \left( \sum_{abcd} \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | c(1)d(2) \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_d \hat{a}_c \right. \\ &\quad \left. + \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | d(1)c(2) \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_c \hat{a}_d \right). \end{aligned}$$

Durch die Vertauschung der Reihenfolge kommt das Minuszeichen:

$$= \frac{1}{4} \left( \sum_{abcd} \left( \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | c(1)d(2) \rangle - \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | d(1)c(2) \rangle \right) \hat{a}_d^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_d \hat{a}_c \right).$$

Für das antisymmetrische Matrixelement  ${}_A \langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | c(1)d(2) \rangle_A$  gilt:

$$\langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | c(1)d(2) \rangle = -\langle a(1)b(2) | \hat{V}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) | d(1)c(2) \rangle.$$

Antisymmetrische Matrixelemente unterscheiden sich unter Vertauschung nur im Vorzeichen. Für  $d = c$  verschwindet der Term: Pauli-Prinzip.  $\square$

$$\begin{aligned} \langle cd | &= |cd\rangle^\dagger \\ &= (\hat{a}_c^\dagger \hat{a}_d^\dagger |0\rangle)^\dagger \\ &= \langle 0 | \hat{a}_d \hat{a}_c \end{aligned}$$

## 8.5 Wick'sches Theorem

### 8.5.1 Einleitung

Wir haben es mit dem Operator  $\hat{O} = \sum_{ab} \langle \psi_a | \hat{O} | \psi_b \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b$  (zum Beispiel: Zweiteilchenoperator) zu tun, der auf Zustände  $|\psi\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \cdots \hat{a}_k^\dagger |0\rangle$  (zum Beispiel: antisymmetrischer  $N$ -Teilchenzustand) wirkt, wobei  $\langle \vec{r} | \hat{a}_i^\dagger |0\rangle = \psi_i(\vec{r})$  der  $i$ -te Einteilchenzustand in Ortsdarstellung ist.

Wir möchten die Matrix  $\langle \psi' | \hat{O} | \psi \rangle$  berechnen.

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \hat{O} | \psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \langle \psi' | \hat{O}(\vec{r}_i) | \psi \rangle \\ &= \sum_{ab} \langle \psi_a | \hat{O} | \psi_b \rangle \langle \psi' | \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Um den hinteren Term zu berechnen, schreiben wir ihn auch in Fock-Darstellung:

$$= \sum_{ab} \langle \psi_a | \hat{O} | \psi_b \rangle \langle 0 | \hat{a}_{k'} \cdots \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \cdots \hat{a}_k^\dagger | 0 \rangle.$$

Das Problem ist jetzt zwar darauf reduziert Matrixelemente des Vakuumzustandes zu berechnen, aber der Operator ist jetzt sehr kompliziert, denn man hat jetzt ein Produkt von  $N$  Einteilchen-Vernichtungsoperatoren und  $N$  Einteilchen-Erzeugungsoperatoren.

$$= \sum_{ab} \langle \psi_a | \hat{O} | \psi_b \rangle \langle 0 | \hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z} | 0 \rangle.$$

Das Wick'sche Theorem liefert für die Matrixelemente  $\langle 0 | \hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z} | 0 \rangle$  mit  $N$  Vernichtungsoperatoren mal Einteilchenoperator mal  $N$  Erzeugungsoperatoren Zahlenwerte. Damit kann man dann solche Matrixelemente zwischen zwei antisymmetrischen Zuständen  ${}_A \langle \psi' | \hat{O} | \psi \rangle_A$  berechnen und zwar viel einfacher, als mit der Slater-Determinante.

### 8.5.2 Normalprodukt $\mathcal{N}(\hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z})$ und Kontraktion $\mathcal{K}(\hat{U} \hat{V})$

Zuerst zwei Definitionen, die die Schreibweise des Wick'schen Theorems stark vereinfachen.

**Definition.** Es sei  $\hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z}$  ein Produkt von Operatoren, wobei für die Elemente gilt:

$$\hat{E} = \begin{cases} \hat{a}_i^\dagger & \text{oder} \\ \hat{a}_i. \end{cases}$$

Das Normalprodukt  $\mathcal{N}()$  schiebt alle Erzeugungsoperatoren nach links und alle Vernichtungsoperatoren nach rechts. Mit Vorfaktor ergibt sich:

$$\mathcal{N}(\hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z}) := (-)^n \hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z},$$

wobei  $n$  die Anzahl der Permutationen ist, um die richtige Reihenfolge zu erhalten.

**Beispiel.** Wieviele Vertauschungen muß man vornehmen, um die geordnete Reihenfolge, die durch das Normalprodukt  $\mathcal{N}(\ )$  vorgegeben ist, zu erhalten?

$$\mathcal{N}(\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger) = (-)^3 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k$$

mit  $n = 1 + 1 + 1 = 3$ .

$$= -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k.$$

**Definition.** Kontraktion für je zwei Operatoren  $\hat{U}, \hat{V}$ :

$$\mathcal{K}(\hat{U}\hat{V}) := \hat{U}\hat{V} - \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}).$$

Damit ergibt sich für einige Beispiele:

- **Beispiel.**

$$\mathcal{K}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger) = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger = 0$$

Für zwei Erzeugungsoperatoren verschwindet die Kontraktion.

- **Beispiel.**

$$\mathcal{K}(\hat{a}_i \hat{a}_j) = \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_i \hat{a}_j = 0$$

Ebenso für zwei Vernichtungsoperatoren.

- **Beispiel.**

$$\mathcal{K}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j) = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = 0.$$

- **Beispiel.**

$$\mathcal{K}(\hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger) = \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger - (-\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j) = [\hat{a}_j, \hat{a}_i^\dagger]_+ = \delta_{ij}.$$

**Definition.** Man kann die Kontraktion auch alternativ definieren als Erwartungswert der Operatoren bezüglich des Vakuumzustandes (Matrixelement für den Teilchenvakuumzustand):

$$\mathcal{K}(\hat{U}\hat{V}) := \langle 0 | \hat{U}\hat{V} | 0 \rangle.$$

Diese Definition liefert dasselbe Ergebnis.

*Beweis.* Durch nachrechnen:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger | 0 \rangle &= \langle \phi_j | \phi_i \rangle = \delta_{ij} \end{aligned}$$

□

### 8.5.3 Wick'sches Theorem

Damit haben wir die Grundlagen erarbeitet um das Wick'sche Theorem zu definieren.

**Definition.**

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z} := & \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}) + \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{1-Paar-} \\ \text{kontraktionen}}} (-)^{a_1} \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \mathcal{N}(\hat{W}\hat{V}\dots\hat{X}\hat{Y}\dots\hat{Z}) \\ & + \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{2-Paar-} \\ \text{kontraktionen}}} (-)^{a_2} \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \mathcal{K}(\hat{X}_1\hat{Y}_1) \mathcal{N}(\hat{W}\hat{V}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{X}_1\hat{Y}_1\dots\hat{Z}) + \dots \\ & + \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Paarkon-} \\ \text{traktionen}}} (-)^{a_z} \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \dots \end{aligned}$$

dabei ist  $a$  jeweils die Anzahl der Vertauschungen (reines durchshiften), damit  $\hat{X}$  und  $\hat{Y}$  nebeneinander stehen.

Nun scheint diese Definition auf den ersten Blick wenig Sinn zu machen, da man sehr viele Terme bekommt. Man habe z.B. 20 Operatoren, dann bekommt man als ersten Summanden ein Normalprodukt mit 20 Termen; der nächste Summand enthält ein Normalprodukt mit 18 Termen; und so weiter. Dementsprechend entstehen noch mehr Terme durch die Kontraktionen. Hier ist aber auch der Vorteil der Darstellung: Viele der Terme verschwinden durch die Kontraktionen beziehungsweise es bleiben nur vorzeichenbehaftete Normalprodukte übrig (falls die Kontraktion ungleich Null ist).

**Beispiel.**

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger &= (-)^3 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k \\ &+ (-)^0 \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger (-)^1 \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k + (-)^2 \hat{a}_i \hat{a}_l^\dagger (-)^0 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \\ &+ (-)^0 \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger (-)^1 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + (-)^0 \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \\ \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger &= -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k - \delta_{ij} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k + \delta_{il} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k - \delta_{kl} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \delta_{ij} \delta_{kl} \end{aligned}$$

Falls man nun das Matricelement  $\langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger | 0 \rangle$  berechnen möchte, so bleibt nur der Term  $\langle 0 | \delta_{ij} \delta_{kl} | 0 \rangle$  übrig, da die Terme, bei denen der linke Erzeugungsoperator auf  $\langle 0 |$  wirkt, oder der rechte Vernichtungsoperator auf  $| 0 \rangle$  wirkt, verschwinden. Dies wird durch die Normalprodukte bewirkt. Es bleibt letztlich nur der Term übrig in dem kein Normalprodukt enthalten ist, sondern nur die Kontraktion (eine Zahl).

Wir veranschaulichen kurz die Herkunft des  $\delta_{kl}$ :

$$\langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \delta_{ij} \delta_{kl} | 0 \rangle$$

Der Vernichtungsoperator  $\hat{a}_k$  kann nur auf das Teilchen, das vorher von  $\hat{a}_l^\dagger | 0 \rangle$  erzeugt wurde wirken. Daher  $\delta_{kl}$ . Ebenso  $\delta_{ij}$ .

Das Wick'sche Theorem ist ein ideales Instrument um Matricelemente zu berechnen, da man damit sehr einfach eine Zahl als Ergebnis bekommt.

*Beweis.* Vollständige Induktion über  $n$ :<sup>14</sup>

**Induktionsanfang**  $n = 2$ :

$$\hat{U}\hat{V} = \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}) + \mathcal{K}(\hat{U}\hat{V})$$

Dies folgt direkt aus der Definition der Kontraktion.

**Induktionsschritt**  $n - 1 \rightarrow n$ :

$$\underbrace{\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}}_{n\text{-mal}}\hat{F}$$

Wir machen die **Fallunterscheidung**:

1.  $\hat{F}$  sei ein Vernichtungsoperator  $\hat{a}$ :

Steht  $\hat{a}$  links, so verschwinden alle Kontraktionen<sup>15</sup> mit  $\hat{U}\hat{a}$ ; steht  $\hat{a}$  an der richtigen Stelle:

$n - 1$ :

$$\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z} = \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}) + \sum_{\text{alle Paare}} (-)^a \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z})$$

$n$ :

$$\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}\hat{a} = \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z})\hat{a} + \sum_{\text{alle Paare}} (-)^a \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z})\hat{a}$$

$\hat{a}$  kann von rechts in das Normalprodukt eingebaut werden; da es an der richtigen Stelle steht, ändert sich nichts.

$$= \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}\hat{a}) + \sum_{\text{alle Paare zzgl. } \hat{a}} (-)^a \mathcal{K}(\hat{X}\hat{Y}) \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z}\hat{a})$$

In die Summation kann man alle  $\hat{a}$  einbauen, da oben gezeigt wurde, daß  $\mathcal{K}(\hat{U}\hat{a})$  verschwindet.

Das Wick'sches Theorem gilt für  $n$ .

2.  $\hat{F}$  sei ein Erzeugungsoperator  $\hat{a}^\dagger$ :

Für die Kontraktionen gilt dann

$$\hat{U}\hat{a}^\dagger = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \hat{U} = \hat{a} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\hat{U}\hat{V}\dots\hat{Z})\hat{a}^\dagger &= (-)^a (\hat{L}^\dagger \hat{M}^\dagger \hat{O} \dots \hat{R} \hat{S}) \hat{a}^\dagger \\ &= (-)^a (\hat{L}^\dagger \hat{M}^\dagger \hat{O} \dots \hat{R}) (\hat{S} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{S} - \hat{a}^\dagger \hat{S}) \\ &= (-)^a (\hat{L}^\dagger \hat{M}^\dagger \hat{O} \dots \hat{R}) ([\hat{S}, \hat{a}^\dagger]_+ - \hat{a}^\dagger \hat{S}) \end{aligned}$$

<sup>14</sup> $n$  ist die Anzahl der Operatoren.

<sup>15</sup>Wie oben gezeigt sind Kontraktionen mit Vernichtungsoperatoren links gleich Null.

Beim Durchschieben entsteht immer wieder eine Kontraktion mit  $\hat{a}^\dagger$  und ein Minuszeichen.

$$\begin{aligned}
 &= (-)^{a'} \hat{L}^\dagger \hat{M}^\dagger \hat{O} \cdots \hat{R} \hat{a}^\dagger \hat{S} + (-)^a \mathcal{K}(\hat{S} \hat{a}^\dagger) \hat{L}^\dagger \hat{M}^\dagger \hat{O} \cdots \hat{R} \\
 &= \mathcal{N}(\hat{U} \hat{V} \cdots \hat{Z} \hat{a}^\dagger) + \sum_{\text{alle Kontraktionen } \hat{U} \hat{a}^\dagger} (-)^b \hat{U} \hat{a}^\dagger \mathcal{N}(\text{Rest})
 \end{aligned}$$

Dadurch, daß man  $\hat{a}^\dagger$  an die richtige Stelle schieben möchte, bekommt man außer dem Normalprodukt noch zusätzliche Kontraktionen mit allen dazwischenliegenden Vernichtern.

Damit kann man das Wick'sche Theorem als bewiesen ansehen.  $\square$



## 8.6 Hartree-Fock-Gleichung

Betrachten wir im Folgenden Anwendungen des Wick'schen Theorems.

### 8.6.1 Problembeschreibung

**Beispiel (Atomphysik).** Betrachten wir ein Atom mit vielen ( $Z$ ) Elektronen; der Kern soll sich dabei in Ruhe befinden.

Abbildung 8.3: Coulomb-Wechselwirkung im Atom mit vielen Elektronen.

Der Hamilton-Operator des Systems beinhaltet die Kern-Elektron-Attraktion, sowie die Elektron-Elektron-Repulsion. Da der Hamilton-Operator der Operator der Energie der Atomelektronen ist, ist der Anteil der Coulomb-Anziehung des Kerns, bei fester Position, ein Einteilchen-Operator, ebenso wie der Operator der kinetischen Energie. Der Wechselwirkungsanteil Elektron-Elektron ist aber eine Summe aus Zweiteilchen-Termen, da jedes Elektron mit jedem wechselwirkt, und sich dabei die Bewegungsparameter aller Elektronen ständig ändern:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \frac{Ze(-e)}{|\vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(-e)^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Spalten wir den Hamilton-Operator in Einteilchen- und Zweiteilchenterme auf:

$$= \sum_{i=1}^Z \hat{U}(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}(i, j)$$

### 8.6.2 Reduktion auf einen Einteilchen-Operator

Das Ziel ist es nun, einen genäherten Hamilton-Operator aufzustellen, der das Problem zwar genau genug beschreibt, allerdings ein reiner Einteilchen-Operator sein soll. Wir suchen also eine antisymmetrische Produktwellenfunktion – eine Slater-Determinante, die die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung möglichst gut approximiert.

#### Mögliche Ansätze

- Vereinfachtes System: Ignoriere den Zweiteilchen-Wechselwirkungsterm. Diese Variante ist aber sehr grob, da vor allem bei größeren  $Z$  die Abschirmung der inneren Elektronen eine wichtige Komponente der Coulomb-Wechselwirkung darstellt.
- Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Abschirmeffekte größtenteils in einen Einteilchen-Operator zu packen, so dass die Restwechselwirkung, die

durch einen Zweiteilchen-Operator ausgedrückt werden muss, vernachlässigbar klein wird:

$$\hat{H}_{\text{Coulomb}} = \underbrace{\sum_{i=1}^Z \hat{U}(i) + \Delta \hat{U}(i)}_{\substack{\text{Einteilchen-Operator} \\ =: \hat{H}_0}} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i \neq j} \hat{V}(i, j) - \Delta \hat{U}(i)}_{\substack{\text{Zweiteilchen-Operator} \\ \rightarrow 0}}$$

### Optimale Näherung

Der zweite Ansatz liefert ein genaues Ergebnis, wenn wir es schaffen, einen Einteilchen-Operator  $\Delta \hat{U}(i)$  aufzustellen, der die Abschirmeffekte so berücksichtigt (auf ein Einteilchen-Problem reduziert), als ob sie nur von der Position des betroffenen Elektrons zustandekommen, und nicht von den Abständen zu den anderen Elektronen.

Wir suchen nun einen solchen Einteilchen-Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  bzw. die zugehörige Produktwellenfunktion. Sei mit  $\xi_a(\vec{r})$  die Einteilchenbasis von Eigenfunktionen zu  $\hat{U}(i)$  bekannt:

$$\langle \vec{r} | \hat{a}_a^\dagger | 0 \rangle = \langle \vec{r} | \xi_a \rangle = \xi_a(\vec{r})$$

Es gilt die Eigenwertgleichung:

$$\hat{U} | \xi_a \rangle = E_a | \xi_a \rangle$$

oder für das Matrixelement:

$$\langle \xi_a | \hat{U} | \xi_b \rangle = E_a \delta_{ab}$$

Damit können wir den Hamilton-Operator aufschreiben:

$$\hat{H} = \sum_{a,b} \langle \xi_a | \hat{U} | \xi_b \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b + \frac{1}{4} \sum_{a,b,c,d} \langle \xi_a, \xi_c | \hat{V} | \xi_b, \xi_d \rangle \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_c^\dagger \hat{a}_b \hat{a}_d$$

Das Matrixelement, bzw. die Zahl:

$$\langle \xi_a | \hat{U} | \xi_b \rangle = E_a \delta_{ab}$$

kennen wir dabei, das andere Matrixelement lässt sich berechnen:

$$\langle \xi_a \xi_c | \hat{U} | \xi_b \xi_d \rangle = \iint \xi_a^*(1) \xi_c^*(2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (\xi_b(1) \xi_d(2) - \xi_d(1) \xi_b(2)) d^3r_1 d^3r_2$$

### Ansatz für die Einteilchen-Wellenfunktion

Die gesuchte Wellenfunktion muss die Eigenwertgleichung zu  $\hat{H}_0$  erfüllen:

$$\hat{H}_0 | \phi_i \rangle = \varepsilon_i | \phi_i \rangle$$

Außerdem gilt für die Einteilchen-Wellenfunktion in Fock-Darstellung, wobei die Teilchenerzeuger  $c_j^\dagger$  in der Basis  $|\phi_i\rangle$  stehen:

$$|\phi_i\rangle = \hat{c}_i^\dagger |0\rangle$$

oder in Basisdarstellung der  $\xi$ 's:

$$|\phi_i\rangle = \sum_a |\xi_a\rangle \langle \xi_a | \phi_i \rangle = \sum_a x_{ia} |\xi_a\rangle = \sum_a x_{ia} \hat{a}_a^\dagger |0\rangle$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten  $x_{ia}$  der Basisdarstellung unbekannt sind. Da beide Darstellungen für  $|\phi_i\rangle$  gültig sind, können wir sie gleichsetzen, und erhalten somit folgende Beziehung, die die Entwicklungskoeffizienten erfüllen müssen:

$$\hat{c}_i^\dagger = \sum_a x_{ia} \hat{a}_a^\dagger$$

Die gesuchte Vielteilchenwellenfunktion mit den Erzeugungsoperatoren in der anderen Basis:

$$|\phi\rangle = \hat{c}_1^\dagger \cdots \hat{c}_Z^\dagger |0\rangle$$

Wir suchen nun die „optimale“ Näherung, also die Eigenfunktion, die den niedrigsten Energieeigenwert (für den Grundzustand) annimmt. Wir suchen also die Slater-Determinante, die uns den niedrigsten Energieeigenwert liefert. Dazu benutzen wir das Variationsprinzip.

### Hartree-Fock-Gleichung

Sei  $|\psi\rangle$  eine exakte Lösung für den Grundzustand. Dann liefert uns das Variationsprinzip folgende Beziehung für den Hamilton-Operators  $\hat{H}$  und die exakte Lösungswellenfunktion  $|\psi\rangle$ :

$$\delta \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0$$

Die optimale Slater-Determinante ist diejenige, für die folgende Variation im Raum der Slater-Determinanten ihr Minimum einnimmt:

$$\delta \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 0$$

Dazu müssen wir das Matrixelement  $\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle$  berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \langle \phi | \sum_{i,j} \langle \phi_i | \hat{U} | \phi_j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j | \phi \rangle \\ &\quad + \langle \phi | \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle \phi_i \phi_k | \hat{V} | \phi_j \phi_l \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_j \hat{c}_l | \phi \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle \phi_i | \hat{U} | \phi_j \rangle \langle 0 | \hat{c}_Z \cdots \hat{c}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \hat{c}_1^\dagger \cdots \hat{c}_Z^\dagger | 0 \rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle \phi_i \phi_k | \hat{V} | \phi_j \phi_l \rangle \langle 0 | \hat{c}_Z \cdots \hat{c}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k \hat{c}_1^\dagger \cdots \hat{c}_Z^\dagger | 0 \rangle \end{aligned}$$

Mit dem Wick'schen Theorem wird dieser Ausdruck kontrahiert ( $\hat{c}_i \hat{d}_j^\dagger = \delta_{ij}$ ):

$$= \sum_{i=1}^Z \langle \phi_i | \hat{U} | \phi_i \rangle + \frac{1}{4} \sum_{i,j}^Z \left( \langle \phi_i \phi_j | \hat{V} | \phi_i \phi_j \rangle_A - \langle \phi_i \phi_j | \hat{V} | \phi_j \phi_i \rangle_A \right)$$

Letztere Matrixelemente sind antisymmetrisch, was durch den Index  $A$  ausgedrückt wird. Vertauscht man im Ket des letzten Matrixelements die Indizes, so ändert sich durch die Antisymmetrie das Vorzeichen, so dass wir zusammenfassen können:

$$= \sum_{i=1}^Z \langle \phi_i | \hat{U} | \phi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^Z \langle \phi_i \phi_j | \hat{V} | \phi_i \phi_j \rangle_A$$

Der nächste Schritt ist, die  $|\phi_i\rangle$ 's nach der bekannten Einteilchenbasis  $|\xi_a\rangle$  zu entwickeln:

$$= \sum_{i=1}^Z \sum_{a,b}^{\infty} \langle \xi_b | \hat{U} | \xi_a \rangle x_{ib}^* x_{ia} \\ + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^Z \sum_{a,b,c,d}^{\infty} \langle \xi_a \xi_c | \hat{V} | \xi_b \xi_d \rangle_A x_{ia}^* x_{ic}^* x_{ib} x_{id}$$

Dieses Zwischenergebnis für das gesuchte Matrixelement  $\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle$  können wir als eine Funktion der Koeffizienten  $x$  und ihrer konjugiert komplexen Zahlen  $x^*$  auffassen:

$$=: f(x, x^*)$$

Die  $x$  und  $x^*$  sind unbekannt. Das neue Ziel heißt also, die Funktion  $f(x, x^*)$  zu finden, die mit dem Variationsprinzip das Minimum liefert. Als Nebenbedingung für die Koeffizienten müssen wir die Normerhaltung fordern:

$$\sum_a x_{ia} x_{ia}^* = 1$$

Daraus leiten wir mit den Lagrange-Multiplikatoren  $\lambda_i$  her, dass folgende Funktion zu betrachten ist:

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle - \sum_{i=1}^Z \lambda_i \sum_a^{\infty} x_{ia} x_{ia}^* \quad (\ddagger)$$

Wir suchen also das Minimum der Funktion  $(\ddagger)$ . Dazu bilden wir die Ableitung, die null sein muss, damit die Funktion ein Extremum annimmt:

$$0 = \frac{d}{dx_{ke}^*} \left( \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle - \sum_{i=1}^Z \lambda_i \sum_a^{\infty} x_{ia} x_{ia}^* \right)$$

Setzen wir den Ausdruck  $f(x, x^*)$  für das Matrixelement ein und differenzieren, so bleibt von den  $\sum_i$  nur die  $k$ -te Komponente übrig. Für die gemischte Summe müssen wir die Produktregel anwenden, wobei einmal  $\sum_a$  und einmal  $\sum_c$  durch die  $e$ -Komponente „ersetzt“ wird. Auch die „Lagrange-Summe“ reduziert sich auf einen Term, so dass übrigbleibt:

$$\begin{aligned} &= \sum_b^{\infty} \langle \xi_e | \hat{U} | \xi_b \rangle x_{kb} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^Z \sum_{b,c,d}^{\infty} \langle \xi_e \xi_c | \hat{V} | \xi_b \xi_d \rangle_A x_{jc}^* x_{kb} x_{jd} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^Z \sum_{a,b,d}^{\infty} \langle \xi_a \xi_e | \hat{V} | \xi_b \xi_d \rangle_A x_{ia}^* x_{ib} x_{jd} - \lambda_k x_{ke} \end{aligned}$$

Umschaulen; dabei lassen sich die Doppelsummen durch Umindizierung zusammenfassen:

$$\lambda_k x_{ke} = \sum_b^{\infty} \left( \langle \xi_e | \hat{U} | \xi_b \rangle + \sum_{j=1}^Z \langle \xi_e \xi_c | \hat{V} | \xi_b \xi_d \rangle_A x_{jc}^* x_{jd} \right) x_{kb}$$

Kürzen wir den Klammerausdruck durch ein „ $\hat{\mathcal{H}}$ “ ab:

$$= \sum_b^{\infty} \langle \xi_e | \hat{\mathcal{H}} | \xi_b \rangle x_{kb}$$

Diese Beziehung gilt für alle  $e$ , sie ist somit eine Bestimmungsgleichung für  $x_{kb}$ . Andererseits ist sie aber auch eine Eigenwertgleichung für  $\hat{\mathcal{H}}$  mit dem Energieeigenwert  $\lambda_k$ . Die eigentliche Eigenwertgleichung für  $\hat{H}_{\text{HF}} := \hat{\mathcal{H}}$  wird *Hartree-Fock-Gleichung* genannt.

$\hat{\mathcal{H}}$  besitzt die Form eines Einteilchen-Operators. Er hat zwei Anteile: Den ursprünglichen Einteilchen-Operator, sowie eine Korrektur, die der Ersatz für die Zweiteilchen-Wechselwirkung ist. Allerdings hängt der Korrekturterm selbst auch von  $x_{ia}$  ab. Bei der Lösung der Eigenwertgleichung muss dies beachtet werden; wir benötigen eine selbstkonsistente Lösung, also eine die beide Bestimmungsgleichungen gemeinsam löst.

### Selbstkonsistenz-Problem

Dieses nichtlineare Problem ist ein typisches selbstkonsistentes Problem, wie es durch das Hartree-Fock-(Selbstkonsistenz-)Verfahren gelöst werden kann: Zur Bestimmung des Hamilton-Operators  $\hat{H}_{\text{HF}} = \hat{\mathcal{H}}$  benötigen wir  $x_{ia}$ , aber zur Bestimmung der  $x_{ia}$  benötigen wir den Hamilton-Operator  $\hat{H}_{\text{HF}}$ .

Diese wechselseitige Beziehung wird mittels Iterationsverfahren gelöst.

Was ist  $\hat{H}_{\text{HF}}$ ? Betrachten wir dazu die Diagonalelemente, die gleich den Energieeigenwerten  $\lambda_k$  sind:

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \langle \xi_k | \hat{H}_{\text{HF}} | \xi_k \rangle \\ &= \langle \xi_k | \hat{U} | \xi_k \rangle + \sum_{j=1}^Z \langle \xi_k \xi_j | \hat{V} | \xi_k \xi_j \rangle \end{aligned}$$

Das Matrixelement von  $\hat{U}$  stellt die Wechselwirkung mit dem Kern dar, die Matrixelemente von  $\hat{V}$  nähern die Wechselwirkung mit den anderen Elektronen als Einteilchen-Operator an.

### Abschließende Bemerkung

Für die Gesamtenergie des Systems muss beachtet werden:

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \neq \sum_{k=1}^Z \lambda_k$$

Dem wäre nur so, wenn es keine Wechselwirkungen der Elektronen untereinander gäbe. Stattdessen gilt das Theorem von *Koopmans*:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \sum_{k=1}^Z \left( \frac{1}{2} \langle \xi_k | \hat{U} | \xi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^Z \langle \xi_k \xi_j | \hat{V} | \xi_k \xi_j \rangle + \frac{1}{2} \langle \xi_k | \hat{U} | \xi_k \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^Z \lambda_k + \langle \xi_k | \hat{U} | \xi_k \rangle \end{aligned}$$

## 8.7 Quasiteilchen; das BCS-Theorem

### 8.7.1 Varianten zum Hartree-Fock-Verfahren

#### Superposition von Slater-Determinanten

Abbildung 8.4: Einteilchen-Potential.

Die mit dem Hartree-Fock-Verfahren gefundene Lösung  $|\phi_{\text{HF}}\rangle$  für Vielteilchensysteme mit gegenseitiger Wechselwirkung ist nicht die exakte Lösung. Falls ein Teilchen angeregt wird, kann die Wellenfunktion zwar noch durch die alte Slater-Determinante beschrieben werden. Werden jedoch zwei Teilchen angeregt, so geht das nicht mehr; die Gesamtenergie kann dabei nämlich kleiner werden. Die Überlagerung zweier Slater-Determinanten kann allerdings eine energetisch niedrigere Lösung liefern, als das Hartree-Fock-Verfahren, und damit eine bessere Näherung liefern.

Die Überlagerung der Slater-Determinante  $|\phi_{\text{HF}}\rangle$  aus Abschnitt 8.6 und einer anderen Slater-Determinante  $|\tilde{\phi}\rangle$ :

$$|\psi\rangle = \alpha |\phi_{\text{HF}}\rangle + \beta |\tilde{\phi}\rangle$$

bedeutet für die Energiewerte der Systeme:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \leq \langle \phi_{\text{HF}} | \hat{H} | \phi_{\text{HF}} \rangle$$

Abbildung 8.5: Besetzte Einteilchen-Zustände.

#### Beimischungen

Ein Zustand kann auch durch Beimischungen anderer Zustände, die über das Hartree-Fock-Verfahren hinausgehen, verbessert angenähert werden.

Die bisherige Vorgehensweise war, die Wellenfunktion  $|\phi_{\text{HF}}\rangle$  mittels Teilchen-erzeugungsoperatoren  $a^\dagger$  aus dem Teilchenvakuum  $|0\rangle$  zu erzeugen:

$$|\phi_{\text{HF}}\rangle = \hat{a}_1^\dagger \cdots \hat{a}_Z^\dagger |0\rangle$$

Stattdessen können wir versuchen, die Hartree-Fock-Wellenfunktion als Beschreibung für ein *Quasiteilchen-Vakuum*  $|\tilde{0}\rangle$  zu verwenden (das damit über die Fermi-Kante definiert ist):

$$|\phi_{\text{HF}}\rangle \cong |\tilde{0}\rangle$$

Für diesen Fall brauchen wir allerdings Vernichtungsoperatoren für die Quasiteilchen. Berücksichtigen wir den Spin ( $\uparrow$  oder  $\downarrow$ ), so definieren wir für den Zustand  $k$ :

$$\hat{b}_{k\uparrow} := \begin{cases} \hat{a}_{k\uparrow}, & \text{falls } k > F \text{ oberhalb der Fermi-Kante;} \\ -\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger, & \text{falls } k \leq F, \text{ also innerhalb des Quasiteilchen-Vakuums.} \end{cases}$$

Dabei soll z.B.  $\hat{a}_{k\uparrow}$  nur  $\uparrow$ -Fermionen vernichten können.

Was bedeutet diese Definition?

- $\hat{b}_{k\uparrow} |\phi_{\text{HF}}\rangle = 0$
- Das Vorzeichen im letzten Fall ist Konvention.
- Warum  $\downarrow$  beim Operator  $-\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger$ ?

Anschaulich kann man die Wirkung folgendermaßen betrachten:

Wende ich den Quasiteilchenvernichter für Spin- $\uparrow$   $\hat{b}_{k\uparrow}$  auf einen Quasiteilchenzustand an, so wird das Spin-Up-Teilchen  $|k\rangle$  vernichtet, wenn es sich „oberhalb“ des Quasiteilchen-Vakuums befindet. Liegt  $|k\rangle$  jedoch innerhalb dieses Vakuums, so wird der zugehörige Spin-Down-Zustand erzeugt (wenn er nicht schon besetzt ist).

Betrachten wir dazu noch den folgenden Operator:

$$\hat{b}_{k\uparrow}^\dagger := \begin{cases} \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger, & \text{falls } k > F \text{ oberhalb der Fermi-Kante} \\ -\hat{a}_{k\downarrow}, & \text{falls } k \leq F \end{cases}$$

und dessen Anwendung:

$$\hat{b}_{k\uparrow}^\dagger |\phi_{\text{HF}}\rangle = \begin{cases} \text{Gesamte Spinprojektion } +\frac{1}{2}, & \text{für } k > F \\ \text{Gesamte Spinprojektion } +\frac{1}{2}, & \text{für } k \leq F \end{cases}$$

### 8.7.2 Verallgemeinerung des Quasiteilchen-Ansatzes

Die beiden Operatoren  $\hat{b}_{k\uparrow}^\dagger$  und  $\hat{b}_{k\uparrow}$  lassen sich als Linearkombination der uns bekannten Teilchenerzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren  $a$  darstellen:

$$\begin{aligned} \hat{b}_{k\uparrow} &= u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \\ \hat{b}_{k\uparrow}^\dagger &= u_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger - v_k \hat{a}_{k\downarrow} \end{aligned}$$

wobei:

$$u_k, v_k \in \mathbb{R}$$

Nun sind wir auf der Suche nach dem Quasiteilchen-Vakuum  $|\tilde{0}\rangle$ :

$$\hat{b}_{k\uparrow} |\tilde{0}\rangle = 0$$

Fordern wir, dass die Quasiteilchen Fermionen sind, so müssen die Operatoren  $\hat{b}_k$  dieselben (Anti-)Kommutatorregeln erfüllen, wie die ursprünglichen Teilchenoperatoren:

$$[\hat{a}_a, \hat{a}_b^\dagger]_+ = \delta_{ab}$$



daraus:

$$[\hat{b}_{k\uparrow}, \hat{b}_{k\uparrow}^\dagger]_+ = 1$$

Einsetzen der Verallgemeinerung:

$$= [u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger, u_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger - v_k \hat{a}_{k\downarrow}]_+$$

Trennt man die Produkte in einzelne Antikommutatoren, so fallen solche mit „gleichen“ Operatoren  $[a, a]_+$  und  $[a^\dagger, a^\dagger]_+$  weg (sie vertauschen), übrig bleibt:

$$= u_k^2 [\hat{a}_{k\uparrow}, \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger]_+ + v_k^2 [\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{k\downarrow}]_+$$

Auf- und Absteigeoperator hintereinander angewandt ergibt, je nach Reihenfolge, null oder die Identität, so dass die beiden Antikommutatoren jeweils  $\hat{1}$  ergeben:

$$= u_k^2 + v_k^2$$

Damit haben wir eine Beziehung für die Koeffizienten des Ansatzes:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1$$

Stellen wir zwei weitere Operatoren auf (die fehlenden bezüglich der möglichen Spinprojektionen):

$$\begin{aligned}\hat{b}_{k\downarrow} &= \tilde{u}_k \hat{a}_{k\downarrow} - \tilde{v}_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \\ \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger &= \tilde{u}_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger - \tilde{v}_k \hat{a}_{k\uparrow}\end{aligned}$$

wobei wieder:

$$\tilde{u}_k, \tilde{v}_k \in \mathbb{R}$$

Es sollen dabei dieselben Antikommutatoreigenschaften gelten, wie für die ursprünglichen Teilchenoperatoren, also:

$$\begin{aligned}[\hat{b}_{k\uparrow}, \hat{b}_{k\downarrow}]_+ &= 0 \\ [\hat{b}_{k\uparrow}^\dagger, \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger]_+ &= 0 \\ [\hat{b}_{k\uparrow}, \hat{b}_{k\uparrow}^\dagger]_+ &= 1 \\ [\hat{b}_{k\downarrow}, \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger]_+ &= 1\end{aligned}$$

woraus für die Koeffizienten folgt:

$$\frac{u_k}{v_k} = -\frac{\tilde{u}_k}{\tilde{v}_k}$$

Womit sich auch diese Operatoren wieder durch die Koeffizienten  $u_k$  und  $v_k$  ausdrücken lassen:

$$\begin{aligned}\hat{b}_{k\downarrow} &= u_k \hat{a}_{k\downarrow} + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \\ \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger &= u_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger + v_k \hat{a}_{k\uparrow}\end{aligned}$$

Diese Quasiteilchen sind die *allgemeinen* Quasiteilchen, während diejenigen von Hartree-Fock ein Spezialfall sind.

### 8.7.3 Allgemeines Quasiteilchen-Vakuum $|\text{BCS}\rangle$

Wir fordern für das allgemeine Quasiteilchen-Vakuum  $|\text{BCS}\rangle$ :

$$\hat{b}_{k\uparrow}|\text{BCS}\rangle = 0, \quad \hat{b}_{k\downarrow}|\text{BCS}\rangle = 0$$

Wir müssen also die Koeffizienten  $u_k$  und  $v_k$  so finden, dass die Energie ein Minimum annimmt.

**Behauptung (Mathematische Betrachtung).** Das Quasiteilchen-Vakuum nimmt folgende formale Gestalt an:

$$|\text{BCS}\rangle \equiv |\tilde{0}\rangle = \prod_k \left( u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$$

*Beweisskizze.*

$$\hat{b}_{k\uparrow}|\text{BCS}\rangle = \left( u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \right) |\text{BCS}\rangle$$

Setzen wir die Behauptung ein und trennen das Produkt in einen Anteil  $k \neq k'$  und einen mit  $k = k'$  auf:

$$= \prod_{k' \neq k} \left( u_{k'} + v_{k'} \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \right) \cdot \left( u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \right) \cdot \left( u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$$

Multipliziert man dies nun aus, und beachtet dabei, dass für Fermionen (wor-auf wir uns anfangs festlegten) Produkte gleicher Quasiteilchen-Operatoren null ergeben, so erhalten wir letztlich:

$$= 0$$

□

#### Sonderfälle

Für die zwei Sonderfälle:

1.  $v_k = 1 \vee u_k = 0$ , für  $k = 1, \dots, F$ , sowie
2.  $v_k = 0 \vee u_k = 1$ ,  $\forall k > F$ ,

entspricht das Quasiteilchenvakuum dem Hartree-Fock-Grundzustand.

#### Teilchenpaare

Betrachten wir die mathematische Darstellung des Quasiteilchen-Vakuums:

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_k \left( u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$$

Für  $k = 1$  werden durch den  $v_1$ -Term 2 Teilchen erzeugt, der  $u_1$ -Term trägt keine Teilchen bei. Setzen wir ein größeres  $k$  an, so bleibt die „Paarhaftigkeit“ der Teilchenerzeugungs-Operatoren erhalten. Wir folgern: *Das Quasiteilchen-Vakuum ist ein Zustand mit gerader Anzahl von Teilchen; in ihm werden Teilchen nur paarweise erzeugt.* Also zwei Fermionen im selben Zustand bis auf die unterschiedliche Spineinstellung.

Für die Quasiteilchen lässt sich das Wick'sche Theorem anwenden.<sup>16</sup>

### Hamilton-Operator

Die Annahme ist, dass die  $\varepsilon_k$  diagonal sind, sowie dass die Energie für  $\uparrow$  und  $\downarrow$  die gleiche ist.

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \left( \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow} \right) - G \sum_{k \neq k'} \left( \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow} \hat{a}_{k'\uparrow} \right)$$

Der erste Term entspricht dabei dem Hartree-Fock-Grundzustand, der zweite Term ist für die attraktive Wechselwirkung zuständig, die auf Teilchen mit entgegengesetztem Spin wirkt (diese kurzreichweitige Wechselwirkung wird durch das Pauli-Prinzip impliziert).

Versuchen wir  $\hat{H}$  in einen Quasiteilchenoperator umzuschreiben. Dazu müssen wir die Teilchenoperatoren  $\hat{a}$  durch die Quasiteilchenoperatoren  $\hat{b}$  darstellen:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger &= u_k \hat{b}_{k\uparrow}^\dagger + v_k \hat{b}_{k\downarrow} \\ \hat{a}_{k\uparrow} &= u_k \hat{b}_{k\uparrow} + v_k \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger \\ \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger &= u_k \hat{b}_{k\downarrow}^\dagger - v_k \hat{b}_{k\uparrow} \\ \hat{a}_{k\downarrow} &= u_k \hat{b}_{k\downarrow} - v_k \hat{b}_{k\uparrow}^\dagger \end{aligned}$$

Daraus folgt für die Matrixelemente (Energieeigenwerte):

$$\langle \tilde{0} | \varepsilon_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} | \tilde{0} \rangle =$$

nach einsetzen der  $\hat{a}$  und umordnen durch das Wick'sche Theorem:

$$= \sum_k \varepsilon_k v_k^2$$

Analog erhalten wir für den kompletten Hamilton-Operator:

$$\langle \tilde{0} | \hat{H} | \tilde{0} \rangle = 2 \sum_k \varepsilon_k v_k^2 - G \left( \sum_k u_k v_k \right)^2$$

Um den Grundzustand zu finden suchen wir das Minimum des Erwartungswerts  $\langle \tilde{0} | \hat{H} | \tilde{0} \rangle$  als Funktion der Koeffizienten  $u_k$  und  $v_k$  (die wir ja noch nicht

<sup>16</sup>Das Wick'sche Theorem hat keine physikalische Bedeutung, sondern sorgt nur dafür, dass die Teilchenoperatoren richtig geordnet sind, bzw. es sich damit leichter rechnen lässt, wie das vorige Kapitel gezeigt hat.

kennen). Ist der tiefst mögliche Zustand der Hartree-Fock-Zustand, so wird er reproduziert; wir erhalten auf jeden Fall den tiefsten Zustand.

Das Problem ist allerdings, dass das Quasiteilchen-Vakuum keine feste Anzahl von Teilchen besitzt, während Atome bzw. Kerne konstante Teilchenzahlen aufweisen. Wir müssen also das Variationsprinzip mit Nebenbedingungen – mit Lagrange-Multiplikator – anwenden. Dazu definieren wir den *Teilchenzahloperator*  $\hat{N}$ , diesmal mit Berücksichtigung des Spins:

$$\hat{N} = \sum_k \left( \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow} \right)$$

sowie:

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k - \lambda$$

Das entsprechende Matrixelement soll ein Minimum annehmen:

$$\langle \tilde{0} | \hat{H} - \lambda \hat{N} | \tilde{0} \rangle = \text{Minimum}$$

Suchen wir das Minimum:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dv_k} \langle \tilde{0} | \hat{H} - \lambda \hat{N} | \tilde{0} \rangle &= 0 \\ &= \frac{\partial}{\partial v_k} \langle \tilde{0} | \hat{H} - \lambda \hat{N} | \tilde{0} \rangle + \frac{du_k}{dv_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \langle \tilde{0} | \hat{H} - \lambda \hat{N} | \tilde{0} \rangle \end{aligned}$$

Bilden wir die Ableitungen, wobei  $u_k = \sqrt{1 - v_k^2}$  ist:

$$= 4 \sum_k \tilde{\varepsilon}_k v_k - 2G u_k \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} + 2G \frac{v_k}{u_k} v_k \sum_{k'} u_{k'} v_{k'}$$

Multiplikation mit  $\frac{u_k}{2}$ :

$$= 2 \sum_k \tilde{\varepsilon}_k u_k v_k - G \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} (u_k^2 - v_k^2) \quad (\star)$$

Dies ist eine nichtlineare gekoppelte Gleichung. Sie ist nicht trivial zu lösen.

Als Ansatz definieren wir die Zahl:

$$\Delta := G \sum_{k'} u_{k'} v_{k'}$$

Die „Restgleichung“ ist einfacher zu lösen. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right) \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right) \end{aligned}$$

Abbildung 8.6: Koeffizient  $v_k^2$  als Lösung der nichtlinearen Gleichung für das Energieminimum.

wobei dies Lösungen von  $(\star)$  sind, die die Bedingung für die Koeffizienten erfüllen:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1$$

Wird  $\tilde{\varepsilon}_k$  null, so ist  $\varepsilon_k = \lambda$ . Nun muss der Parameter  $\lambda$  so verschoben werden, dass die Teilchenzahl  $N$  herauskommt:

$$N = 2 \sum_k v_k^2$$

Dazu setzen wir  $\lambda$  gleich der Fermi-Energie:

$$\lambda := E_F$$

Wie bestimmt man nun  $\Delta$ ?

Für  $\Delta = 0$  erhalten wir den Hartree-Fock-Zustand. Außer dieser trivialen<sup>17</sup> Lösung soll es aber noch eine tieferer Energie geben. Diese hängt jedoch von der „Kopplungsstärke“  $G$  ab:

$$\begin{aligned} \Delta &= G \sum_k \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right) \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right)} \\ &= \frac{1}{2} G \sum_k \sqrt{1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_k^2}{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \\ &= \frac{1}{2} G \sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta^2}} \end{aligned} \quad \text{Gap-Gleichung}$$

Diese Gleichung hat (wie erwartet) die triviale Lösung  $\Delta = 0$ . Außerdem besitzt sie für ein  $G$  oberhalb einer kritischen Kopplungsstärke  $G_C$  eine Lösung mit positivem  $\Delta$ . Der Parameter  $\Delta$  heißt *Gap-Parameter*.

Was bedeutet dies nun für den Hamilton-Operator? Ist  $\Delta > 0$ , so ist dies eine zusätzliche Energie. Diese basiert auf Paarbildung in den Systemen:

- Kernphysik (Paarenergie): Die Möglichkeit der Paarung macht gg-Kerne<sup>18</sup> attraktiver als uu-Kerne und ug-Kerne.<sup>19</sup>
- Festkörperphysik (Cooperpaare): Die Supraleitung entsteht, wenn zwei Elektronen gepaart auftreten. Sie wechselwirken dann nicht mehr wie einzelne Elektronen. Dieser Cooperpaarzustand ist bei tiefsten Temperaturen der energetisch günstigere; d.h. es muss Energie aufgewendet werden, die zwei Elektronen voneinander zu trennen.

<sup>17</sup>Diese Lösung kennen wir ja schon, wir machten den Ansatz, um energetisch niedrigere Lösungen zu finden.

<sup>18</sup>Gerade Anzahl von Neutronen und gerade Anzahl von Protonen im Kern; u steht entsprechend für eine ungerade Anzahl.

<sup>19</sup>Bei der Stabilität der Kerne, und damit zusammenhängend beim  $\beta$ -Zerfall, macht sich die Paarungsenergie bemerkbar; vgl. [Povh, Abschnitt 3.1].

## 8.8 Konsequenzen der Symmetrieeigenschaft von Vielteilchensystemen

Im Folgenden fragen wir, welche Konsequenz die Eigenschaften der Fermionen für zusammengesetzte physikalische Systeme hat.

### 8.8.1 Schalenmodell der Atomphysik

Das Pauli-Prinzip „zwingt“ die Elektronen in die, als Schalen auffassbaren, Energieniveaus der Atome.

Abbildung 8.7: Energieniveaus des Wasserstoff-Atoms.

Vor allem die Edelgaskonfiguration mit stark gebundenen Elektronen deutet auf die Wichtigkeit des Paarverhaltens hin. Hier sind nämlich die (unteren) Schalen abgeschlossen, also voll besetzt.

### 8.8.2 Schalenmodell der Kernphysik

Im Gegensatz zu den Elektronen im Atom, wird der Kern aus zwei verschiedenen Bausteinen gebildet. Außerdem liegt statt eines Zentralpotentials ein davon deutlich unterscheidbares (Hartree-Fock-artiges) Potential vor. Trotzdem kann man das Schalenmodell einfach auf den Kern übertragen. Damit lässt sich z.B. erklären, dass  ${}^4\text{He}$  mit seinem Neutron- und Proton-Paar extrem stark gebunden ist. Die sogenannten *magischen Zahlen* sind die Besetzungszahlen voller Nukleonenschalen. Protonen und Neutronen haben dabei ihre eigenen Schalen, da sie unterscheidbar sind.

Abbildung 8.8: Kern-Schalenmodell für  ${}^4\text{Helium}$ .

### 8.8.3 Schalenmodell der Teilchenphysik

Auch wenn man noch tiefer in die Materie blickt, die Baryonen nach ihren Quarks auflöst, so kann man experimentelle Befunde durch die Eigenschaften der Fermionen erklären. So wurde aus der  $\Delta$ -Resonanz (mit Spin  $\frac{3}{2}$ ) – mit Hilfe des Pauli-Prinzips – gefolgert, dass es außer Ladung, Spin und Flavor noch eine weitere Eigenschaft der Quarks geben muss, die drei Einstellmöglichkeiten besitzt. Diese Eigenschaft wird Farbe genannt, die drei Einstellmöglichkeiten (Eigenzustände) rot, grün und blau.

Abbildung 8.9: Schalenmodell der Baryonenkonstituenten.

### 8.8.4 Freies Vielteilchensystem

Ein weiteres Beispiel für Vielteilcheneffekte ist die Abstoßung freier Fermionen gleichen Zustands (identisch bis auf die Ortswellenfunktion). Das ist wie die oberen Punkte auf das Pauli-Prinzip zurückzuführen. Interessant ist dabei, dass dies auch für freie Fermionen nachweisbar ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist in diesem Fall nur vom Relativabstand der Teilchen abhängig.

Ebenso vom Relativabstand hängt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit freier Bosonen ab. Deren Produktwellenfunktion führt aber zu einer Anziehung der Teilchen untereinander. Das Bose-Einstein-Kondensat ist ein experimenteller Beweis dafür.

Abbildung 8.10: Vergleich der Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Fermionen und von Bosonen, die sich jeweils im selben Zustand befinden.

Bezüglich des Relativabstands  $r$  zweier Teilchen ergibt sich die Produktwellenfunktion:

- Für zwei Bosonen:

$$|1\rangle|2\rangle = 4\pi \left(1 + \frac{\sin kr}{kr}\right)$$

- Für zwei Fermionen:

$$|1\rangle|2\rangle = 4\pi \left(1 - \frac{\sin kr}{kr}\right)$$

wie in Abbildung 8.10 angedeutet wird.

### 8.8.5 Entartetes Fermigas

Um mehr Fermionen in ein System zu packen, muss man mehr Energie hineinstecken, da das Pauli-Prinzip eine Abstoßung bewirkt. Im Modell würde man sagen, dass z.B. die Wände eines Kastenpotentials auseinandergezogen werden müssen, damit mehr Teilchen Platz haben.

Geht also  $N \rightarrow \infty$ , so muss auch das Volumen  $V \rightarrow \infty$  gehen, damit eine endliche Teilchendichte:

$$\begin{aligned} \varrho &= \frac{N}{V} \\ &= 2 \sum_k^F \phi_{kj}^2 \end{aligned}$$

gegeben bleibt, denn nach dem Pauli-Prinzip kann die Teilchendichte für Fermionen nicht unendlich werden. Setzen wir die Teilchenwellenfunktionen mit ebenen Wellen an, wobei  $k_F$  die Wellenzahl ist, die der Energie  $E_F$ , der *Fermikante* entspricht:

$$\begin{aligned} &= 2(2\pi)^{-3} \int_0^{k_F} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k \\ &= \frac{2\pi}{3} k_F^3 (2\pi)^{-3} \\ &= \frac{1}{3\pi^2} k_F^3 \end{aligned}$$

Ohne Wechselwirkung ergibt die Rechnung für die kinetische Energie pro Teilchen:

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} &= \frac{T}{V\rho} \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \end{aligned}$$

Mit mehr Teilchen steigt die Fermikante  $k_F$  und damit wird die kinetische Energie der Teilchen größer.

Trotzdem werden z.B. ausgebrannte Sterne durch die Elektronen stabilisiert, weil sich die Gravitation und der Druck des Elektronen-Gases die Waage halten (weiße Zwerge).

Steigt der Gravitationsdruck, so werden die Elektronen in die Protonen „gedrückt“. Man erhält einen Neutronenstern.



# Kapitel 9

## Einführung in die relativistische Quantenmechanik

### 9.1 Begriffe der Speziellen Relativitätstheorie

Im vorliegenden Abschnitt soll keine Einführung in die Relativitätstheorie gegeben werden, sondern nur, in knapper Form, die Begriffe und Notationen vorgestellt werden, die für eine Übersicht über die relativistische Quantenmechanik benötigt werden.

#### 9.1.1 Lichtausbreitung

Was die Newton'sche Mechanik „aus den Angeln gehoben hat“ ist die Tatsache, dass sich Licht in allen Bezugssystemen mit der gleichen Geschwindigkeit bewegt. Die Lichtgeschwindigkeit ist somit das „Maß aller Dinge“. Bei einer Transformation in ein anderes Koordinatensystem muss die *Zeit* mittransformiert werden; sie ist nicht universell.<sup>1</sup> Bei einer Transformation muss also zu den drei Ortskomponenten noch die Zeit mitberücksichtigt werden. Die mathematische Formulierung dieser Physik geschieht über 4-er-Vektoren, die die Zeit als „nullte“ Komponente besitzen; die anderen drei Komponenten sind die bekannten Ortskoordinaten. Durch diese Schreibweise wird ausgedrückt, dass Zeit und Raum gleichwertig sind.<sup>2</sup>

Startet ein Lichtblitz zur Zeit  $t_0 = 0$  am Ort  $x_0 = 0$  in  $x$ -Richtung, so befindet er sich zur Zeit  $t$  am Ort  $x = ct$ . Auf drei Dimensionen verallgemeinert bedeutet das für die Lichtausbreitung:

$$x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = 0$$

---

<sup>1</sup>Wie es die gesamte Physik vor 1900 annahm.

<sup>2</sup>Die Gleichwertigkeit von Raum und Zeit wird auch über die Dimension der Zeitkomponente des 4-er-Vektors ausgedrückt. Indem der Zeit  $t$  immer die Naturkonstante  $c$  als Faktor mitgegeben wird, hat die Zeit in dieser Darstellung auch die Dimension einer Länge.

Diese Beziehung gilt in jedem Bezugssystem, also auch in einem relativ dazu bewegten System:

$$\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2 - c^2 \tilde{t}^2 = 0$$

weil  $c$  eine Naturkonstante ist.<sup>3</sup>

Im vierdimensionalen Raum, der *Raum-Zeit*, wird durch diese Beziehung der *Lichtkegel* definiert. Das ist der Teilraum, der vom Koordinatenursprung aus mit Lichtgeschwindigkeit erreichbar ist (Zukunft), bzw. von dem aus der Ursprung erreicht werden konnte (Vergangenheit).

### 9.1.2 4-er-Vektoren

#### Ortsvektor

Es gibt zwei Schreibweisen für Vierervektoren, die sich nur durch das Vorzeichen des (klassischen Orts-)Dreiervektoranteils unterscheiden. In Rechnungen werden sie gemischt verwendet, so dass eine konsequente Einhaltung der nun vorzustellenden Index-Schreibkonvention wichtig ist.

#### Ko- und kontravariante Vektorschreibweise

*Kontravariante* Vektoren enthalten die drei klassischen Ortskoordinaten mit einem positivem Vorzeichen. Sie werden durch den *oberen* Index markiert:

$$x^\mu := \begin{pmatrix} x^0 = ct \\ x^1 = x \\ x^2 = y \\ x^3 = z \end{pmatrix}$$

*Kovariante* Vektoren führen den Dreiervektor mit negativem Vorzeichen. Sie sind *unten* indiziert:

$$x_\mu := \begin{pmatrix} x_0 = ct \\ x_1 = -x \\ x_2 = -y \\ x_3 = -z \end{pmatrix}$$

Die Schreibweisen sind völlig gleichwertig, bezeichnen also genau denselben Vierervektor, müssen jedoch streng unterschieden werden, da sie ihn in verschiedenen Darstellungen beschreiben. Dass beide Verwendung finden, wird sich noch als nützlich erweisen.

<sup>3</sup>Die Lichtgeschwindigkeit  $c$  wird immer für das Vakuum angegeben; bei Lichtausbreitung im Medium ist der Brechungsindex des Materials zu beachten, wodurch die Lichtgeschwindigkeit gegenüber dem Vakuum langsamer ist. Wir verzichten jedoch auf eine Indizierung  $c_0$  für die Vakuumlichtgeschwindigkeit, da im gesamten Skript keine andere vorkommt.

**Notation (Vektor und Komponenten).** In der Literatur wird durch die gewählte Schreibweise i.A. *nicht* zwischen dem 4-er-Vektor  $x^\mu$  und dessen Komponenten  $x^\mu$  unterschieden. Das mag etwas verwirren. Meist geht aber aus dem Kontext hervor, was gemeint ist. Eine konkrete Komponente wird zur Unterscheidung mit einem entsprechenden Stellenindex, z.B.  $x^0$  für die Zeitkomponente, versehen.

Bei allgemeinen Buchstabenindizes hat sich durchgesetzt griechische Buchstaben, meist  $\mu$  und  $\nu$ , zur Markierung der 4-er-Vektoren, bzw. derer Komponenten zu benutzen. Wird der klassische 3-er-Vektor angesprochen, so wird er mit lateinischen Buchstaben versehen, meist mit  $k$ .

Wenn wir die Einstein'sche Summenkonvention vorstellen, werden wir sehen, dass die Schreibweisen für Komponenten und Vektoren teilweise äquivalente Aussagen enthalten, und somit nicht unterschieden werden muss.

Nur wenn der 4-er-Vektor ganz allgemein angesprochen wird, verwenden wir die Notation mit Vektor-Doppelpfeil<sup>4</sup>,  $\vec{\vec{x}}$ . Sie soll einerseits hervorheben, dass ein Vektor gemeint ist, andererseits die Darstellungsunabhängigkeit verdeutlichen.

### Metrik der Raum-Zeit

Definieren wir:

$$\begin{aligned} s^2 &:= c^2 t^2 - \vec{x}^2 && \text{Metrik} \\ &\equiv c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 \end{aligned}$$

was in kontravarianter Schreibweise folgendermaßen aussieht:

$$\equiv (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2$$

So besitzen wir eine *Metrik*<sup>5</sup> für die Raum-Zeit. Der Skalar  $s$  ist die Länge eines Vektors in dieser Metrik, bzw. der Abstand eines Raum-Zeit-Punkts vom Koordinatenursprung ( $t = 0, \vec{x} = 0$ ).

Der Abstand zweier Raum-Zeit-Punkte ist entsprechend definiert.

**Definition (Abstandsquadrat).** *Mit der gegebenen Metrik ist das Quadrat des Abstands zweier Punkte definiert durch:*

$$\left(\Delta \vec{\vec{x}}\right)^2 := \left\| \begin{pmatrix} \Delta x^0 \\ \Delta x^1 \\ \Delta x^2 \\ \Delta x^3 \end{pmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{x}^0 \\ \tilde{x}^1 \\ \tilde{x}^2 \\ \tilde{x}^3 \end{pmatrix} \right\|^2$$

Also ist der Abstand  $\Delta x$  gegeben durch:

$$\Delta x = \sqrt{(x^0 - \tilde{x}^0)^2 - (x^1 - \tilde{x}^1)^2 - (x^2 - \tilde{x}^2)^2 - (x^3 - \tilde{x}^3)^2}$$

<sup>4</sup>Diese Schreibweise ist keine Konvention, sie wird aber von einigen Autoren verwendet.

<sup>5</sup>[Heuser-1, Abschnitte 10–12, vor allem Seite 85] führt den Begriff der Metrik und den allgemeinen (mathematischen) Abstands begriff ein.

Die nullte Komponente des Vierervektors wird die *zeitartige* Komponente genannt, die anderen drei die *raumartigen* Komponenten.

Wir fanden oben die Beziehung  $c^2t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = 0$  für das Licht. In der gewählten Metrik heißt das, dass das Licht zu seinem Ursprung immer den Abstand null hat. Ist  $s^2$  positiv, so ist die raumartige Komponente kleiner, als die zeitartige; ein solcher Abstand wird *zeitartig* genannt. Der gesamte zeitartige Raum wird auch als *kausaler Bereich* bezeichnet, weil zwischen den verschiedenen Punkten dieses Teilraumes Nachrichten ausgetauscht werden können. Mit dem *raumartigen* Bereich ist mit  $s^2 < 0$ , bzw.  $c^2t^2 < \vec{x}^2$  kein Informationsaustausch möglich, da Nachrichten nicht schneller als Lichtgeschwindigkeit übermittelt werden können.

Nun benötigen wir noch eine Koordinatentransformation, die den Abstand  $s$  der Raum-Zeit erhält. Da die Galilei-Transformation die Zeit nicht berücksichtigt, kann sie dies nicht erfüllen.

### Lorentz-Transformation

Bedingt durch die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit, und damit einem nicht mehr absoluten Zeitbegriff mit verschiedenen Zeiten in verschiedenen Koordinatensystemen, kann die Galilei-Transformation keine Transformation in der Raum-Zeit darstellen. Sie sieht die Zeit als absolut an.<sup>6</sup>

Die *Lorentz-Transformation* erfüllt die Metrik der Vierervektoren; unter ihr ist also die über die Raum-Zeit-Metrik definierte Länge erhalten. Die Zeit wird bei einer Koordinatentransformation mittransformiert.

Mit den (allgemein verwendeten) Abkürzungen:<sup>7</sup>

$$\beta := \frac{v}{c}$$

$$\gamma := \sqrt{1 - \beta^2}$$

führt die Lorentz-Transformation ein Koordinatensystem  $\mathcal{KS}$  in ein relativ dazu mit  $v$  in  $x$ -Richtung bewegtes System  $\tilde{\mathcal{KS}}$  mit folgenden Transformationsregeln über:

$$\tilde{x}^0 = c\tilde{t} = \frac{ct - \beta x}{\gamma} = \frac{x^0 - \beta x^1}{\gamma}$$

$$\tilde{x}^1 = \tilde{x} = \frac{x - \beta ct}{\gamma} = \frac{x^1 - \beta x^0}{\gamma}$$

$$\tilde{x}^2 = x^2$$

$$\tilde{x}^3 = x^3$$

<sup>6</sup>Was für sehr kleine Geschwindigkeiten  $v \ll c$  gerechtfertigt ist.

<sup>7</sup>Die Faktoren  $\beta$  und  $\gamma$  sind im Prinzip nur Abkürzungen. Sie drücken allerdings auch gut aus, ob man relativistisch rechnen muss oder nicht. Denn ist z.B.  $v \ll c$ , so ist  $\beta \simeq 0$  und  $\gamma \simeq 1$ . Für  $v \simeq c$  vertauschen sich die Werte.

### Geschwindigkeit

Die Geschwindigkeit ist die Ableitung des Ortsvektors nach der Zeit. Hierbei ist nun zu beachten, dass sowohl der Ortsvektor, als auch die Zeit von der Transformation betroffen sind. Eine Komponente der Geschwindigkeit hängt also von zwei Komponenten des Raum-Zeit-Ortsvektors ab; sie ist somit ein Element eines Tensors zweiter Stufe. Den raumartigen Geschwindigkeitsanteil bilden wir wie gewohnt:<sup>8</sup>

$$\vec{v} = v_k = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{d}{dx^0} \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}$$

Für den zeitartigen Anteil benötigen wir noch den Begriff der Eigenzeit.

### 9.1.3 Eigenzeit

Die Zeit ist in der Relativitätstheorie genaugenommen kein Skalar mehr, sondern eine Komponente des 4-er-Ortsvektors. Man kann jedoch einen Skalar aufstellen, der die Dimension einer Zeit besitzt. Dazu brauchen wir die Länge  $s$  des Vektors in der vierdimensionalen Raum-Zeit, wie wir sie oben definiert haben.

**Definition (Eigenzeit).** Die Eigenzeit  $\tau$  (eines Raum-Zeit-Punktes) ist definiert durch die Länge (den Abstand vom Ursprung) eines 4-er-Vektors, normiert auf die Dimension einer Zeit:

$$\tau := \frac{1}{c} \sqrt{(\Delta \vec{x})^2}$$

Im Ruhesystem eines Teilchens ( $\Delta \vec{x} = 0$ ) fällt die Eigenzeit  $\tau$  mit der „Koordinatenzeit“  $t$  zusammen.

**Eigenschaften der Eigenzeit:** Für eine Bewegung mit  $v \leq c$  gilt:<sup>9</sup>

- $\tau$  ist reell.
- $\tau$  hat die Dimension einer Zeit.
- $\tau$  ist ein Skalar, und somit unabhängig vom Koordinatensystem.
- $\Delta \tau$  ist die Zeit, die man misst, wenn sich das Bezugssystem (in dem gemessen wird) mitbewegt:  $\Delta x^1 = \Delta x^2 = \Delta x^3 = 0$ .

<sup>8</sup>Dass die Geschwindigkeit hier unten indiziert wird ist kein Schreibfehler; den Grund werden wir gleich noch kennenlernen.

<sup>9</sup>Etwas anderes macht physikalisch keinen Sinn.

Wird die Zeit im Laborsystem gemessen, so ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen der gemessenen Zeit  $t$  und der Eigenzeit  $\tau$  des Systems:

$$\begin{aligned} t &= \frac{\tau}{\sqrt{1-\beta^2}} \\ &= \frac{\tau}{\gamma} \end{aligned}$$

Zur Substitution (Wechsel zwischen Eigenzeit und Koordinatenzeit) benötigen wir noch einen Ausdruck für  $\frac{1}{d\tau}$ :

$$\frac{1}{d\tau} = \frac{1}{d\tau} \frac{dt}{dt}$$

$t$  von oben eingesetzt:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{d\tau} \frac{d}{dt} \left( \frac{\tau}{\gamma} \right) \\ &= \frac{1}{\gamma} \frac{1}{dt} \end{aligned}$$

Halten wir die zwei Beziehungen zwischen den Zeiten fest:

$$\boxed{t = \frac{\tau}{\gamma}} \quad \boxed{\frac{1}{d\tau} = \frac{1}{\gamma} \frac{1}{dt}}$$

### 9.1.4 Impuls als 4-er-Vektor

#### Impuls und „effektive“ Masse

Mit Hilfe der Eigenzeit können wir nun eine Definition für die Geschwindigkeit und den Impuls<sup>10</sup> angeben, die sich wie ein „normaler“ Vektor transformiert.

**Definition (Relativistischer 3-er-Impuls).**

$$\boxed{\vec{p} := m_0 \frac{d\vec{r}}{d\tau}}$$

Substituieren wir in der Definition  $d\tau$  durch  $dt$ , so erhalten wir den Impuls als Ortsableitung nach der Laborzeit:

$$\vec{p} = m_0 \frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{r}}{dt}$$

Man fasst nun  $\vec{p}$  so zusammen, dass die Masse und der relativistische Vorfaktor  $\gamma$  zusammengeschrieben werden als sogenannte *effektive Masse*:

$$m_{\text{eff}} := \frac{m_0}{\gamma}$$

<sup>10</sup>Die Ruhemasse  $m_0$  eines Teilchens indizieren wir konsequent mit 0.

Dabei ist  $m_0$  die Ruhemasse des beobachteten Teilchens. Die „effektive“ Masse  $m_{\text{eff}}$  hat keine physikalische Begründung, die Masse eines Teilchens ist eine Konstante. Welcher physikalischen Größe man den Faktor  $\frac{1}{\gamma}$  zuschlägt, ist Interpretationssache.

Zu beachten ist, dass die effektive Masse eine Größe ist, die von der Geschwindigkeit des Teilchens abhängt. Für Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit wird die effektive Masse eines Teilchens unbeschränkt. Diese Eigenschaft von  $m_{\text{eff}}$  wird gerne als relativistischer *Massenzuwachs* bezeichnet.

## Energie und Impuls

Für die Energie des ruhenden Teilchens gilt Einsteins berühmte Formel:

$$E = m_0 c^2$$

Wie sieht nun der 4-er-Vektor des Impulses aus? Bilden wir dazu die Ableitungen nach der Definition:

$$p^\mu = \begin{pmatrix} p^0 \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p^0 \\ p^1 \\ p^2 \\ p^3 \end{pmatrix} = \frac{m_0}{\gamma} \begin{pmatrix} \frac{\partial(ct)}{\partial t} \\ \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial y}{\partial t} \\ \frac{\partial z}{\partial t} \end{pmatrix}$$

Die Ortsableitungen sind bei gegebener Ortsfunktion  $\vec{r}(t)$  wie gewohnt zu berechnen; betrachten wir nur die nullte Komponente des Impulses:

$$\begin{aligned} p^0 &= \frac{m_0}{\gamma} \frac{\partial(ct)}{\partial t} \\ &= \frac{1}{\gamma} m_0 c \\ &= \frac{E}{c} \end{aligned}$$

wenn man die Einstein'sche Masse-Energie-Relation einsetzt. Damit haben wir eine Interpretation des Impuls-Vierervektors: Die nullte Komponente entspricht der Ruheenergie des Teilchens (durch die Naturkonstante  $c$  geteilt), während die restlichen drei Komponenten den Dreierimpuls bilden.<sup>11</sup>

---

<sup>11</sup>Zu beachten ist folgender Zusammenhang: Der Vierer-Ortsvektor besitzt als nullte Komponente die Zeit; die Fouriertransformation der Zeit liefert eine Energie, die die nullte Komponente des Impulses ist. Ebenso ist die Fouriertransformierte des Ortes der Impuls, so dass der komplette 4-er-Vektor sich unter Fouriertransformation „gutartig“ verhält.

Betrachten wir die Länge des Impulsvektors mit unserer Metrik:

$$\begin{aligned}
 |\vec{p}|^2 &= |p^0|^2 - \vec{p}^2 \\
 &= \left(\frac{1}{\gamma}m_0c\right)^2 - \left(\frac{1}{\gamma}m_0\vec{v}\right)^2 \\
 &= \frac{m_0^2}{\left(\sqrt{1-\beta^2}\right)^2} (c^2 - \vec{v}^2) \\
 &= \frac{m_0^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} (c^2 - \vec{v}^2) \\
 &= m_0^2c^2
 \end{aligned}$$

Dies ist eine Konstante, so dass gilt: *Der Impulsbetrag ist invariant unter einer Lorentz-Transformation.*

Im Impulsbetrag, bzw. in  $p^0$ , steckt die Energie, lösen wir die Gleichung für  $|p^\mu|^2$  nach ihr auf:

$$|p^0|^2 - \vec{p}^2 = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m_0^2c^2$$

multiplizieren mit  $c^2$ :

$$\begin{aligned}
 E^2 - \vec{p}^2c^2 &= m_0^2c^4 \\
 E^2 &= m_0^2c^4 + \vec{p}^2c^2
 \end{aligned}$$

so erhalten wir die *relativistische Energie-Impuls-Beziehung*:

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

Die Energie ist also abhängig von der Teilchengeschwindigkeit, bzw. vom gewählten Koordinatensystem.

## 9.1.5 Vektor-Nomenklatur

### Mischschreibweise

Mit dem kontravarianten Vektor  $x^\mu$  haben wir schon gearbeitet:

$$x^\mu = \begin{pmatrix} x^0 = ct \\ x^1 = x \\ x^2 = y \\ x^3 = z \end{pmatrix}$$

Der kovariante Vektor wurde auch schon vorgestellt:

$$x_\mu = \begin{pmatrix} x_0 = ct \\ x_1 = -x \\ x_2 = -y \\ x_3 = -z \end{pmatrix}$$



Die Länge eines 4-er-Vektors darf nicht von der Darstellungsart abhängen; unabhängig davon, ob man mit kovariantem oder kontravariantem Vektor arbeitet, muss gelten:

$$|\vec{x}|^2 = (x^0)^2 - \vec{x}^2$$

wobei durch die Benutzung der 4-er-Vektorschreibweise  $\vec{x}$  die Darstellungsinvarianz ausgedrückt werden soll. Die Länge eines 4-er-Vektors kann aber eindeutig (und mathematisch korrekt) durch die ko- und kontravariante Schreibweise definiert werden; so ist die Länge folgendermaßen festgelegt:

$$|\vec{x}|^2 = \sum_{\mu=0}^3 x^\mu x_\mu$$

**Notation (Einstein'sche Summenkonvention).** Um häufiger auftretende „Muster“ in Summationen in der relativistischen Physik abzukürzen, hat sich die Einstein'sche Summenkonvention durchgesetzt. Sie besagt, dass wenn über einen (4-er-)Index summiert wird, der in zwei Größen innerhalb der Summation unmittelbar hintereinander oben und unten vorkommt, so kann das Summenzeichen weggelassen werden. Obige Längendefinition kann man mit dieser Konvention abkürzen:

$$|\vec{x}|^2 = \sum_{\mu=0}^3 x^\mu x_\mu \stackrel{!}{=} x^\mu x_\mu$$

Die Summenkonvention ist einzig eine Abkürzung der Schreibweise, die zwar Formeln verkürzt, aber durchaus auch zu Verwirrung führen kann. Wir versuchen im Folgenden noch öfter darauf hinzuweisen, wenn die Konvention zuge schlagen hat.

### Metrischer Tensor

Um kovariante und kontravariante Vektoren ineinander überzuführen, gibt es eine Matrix, deren einzige Aufgabe es ist, die Vorzeichen richtig zu setzen. Da diese Matrix die Metrik erhält, wird sie *metrischer Tensor*  $g_{\mu\nu}$  genannt:

**Definition (Metrischer Tensor).**

$$g_{\mu\nu} := \delta_{\mu\nu} \cdot \begin{cases} 1, & \text{für die zeitartige Komponente } \mu = 0 \\ -1, & \text{für die raumartigen Komponenten } \mu = \{1, 2, 3\} \end{cases}$$

In Matrixschreibweise:

$$g_{\mu\nu} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Metrischer Tensor

Mit dem metrischen Tensor  $g_{\mu\nu}$  schreibt sich die Umrechnung zwischen kontra- und kovariantem Vektor folgendermaßen:

$$x_\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \sum_{\nu=0}^3 g_{\mu\nu} x^\nu$$

bzw. umgekehrt:

$$x^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \sum_{\nu=0}^3 g^{\mu\nu} x_\nu$$

wobei gilt:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$$

Unter Benutzung der Einstein'schen Summenkonvention schreiben sich die Beziehungen kürzer:

$$\boxed{x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu} \quad \text{und} \quad \boxed{x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu}$$

### Transformationsverhalten kovarianter Vektoren

Aus dem Transformationsverhalten der kontravarianten Vektoren können wir direkt (mit Hilfe von  $g_{\mu\nu}$ ) auf das Verhalten kovarianter Vektoren schließen. Dabei sei wieder  $\widetilde{\mathcal{KS}}$  das relativ zu  $\mathcal{KS}$  bewegte Koordinatensystem:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_0 = c\tilde{t} &= \frac{x^0 - \beta x^1}{\gamma} = \frac{x_0 + \beta x_1}{\gamma} \\ \tilde{x}_1 = -\tilde{x}^1 &= -\frac{x^1 - \beta x^0}{\gamma} = \frac{x_1 + \beta x_0}{\gamma} \end{aligned}$$

### Rücktransformation

Aus der Sicht des bewegten Koordinatensystems  $\widetilde{\mathcal{KS}}$  sieht die eigene Bewegung so aus, als ob sich das („ruhende“) System  $\mathcal{KS}$  mit entgegengesetzter Geschwindigkeit  $-\vec{v}$  bewegen würde. Für die Ortstransformation bedeutet dies, dass der Faktor  $\beta = \frac{v}{c}$  mit negativem Vorzeichen behaftet ist. An  $\gamma$  ändert sich nichts, da die Geschwindigkeit hier quadratisch vorkommt:

$$\begin{aligned} x^0 &= \frac{\tilde{x}^0 + \beta \tilde{x}^1}{\gamma} \\ x^1 &= \frac{\tilde{x}^1 + \beta \tilde{x}^0}{\gamma} \end{aligned}$$

**Differentiation**

**Notation.** Wir kürzen im Folgenden, aus gleich noch ersichtlichen Gründen, die Differentiationsschreibweise  $\frac{\partial}{\partial(\mathcal{O}x^\mu)}$  durch  $\partial$  ab. Der Komponentenindex wird dabei mitgeführt.

**Behauptung.** Die Differentiation nach einer kontravarianten Variable, bzw. Vektorkomponente ist kovariant:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \partial_\mu$$

*Beweis.*

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}^0} = \frac{\partial}{\partial x^0} \frac{\partial x^0}{\partial \tilde{x}^0} + \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^0}$$

Setzt man die Umkehrtransformation, also  $x^0$  und  $x^1$ , ein:

$$= \frac{\partial}{\partial x^0} \frac{1}{\gamma} + \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\beta}{\gamma}$$

Die Form dieser Terme ist aber die gleiche wie die kovariante Transformation:

$$\tilde{\xi}_0 = \frac{\xi_0 + \beta \xi_1}{\gamma}$$

Die kontravariante Differentiation transformiert sich also wie ein kovarianter Vektor.  $\square$

Damit hat die abkürzende Schreibweise ihre Berechtigung. Wir kürzen also die Differentiation nach einer kontravarianten Variable durch das Zeichen  $\partial$  mit einem kovarianten Index (unten) ab:

$$\begin{aligned} \tilde{\partial}_0 &= \frac{\partial_0 + \beta \partial_1}{\gamma} \equiv \frac{\partial}{\partial \tilde{x}^0} \\ \tilde{\partial}_1 &= \frac{\partial_1 + \beta \partial_0}{\gamma} \equiv \frac{\partial}{\partial \tilde{x}^1} \end{aligned}$$

Entsprechend transformieren sich kovariante Differentiationen wie kontravariante Vektoren:

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

Die zweimalige Differentiation nimmt mit dieser Notation folgende Form an:

$$\left(\overset{\rceil}{\partial}\right)^2 = \sum_{\mu=0}^3 \partial_\mu \partial^\mu$$

Einstein'sche Summenkonvention:

$$\begin{aligned} &= \partial_\mu \partial^\mu \\ &= \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial(ct)} \\ \vec{\nabla} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial(ct)} \\ -\vec{\nabla} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dieses Skalarprodukt zweier Vierervektoren ist in der gegebenen Metrik eine Art „Länge“ des Differentiationsoperators:

$$= \frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} - \Delta$$

Eine Länge bleibt jedoch grundsätzlich unter Lorentz-Transformationen erhalten!

Dieser zweifache Differentiationsoperator wird häufig gebraucht, so dass ihm eine Abkürzung zugewiesen wurde:

**Definition (d'Alembert-Operator).** Die zweifache Differentiation eines 4-er-Vektors wird durch den d-Alembert-Operator  $\square$  abgekürzt:

$$\square := \frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} - \Delta \quad \text{d'Alembert-Operator}$$

$\square$  transformiert sich wie ein Skalar (Lorentz-Skalar).

Aufgrund der Beziehung zum einfachen Differentiationsoperator *Nabla*, hat sich für den „quadratischen“ 4-er-Operator der Name *Quabla* eingebürgert.<sup>12</sup>

### 9.1.6 Impulsoperator

Benutzt man wieder die Ersetzungsregeln, die vom klassischen Impulsvektor  $\vec{p}$  zum quantenmechanischen Impulsoperator  $\hat{p}$  führen, so erhält man den relativistischen quantenmechanischen Impulsoperator  $\hat{p}^\mu$  in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \hat{p}^\mu &= i\hbar \partial^\mu \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \\ &= i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial(ct)} \\ \frac{\partial}{\partial(-x)} \\ \frac{\partial}{\partial(-y)} \\ \frac{\partial}{\partial(-z)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

<sup>12</sup>Und wie alle „direkten“ Differentiationsoperatoren, bzw. -symbole, wird er nicht explizit mit einem Operatordach versehen.

Und damit:

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

## 9.2 Klein-Gordon-Gleichung

### 9.2.1 Relativistische Schrödinger-Gleichung

#### Problematik

Die Schrödinger-Gleichung ist nicht geeignet um relativistische Phänomene der Quantenmechanik zu beschreiben. Besprechen wir die Problematik, indem wir in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

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

den Hamilton-Operator eines freien Teilchens einsetzen:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$$

und wir somit die freie, zeitabhängige Schrödinger-Gleichung betrachten können:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi$$

Die folgenden Probleme ergeben sich, wenn relativistische Geschwindigkeiten vorliegen:

1. Die linke Seite der Schrödinger-Gleichung enthält quadratische Ableitungen im Ort, die rechte Seite eine lineare Ableitung in der Zeit. Zeit und Ort sind in der Relativitätstheorie aber Komponenten eines einzigen Vektors. Eine derartige Mischung der Ableitungsordnungen führt zu Konflikten; die Folge ist, dass die Schrödinger-Gleichung nicht invariant unter einer Lorentz-Transformation ist. Damit ist sie zur Beschreibung relativistischer Bewegungen ungeeignet.
2. Die Energie eines relativistisch bewegten Teilchens ist:

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

Der Hamilton-Operator als Operator der Energie lautet damit:

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

Problematik hierbei:

- Wie ist die Wurzel eines Operators definiert?
- Gibt es zwei Lösungen, und wenn ja, wie interpretiert man diese? Vor allem die negative Lösung ist physikalisch schwierig einzuordnen.

**Zielsetzung**

Das erste Ziel muss nun sein, eine Bewegungsgleichung zu finden, die die relativistischen Effekte beinhaltet, also die Schrödinger-Gleichung für relativistisch bewegte Systeme ersetzt.

Folgende Kriterien müssen bei der Konstruktion beachtet werden:

1. Die relativistische Differentialgleichung soll invariant unter einer Lorentz-Transformation sein. Dazu müssen die Ableitungen nach Ort und Zeit von derselben Ordnung sein.
2. Die relativistische Energie-Impuls-Beziehung eines freien Teilchens muss gelten:

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

3. Im Grenzfall kleiner Geschwindigkeiten ( $\frac{v}{c} \ll 1$ ) muss die relativistische Quantenmechanik in die „klassische“ Quantenmechanik<sup>13</sup> übergehen.
4. Die neue Bewegungsgleichung muss eine als solche deutbare Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho = \psi^* \psi$$

sowie eine Kontinuitätsgleichung hervorbringen:

$$\dot{\rho} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

**9.2.2 Relativistische Wellenfunktion I****Ansatz**

Starten wir mit dem 2. Konstruktionskriterium, so haben wir, wenn wir den Impuls  $p$  durch seinen Operator ersetzen, eine Ableitung unter der Wurzel. Zur Umgehung dieses Problems betrachten wir das Quadrat der Energie:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

Von dieser Formel aus starten wir.

**Klein-Gordon-Gleichung**

Setzen wir in die quadrierte Energiebeziehung die quantenmechanischen „Ersetzungsregeln“

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \hat{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

<sup>13</sup>Wenn wir im Folgenden von der *klassischen* Quantenmechanik reden, meinen wir immer die nichtrelativistische Quantenmechanik. Um keine Verwechslungen mit der Klassischen Mechanik aufkommen zu lassen setzen wir den Begriff in Anführungszeichen und schreiben ihn klein, da er kein feststehender Begriff ist.

ein, so erhalten wir:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 = c^2\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 + m_0^2c^4$$

Alle Terme nach links:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2\hbar^2\Delta - m_0^2c^4 = 0$$

Division durch  $c^2$ :

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} + \hbar^2\Delta - m_0^2c^2 = 0$$

Vorzeichenwechsel:

$$\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} - \hbar^2\Delta + m_0^2c^2 = 0$$

Hier erkennen wir aber den d'Alembert-Operator  $\square$  wieder:

$$\hbar^2\square + m_0^2c^2 = 0$$

Diese Operatorgleichung wirkt auf die Wellenfunktion eines Systems; somit besitzen wir eine Differentialgleichung für ein relativistisches System:

$$\boxed{\left(\square + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\vec{r}, t) = 0} \quad \text{Klein-Gordon-Gleichung}$$

Betrachten wir die Form mit ausgeschriebenem d'Alembert-Operator, so steht dort die zweifache Zeitableitung minus die zweifache Ortsableitung. Das läßt sich in der relativistischen Notation, mittels der Summenkonvention folgendermaßen schreiben:

$$\boxed{\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} = 0} \quad \text{Kurzform der Klein-Gordon-Gleichung}$$

Aufgrund des Ansatzes erfüllt diese Differentialgleichung sicher die beiden ersten Kriterien. Durch die Quadrierung des Energieterms erhalten wir aber zwangsläufig zwei Lösungen, die interpretiert werden müssen (vor allem die Lösung negativer Energie). Ob die Klein-Gordon-Gleichung also eine physikalische Bewegungsgleichung ist, bleibt zu prüfen. Dies werden wir nun weiterverfolgen.

### 9.2.3 Überprüfung der Klein-Gordon-Gleichung

Zur Klärung der Kriterien 3 und 4 müssen wir die Wellenfunktionen  $\psi$  betrachten, die die Klein-Gordon-Gleichung lösen:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = (-c^2\hbar^2\Delta + m_0^2c^4)\psi$$



### Zeitbetrachtung

Die 3. Forderung birgt zunächst ein neues Problem.

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung liefert uns bei gegebener Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt  $t_0$  die zeitliche Wellenentwicklung:

$$\psi(t_0) \xrightarrow{\text{Schrödinger-Gleichung}} \psi(t)$$

Die neue Differentialgleichung ist aber von zweiter Ordnung in der Zeit; außer einem Startwert  $\psi(t_0)$  benötigen wir zur Lösung auch den Wert der ersten Ableitung am Startzeitpunkt:

$$\psi(t_0) \wedge \left. \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \right|_{t=t_0} \xrightarrow{\text{Klein-Gordon-Gleichung}} \psi(t)$$

Aber das ist noch nicht alles. Betrachten wir den einfachen Fall einer ortsunabhängigen Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$ . Für sie ist der Erwartungswert des Impulses null,  $\langle p \rangle = 0$ . Die Differentialgleichung reduziert sich dadurch zu:

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(t) = \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \psi(t)$$

Für diese Bewegungsgleichung gibt es jedoch zwei Lösungen:

$$\psi(t) = e^{\pm \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$$

Durch die Quadrierung des Energieterms erhalten wir (auch wenn wir nur die Zeitabhängigkeit betrachten) zwei linear unabhängige Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung. Es stellt sich die Frage, wie das physikalisch zu interpretieren ist.<sup>14</sup>

### Wahrscheinlichkeits- und Stromdichte

Das 4. Konstruktionskriterium verlangt eine Wahrscheinlichkeitsdichte und eine Kontinuitätsgleichung für eine relativistische Bewegungsgleichung. Versuchen wir dies aus der Klein-Gordon-Gleichung zu extrahieren. Die Klein-Gordon-Gleichung lautet:

$$\square \psi + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (\text{KG})$$

Die konjugiert komplexe Gleichung lautet, wobei  $\square = \square^*$  ist:

$$\square \psi^* + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi^* = 0 \quad (\text{KG}^*)$$

Subtrahieren wir zwei Gleichungen die null ergeben voneinander, so ergibt das Ergebnis wieder null; wir bilden folgende Differenz:

$$0 = \psi^* \cdot (\text{KG}) - \psi \cdot (\text{KG}^*)$$

<sup>14</sup>Man kann eine physikalisch scheinbar unsinnige Lösung nicht einfach unter den Tisch kehren; man kann sie höchstens „weg“diskutieren. Dazu braucht man aber erst einen Interpretationsansatz.

Eingesetzt:

$$= \psi^* \square \psi + \psi^* \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi - \psi \square \psi^* - \psi \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi^*$$

Wir erhalten mit  $\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu$ :

$$= \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^*$$

Daraus ergibt sich:

$$0 = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)$$

*Beweis.* Die letzte Gleichung ist nicht durch einfaches Ausklammern des Operators  $\partial_\mu$  zustande gekommen, was nicht erlaubt wäre, da sich dadurch der Wirkungsbereich der Differentiation ändert. Sie ist mathematisch fundiert, wie jetzt gezeigt wird.

Wendet man die Produktregel an, so erhält man:

$$\partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = (\partial_\mu \psi^*) \partial^\mu \psi + \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - (\partial_\mu \psi) \partial^\mu \psi^* - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^*$$

Erster und dritter Term heben sich weg:

$$= \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^*$$

□

Die erhaltene Form kann als vierdimensionales „div  $\vec{j}$ “ interpretiert werden.<sup>15</sup>

$$\partial_\mu j^\mu = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = 0$$

4-er-Vektor in nullte Komponente und 3-er-Vektor aufspalten:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\partial}{\partial t} \varrho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Dabei interpretiert man die nullte Komponente  $j^0$  des 4-er-Stromdichtevektors  $j^\mu$  als die „klassische“ Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$ :

$$\boxed{\varrho := \frac{j^0}{c}}$$

Relativistische Wahrscheinlichkeitsdichte

Damit sich die Dimension einer echten Stromdichte ergibt, benötigen wir noch einen Vorfaktor; es ergibt sich:

$$\boxed{j^\mu = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)}$$

Relativistische Stromdichte

<sup>15</sup>In der Literatur findet man entsprechend  $\partial_\mu$  auch als *Viererddivergenz* bezeichnet.

Mit der nullten Komponente:

$$j^0 = \frac{i\hbar}{2m_0} \left( \psi^* \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) = c\rho$$

Die räumlichen Komponenten der Wahrscheinlichkeitsstromdichte lauten in kontravarianter Schreibweise:<sup>16</sup>

$$j^k = \frac{i\hbar}{2m_0} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x_k} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x_k} \psi^* \right)$$

In kovarianter Schreibweise ändert sich das Vorzeichen der Ortskomponenten:

$$= -\frac{i\hbar}{2m_0} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x^k} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x^k} \psi^* \right)$$

Dieser Ausdruck hat die gleiche Form, wie der nichtrelativistische 3-er-Vektor der Wahrscheinlichkeitsstromdichte:

$$\hat{j} = \frac{\hbar}{2m_0 i} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$$

Das einzige Problem bei aller Ähnlichkeit ist der Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichte, bzw.  $j^0$ :

- $j^0$  enthält eine Zeitableitung.
- $j^0$  ist nicht zwingend positiv definit, denn durch das Minuszeichen zwischen den beiden Ableitungstermen sind auch negative Werte möglich. Also liefert auch das 4. Kriterium ein Problem; wie soll man eine negative Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren? Da es anschaulich keine negativen Wahrscheinlichkeiten gibt, sollte man eher fragen, wie wir einen negativen Wert uminterpretieren können.

### 9.2.4 Ergebnis durch Uminterpretation

Von den 4 Forderungen, die wir an die relativistische Bewegungsgleichung stellen, erfüllt die Klein-Gordon-Gleichung nur eine ohne dabei neue Probleme zu schaffen.

#### Problem des Grenzfalls

Bisher hofften wir, dass eine Lösung  $\psi_{\text{KG}}$  der Klein-Gordon-Gleichung im nicht-relativistischen Grenzfall in die Lösung der Schrödinger-Gleichung übergeht. Es gibt aber zwei linear unabhängige Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung. Durch die lineare Unabhängigkeit können sie nicht die gleiche nichtrelativistische Lösung ergeben. Die Schrödinger-Gleichung besitzt aber nur eine Lösung.

<sup>16</sup>Es sei nochmals daran erinnert, dass  $x_\nu$  kovariant ist,  $\frac{\partial}{\partial x_\nu} \equiv \partial^\nu$  aber kontravariant.

### Uminterpretation

Nun macht man sich die mathematische Tatsache zunutze, dass jede Linearkombination von Lösungen einer Differentialgleichung wieder eine Lösung ist. Wir interpretieren die zwei Lösungen  $\psi = e^{\pm i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$  der Klein-Gordon-Gleichung also dahingehend um, dass sie nicht die physikalischen Lösungen sind, sondern bestimmte Linearkombinationen von ihnen. Geht eine der beiden Linearkombinationen (wir brauchen nach wie vor zwei Lösungen für die Klein-Gordon-Gleichung) im Grenzfall gegen null, so ist die andere im Grenzfall die „klassische“ Lösung.

### Ansatz zur Erfüllung des Grenzfalls

Folgende Wellenfunktionen lösen wieder die Klein-Gordon-Gleichung, wenn  $\psi$  sie löst:

$$\begin{aligned}\phi &= \psi + \frac{i\hbar}{m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \psi \\ \chi &= \psi - \frac{i\hbar}{m_0 c^2} \frac{\partial}{\partial t} \psi\end{aligned}$$

Durch diesen Ansatz ergeben sich folgende Beziehungen für  $\psi$ :

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{2}(\phi + \chi) \\ \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \frac{m_0 c^2}{2i\hbar}(\phi - \chi)\end{aligned}$$

Wie oben betrachten wir den einfacheren Fall der ortsunabhängigen Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$ , für die  $\langle p \rangle = 0$  gilt. Für die zwei ursprünglichen Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung ist dann:

1. Mit  $\psi = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$  folgt für den Ansatz:

$$\begin{aligned}\phi_- &= e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} + \frac{i\hbar}{m_0 c^2} \left( -i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \right) e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} = 2e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \\ \chi_- &= 0\end{aligned}$$

2. Mit der davon linear unabhängigen Lösung  $\psi = e^{+i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$  folgt:

$$\begin{aligned}\phi_+ &= 0 \\ \chi_+ &= 2e^{+i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}\end{aligned}$$

Wie wir gleich sehen werden, erhalten wir mit der gewählten Betrachtungsweise, im Grenzfall kleiner Geschwindigkeiten, tatsächlich nur noch eine sinnvolle Lösung; diese interpretieren wir als die Lösung der Schrödinger-Gleichung:

$$\phi_- \Big|_{v \ll c} \longrightarrow \psi_{\text{S.G.}}$$

Die ersten drei Kriterien werden vom Ansatz erfüllt. Die Lösungen sind Lorentz-invariant, erfüllen die Energie-Impuls-Beziehung und reduzieren sich im nicht-relativistischen Grenzfall auf eine „Schrödinger-kompatible“ Lösung.

**Stromdichte**

Betrachten wir noch die Stromdichte; konkret interessiert uns, für welchen Ansatz die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$  positiv definit ist:

$$\varrho = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right)$$

Den Ansatz eingesetzt:

$$\begin{aligned} &= \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left( \frac{1}{2}(\phi^* + \chi^*) \frac{m_0c^2}{2i\hbar} (\phi - \chi) - \frac{1}{2}(\phi + \chi) \frac{m_0c^2}{-2i\hbar} (\phi^* - \chi^*) \right) \\ &= \frac{1}{4} (\phi^* \phi - \chi^* \chi) \end{aligned}$$

Für  $\psi = e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t}$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte positiv definit da hier  $\chi_-^* \chi_-$  verschwindet, weil  $\chi_- = 0$  und  $\phi_-^* \phi_-$  positiv definit ist. Die Lösung  $\psi = e^{+i\frac{m_0c^2}{\hbar}t}$  liefert dagegen eine negative Wahrscheinlichkeitsdichte  $(-1)$ , die wir noch nicht interpretieren können.

**Ausblick**

Wir haben mit obigem Ansatz ein Lösungspaar gefunden, das Sinn machen kann. Probleme bereitet die Interpretation von  $\chi_+$ . Wir können mit unseren mathematischen Mitteln nicht entscheiden, ob  $\chi_+$  nur eine mathematische Lösung der quadratischen Gleichung ist, von der wir starteten, oder auch physikalische Bedeutung hat. Deswegen möchten wir andere Ansätze verfolgen. Die Dirac-Gleichung ist ein solcher.

## 9.3 Dirac-Gleichung

### 9.3.1 Motivation

Das Interpretationsproblem des letzten Abschnitts ergab sich daraus, dass wir von einer quadratischen Gleichung ausgingen. Diese liefert mathematisch zwei Lösungen; wobei für die negative nicht sicher ist, ob sie physikalisch Sinn macht. Dirac versuchte einen Ansatz zu finden, der von einer linearen Gleichung ausgeht. Wir werden sehen, dass auch dieser Ansatz zwei Lösungen liefert, so dass die zweite Lösung der Klein-Gordon-Gleichung ihre physikalische Berechtigung bekommt. Die negative Lösung der Dirac-Gleichung wurde (nach langen Diskussionen) als die Wellenfunktion von Antiteilchen interpretiert.

### 9.3.2 Relativistische Wellengleichung II

#### Linearer Ansatz

Der „Fehler“ des letzten Ansatzes soll nicht wiederholt werden, wir bleiben also beim Wurzelausdruck der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung:

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

Benutzen wir die Ersetzungsregeln für  $E$  und  $p$ , so haben wir einen Operator unter der Wurzel. Dies können wir nicht direkt handhaben, so dass wir die ganze Wurzel zu einem „Wurzeloperator“  $\hat{W}$  zusammenfassen, für den wir dann einen sinnvollen Entwicklungsansatz suchen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = c\hat{W}$$

Als Ansatz für diesen Operator  $\hat{W}$  wählen wir eine lineare Entwicklung:

$$= c \left( \underbrace{\alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3}_{\sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k} + \beta m_0 c \right) \quad \text{Ansatz}$$

Durch diesen Entwicklungsansatz passen unsere Ableitungsordnungen; sowohl Orts-, als auch Zeitableitung kommen in erster Ordnung vor.

#### Entwicklungskoeffizienten des Wurzeloperators

Nun müssen wir etwas über die Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_k$  und  $\beta$  in Erfahrung bringen. Dazu vergleichen wir den Operatoransatz mit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung:

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

die wir zunächst quadrieren, um dann alle Terme nach rechts zu bringen:

$$0 = E^2 - c^2 \sum_{k=1}^3 p_k^2 - m_0^2 c^4 \quad (\star)$$

Aus der Definition des Wurzeloperators folgt:

$$0 = E^2 - c^2 \hat{W}^2$$

Setzen wir für  $\hat{W}$  den Ansatz ein und multiplizieren die Terme aus. Da wir über die Entwicklungskoeffizienten noch nichts wissen, achten wir in weiser Voraussicht auf die strenge Einhaltung der Faktorreihenfolge:

$$= E^2 - c^2 \left( \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k \right) \left( \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k \right) - m_0^2 c^4 \beta^2 - m_0 c^2 \left( \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k \beta + \beta \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k \right)$$

Hier kann man ahnen, dass obiges Gleichheitszeichen nicht erfüllt werden kann, wenn  $\beta$  und die  $\alpha_k$  normale Zahlen sind. Beim Ausmultiplizieren des Summenquadrats achten wir deshalb weiterhin streng auf die Einhaltung der Reihenfolge:

$$\begin{aligned} &= E^2 - c^2 \sum_{k=1}^3 (\alpha_k \hat{p}_k)^2 - c^2 \sum_{k < l} (\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k) \hat{p}_k \hat{p}_l \\ &\quad - m_0^2 c^4 \beta^2 - m_0 c^2 \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k (\alpha_k \beta + \beta \alpha_k) \end{aligned}$$

Ein Koeffizientenvergleich dieses Ergebnisses mit (★) ergibt:

$$\alpha_k^2 = 1 = \beta^2 \quad \forall k \quad (1)$$

$$\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 0 \quad \text{für } k \neq l \quad (2)$$

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0 \quad \forall k \quad (3)$$

### Dirac-Matrizen

Damit diese Bedingungen gleichzeitig erfüllbar sind, müssen  $\alpha_k$  und  $\beta$  lineare Operatoren in Form quadratischer Matrizen gleicher Dimension  $N$  sein.

Versuchen wir mehr über diese Matrizen zu erfahren:

1. Da  $\hat{H}$  und  $\hat{p}_k$  hermitesch sind, müssen auch  $\alpha_k$  und  $\beta$  hermitesch sein.
2. Die Dimension der Matrizen muss geradzahlig sein,  $N = 2, 4, 6, \dots$

*Beweis.* Aus Beziehung (1) folgt, dass die Eigenwerte von  $\alpha_k$  und  $\beta$   $\pm 1$  sind. Sicher gilt:

$$\alpha_k = \mathbf{1}_N \alpha_k$$

(1) eingesetzt:

$$\begin{aligned} &= \beta^2 \alpha_k \\ &= \beta (\beta \alpha_k) \end{aligned}$$

Mit Beziehung (3) folgt:

$$= \beta(-\alpha_k\beta)$$

Machen wir uns nun die Tatsache zunutze, dass die Spur einer Matrix, die sich aus einer Matrixmultiplikation ergibt, sich durch Vertauschung der Faktoren nicht ändert,  $\text{Spur}(AB) = \text{Spur}(BA)$ . Dann gilt wieder mit  $\beta^2 = \mathbb{1}_N$ :

$$\text{Spur}(\alpha_k) = \text{Spur}(\beta\alpha_k\beta)$$

Setzen wir das Zwischenergebnis von eben ein:

$$\begin{aligned} &= \text{Spur}(\beta(-\alpha_k)\beta) \\ &= -\text{Spur}(\beta^2\alpha_k) \\ &= -\text{Spur}(\alpha_k) \end{aligned}$$

Diese Bedingung kann nur erfüllt sein, wenn  $\text{Spur}(\alpha_k) = 0$  gilt. Die Spur der Matrix  $\alpha_k$  ist aber die Summe ihrer Eigenwerte:

$$= \sum_{l=1}^N \text{EW}_l(\alpha_k) = 0$$

Das bedeutet, dass die Zahl der Eigenwerte  $+1$  dieselbe sein muss, wie die Anzahl der  $-1$ -Eigenwerte, also muss  $N$  gerade sein.  $\square$

Nun wissen wir genug über die Koeffizienten des Wurzeloperators, so dass wir versuchen können, durch ein konkretes Beispiel etwas über diese Matrizen zu erfahren:

**Beispiel ( $N = 2$ ).** Gesucht sind 4 Matrizen der Dimension  $2 \times 2$ , die hermitesch sind und die Bedingungen (1) – (3) erfüllen. Leider gibt es deren keine vier! Lediglich die drei Pauli-Matrizen  $\sigma_k$  erfüllen alle Bedingungen; womit aber eine Matrix fehlt. Mit der Dimension 2 kann die Dirac-Gleichung also nicht gelöst werden.

Nächster Versuch:

**Beispiel ( $N = 4$ ).** Da die Pauli'schen Spinmatrizen die Bedingungen erfüllen, können wir sie benutzen um Matrizen höherer Dimension zu konstruieren. Folgender  $(4 \times 4)$ -Ansatz führt zum Ziel:

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

Dirac-Matrizen

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}$$

Damit haben wir eine Realisierung gefunden, die alle Bedingungen erfüllt.

Die vier  $(4 \times 4)$ -Matrizen  $\alpha_k$  und  $\beta$ , deren Eigenschaften wir als Forderung an unseren Ansatz schon ab Seite 471 kennenlernten, werden *Dirac-Matrizen* genannt.



**Dirac-Gleichung**

Setzen wir die Matrizen in unseren Ansatz von Seite 470 ein, und beachten dabei, dass mit den Matrizen 4 Gleichungen für 4 Wellenfunktionen  $\psi_i = \psi_i(\vec{r}, t)$  vorliegen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_k} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Dirac-Gleichung

Die *Dirac-Gleichung* besteht aus 4 gekoppelten, linearen Differentialgleichungen. Die 4 Lösungen fasst man zu einem Lösungsvektor zusammen, und nennt ihn *Dirac-Spinor*:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Dirac-Spinor

**Fragen,** die sich stellen:

- Erfüllt die Dirac-Gleichung die Anforderungen an eine relativistische Erweiterung der Schrödinger-Gleichung?
- Welche Bedeutung hat der Dirac-Spinor, also die vier Lösungen der Gleichung?

Betrachten wir dazu ein einfaches

**Beispiel.** Wir reduzieren das Problem wieder auf ein Teilchen mit Impuls  $\vec{p} = 0$ . Die Dirac-Gleichung reduziert sich dadurch auf eine Gleichung im Ruhesystem des Teilchens, dessen Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  wir finden möchten. Dadurch, dass die Terme der Ortsableitungen verschwinden, liefert die Dirac-Gleichung für dieses Problem 4 linear unabhängige Gleichungen; das vereinfacht die Berechnung erheblich:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 \psi_1 \\ m_0 c^2 \psi_2 \\ -m_0 c^2 \psi_3 \\ -m_0 c^2 \psi_4 \end{pmatrix} \quad \text{Dirac-Gleichung im Ruhesystem}$$

Die Exponentialfunktion löst diese Gleichungen; in ihr steckt dann auch die Zeitabhängigkeit der Lösung. Um die vier einzelnen Lösungen wieder in die Dirac-Gleichung einsetzen zu können, müssen sie Vektorcharakter besitzen.<sup>17</sup>

<sup>17</sup> Wir können entweder die vier Lösungsfunktionen als Vektor zusammenfassen, oder, da sie voneinander linear unabhängig sind, jede einzelne als 4-er-Spinor betrachten, der jeweils drei Nullkomponenten hat. Durch die Dimension  $4 \times 4$  der Operatoren in der Dirac-Gleichung muss eine Lösung auf jeden Fall die Dimension 4 besitzen.

Das wird durch 4-er-Spinoren erreicht:

$$\begin{aligned}\psi_1(t) &= e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \psi_2(t) &= e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi_3(t) &= e^{i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \psi_4(t) &= e^{i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Ortsunabhängige Lösungsspinoren der Dirac-Gleichung

### Vorläufige Interpretation des Beispiels

Die beiden ersten Lösungen  $\psi_1(t)$  und  $\psi_2(t)$  deuten wir als Lösungen positiver Energie  $E = m_0c^2$ , wobei der Spinor die Spinprojektion anzeigt.  $\psi_1$  besitzt bezüglich der Spin-Projektion den Eigenwert  $+1$ , ist somit Spin-Up,  $\psi_2$  mit Eigenwert  $-1$  ist Spin-Down.<sup>18</sup> Die 2 Lösungen  $\psi_3(t)$  und  $\psi_4(t)$  mit negativer Energie  $E = -m_0c^2$  kann man bezüglich der Spin-Projektion ebenso deuten:

$$\begin{aligned}|\psi_{1/2}\rangle &= e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} |\pm\rangle \\ |\psi_{3/4}\rangle &= e^{i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} |\pm\rangle\end{aligned}$$

Damit ist allerdings die Bedeutung der negativen Energie noch nicht geklärt.

### Ergebnis

Auch die Dirac-Gleichung liefert uns Lösungen negativer Energie, obwohl der Ansatz von einer linearen Gleichung startet. Wenn zwei verschiedenartige Ansätze negative Lösungen ins Spiel bringen, lässt sich vermuten, dass die negativen Lösungen physikalisch Sinn machen.

Entgegen der Klein-Gordon-Gleichung bringt die Dirac-Gleichung aber zusätzlich den Spin ins Spiel. Es wird sich zeigen, dass *die Klein-Gordon-Gleichung für spinlose relativistische Teilchen, die Dirac-Gleichung für relativistische Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen* geeignet ist.

Die Dirac-Gleichung ist jedoch nicht auf die Dimension 4 festgelegt; wir konnten nur feststellen, dass 4 die kleinstmögliche Dimension ist. Mit höheren Dimensionen „explodiert“ das Problem allerdings, es gibt immer mehr Lösungen, deren Berechnung beliebig kompliziert wird.

Ungeklärt ist auch noch die Frage nach einer Kontinuitätsgleichung, der wir jetzt nachgehen möchten.

<sup>18</sup>Vergleiche die 2-er-Spinoren der Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen: Die Anwendung von  $\sigma_z$  (in Form des Operators  $\hat{s}_z$ ) ergab dort die Spin-Projektion in  $z$ -Richtung.

### 9.3.3 Kontinuitätsgleichung

**Bemerkung (Zum Vektorcharakter der Lösungen).** Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass der Spinor bei Adjunktion sowohl konjugiert, als auch durch seinen Vektorcharakter transponiert werden muss. Bei den Lösungsvektoren ist die zusätzliche Transposition  $\dagger \equiv (*)^T$  wichtig, da sie Spalten- und Zeilenvektor ineinander umwandelt. Die Multiplikation eines Zeilenvektors (Dimension  $1 \times 4$ ) mit einem Spaltenvektor (Dimension  $4 \times 1$ ) ergibt (nach den Regeln der Matrixmultiplikation) die Dimension  $1 \times 1$ , also eine Zahl.

Schreiben wir nochmals die Dirac-Gleichung auf:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + m_0 c^2 \beta \psi \quad (1)$$

Hierbei ist  $\psi$  ein kompletter Lösungsvektor, der adjungiert folgendermaßen aussieht (Zeilenvektor!):

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$$

Adjungieren wir die Dirac-Gleichung (die 4 Matrizen sind selbstadjungiert, ändern sich also bei Adjunktion nicht, allerdings wird die Position vertauscht):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger = -\frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} \psi^\dagger \alpha_k + m_0 c^2 \psi^\dagger \beta \quad (2)$$

Multiplizieren wir (1) von links mit  $\psi^\dagger$  und (2) von rechts mit  $\psi$ :

$$i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \psi^\dagger \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + m_0 c^2 \psi^\dagger \beta \psi \quad (1')$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \psi = -\frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} \psi^\dagger \alpha_k \psi + m_0 c^2 \psi^\dagger \beta \psi \quad (2')$$

Subtraktion (1') - (2'):

$$i\hbar \left( \psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi + \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \psi \right) = \frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \left( \psi^\dagger \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + \frac{\partial}{\partial x^k} \psi^\dagger \alpha_k \psi \right)$$

Setzen wir  $\varrho = \psi^\dagger \psi$  in die Gleichung ein, so erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho = -c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} (\psi^\dagger \alpha_k \psi)$$

Vergleichen wir das mit der Kontinuitätsgleichung  $\dot{\varrho} + \text{div } \vec{j} = 0$ :

$$\dot{\varrho} = -\text{div } \vec{j} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} j_k$$

So erhalten wir:

$$j_k = \psi^\dagger c \alpha_k \psi$$

$\hat{v}_k := c \alpha_k$  deuten wir dabei als *Geschwindigkeitsoperator*.

### Ergebnis

Relativistisch müssen wir folgende Definitionen machen, damit die Kontinuitätsgleichung erfüllt wird:

$\varrho := \psi^\dagger \psi$	Wahrscheinlichkeitsdichte
$j_k := \psi^\dagger \hat{v}_k \psi$	Stromdichte
$\hat{v}_k := c \alpha_k$	Geschwindigkeitsoperator

Der Geschwindigkeitsoperator hat nichts mit unserer „altbekannten“ Geschwindigkeit zu tun; hier steht keine Ableitung im Operator!

### Zusammenfassen der Spinorkomponenten

Mit 2-dimensionalen Vektoren und Blockmatrizen arbeitet es sich einfacher, als mit 4-dimensionalen. Außerdem bietet sich die Trennung der Lösungen positiver und negativer Energien an. Wir definieren deshalb die folgenden 2-er-Spinoren:

$$\phi := \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\chi := \begin{pmatrix} -\psi_3 \\ -\psi_3 \end{pmatrix}$$

Die Stromdichte schreibt sich damit als:

$$\begin{aligned} j_k &= c (\phi^\dagger, \chi^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &= c (\phi^\dagger, \chi^\dagger) \begin{pmatrix} \sigma_k \chi \\ \sigma_k \phi \end{pmatrix} \\ &= c (\phi^\dagger \sigma_k \chi + \chi^\dagger \sigma_k \phi) \end{aligned}$$

Ist also  $\phi$  oder  $\chi = 0$ , so ist auch die Stromdichte  $j_k = 0$ .

### 9.3.4 Ausblick

Was noch ungeklärt ist:

- Wie verhalten sich die Lösungen der Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Grenzfall?
- Ist die Dirac-Gleichung in allen Koordinatensystemen gleich? Diese Frage nach der *Kovarianz* der Dirac-Gleichung stellt der nächste Abschnitt.

## 9.4 Kovarianz der Dirac-Gleichung

### 9.4.1 Schreibweise der Dirac-Gleichung

#### $\gamma$ -Matrizen

Je kompakter eine Formel, desto schöner scheint sie; diesen ästhetischen Leitsatz verfolgen wir zunächst. Er führt zu den  $\gamma$ -Matrizen, die nützlich sind. Starten wir von der Dirac-Gleichung, wie wir sie im letzten Abschnitt gefunden haben. Wir bleiben bei der vierdimensionalen Form für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\hbar}{i} c \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + m_0 c^2 \beta \psi$$

Division durch  $c$  und von links mit  $\beta$  multiplizieren:

$$i\hbar \beta \frac{\partial}{\partial(ct)} \psi = -i\hbar \sum_{k=1}^3 \beta \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + m_0 c \beta^2 \psi$$

Auf Seite 471 fanden wir, dass  $\beta^2 = \mathbb{1}_4$  ist. Außerdem wirkt  $\beta$  nicht auf  $t$ , ist auch nicht selbst zeitabhängig, so dass wir es links hinter die Differentiation schieben können:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)} \beta \psi = -i\hbar \sum_{k=1}^3 \beta \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + m_0 c \mathbb{1}_4 \psi$$

Die Differentiationen sind die Komponenten des 4-er-Impulsoperators; in kovarianter Schreibweise:

$$\hat{p}_0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^0}$$

und:

$$\hat{p}_k = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k}, \quad \text{für } k = \{1, 2, 3\}$$

Damit nimmt die Dirac-Gleichung folgende Gestalt an:

$$\hat{p}_0 \beta \psi = - \sum_{k=1}^3 \beta \alpha_k \hat{p}_k \psi + m_0 c \mathbb{1}_4 \psi$$

Bei dieser Form liegt es nahe, die Dirac-Matrizen neu zusammenzufassen, um eine kompaktere und konsequenter (ko- und kontravariante) Schreibweise zu erhalten:

$$\hat{p}_0 \gamma^0 \psi = - \sum_{k=1}^3 \gamma^k \hat{p}_k \psi + m_0 c \psi$$

Dabei sind die  $\gamma$ -Matrizen folgendermaßen definiert:<sup>19</sup>

$$\gamma^0 := \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}$$

$\gamma$ -Matrizen

$$\gamma^k := \beta \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

In der durch die  $\gamma$ -Matrizen leicht verkürzten Form der Dirac-Gleichung können die drei Raumkomponenten und die Zeitkomponente noch zu einem 4-er-Vektor zusammengefasst werden, so dass wir folgende Form erhalten:

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu \psi = m_0 c \psi$$

Auf eine Seite bringen und den Wellenspinor ausklammern:

$$\boxed{(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m_0 c) \psi = 0} \quad \text{Dirac-Gleichung in kompakter Form}$$

**Bemerkung (Zur kompakten Schreibweise).**

- $\psi$  ist ein 4-er-Vektor.
- Bei der kompakten Schreibweise der Dirac-Gleichung wird stillschweigend die  $\mathbb{1}_4$  vor  $m_0 c$  weggelassen.<sup>20</sup>
- Die Schreibweise  $\gamma^\mu$  soll implizieren, dass es sich um einen 4-er-Vektor handelt. Die einzelnen Komponenten dieses Vektors sind die vier  $\gamma$ -Matrizen, die selbst von der Dimension  $4 \times 4$  sind.
- Dieselbe Bedeutung wird mit der Einstein'schen Summenkonvention impliziert. Hierbei stellt  $\gamma^\mu \hat{p}_\mu$  nicht ein Skalarprodukt zweier 4-er-Vektoren, sondern die Summe aus vier Komponentenprodukten dar, was aber zum selben Ergebnis führt.

So kurz also die Schreibweise ist, sie birgt sehr viele Informationen in sich.

**Behauptung.** Die zwei Vektoroperatoren  $\gamma^\mu$  und  $\hat{p}_\mu$  vertauschen miteinander:

$$[\gamma^\mu, \hat{p}_\mu]_- = 0$$

Für das Skalarprodukt spielt die Reihenfolge also keine Rolle:

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu = \hat{p}_\mu \gamma^\mu$$

Außerdem bleibt  $\hat{p}_\mu \gamma^\mu$  unter einer Lorentz-Transformation erhalten; dieses Produkt ist ein Lorentz-Skalar.

*Ohne Beweis.* □

<sup>19</sup>Vor ausufernden Literaturvergleichen sei gewarnt. [Sakurai-2, Appendix B] stellt die unterschiedlichen Notationen der Standardliteratur gegenüber. Die hier verwendete entspricht Messiah und Bjorken/Drell.

<sup>20</sup>Das ist mathematisch nicht falsch, wenn beachtet wird, dass die Gleichung auf einen 4-er-Vektor wirkt.

### Dolch-Operator

Mit der folgenden Schreibkonvention Feynmans lässt sich die Dirac-Gleichung noch kompakter schreiben.

**Definition.** Sei  $a_\mu$  ein beliebiger kovarianter 4-er-Vektor. Dann ist „Dolch- $a$ “ (oder „Slash- $a$ “) definiert durch:<sup>21</sup>

$$\not{a} := \gamma^\mu a_\mu \equiv \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu a_\mu$$

$\not{a}$  ist als das Produkt aus einem kovarianten und einem kontravarianten Vektor ein Lorentz-Skalar.<sup>22</sup> Damit erhalten wir tatsächlich eine noch kompaktere Schreibweise für die Dirac-Gleichung:

$$\boxed{(\not{\not{p}} - m_0 c) \psi = 0} \quad \text{Dirac-Gleichung in kompaktester Form}$$

### Fragestellung

Ist das, was durch die Schreibweise  $\mathcal{D}\psi = 0$  ausgedrückt wird, tatsächlich erfüllt? Ist die Dirac-Gleichung also physikalisch sinnvoll? Wir fragen konkret:

- Was bedeutet ein 4-er-Vektor aus Matrizen?
- Transformiert sich die Dirac-Gleichung korrekt, d.h. ist sie invariant unter Lorentz-Transformationen?

Diesen Fragen gehen wir im nun folgenden Hauptteil dieses Abschnittes nach.

## 9.4.2 Koordinatentransformationen

### Beispielsystem

Betrachten wir die freie<sup>23</sup> Dirac-Gleichung in verschiedenen Koordinatensystemen. Wir untersuchen dabei die Bewegungsgleichung wieder für ein nur in  $x$ -Richtung bewegtes Teilchen.

Abbildung 9.1: Relativistisch bewegtes Teilchen im „ruhenden“ System  $\mathcal{KS}$  und im mitbewegten Koordinatensystem  $\widetilde{\mathcal{KS}}$ , dem Ruhesystem des Teilchens.

Im Ruhesystem des Teilchens, dem mitbewegten System  $\widetilde{\mathcal{KS}}$ , sieht der Impuls-4-er-Vektor folgendermaßen aus:

$$\hat{p}^\mu = \begin{pmatrix} \hat{p}^0 = m_0 c = \frac{E}{c} \\ \hat{p}^k = 0 \end{pmatrix}$$

<sup>21</sup>Beachte die Einstein'sche Summenkonvention!

<sup>22</sup>Außerdem sollte  $\not{a}$  nicht mit einem durchgestrichenen Parameter  $B(\not{a})$  verwechselt werden.

<sup>23</sup>Genaugenommen müssten wir immer von der *freien* Dirac-Gleichung sprechen, da wir bisher noch keine Störungen bzw. Potentiale betrachtet haben. Da dies in diesem (und in den vorherigen) Kapitel(n) keine Rolle spielt, lassen wir den Zusatz meist weg.

Im „ruhenden“ System  $\mathcal{KS}$  sind nur die  $y$ - und die  $z$ -Komponente null:

$$\hat{p}^\mu = \begin{pmatrix} \hat{p}^0 \\ \hat{p}^1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Anhand dieses Systems möchten wir die Koordinatentransformation erarbeiten.

### Koordinatentransformation

Betrachten wir die Lorentz-Transformation mit den Faktoren:<sup>24</sup>

$$\beta = -\frac{v}{c}, \quad \gamma = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Der Impuls  $\hat{p}^\mu$  im „ruhenden“ System  $\mathcal{KS}$  ergibt sich damit aus dem Impuls  $\hat{\hat{p}}^\mu$  im Ruhesystem des Teilchens nach folgender Transformationsvorschrift:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}^0 \\ \hat{p}^1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} \hat{\hat{p}}^0 - \beta \hat{\hat{p}}^1 \\ \hat{\hat{p}}^1 - \beta \hat{\hat{p}}^0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma} \begin{pmatrix} m_0 c \\ v m_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Betrachten wir davon die erste Komponente:

$$\hat{p}^1 = \frac{m_0 v}{\gamma} = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1)$$

sowie die nullte Komponente:

$$\hat{p}^0 = \frac{m_0 c}{\gamma} = \frac{m_0 c}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (0)$$

Formen wir (0) um, ohne etwas zu ändern:

$$\begin{aligned} &= \frac{\sqrt{m_0^2 c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ &= \frac{\sqrt{m_0^2 c^2 - m_0^2 v^2 + m_0^2 v^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ &= \sqrt{m_0^2 c^2 + \frac{m_0^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

<sup>24</sup>Kommentare zu den relativistischen Faktoren:

- $\beta$ : Das Vorzeichen hängt davon ab, aus welchem System man die Geschwindigkeit betrachtet.
- $\gamma$ : Um nichts zu verwechseln, muss man streng auf die Indizes achten;  $\gamma$  ohne Index ist eine Zahl, die nicht mit den  $\gamma$ -Matrizen oder dem Vektor daraus verwechselt werden darf.



Hier steht aber (1) zum Quadrat unter der Wurzel:

$$\begin{aligned} &= \sqrt{m_0^2 c^2 + (\hat{p}^1)^2} \\ &= \sqrt{m_0^2 c^2 + \left(\frac{m_0 v}{\gamma}\right)^2} \end{aligned}$$

Im Ruhesystem des Teilchens ist der 4-er-Vektor konstant. Dass sich der Zustandsvektor im System  $\mathcal{KS}$  wie oben auf eine Abhängigkeit in der Komponente, in der sich das Teilchen bewegt, reduziert, liegt daran, dass die Länge bei einem Systemwechsel erhalten bleibt:

$$\boxed{\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu = \hat{p}^\mu \hat{p}_\mu} \quad \text{Längenerhaltung der Lorentz-Transformation}$$

### Kontravariante Transformationsmatrix

Die Transformation kann man mittels einer Transformationsmatrix<sup>25</sup>  $a^\mu_\nu$  ausdrücken:<sup>26</sup>

$$\boxed{\hat{p}^\mu = a^\mu_\nu \hat{p}^\nu}$$

Vollständig (ohne Einstein'sche Summenkonvention) lautet die Beziehung für die Komponenten  $\mu$  des 4-er-Vektors:

$$\hat{p}^\mu = \sum_{\nu=0}^3 a^\mu_\nu \hat{p}^\nu$$

Der „linkere“ Index ist der Zeilenindex, der „rechtere“ entsprechend der Spaltenindex; die Höhenposition hängt davon ab, zwischen welchen „Varianten“ (ko- und kontra), in welcher Richtung, transformiert wird. In unserem Beispielsystem ist z.B.:

$$a^0_0 = \frac{1}{\gamma}$$

sowie:

$$a^0_1 = -\frac{\beta}{\gamma}$$

Die vollständige Transformationsmatrix nimmt in unserem Beispielsystem folgende Gestalt an:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}^0 \\ \hat{p}^1 \\ \hat{p}^2 \\ \hat{p}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} & -\frac{\beta}{\gamma} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\gamma} & \frac{1}{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}^0 \\ \hat{p}^1 \\ \hat{p}^2 \\ \hat{p}^3 \end{pmatrix}$$

<sup>25</sup>Es ist immer möglich einen kontravarianten Vektor des einen Systems in einen kontravarianten Vektor des anderen Systems zu überführen. In der Transformationsmatrix  $a^\mu_\nu$  stecken die Koeffizienten der Lorentz-Transformation.

<sup>26</sup>Dieser Teilabschnitt dient mehr dazu, mit den verschiedenen Schreibweisen und Matrizen vertraut zu werden.

Für die Beziehung zwischen kontravariantem  $\hat{p}^\mu$  und kovariantem  $\hat{p}_\mu$  gilt:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}^0 \\ \hat{p}^1 \\ \hat{p}^2 \\ \hat{p}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} & \frac{\beta}{\gamma} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\gamma} & -\frac{1}{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \hat{p}_3 \end{pmatrix}$$

Die Transformationsmatrix  $a^{\mu\nu}$  nimmt für  $\hat{p}^\mu = a^{\mu\nu} \hat{p}_\nu$  folgende Gestalt an:

$$a^{\mu\nu} = \begin{cases} a^\mu_\nu, & \text{für } \nu = 0 \\ -a^\mu_\nu, & \text{für } \nu = 1, 2, 3 \end{cases}$$

Transformationsmatrizen mit Indizes an gleicher Position beschreiben die Transformation zwischen ko- und kontravarianten Vektoren der zwei Koordinatensysteme, während solche mit „diagonalen“ Indizes zwischen der gleichen „Variante“ transformieren. Erinnern wir uns an den metrischen Tensor von Seite 457:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = g^{\mu\nu}$$

Mit dieser Matrix können wir eine Beziehung zwischen den Transformationsmatrizen aufstellen; salopp ausgedrückt, dient der metrische Tensor zum „umschauen“ der Indizes:<sup>27</sup>

$$a^{\mu\nu} = a^\mu_\kappa g^{\kappa\nu}$$

### Kovariante Transformationsmatrix

Es gilt:

$$\hat{p}_\mu = a_\mu^\nu \hat{p}_\nu$$

Man kann nicht oft genug darauf hinweisen, dass hier die Einstein'sche Summenkonvention angewandt wird; ausgeschrieben lautet die Formel:

$$\hat{p}_\mu = \sum_{\nu=0}^3 a_\mu^\nu \hat{p}_\nu$$

<sup>27</sup>Die ko/kontravariante Indeschreibweise scheint zunächst verwirrend. Sie lässt sich mit etwas Übung aber gut anwenden, vor allem ist eine Kontrolle der Indizierung leicht möglich. An dieser Formel kann das schön gezeigt werden:

- Aufeinanderfolgende gleiche Indizes zweier Größen müssen „diagonal“ zueinander stehen. Sie implizieren immer auch die Einstein'sche Summenkonvention.
- Die restlichen Indizes müssen auf beiden Seiten einer Transformationsgleichung am selben Ort stehen.

Die Matrix  $a_\mu^\nu$  lautet:

$$a_\mu^\nu = \begin{cases} a^{\mu\nu}, & \text{für } \nu = 0 \\ -a^{\mu\nu}, & \text{für } \nu = 1, 2, 3 \end{cases}$$

### Rücktransformation

Zur Transformation in das bewegte System:

$$\hat{p}^\mu = a_\nu^\mu \hat{p}^\nu$$

existiert die Umkehrtransformation in das Ruhesystem des Teilchens:

$$\hat{p}^\mu = \hat{p}^\nu (a_\nu^\mu)^{-1}$$

**Behauptung.** Für die Rücktransformationsmatrix gilt:

$$\boxed{(a_\nu^\mu)^{-1} = a_\nu^\mu}$$

Das bedeutet außer:

$$\hat{p}^\mu = \hat{p}^\nu a_\nu^\mu$$

auch:

1. Bilde die Transponierte der Matrix  $a_\nu^\mu$ . Dadurch wechseln die Indizes ihre Position miteinander.
2. Multipliziere die Spalten 1-3 mit  $-1$ ; der Spaltenindex geht damit nach oben.
3. Multipliziere die Zeilen 1-3 mit  $-1$ ; der Zeilenindex wechselt nach unten.

*Beweis.* Wir wissen, dass das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst in jedem Koordinatensystem denselben Wert ergibt, also Lorentz-invariant ist:

$$\hat{x}^\mu \hat{x}_\mu = x^\mu x_\mu$$

Setzen wir für letzteres die Transformation ein:

$$= a_\nu^\mu \hat{x}^\nu a_\mu^\kappa \hat{x}_\kappa$$

Die  $a$ -Matrizen beinhalten nur skalare Zahlenwert; sie können also beliebig mit Operatorenkomponenten die Position wechseln:

$$= \underbrace{a_\nu^\mu a_\mu^\kappa}_{=: z_\nu^\kappa} \hat{x}^\nu \hat{x}_\kappa$$

Weil die Länge in allen Systemen dieselbe ist, muss die Matrix  $z_\nu^\kappa$  immer dann null sein, wenn die Indizes verschieden sind, sonst soll sie eins sein:  $z_\nu^\kappa \equiv \delta_{\nu\kappa}$ . Wenn das Produkt der zwei Matrizen  $a_\nu^\mu$  und  $a_\mu^\kappa$  aber die Einheitsmatrix ergibt,  $\delta_{\nu\kappa} \equiv \mathbb{1}_4$ , dann ist die eine die Inverse der anderen.  $\square$

**Beispiel.** Die Transformationsmatrix für ein in  $x$ -Richtung bewegtes System lautet:

$$a^\mu_\nu = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} & -\frac{\beta}{\gamma} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\gamma} & \frac{1}{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Rücktransformation ist dann gegeben durch:

$$(a^\mu_\nu)^{-1} = a_\nu^\mu = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} & \frac{\beta}{\gamma} & 0 & 0 \\ \frac{\beta}{\gamma} & \frac{1}{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Anschaulich macht das Sinn, da sich bei der Rücktransformation nur das Geschwindigkeitsvorzeichen ändert; dieses steckt im  $\beta$ , so dass alle Koeffizienten mit  $\beta$  das Vorzeichen wechseln müssen.

**Beispiel.** Besteht die Transformation aus einer Drehung<sup>28</sup> um die  $z$ -Achse, mit Drehwinkel  $\varphi$ :

$$a^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

so lautet die Rücktransformation:

$$(a^\mu_\nu)^{-1} = a_\nu^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die zeitartige Komponente ändert sich bei einer Drehung nicht. Ebenso darf sich (bei Drehung um die  $z$ -Achse) die  $z$ -Komponente nicht ändern. Die Rücktransformation besteht in einer Drehung um den Winkel  $-\varphi$ .

### 9.4.3 Lösung der Dirac-Gleichung

#### Zur Erinnerung

Die Dirac-Gleichung lautet:

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m_0 c) \psi = 0$$

Der erste Faktor dabei ist das Skalarprodukt aus dem 4-er-Vektor der  $\gamma$ -Matrizen mit dem Impuls-4-er-Operator (Einstein'sche Summenkonvention – ohne Summenzeichen), beim Faktor  $m_0 c$  kann man sich die  $\mathbb{1}_4$  dazudenken. Die Lösung  $\psi$  ist auch ein 4-er-Vektor, der Dirac-Spinor.

<sup>28</sup>Auch eine Drehung ist eine Lorentz-Transformation.

**Lösung im Ruhesystem des Teilchens**

Im Ruhesystem  $\widetilde{\mathcal{KS}}$  des Teilchens ist nur die „Energiekomponente“  $\frac{E}{c}$  ungleich null:

$$\hat{p} = \begin{pmatrix} m_0 c \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dadurch vereinfacht sich die Dirac-Gleichung:

$$\gamma^0 \hat{p}_0 \tilde{\psi} = m_0 c \tilde{\psi}$$

wobei  $\tilde{\psi}$  nach wie vor ein 4-er-Vektor ist.

**Als Ansatz** spalten wir  $\tilde{\psi}$  in zwei zweikomponentige Vektoren auf:<sup>29</sup>

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\phi} := \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\chi} := \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_3 \\ \tilde{\psi}_4 \end{pmatrix}$$

Im Ruhesystem des Teilchens benötigen wir als einzige  $\gamma$ -Matrix  $\gamma^0$ :

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

Unsere Bewegungsgleichung lautet damit:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \hat{p}_0 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = m_0 c \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$$

Dadurch dass wir das einfachste System, das Ruhesystem des Teilchens, gewählt haben, entkoppeln die vier Differentialgleichungen der Dirac-Gleichung.

Da  $\hat{p}_0 = m_0 c$  ist, ist eine Lösung nur mit  $\tilde{\phi} \neq 0$  und  $\tilde{\chi} = 0$  möglich. Das Teilchen ruht in seinem Ruhesystem, so dass die zwei Lösungen, die durch  $\tilde{\phi}$  beschrieben sind, nicht ortsabhängig sein können. Z.B. in Ortsdarstellung lauten sie:

$$\tilde{\psi}_1 = \begin{pmatrix} e^{i(0 \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und:

$$\tilde{\psi}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i(0 \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-i\omega t} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{c \hat{p}^0}{\hbar} = \frac{m_0 c^2}{\hbar}$$

<sup>29</sup>Dieser Ansatz macht im Ruhesystem noch nicht viel Sinn, da es direkt zu lösen ist; erst im Laborsystem ist die Aufspaltung sehr nützlich.

**Lösung im Laborsystem**

Die Bewegung findet weiter in 1-Richtung statt; im Laborsystem verschwinden nur  $\hat{p}_2 = \hat{p}_3$  zu null. Die Bewegungsgleichung lautet dann:

$$(\gamma^0 \hat{p}_0 + \gamma^1 \hat{p}_1) \psi = m_0 c \psi$$

Setzen wir wieder mit zwei 2-er-Lösungsvektoren an:

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \phi := \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi := \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Setzen wir diese, zusammen mit den beiden  $\gamma$ -Matrizen, in die Dirac-Gleichung ein:

$$\left( \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \hat{p}_0 + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_1 \right) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = m_0 c \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

So erhalten wir zwei gekoppelte Differentialgleichungen für  $\phi$  und  $\chi$ :

$$\mathbf{1}_2 \hat{p}_0 \phi + \sigma_1 \hat{p}_1 \chi = m_0 c \mathbf{1}_2 \phi$$

und:

$$-\mathbf{1}_2 \hat{p}_0 \chi - \sigma_1 \hat{p}_1 \phi = m_0 c \mathbf{1}_2 \chi$$

Fassen wir nun die Wellenvektoren  $\phi$  und  $\chi$ , die eigentlich 2-er-Vektoren sind, als abstrakte Objekte auf, so finden wir, dass der folgende Ansatz diese Dirac-Gleichung löst:

$$\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0 c} \end{pmatrix}$$

Dass hierbei  $\phi$  eine Zahl (ein Skalar!) ist und  $\chi$  eine  $(2 \times 2)$ -Matrix (mit  $\sigma_1$  steht diese Dimension fest;  $p$  ist der 3-er-Impulsbetrag  $p := |\vec{p}|$ ), lässt einen erstaunen. Diese abstrakte Lösung ist allerdings nicht die vollständige, wie wir gleich sehen werden. Interessanterweise erfüllt sie aber tatsächlich das Gleichungssystem. Dieser Lösungszwischenschritt muss noch mit einem Spin-Zustand multipliziert werden, um zur echten Lösung zu werden. Hier sieht man dann, dass die unterschiedliche Dimensionierung von  $\phi$  und  $\chi$  sich in Wohlgefallen auflöst; denn ein Skalar mit einem Spinzustand multipliziert gibt wieder einen Spinzustand; ebenso ergibt eine Paulimatrix, auf einen Spinzustand angewandt, wieder einen Spinzustand. Bevor wir dies zum allgemeinen Ansatz zusammenfassen, prüfen wir noch die abstrakte „Zwischenlösung“.

*Verifikation des abstrakten Lösungsvektors.* Wir setzen die zwei Lösungskomponenten  $\phi = 1$  und  $\chi = \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0 c}$  in die Gleichung ein:

1. Zeile: Wir benutzen die Eigenschaften  $\hat{p}_0 = \frac{E}{c}$  und  $\sigma_1^2 = \mathbb{1}_2$ :

$$\hat{p}_0 \mathbb{1}_2 + \frac{\sigma_1(-p)\sigma_1 p}{\frac{E}{c} + m_0 c} = m_0 c \mathbb{1}_2$$

$\mathbb{1}_2$  herauskürzen; mit dem Nenner durchmultiplizieren:

$$\frac{E}{c} \left( \frac{E}{c} + m_0 c \right) - p^2 = m_0 c \left( \frac{E}{c} + m_0 c \right)$$

Ausmultiplizieren,  $Em_0$  subtrahieren und mit  $c^2$  multiplizieren:

$$E^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^2$$

Damit erhalten wir die Einstein'sche Energie-Impuls-Beziehung. Dies ist eine wahre Aussage, was den Ansatz bestätigt:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^2$$

Der Lösungsvektor liefert für die erste Differentialgleichung ein korrektes Ergebnis.

2. Zeile:

$$-\hat{p}_0 \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0 c} + p\sigma_1 = m_0 c \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0 c}$$

$\sigma_1$  herauskürzen und mit dem Nenner durchmultiplizieren:

$$-\frac{E}{c} p + p \frac{E}{c} + p m_0 c = m_0 c p$$

Also:

$$0 = 0$$

Eine wahre Aussage, auch für die zweite Differentialgleichung, die damit den Ansatz bestätigt.

Der abstrakte Lösungsvektor erfüllt die gekoppelte Differentialgleichung.  $\square$

Nun müssen wir ihn um die Spinkomponente erweitern und noch richtig normieren.

### Allgemeiner Ansatz

Die Lösung im Laborsystem lautet mit Normierungskonstante  $N$  und Spinvektor  $|m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle$ , z.B. für Spin-Up mit der Spinor-Darstellung:

$$\psi = N \left( \begin{array}{c} 1 \\ \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0 c} \end{array} \right) | \left( \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right) \rangle$$

Ziehen wir den Spinor in die Klammer herein:

$$= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{p\sigma_1}{\frac{E}{c} + m_0c} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Lassen wir die Pauli-Matrix auf den Spinor wirken:

$$= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{p}{\frac{E}{c} + m_0c} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$= N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{p}{\frac{E}{c} + m_0c} \end{pmatrix}$$

Dies ist die Lösung der Dirac-Gleichung für ein Teilchen mit Spin-Up, das sich frei in  $x$ -Richtung mit dem Impuls  $p$  bewegt.

Verallgemeinern wir die Bewegung des Systems auf alle drei Ortsrichtungen, so muss  $p\sigma_1$  durch  $\hat{\vec{p}} \cdot \vec{\sigma}$  ersetzt werden. Um die allgemeinste Lösungsform zu erhalten, brauchen wir außerdem noch die oben gefundene Exponentialfunktion mit der Zeitabhängigkeit der Bewegung:

$$\psi(\vec{r}, t) = N \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hat{\vec{p}} \cdot \vec{\sigma}}{\frac{E}{c} + m_0c} \end{pmatrix} |m_s\rangle e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

Setzt man  $\hat{\vec{p}} = 0$ , so kommt wieder die Lösung für das Teilchen im Ruhesystem heraus. Für die Kreisfrequenz ergibt sich mit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\sqrt{m_0^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}}{\hbar}$$

### Normierung

**Behauptung.** Die Normierungskonstante lautet:

$$N = \sqrt{\frac{E + m_0c^2}{2m_0c^2}}$$



*Beweis.* Prüfen wir die Behauptung mittels der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\varrho$ . Der Spinzustand wird im Folgenden durch  $|m_s\rangle$  ausgedrückt:<sup>30</sup>

$$\begin{aligned}\varrho &= \psi^\dagger \psi \\ &= N^2 \langle m_s | \left( 1, \frac{\hat{\vec{p}}^\dagger \cdot \vec{\sigma}}{\frac{E}{c} + m_0 c} \right) \cdot \left( \frac{1}{\frac{E}{c} + m_0 c}, \frac{\hat{\vec{p}} \cdot \vec{\sigma}}{\frac{E}{c} + m_0 c} \right) | m_s \rangle \\ &= N^2 \langle m_s | \left( 1 + \frac{\hat{\vec{p}}^\dagger \cdot \vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} \cdot \vec{\sigma}}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2} \right) | m_s \rangle\end{aligned}$$

Der  $\vec{\sigma}$ -Vektor vertauscht mit dem Impuls, die Quadrate der einzelnen Pauli-Matrizen ergeben die Einheitsmatrix  $\mathbf{1}_2$ , so dass kein Operator übrigbleibt, der auf die Spins wirkt.<sup>31</sup> Dadurch können wir Bra und Ket zusammenziehen, das Spin-Skalarprodukt  $\langle m_s | m_s \rangle$  ist aber auf 1 normiert, so dass kein Spinanteil übrigbleibt:

$$= N^2 \left( 1 + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2} \right)$$

Alles auf denselben Nenner bringen und das so entstandene Klammerquadrat im Zähler ausmultiplizieren:

$$= N^2 \frac{\left(\frac{E}{c}\right)^2 + 2Em_0 + m_0^2 c^2 + \hat{\vec{p}}^2}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2}$$

Die hinteren beiden Terme im Zähler sind über die Energie-Impuls-Beziehung durch die Energie zu ersetzen:

$$\begin{aligned}&= N^2 \frac{\left(\frac{E}{c}\right)^2 + 2Em_0 + \left(\frac{E}{c}\right)^2}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2} \\ &= 2N^2 \frac{\left(\frac{E}{c}\right)^2 + Em_0}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2} \\ &= 2N^2 \frac{\frac{E}{c} \left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)}{\left(\frac{E}{c} + m_0 c\right)^2} \\ &= 2N^2 \frac{\frac{E}{c}}{\frac{E}{c} + m_0 c}\end{aligned}$$

Einsetzen des angenommenen Normierungsfaktors  $N$ :

$$= 2 \frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2} \frac{\frac{E}{c}}{\frac{E}{c} + m_0 c}$$

<sup>30</sup>Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass  $\sigma_k = \sigma_k^\dagger$  selbstadjungiert ist.

Also:

$$\varrho = \frac{p^0}{m_0 c}$$

Das ist in Ordnung, weil:

- Im Ruhesystem des Teilchens ist die Wahrscheinlichkeit des Dirac-Spinors auf 1 normiert.
- $\varrho$  muss sich wie die nullte Komponente eines 4-er-Vektors transformieren.

□

### 9.4.4 Boost

#### Zielsetzung

Es stellt sich nun die Frage, ob man nicht die Dirac-Gleichung im einfacheren Ruhesystem des Teilchens lösen kann, um die Lösungswellenfunktion dann ins Laborsystem zu transformieren. Eine solche Lorentz-Transformation der Wellenfunktion wird *Boost* genannt.

#### Transformation des Dirac-Spinors

Sei  $\widetilde{\mathcal{KS}}$  wieder das Ruhesystem des Teilchens. Wir wissen, wie sich die 4-er-Vektoroperatoren physikalischer Observable transformieren. So transformiert sich der kontravariante Impuls-4-er-Vektor folgendermaßen in das Laborsystem  $\mathcal{KS}$ :

$$\hat{p}^\mu = a^\mu{}_\nu \hat{p}^\nu$$

Die kovariante Transformation lautet:

$$\hat{p}_\mu = a_\mu{}^\nu \hat{p}_\nu$$

---

<sup>31</sup>Kleine Nebenrechnung zur Verifikation:

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \hat{p}^\dagger \cdot \vec{\sigma} \cdot \hat{p} &= (\vec{\sigma} \cdot \hat{p}^\dagger) (\vec{\sigma} \cdot \hat{p}) \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_i \hat{p}_i \sigma_j \hat{p}_j \end{aligned}$$

Die Komponenten der Impulsoperatoren wirken nicht auf die Spin-Matrizen, wir können sie miteinander vertauschen. Dabei spalten wir die Summationen in gemischte und gleiche Indizierung auf:

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^3 \underbrace{\sigma_i \sigma_i}_{\mathbf{1}_2} \hat{p}_i \hat{p}_i + \sum_{i < j} (\underbrace{\sigma_i \sigma_j}_0 + \underbrace{\sigma_j \sigma_i}_0) \hat{p}_i \hat{p}_j \\ &= \mathbf{1}_2 \hat{p}^2 \end{aligned}$$

worin die Matrizen  $a$  die Lorentz-Transformation für die jeweiligen Komponenten der 4-er-Vektoren übernehmen.

Sei nun  $\tilde{\psi}$  die Lösung der Dirac-Gleichung im Ruhesystem des Teilchens. An der Transformation der Wellenfunktion ist zwar die Operatortransformation  $a$  beteiligt, aber nicht in so einfacher Form. Es zeigt sich, dass die Transformationsmatrix für den Wellenspinor von der Transformationsmatrix der 4-er-Operatoren  $a^\mu_\nu$  bzw.  $a_\mu^\nu$  abhängt, die genaue Form müssen wir jedoch erst erarbeiten:<sup>32</sup>

$$\psi = \hat{S}(a)\tilde{\psi}$$

Der Operator  $\hat{S}$  wird *Boost* oder Boost-Operator genannt. Er „boostet“ die Wellenfunktion aus der Ruhe (aus dem Ruhesystem) auf die Geschwindigkeit  $v$  (ins Laborsystem, in dem das Teilchen sich mit  $v$  bewegt).  $\hat{S}$  beschreibt also die („Lorentz“-)Transformation des Dirac-Spinors.

### Ansatz für den Boost

Wie sieht der Boost-Operator aus? Sicher ist, dass die Dirac-Gleichung in beiden Systemen gelten muss. Die  $\gamma$ -Matrizen sind systemunabhängig.

*Die Dirac-Gleichung ist in den verschiedenen Systemen gleich, aber der Lösungsvektor ändert sich.* Im Laborsystem gilt:

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu \psi = m_0 c \psi \quad (1)$$

Im Ruhesystem gilt:

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu \tilde{\psi} = m_0 c \tilde{\psi} \quad (2)$$

Versuchen wir etwas über die Transformation zu erfahren, indem wir (1) aus (2) herleiten.

Wir fordern für eine Transformationsmatrix  $\hat{S}$ , dass eine inverse Matrix  $\hat{S}^{-1}$  existiert, für die  $\hat{S}^{-1}\hat{S} = \hat{\mathbb{1}}$  gilt. Außerdem muss die Gleichung, wenn sie komplett transformiert wird, immer noch gelten. Wenden wir also  $\hat{S}$  von links auf (2) an. Zusätzlich schieben wir eine  $\hat{\mathbb{1}} = \hat{S}^{-1}\hat{S}$  ein:

$$\hat{S}\gamma^\mu \hat{p}_\mu \hat{S}^{-1}\hat{S}\tilde{\psi} = m_0 c \hat{S}\tilde{\psi}$$

Die Transformation  $\hat{S}$  boostet  $\tilde{\psi}$  nach  $\psi$ :

$$\hat{S}\gamma^\mu \hat{S}^{-1}\hat{p}_\mu \psi = m_0 c \psi$$

Für den rechten Term können wir (1) einsetzen:

$$\hat{S}\gamma^\mu \hat{S}^{-1}\hat{p}_\mu \psi = \gamma^\nu \hat{p}_\nu \psi$$

Ersetzen wir  $\hat{p}_\mu$  durch die ins Laborsystem übersetzte Beziehung  $\hat{p}_\nu a^\nu_\mu$ :

$$\hat{S}\gamma^\mu \hat{S}^{-1}\hat{p}_\nu a^\nu_\mu \psi = \gamma^\nu \hat{p}_\nu \psi$$

<sup>32</sup>Die Klammer ist hier als Argument von  $\hat{S}$  zu verstehen.

In der letzten Zeile stehen Impuls und Wellenfunktion im gleichen System (Laborsystem), d.h. wir können einen Koeffizientenvergleich durchführen:

$$\hat{S}\gamma^\mu\hat{S}^{-1}a^\nu{}_\mu = \gamma^\nu$$

Wenden wir  $\hat{S}^{-1}$  von links,  $\hat{S}$  von rechts an:

$$\hat{S}^{-1}\hat{S}\gamma^\mu\hat{S}^{-1}a^\nu{}_\mu\hat{S} = \hat{S}^{-1}\gamma^\nu\hat{S}$$

Mit dem nächsten Schritt erhalten wir eine Bestimmungsgleichung für  $\hat{S}$ :

$$\boxed{\hat{S}^{-1}\gamma^\nu\hat{S} = a^\nu{}_\mu\gamma^\mu} \quad (3)$$

Das bedeutet, dass sich  $\gamma^\mu$  unter einer Lorentz-Transformation wie ein Lorentz-Vektor transformiert. Das ist sinnvoll, denn das Produkt  $\gamma^\mu\hat{p}_\mu$  ist ein Lorentz-Skalar. Die Gleichung kann so gedeutet werden, dass man anstatt den Dirac-Spinor zu transformieren, die Transformation auf die  $\gamma$ -Matrizen „umwälzen“ kann. Als Ergebnis: *Die Dirac-Gleichung ist Lorentz-invariant, also kovariant.*

Allein aus dieser Operatorgleichung (3) kann man für eine gegebene Lorentz-Transformation  $a^\nu{}_\mu$  den Boost-Operator  $\hat{S}$  konstruieren.

### Aufstellen des Boost-Operators

Das Prinzip der Aufstellung eines Operators zur Koordinatentransformation kennen wir schon vom Translations- und Rotationsoperator. Für den Boost funktioniert das analog:

1. Stelle einen Boost für eine infinitesimale Lorentz-Transformation auf.
2. Die Hintereinanderschaltung infinitesimaler Boosts führt zu einer endlichen Lorentz-Transformation.

Anstatt die verbleibende Zeit der Konstruktion zu widmen, betrachten wir lieber noch Beispiele für Boost-Operatoren.

### Boost-Beispiele

**Beispiel (Boost in  $x$ -Richtung).** Die Transformation vom Ruhesystem in ein in  $x$ -Richtung bewegtes System haben wir schon kennengelernt:

$$a^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma} & -\frac{\beta}{\gamma} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\gamma} & \frac{1}{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Der Boost  $\hat{S}$ , der den Dirac-Spinor transformiert lautet hierbei formal:

$$\hat{S} = \cosh\alpha \left( \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} - \tanh\alpha \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \right)$$

wobei:

$$\cosh \alpha = \sqrt{\frac{E + m_0 c^2}{2m_0 c^2}}$$

und:

$$\tanh \alpha = \frac{-pc}{E + m_0 c^2}$$

Konkret ist also:

$$\hat{S} = \cosh \alpha \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & -\sigma_1 \tanh \alpha \\ -\sigma_1 \tanh \alpha & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

Die Rücktransformation lautet:

$$\hat{S}^{-1} = \cosh \alpha \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & \sigma_1 \tanh \alpha \\ \sigma_1 \tanh \alpha & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

*Prüfen des Operators.* Mit konkretem Boost und „Rückboost“ lässt sich die Realisierung der Transformation überprüfen; das Produkt muss die Identität ergeben:

$$\hat{S}^{-1} \hat{S} = \cosh^2 \alpha \begin{pmatrix} 1 - \tanh^2 \alpha & 0 \\ 0 & 1 - \tanh^2 \alpha \end{pmatrix}$$

Mit der Rechenregel  $\cosh \cdot \tanh = \sinh$ :

$$= \begin{pmatrix} \cosh^2 \alpha - \sinh^2 \alpha & 0 \\ 0 & \cosh^2 \alpha - \sinh^2 \alpha \end{pmatrix}$$

Mit der Rechenregel  $\cosh^2 - \sinh^2 = 1$ :

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

Das Produkt aus angenommener Transformation und ihrer Inversen ergibt also die Identität.

Prüfen wir zusätzlich noch, ob sich die richtige Transformationsregel für die  $\gamma$ -Matrizen ergibt. Gelten muss (O.B.d.A. für  $\gamma^0$ ):

$$\hat{S}^{-1} \gamma^0 \hat{S} = a^0_{\mu} \gamma^{\mu}$$

Setzen wir links den Boost-Operator und die Matrix  $\gamma^0$  ein:

$$\begin{aligned} \hat{S}^{-1} \gamma^0 \hat{S} &= \cosh^2 \alpha \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & \sigma_1 \tanh \alpha \\ \sigma_1 \tanh \alpha & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & -\sigma_1 \tanh \alpha \\ -\sigma_1 \tanh \alpha & \mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\gamma} \gamma^0 - \frac{\beta}{\gamma} \gamma^1 \end{aligned}$$

□

Da wir weiter oben  $\psi$  und  $\tilde{\psi}$  für die konkrete Transformation schon berechnet haben, können wir durch Einsetzen prüfen, ob das richtige Ergebnis für den Boost  $\psi = \hat{S}\tilde{\psi}$  herauskommt. Erwartungsgemäß werden wir dabei nicht enttäuscht:

$$\begin{aligned}\psi &= \hat{S}\tilde{\psi} \\ &= \hat{S} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} |m_s\rangle \\ &= \sqrt{\frac{E+m_0c^2}{2m_0c^2}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{pc\sigma_x}{E+m_0c^2} \\ \frac{pc\sigma_x}{E+m_0c^2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} |m_s\rangle \\ &= \frac{E+m_0c^2}{2m_0c} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{pc\sigma_x}{E+m_0c} \end{pmatrix} |m_s\rangle\end{aligned}$$

**Beispiel (Drehung um die  $x$ -Achse).** Die Transformationsmatrix für den 4-er-Impuls lautet, wenn  $\varphi$  der Drehwinkel ist:

$$a^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

Der zugehörige Boost-Operator lautet:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & i\sin\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\varphi}{2} & i\sin\frac{\varphi}{2} \\ 0 & 0 & i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

Das entspricht aber einer Drehung von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen in der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

### 9.4.5 Negative Energien

Beim Aufstellen der Dirac-Gleichung mussten wir feststellen, dass auch Wellenfunktionen mit negativer Energie  $E = -m_0c^2$  diese Gleichung erfüllen können. Mit diesen Lösungen möchten wir uns noch kurz befassen.

#### Ruhsystem

Setzen wir in die Dirac-Gleichung für das Ruhesystem des Teilchens:

$$\gamma^0 p_0 \tilde{\psi} = m_0 c \tilde{\psi}$$

folgenden Spinor ein:

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

so ergibt sich mit  $p_0 = m_0 c$  eine positive Energie  $E = p_0 c$ . Setzen wir allerdings den Spinor:

$$\tilde{\psi}' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ein, so erhalten wir (durch den negativen Koeffizienten  $\gamma_{44}^0$  in der  $\gamma^0$ -Matrix)  $-p_0 = m_0 c$ , bzw.  $E = -m_0 c^2$ , also eine negative Teilchenenergie.

### Laborsystem

Im Laborsystem, mit dem in  $x$ -Richtung bewegten Teilchen, müssen wir den mit  $\hat{S}$  transformierten Ruhe-Spinor  $\tilde{\psi}'$  einsetzen:

$$\psi = \hat{S} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} p\sigma_1 \\ \frac{E}{c} + m_0 c \\ 1 \end{pmatrix} |m_s\rangle e^{i\frac{m_0 c^2}{\hbar}t} e^{i\frac{pE}{\hbar}}$$

Damit erhalten wir wieder die entsprechende negative Energie. Für positive Energien ist der Exponent in der „zeitlichen“ Exponentialfunktion negativ.

### Interpretation

Betrachten wir ein Vielteilchensystem, bei dem alle Zustände bis zu einer Oberkante besetzt sind. Innerhalb dieser Energiezustände ist kein Teilchen erzeugbar, da das Pauli-Prinzip keine weiteres Teilchen zulässt. Da man nichts von diesem „Teilchensee“ merkt, kann man ihn als *Quasiteilchen-Vakuum* auffassen.

Abbildung 9.2: Vielteilchensystem als Quasiteilchen-Vakuum.

Man kann allerdings ein Teilchen durch Aufbringen der Energie  $2m_0 c^2$  aus diesem See hochheben. Durch das Anheben hat man nun ein Teilchen positiver Energie  $m_0 c^2$  außerhalb des Sees, zurück bleibt ein Loch, das man als Antiteilchen mit der negativen Energie  $-m_0 c^2$  interpretiert.

Abbildung 9.3: Anheben eines Teilchens aus dem Quasiteilchen-Vakuum.

Diese Interpretation impliziert die Existenz von Antiteilchen mit negativer Energie. Das Nachprüfen macht allerdings Mühe, denn das Quasiteilchen-Vakuum ist dadurch ausgezeichnet, dass keine Nettoladung, bzw. Nettoquantenzahlen übrig sind. Mit hohem Aufwand ist es trotzdem möglich.

### Lamb-Shift

Durch ein starkes elektrisches Feld findet eine Polarisation des Vakuums statt (*Vakuumpolarisation*), die sich experimentell in einer kleinen Verschiebung der Energieniveaus, z.B. im S-Zustand des Wasserstoffatoms bemerkbar macht. Interpretiert wird dieser *Lamb-Shift* durch den See von Elektronen und ihren Antiteilchen, den Positronen. Diese werden durch das Feld leicht aus ihrem gemeinsamen Schwerpunkt herausgezogen, wodurch es zu einem elektrischen Dipolmoment des „Vakuums“ kommt.

### 9.4.6 Ausblick

Unser Ansatz zur Dirac-Gleichung führte auf vier durch Auflagen bestimmte Matrizen. Wir hatten gesehen, dass diese von gerader Dimension sein müssen, und es für die Dimension  $2 \times 2$  keine 4 Matrizen gibt, die gleichzeitig alle Bedingungen erfüllen. Erst für  $4 \times 4$  gibt es die 4  $\gamma$ -Matrizen. Die so entstandene Dirac-Gleichung ist zur Beschreibung von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen geeignet. Aber auch höherdimensionale 4-er-Paare von Matrizen finden sich. So beschreibt die Dirac-Gleichung mit den passenden  $6 \times 6$ -Matrizen Spin-1-Teilchen, die mit  $8 \times 8$ -Matrizen beschreibt Spin- $\frac{3}{2}$ -Teilchen; usw.



## 9.5 Dirac-Teilchen im Zentralfeld

Betrachten wir im Folgenden ein Zentralpotential. Dieses hängt nur vom Betrag des Ortsvektors ab; damit ist der Operator der potentiellen Energie  $\hat{V} = \hat{V}(r)$  mit  $r := |\vec{r}|$ . Wir bleiben weiterhin bei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, also der einfachsten Form der Dirac-Gleichung.

### 9.5.1 Vergleich mit der Schrödinger-Gleichung

Um die Dirac-Gleichung mit Zentralpotential zu lösen, können wir unser Wissen um die Schrödinger-Gleichung mit Zentralpotential anwenden.

#### Eigenfunktionssystem

Für die Schrödinger-Gleichung:

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

fanden wir folgende Vertauschungsrelationen zwischen dem Hamilton-Operator und den Drehimpulsoperatoren:

$$[\hat{H}, \hat{J}^2]_- = [\hat{H}, \hat{J}_z]_- = 0$$

was bedeutet, dass Wellenfunktionen  $\psi$  existieren, die sowohl Eigenfunktion zu  $\hat{H}$ , als auch zu den Drehimpulsoperatoren  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  sind. Eine solche Lösung  $\psi = |j, m_j\rangle$  kann separiert werden in Orts- und Winkelanteil, wobei der Winkelanteil selbst wieder in Bahn- und Spinanteil trennbar ist:

$$|j, m_j\rangle = R(r) \sum_{m_l, m_s} Y_{l m_l} \xi_{\frac{1}{2} m_s} \underbrace{c(l, m_l, s, m_s, j, m_j)}_{\text{Clebsch-Gordon}}$$

Für den relativistischen (Dirac'schen) Hamilton-Operator mit Potential  $\hat{H}_D$  machen wir folgenden Ansatz:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H}_D \stackrel{!}{=} c \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k + \beta m_0 c^2 + V(\hat{r})$$

#### Paritätsoperator

Versuchen wir nun einen Paritätsoperator für 4-er-Vektoren, bzw. die Paritätstransformation für die Dirac-Gleichung zu finden.

Der Paritätsoperator vertauscht mit dem Schrödinger-Hamilton-Operator:

$$[\hat{H}_{S.G.}, \hat{P}]_- = 0$$

Wenn die Parität eine gute Quantenzahl ist, bedeutet das, dass das System spiegelsymmetrisch ist. Die Paritätsoperation spiegelt die Koordinaten:

$$\vec{x}' = \hat{P}\vec{x} = -\vec{x}$$

Bei 4-er-Vektoren ist dabei zu beachten, dass die Zeit (also die nullte Komponente) nicht transformiert werden darf (die Zeit ändert sich im Spiegel nicht). Für die Paritätsoperation in der relativistischen Quantenmechanik benötigen wir folgende Transformation:

$$(\hat{x}')^\mu = a^\mu{}_\nu \hat{x}^\nu$$

wobei die Transformationsmatrix dem metrischen Tensor  $g^{\mu\nu}$  entspricht:

$$a^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Das ist eine uneigentliche Lorentz-Transformation, weil die Determinante der Transformationsmatrix  $\det a^\mu{}_\nu = -1$  negativ ist. Außerdem ist die Paritätsoperation keine kontinuierliche Operation, wie z.B. die Drehungen. Es ist auch keine Hintereinanderausführung von Drehungen.

Löst nun  $\psi$  die Dirac-Gleichung, so löst:

$$\psi' = \hat{S}_P \psi$$

die Paritätstransformierte Dirac-Gleichung. Aus dem vorigen Abschnitt wissen wir, dass die Transformation mit obiger Transformationsmatrix  $a^\mu{}_\nu$  folgendermaßen zusammenhängt:

$$\hat{S}_P^{-1} \gamma^\mu \hat{S}_P = a^\mu{}_\nu \gamma^\nu$$

**Behauptung.** Der Paritätsoperator  $\hat{S}_P$  lautet:

$$\hat{S}_P = e^{i\varphi} \gamma^0$$

Er setzt sich aus einer komplexen Phase und einer  $\gamma$ -Matrix zusammen.

*Beweis.* Folgende Punkte müssen erfüllt sein:

1. Die Hintereinanderausführung von Transformation und Umkehrtransformation führt wieder zum Ausgangszustand zurück. Prüfen wir dies, indem wir die angenommene Form einsetzen:

$$\hat{S}_P \hat{S}_P^{-1} = e^{i\varphi} \gamma^0 e^{-i\varphi} \gamma^0$$

Die Exponentialfunktionen heben sich zu 1 weg, übrig bleiben die  $\gamma^0$ -Matrizen:

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{1}_4 \end{aligned}$$

2. Prüfen wir das Transformationsverhalten der  $\gamma$ -Matrix unter der Paritätsoperation, zunächst für  $\gamma^0$ :

$$\hat{S}_P^{-1} \gamma^\mu \hat{S}_P = e^{-i\varphi} \underbrace{\gamma^0 \gamma^0}_{=\mathbb{1}_4} e^{i\varphi} \gamma^0$$

wieder hebt sich vieles weg, übrig bleibt:

$$= \gamma^0$$

dies ist aber auch gleich dem folgenden Ausdruck, der erfüllt sein muss:

$$= a^0_\nu \gamma^\nu$$

Für die drei anderen  $\gamma$ -Matrizen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{S}_P^{-1} \gamma^\mu \hat{S}_P &= e^{-i\varphi} \gamma^0 \gamma^k e^{i\varphi} \gamma^0 \\ &= -\gamma^k \end{aligned}$$

was aber ebenso zum korrekten Ergebnis der Transformationsgleichung führt:

$$= a^k_\nu \gamma^\nu$$

$\hat{S}_P$  transformiert damit richtig.  $\square$

Wir beschränken uns im Folgenden auf die Phase  $\varphi = 0$  des Paritätsoperators.

Wie transformiert sich die Dirac-Gleichung unter der Paritätstransformation? Die Parität ändert die 3-er-Vektoren von Impuls und Ort durch Spiegelung. Im Zentralfeld ändert sich durch die  $r$ -Spiegelung allerdings nichts. Wir müssen also nur für den Impuls die invertierten Operatoren  $\hat{p}'_k = -\hat{p}_k$  einsetzen:

$$\begin{aligned} \hat{S}_P^{-1} \hat{H}_D \hat{S}_P &= e^{-i\varphi} \gamma^0 \hat{H}_D(\hat{r}' = \hat{r}, \hat{p}'_k = -\hat{p}_k) e^{i\varphi} \gamma^0 \\ &= \gamma^0 \left( c \sum_{k=1}^3 \gamma_k (-\hat{p}_k) + \gamma^0 m_c^2 + V(\hat{r}) \right) \gamma^0 \end{aligned}$$

Durch die Eigenschaft  $\gamma^0 \gamma^k \gamma^0 = -\gamma^k$ , wird das Vorzeichen vor  $\hat{p}$  wieder vertauscht, womit wir den ursprünglichen Hamilton-Operator erhalten:

$$= \hat{H}_D$$

Das bedeutet, dass der Dirac'sche Hamilton-Operator, wie auch der nichtrelativistische, mit  $\hat{P}$  vertauscht:

$$[\hat{H}_D, \hat{S}_P]_- = 0$$

Die Lösung der Dirac-Gleichung ist damit auch eine Eigenfunktion bezüglich der Paritätsoperation.

### 9.5.2 Ansatz für die Lösung der Dirac-Gleichung

#### Separationsansatz

Wir spalten den 4-er Vektor wieder in zwei 2-er Vektoren auf, die Eigenfunktionen zum gleichen  $j$  und  $m$  sind. Mit den Quantenzahlen  $\pi = \pm 1$  für die Parität,  $j$  für den Drehimpuls  $\hat{J}^2$  und  $m$  als Magnetquantenzahl des Drehimpulses ( $z$ -Projektion,  $\hat{J}_z$ ) lautet der Ansatz:

$$\psi_{\pi jm} = \begin{pmatrix} \phi_{jlm}(\vec{r}, t) \\ \chi_{jl'm}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

Dabei soll  $\phi$  sich so schreiben, wie im nichtrelativistischen Fall, also separiert in Radialanteil, Winkelanteil (Kugelwellenfunktion), Spinanteil und Drehimpulskopplung (Clebsch-Gordon-Koeffizienten):

$$\phi_{jlm}(\vec{r}, t) = \sum_{m_l m_s} i g(r) Y_{lm_l} \xi_{\frac{1}{2} m_s} c(l, m_l, s, m_s, j, m_j) = i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi)$$

Denselben Ansatz machen wir für  $\chi$ , bis auf einen anderen Vorfaktor:

$$\chi_{jl'm} = -f(r) \Omega_{jl'm}(\vartheta, \varphi)$$

Die Spinfunktion  $\xi$  für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ist dabei durch die entsprechenden 2-er-Spinoren gegeben:

$$\xi_{\frac{1}{2} m_s} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \text{für } m_s = \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \text{für } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

#### Eigenwertgleichungen für die Lösungsanteile

Die Drehimpulskopplung verlangt die Drehimpulsbeziehung  $j = l \pm \frac{1}{2}$ ; ist  $j = \frac{1}{2}$ , so kommt nur  $l, l' \in \{0, 1\}$  in Frage. Da  $\psi_{\pi jm}$  Eigenzustand zu  $\hat{P}$ ,  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  ist, gelten die folgenden Eigenwertgleichungen:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \psi_{\pi jm} &= \hbar^2 j(j+1) \psi_{\pi jm} \\ \hat{J}_z \psi_{\pi jm} &= \hbar m \psi_{\pi jm} \\ \hat{P} \psi_{\pi jm} &= \pm \psi_{\pi jm} \end{aligned}$$

Den Eigenwert zu  $\hat{P}$  müssen wir erst noch verifizieren (bzw. die Abhängigkeit mit  $l$  und  $l'$ ).

*Beweis.* Setzen wir den Paritätsoperator (mit Phase  $\varphi = 0$ ) ein, so spiegeln sich einerseits die Ortsargumente:

$$\hat{P} \psi_{\pi jm} = \gamma^0 \psi_{\pi jm}(\vec{r}' = -\vec{r}, t' = t)$$

Wobei die explizite  $r$ -Abhängigkeit sich im Zentralfeld nicht tatsächlich ändert; allerdings muss die Winkelabhängigkeit auch gespiegelt werden:

$$= \gamma^0 \begin{pmatrix} i g(r) \Omega_{jlm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \\ -f(r) \Omega_{j'l'm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \end{pmatrix}$$

Diese Winkelspiegelung kann aber als Vorzeichen wieder herausgezogen werden:

$$= \begin{pmatrix} i g(r) (-1)^l \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \\ f(r) (-1)^{l'} \Omega_{j'l'm}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Es treten also, in Abhängigkeit von  $l$  und  $l'$  Faktoren auf, die jedoch letztlich nur das Vorzeichen ändern können. Damit haben wir die Eigenwerte des Paritätsoperators bestätigt:

$$= \pm \begin{pmatrix} i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \\ -f(r) \Omega_{j'l'm}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

□

Allerdings ergeben sich daraus Bedingungen für  $l$  und  $l'$ , damit beide Teillösungen  $\phi$  und  $\chi$  denselben Eigenwert besitzen:

Ist  $l$  gerade, so ist für  $\phi$   $\pi = +1$ , dann muss aber  $l'$  ungerade sein, damit auch die Teillösung  $\chi$  den Eigenwert  $\pi = +1$  ergibt (und umgekehrt).

Damit haben wir die Voraussetzungen geschaffen, um an die Lösung der Dirac-Gleichung gehen zu können. Wir versuchen das folgende Eigenwertproblem zu lösen:

$$\hat{H}_D \psi_{\pi jm} = E \psi_{\pi jm}$$

Schreiben wir den Ansatz von Seite 497 aus, so erhalten wir:

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 + \hat{V}(r) & c \vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} \\ -c \vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} & -m_0 c^2 + \hat{V}(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \\ -f(r) \Omega_{j'l'm}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \\ -f(r) \Omega_{j'l'm}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Um diese gekoppelten Differentialgleichungen lösen zu können benötigen wir erst ein paar Nebenrechnungen und Zwischenergebnisse.

**Behauptung.** Für beliebige 3-er-Vektoren  $\vec{A}$  und  $\vec{B}$  gilt:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma}(\vec{A} \times \vec{B})$$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) &= \sum_{jk} \sigma_j A_j \sigma_k B_k \\ &= \sum_{jk} A_j B_k \left( \frac{1}{2} (\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j) + \frac{1}{2} (\sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j) \right) \end{aligned}$$

Der erste  $\sigma$ -Term reduziert sich auf das Kronecker- $\delta$ , der zweite ist der Kommutator der  $\sigma$ -Matrizen, der (zyklisch) die „dritte“ Matrix ( $2i\sigma_l$ ) ergibt:

$$\begin{aligned} &= \sum_{jk} A_j B_k (\delta_{jk} + i\sigma_l) \\ &= \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma}(\vec{A} \times \vec{B}) \end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung bestätigt.  $\square$

Diese Formel nutzen wir für Zwischenergebnisse:

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r)(\vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r) &= \mathbf{1}_2 + i\vec{\sigma}(\vec{e}_r \times \vec{e}_r) \\ &= \mathbf{1}_2 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r)(\vec{\sigma} \cdot \hat{p}) &= \vec{e}_r \cdot \hat{p} + i\vec{\sigma}(\vec{e}_r \times \hat{p}) \\ &= \hat{p}_r + i\vec{\sigma} \frac{\vec{e}_r}{|\vec{r}|} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} + i\vec{\sigma} \frac{\vec{e}_r}{r} \end{aligned} \quad (2)$$

Außerdem ist:

$$(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r}) \Omega_{jlm} = -\Omega_{jl'm} \quad (3)$$

Damit kommen wir zur wichtigen

**Behauptung.** Es gilt folgende Eigenwertgleichung für  $\Omega_{jlm}$ :

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{L} \Omega_{jlm} = -(1 + \varkappa)\hbar \Omega_{jlm}$$

Mit:

$$\varkappa = \begin{cases} -(j + \frac{1}{2}) = -(l + 1), & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ j + \frac{1}{2} = l, & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

*Beweisskizze.* Mit:

$$\hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

und:

$$\hat{J}^2 = (\hat{L}^2 + \hat{S}^2) = \hat{L}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} + \hat{S}^2$$

gelangt man zu:

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{L} \Omega_{jlm} = \hbar(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}) \Omega_{jlm}$$

in die man die Fallunterscheidung für  $\varkappa$  einsetzt.  $\square$

**Formale Lösung**

Jetzt können wir uns der Matrix-Vektor-Multiplikation zuwenden, wie sie in unserer Dirac-Gleichung vorkommt.

Mit Hilfe der beiden Behauptungen, bzw. den Zwischenergebnissen (1)–(3) erhalten wir zwei Differentialgleichungen für die Ortsanteile der Lösung  $f(r)$  und  $g(r)$ :

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{p} i g(r) \Omega_{jlm} = -\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} g(r) + \frac{1+\kappa}{r} g(r) \right) \Omega_{jlm}$$

und:

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{p} (-f(r)) \Omega_{jlm} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1-\kappa}{r} f(r) \right) \Omega_{jlm}$$

Diese bringen uns direkt nichts, da das Potential nicht in die obigen Überlegungen einging. Allerdings sind sie nützlich, wenn wir sie in die Dirac-Gleichung einsetzen. Betrachten wir die zwei gekoppelten Differentialgleichungen der Dirac-Gleichung getrennt:

$$0 = \left( m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) - c \vec{\sigma} \cdot \hat{p} f(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \quad (1)$$

und die zweite Zeile:

$$0 = \left( -m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) (-f(r)) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) - c \vec{\sigma} \cdot \hat{p} i g(r) \Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi) \quad (2)$$

Hier können wir nun die obigen Beziehungen einsetzen; die für  $f$  in die erste Zeile:

$$0 = \left( m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) i g(r) \Omega_{jlm} - i\hbar c \left( \frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1-\kappa}{r} f(r) \right) \Omega_{jlm}$$

Herauskürzen von  $\Omega_{jlm}$ :

$$= \left( m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) i g(r) - i\hbar c \left( \frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1-\kappa}{r} f(r) \right) \quad (1')$$

Und die für  $g$  in die zweite Zeile eingesetzt:

$$0 = \left( -m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) (-f(r)) \Omega_{jlm} + \hbar c \left( \frac{\partial}{\partial r} g(r) + \frac{1+\kappa}{r} g(r) \right) \Omega_{jlm}$$

Herauskürzen von  $\Omega_{jlm}$ :

$$= \left( -m_0 c^2 + \hat{V}(r) - E \right) (-f(r)) + \hbar c \left( \frac{\partial}{\partial r} g(r) + \frac{1+\kappa}{r} g(r) \right) \quad (2')$$

Damit vereinfachen sich die zwei Differentialgleichungen durch das Herausfallen der  $\Omega_{jlm}(\vartheta, \varphi)$ .

Nun können wir, wenn wir für ein gegebenes Potential den Operator der potentiellen Energie in die Dirac-Gleichung einsetzen, die zwei gekoppelte Differentialgleichungen 1. Ordnung zur Bestimmung von  $f(r)$  und  $g(r)$  lösen.

**Wahrscheinlichkeitsdichte**

Während sich in der nichtrelativistischen Quantenmechanik die Wahrscheinlichkeitsdichte aus einem Term mit  $R_{nl}^2(r)$  ergab, setzt sie sich hier aus zweien zusammen:

$$\varrho(r) = g^2(r) - f^2(r)$$

Abbildung 9.4: Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichte in der „klassischen“ Quantenmechanik mit der relativistischen Quantenmechanik.



## 9.6 Ladung im elektromagnetischen Feld

Als Abschluss der Betrachtungen möchten wir noch kurz Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen im elektromagnetischen Feld behandeln. Dazu werfen wir zunächst einen Blick zurück auf die klassische Elektrodynamik.

### 9.6.1 Klassische Elektrodynamik

#### Maxwellgleichungen

Aus der klassischen Elektrodynamik kennen wir die Maxwellgleichungen mit ihren Konsequenzen.

Es gibt keine isolierten magnetischen Monopole:

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (1)$$

Magnetfeld  $\vec{B}$  und Vektorpotential  $\vec{A}$  hängen folgendermaßen zusammen, wobei sich der formale Zusammenhang  $\operatorname{div} \operatorname{rot} \equiv 0$  mit (1) ergibt:

$$\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A} \quad (1')$$

Aus dem Faraday'schen Induktionsgesetz folgt:

$$\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} = 0 \quad (2)$$

Mit (1') folgt:

$$\operatorname{rot} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right) = 0 \quad (2')$$

Das elektrische Feld  $\vec{E}$  wird durch ein elektrisches Potential  $\Phi$  erzeugt, ebenso führt aber auch ein sich zeitlich änderndes Magnetfeld zu einem  $\vec{E}$ -Feld, wie aus (2') ersichtlich ist:

$$\vec{E} = -\operatorname{grad} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \quad (2'')$$

Aus (2') und (2'') folgt, dass das elektrostatische Feld konservativ, bzw. wirbelfrei ist. Die Quellen und Senken des elektrischen Feldes ergeben sich aus Ladungsverteilungen  $\varrho(\vec{r})$ . Dies folgt letztlich aus dem Coulomb'schen Kraftgesetz:

$$\operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\varrho \quad (3)$$

Dabei fasst man die Beziehung (2'') für ein statisches Feld  $\vec{E} = -\operatorname{grad} \Phi$  und (3) gerne zur *Poisson-Gleichung* zusammen:

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \Phi = -4\pi\varrho \quad (3')$$

Im ladungsfreien Raum, mit  $\rho = 0$ , wird daraus die *Laplace-Gleichung*:

$$\Delta \Phi = 0 \quad (3'')$$

Beachtet man noch den elektrischen Strom  $\vec{j}$ , so erhält man die vierte Gleichung, die sich aus dem Maxwell'schen Verschiebungsstrom und dem Ampère'schen Gesetz zusammensetzt:

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (4)$$

Wichtig ist in diesem Zusammenhang auch die *Kontinuitätsgleichung* der Elektrodynamik, die besagt, dass sich die Ladungsverteilung nur ändern kann, wenn Ladung verschoben wird, also ein Strom fließt; sie beschreibt damit die Ladungserhaltung:

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4')$$

### Elektrodynamik und Mechanik

Die Wirkung des elektromagnetischen Feldes auf eine Ladung  $q$  wird durch die Kraft  $\vec{F}$  beschrieben, die das Feld auf sie ausübt. Die Wirkung des Magnetfeldes hängt dabei von der Geschwindigkeit der Ladung ab, die des elektrischen Feldes ist statisch:

$$\vec{F} = q \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad (5)$$

Diese Beziehung wird in der Literatur auch *Lorentz-Gleichung* genannt. Dabei ist der zweite Term die *Lorentzkraft*.

### Magnetfeld und Vektorpotential

Wir möchten nun prüfen, ob sich ein homogenes Magnetfeld  $\vec{B}$  durch das Vektorpotential  $\vec{A}$  beschreiben lässt.

**Beispiel (Homogenes Magnetfeld).** Prüfen wir nun, ob wir aus dem Vektorpotential  $\vec{A}$  den magnetischen Feldvektor  $\vec{B}$  gewinnen können:

*Beweis.* Mit dem homogenen Feld in  $z$ -Richtung:

$$\vec{B} = B \vec{e}_z$$

und der Beziehung:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$$

Folgt das Vektorpotential des Problems in vektorieller Schreibweise:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \times \vec{r} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -By \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$$

Setzen wir dieses Vektorpotential in (1') ein:

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \text{rot } \vec{A} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -By \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B - (-B) \end{pmatrix} \\ &= B\vec{e}_z\end{aligned}$$

□

### 9.6.2 Dirac-Gleichung

Nun möchten wir, mit Hilfe der klassischen Beziehungen, die Dirac-Gleichung um einen elektromagnetischen Potentialterm erweitern.

#### Vektorpotential

In der relativistischen Schreibweise fasst man das elektrische Potential  $\Phi$  und das Vektorpotential  $\vec{A}$  zu einem 4-er-Vektor  $\vec{A}$  zusammen. In kontravarianter Schreibweise lautet dieses 4-er-Vektorpotential:

$$A^\mu = \begin{pmatrix} \Phi \equiv A^0 \\ \vec{A} \equiv \begin{cases} A^1 \\ A^2 \\ A^3 \end{cases} \end{pmatrix}$$

Dies geschieht, um zum Ausdruck zu bringen, dass das gesamte Feld alleine durch diese vier Komponenten beschrieben werden kann. Dieser 4-er-Vektor genügt der *Lorentz-Eichung*:

$$\partial_\mu A^\mu = 0$$

Ausgeschrieben lautet sie:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi = 0$$

Man benötigt eine Eichung, da durch die Angabe von  $\vec{B}$  und  $\vec{E}$  das Vektorpotential  $\vec{A}$  nicht eindeutig festgelegt ist. Die folgende Erweiterung des Vektorpotentials lässt  $\vec{B}$  und  $\vec{E}$  nämlich unverändert:

$$(A')^\mu = A^\mu + \partial^\mu \lambda$$

Erst die Eichung sorgt für völlige Eindeutigkeit.<sup>33</sup>

<sup>33</sup>Dabei ist zu beachten, dass die Lorentz-Eichung nicht die einzig mögliche Eichung ist.

**Hamilton-Funktion**

Bauen wir weiter auf der Klassischen Mechanik auf.

Die klassische Hamilton-Funktion für ein freies Teilchen ist durch die kinetische Energie gegeben:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Im Hamilton-Formalismus berücksichtigt man eine Kraftkomponente durch *minimale Substitution*. Bezogen auf die Lorentz-Gleichung (5) bedeutet dies:

$$p^\mu \xrightarrow{\text{Minimale Substitution}} p^\mu - \frac{q}{c} A^\mu$$

Setzen wir für  $\vec{p}$  die minimale Substitution ein:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{2q\vec{p} \cdot \vec{A}}{2mc} + \frac{q^2}{2mc^2}\vec{A}^2 \end{aligned}$$

Der letzte Term beinhaltet die Energie des elektromagnetischen Feldes. Diese ist eine reine additive Konstante, die nicht von der Bewegung des Teilchens abhängt, so dass wir sie weglassen können. Drücken wir außerdem das Vektorpotential, wie im Beispiel, durch  $\vec{B}$  aus:

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r})$$

Der letzte Term ist ein Spatprodukt das umgestellt werden kann, denn das zyklische Vertauschen der Vektoren ändert das Spatprodukt nicht:

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p})$$

Damit kommt aber der Drehimpuls ins Spiel:

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\vec{B} \cdot \vec{l}$$

Der Term  $\vec{B} \cdot \vec{l}$  entspricht einem Kreisstrom, also einer stromdurchflossenen geschlossenen Leiterschleife.

Außer dem Impuls im Term der kinetischen Energie, erhalten wir auch den Drehimpuls in der Hamilton-Funktion. Dieser zweite Term entspricht der potentiellen Feldenergie für ein bewegtes Teilchen im  $\vec{B}$ -Feld.

### Hamilton-Operator

Bis hier sind unsere Überlegungen völlig klassisch. Den Übergang zur nicht-relativistischen Quantenmechanik machen wir wieder durch die Ersetzung der Observablen durch ihre entsprechenden Operatoren:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{q}{2mc}\hat{L}_z B_z$$

Die minimale Substitution führt uns also zum Hamilton-Operator, und damit zur Schrödinger-Gleichung unseres Systems.

### Dirac-Gleichung

Wenn die minimale Substitution von der Klassischen Mechanik in die Quantenmechanik übersetzen kann, so versuchen wir sie auch für die relativistische Quantenmechanik zu nutzen.

Den Übergang zur relativistischen Quantenmechanik mit der Dirac-Gleichung:

$$(\gamma^\mu p_\mu - m_0 c) \psi = 0$$

leisten wir also auch mit der minimalen Substitution:

$$\left(\gamma^\mu \left(p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu\right) - m_0 c\right) \psi = 0$$

Trennen wir die Dirac-Gleichung in einen zeitartigen und einen raumartigen Anteil auf:

$$\left(\gamma^0 \left(p_0 - \frac{q}{c} A_0\right) + \gamma^k \left(p_k - \frac{q}{c} A_k\right) - m_0 c\right) \psi = 0$$

und multiplizieren die Gleichung noch mit  $c$  durch. Schreiben wir dabei den Impuls und das Vektorpotential als klassischen Vektor, so müssen wir ein Minus herausziehen, da sie in obiger Formel kovariant sind:

$$\left(\gamma^0 \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right) - \vec{\gamma} \left(c\vec{p} - q\vec{A}\right) - m_0 c\right) \psi = 0$$

Multiplizieren wir noch mit  $\gamma^0$  durch, wobei  $(\gamma^0)^2 = \mathbf{1}_4$  und  $\gamma^0 \gamma_k = \alpha_k$  ist:

$$\left(\mathbf{1}_4 \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right) - \vec{\alpha} \left(c\vec{p} - q\vec{A}\right) - \gamma^0 m_0 c\right) \psi = 0$$

Zu beachten ist, dass  $\vec{\alpha}$  ein Vektor aus  $(4 \times 4)$ -Matrizen ist:

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{pmatrix}$$

Definieren wir noch die Abkürzung:

$$\vec{\pi} := c \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)$$

So haben wir alles, um einen Lösungsansatz für die Dirac-Gleichung machen zu können:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi - \vec{\pi} \cdot \vec{\alpha} - \gamma^0 m_0 c \right) \psi = 0$$

### Ansatz

Den Ansatz für die Wellenfunktion trennen wir wieder in zwei 2-er-Spinoren auf:

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$$

Das können wir in die Dirac-Gleichung einsetzen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = \vec{\pi} \cdot \vec{\alpha} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} + q\Phi \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} + m_0 c^2 \gamma^0 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \quad (\spadesuit)$$

Versuchen wir noch die relativistische Wellenfunktion:

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$$

durch die nichtrelativistische darzustellen, indem wir den relativistischen Teil in eine Exponentialfunktion packen. In der Schrödinger-Gleichung existiert die Ruheenergie nicht, wir ziehen also die „Energieverschiebung“, die durch den Ruheanteil zustande kommt, heraus:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Mit diesem Ansatz gehen wir wieder in die Dirac-Gleichung ():

$$\begin{aligned} i\hbar \left( -\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 \right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \\ = \left( \vec{\pi} \cdot \vec{\alpha} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + q\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + m_0 c^2 \gamma^0 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion kann aber herausdividiert werden; wenden wir außerdem  $\vec{\alpha}$  und  $\gamma^0$  auf den Lösungsvektor an, so erhalten wir:

$$m_0 c^2 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \vec{\pi} \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \chi \\ \vec{\sigma} \phi \end{pmatrix} + q\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \phi \\ -\chi \end{pmatrix}$$

Bringen wir noch die  $m_0c^2$ -Terme zusammen:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} + q\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + 2m_0c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ -\chi \end{pmatrix}} \quad (\diamond)$$

Damit erhalten wir die Dirac-Gleichung für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen im elektromagnetischen Feld.

### Nichtrelativistischer Grenzfall

Betrachten wir nun den Ansatz im nichtrelativistischen Grenzfall, d.h. wenn die Ruheenergie des Teilchens groß ist gegenüber der elektrostatischen Energie und der Energiekorrektur durch die Wellenfunktion  $\chi$ ; also für den Fall  $|\phi| \gg |\chi|$ , bzw.  $m_0c^2 \gg q\Phi$  und  $m_0c^2 \gg \Delta E = i\hbar\partial_t\chi$ .

Die zweite Zeile der Vektorgleichung  $(\diamond)$  lautet mit den Vereinfachungen des nichtrelativistischen Falls:

$$0 = c\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma}\phi - 2m_0c^2\chi$$

Nach  $\chi$  aufgelöst:

$$\chi = \frac{c\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma}}{2m_0c^2}\phi$$

Weil  $c\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \ll 2m_0c^2$  folgt, dass  $\chi$  klein ist gegenüber  $\phi$ . Setzen wir nun dieses Ergebnis für  $\chi$  in die erste Zeile von  $(\diamond)$  ein, so haben wir eine Differentialgleichung alleine für  $\phi$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\phi = c\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \frac{c\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma}}{2m_0c^2}\phi + q\Phi\phi \quad (\heartsuit)$$

Dieses Zwischergebnis deutet schon auf eine Schrödinger-Gleichung hin, allerdings stören die  $\vec{\sigma}$ -Vektoren im Term der kinetischen Energie. Der zweite Term steht für das elektrostatische Potential.

Klären wir zunächst, was das doppelte Skalarprodukt mit den Pauli-Matrizen ergibt. Dabei hilft uns die Beziehung von Seite 501, die besagt:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) = \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} + i\vec{\sigma}(\vec{\pi} \times \vec{\pi})$$

Zu beachten ist, dass  $\vec{\pi}$  aus Operatoren besteht, das Kreuzprodukt  $\vec{\pi} \times \vec{\pi}$  ist dadurch nicht zwangsweise null! Schreiben wir  $\vec{\pi}$  im Kreuzprodukt aus:

$$\begin{aligned} &= \vec{\pi}^2 + i\vec{\sigma} \left( \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) \times c \left( \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) \\ &= \vec{\pi}^2 \\ &\quad + i\vec{\sigma} \left( \underbrace{(-\hbar^2) \vec{\nabla} \times \vec{\nabla}}_{\substack{=\text{rot grad} \\ =0}} - \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \times \frac{q}{c}\vec{A} - \frac{\hbar}{i}\frac{q}{c}\vec{A} \times \vec{\nabla} + \left(\frac{q}{c}\right)^2 \underbrace{\vec{A} \times \vec{A}}_{=0} \right) \\ &= \vec{\pi}^2 - \frac{q\hbar}{c}\vec{\sigma} \left( \vec{\nabla} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{\nabla} \right) \end{aligned}$$

Nun müssen wir beachten, dass die Operatoren nicht nur auf  $\vec{A}$ , sondern auch auf eine Wellenfunktion wirken. Führen wir eine fiktive Wellenfunktion  $\Xi$  ein, nur um die Position zu markieren, so sieht die obige Zeile mit ausgeführter Produktregel folgendermaßen aus:

$$= \vec{\pi}^2 \Xi - \frac{q\hbar}{c} \vec{\sigma} \left( (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \Xi + (\vec{\nabla} \Xi) \times \vec{A} + \vec{A} \times (\vec{\nabla} \Xi) \right)$$

Der zweite Term ist aber das Negative des dritten Terms, so dass übrigbleibt:

$$= \vec{\pi}^2 - \frac{q\hbar}{c} \vec{\sigma} \left( \vec{\nabla} \times \vec{A} \right)$$

Da zuerst das Kreuzprodukt ausgeführt werden muss bevor die Klammer mit der Wellenfunktion „ausmultipliziert“ wird, können wir schreiben (außerdem ersetzen wir die Abkürzung  $\vec{\pi}^2$  wieder durch den eigentlichen Term):

$$= \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Dieses Ergebnis können wir nun in die Dirac-Gleichung (♥) einsetzen, wie wir sie im Übergang zum nichtrelativistischen Fall gefunden haben:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2m_0} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \phi + q\Phi \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \\ &= \left( \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{q}{2m_0 c} \vec{L} \cdot \vec{B} - \frac{q}{2m_0 c} 2\vec{S} \cdot \vec{B} + q\Phi \right) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dabei ist  $\vec{S}$  der Vektor der durch die drei Spinoperatoren  $\hat{S}_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$  gebildet wird.

Diese Gleichung identifizieren wir mit der Schrödinger-Gleichung. Die Dirac-Gleichung liefert also für den nichtrelativistischen Grenzfall die korrekte Bewegungsgleichung.

Die Gleichung liefert uns die Wechselwirkung sowohl vom Spin, als auch vom Bahndrehimpuls des Teilchens mit dem Magnetfeld. Allerdings wird der Spin mit dem zusätzlichen Faktor 2 belegt. Dieses *anomale magnetische Moment des Spins*<sup>34</sup> konnten wir bei seiner Einführung nur heuristisch angeben. Die relativistische Quantenmechanik liefert uns hier die Theorie dazu.

<sup>34</sup>Der Wert 2 stimmt nicht exakt. Präzisionsmessungen liefern eine kleine Abweichung von 2, die jedoch auch theoretisch durch Polarisationseffekte des Dirac-Sees erklärt werden kann.



# Anhang A

## Griechisches Alphabet

Im Skript verwenden wir nur diejenigen Buchstaben als griechische, die „echt griechisch“ aussehen. Ein A ist also immer das lateinische A. Bei den Kleinbuchstaben stehen alternative Formen in Klammern. Beim Phi nutzen wir das zur Unterscheidung:  $\varphi$  ist ein Winkel,  $\phi$  stellt eine Wellenfunktion dar.

Großbuchstabe	Kleinbuchstabe	Name
A	$\alpha$	Alpha
B	$\beta$	Beta
$\Gamma$	$\gamma$	Gamma
$\Delta$	$\delta$	Delta
E	$\varepsilon$ ( $\epsilon$ )	Epsilon
Z	$\zeta$	Zeta
H	$\eta$	Eta
$\Theta$	$\vartheta$ ( $\theta$ )	Theta
I	$\iota$	Jota
K	$\kappa$ ( $\kappa$ )	Kappa
$\Lambda$	$\lambda$	Lambda
M	$\mu$	My
N	$\nu$	Ny
$\Xi$	$\xi$	Xi
O	$\omicron$	Omikron
$\Pi$	$\pi$	Pi
P	$\rho$ ( $\rho$ )	Rho
$\Sigma$	$\sigma$	Sigma
T	$\tau$	Tau
$\Upsilon$	$\upsilon$	Ypsilon
$\Phi$	$\varphi$ ( $\phi$ )	Phi
X	$\chi$	Chi
$\Psi$	$\psi$	Psi
$\Omega$	$\omega$	Omega

Tabelle A.1: Griechisches Alphabet

## Anhang B

# Physikalische Konstanten

Die folgenden Naturkonstanten kommen im Skript vor.

<i>Zeichen</i>	<i>Wert</i>	<i>Bezeichnung</i>
$c$	$299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
$h$	$6,626\,075\,5(40) \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Planck'sches Wirkungsquantum
$\hbar := \frac{h}{2\pi}$	$1,054\,572\,66(63) \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Reduzierte Planck-Konstante
$\hbar$	$6,582\,122\,0(20) \cdot 10^{-22} \text{ MeV s}$	$\hbar$ in Einheiten der Kernphysik
$e$	$1,602\,177\,33(49) \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Elektronenladung (Elementarladungseinheit)
$m_e$	$0,510\,999\,06(15) \frac{\text{MeV}}{c^2}$	Elektronenmasse
$m_p$	$938,272\,31(28) \frac{\text{MeV}}{c^2}$	Protonenmasse
$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$	$5,788\,382\,63(52) \cdot 10^{-11} \frac{\text{MeV}}{\text{T}}$	Bohrsches Magneton
$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$	$3,152\,451\,66(28) \cdot 10^{-14} \frac{\text{MeV}}{\text{T}}$	Kernmagneton
$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$	$0,529\,177\,249(24) \cdot 10^{-10} \text{ m}$	Bohr'scher Radius

Tabelle B.1: Physikalische Konstanten (aus [Particles])

# Anhang C

## Zeichen und Symbolik

Die folgenden Tabellen listen die im Skript verwendeten (mathematischen) Zeichen und Schreibkonventionen auf. Ist ein Zeichen davon im Text selbst definiert oder explizit eingeführt worden, so wird in der Spalte „Definition“ die entsprechende Seitenzahl angegeben. Ein Anspruch auf Vollständigkeit besteht nicht, die Tabellen sollen mehr der Orientierung dienen.

<i>Zeichen</i>	<i>Beispiel/Definition</i>	<i>Einführung</i>	<i>Bedeutung</i>
$\langle \cdot \rangle$	$\langle f \rangle$	Seite 19	Erwartungswert
$\langle \cdot  $	$\langle \psi  $		Bra-Vektor (oder -Zustand)
$ \cdot \rangle$	$ \psi \rangle$		Ket-Vektor (oder -Zustand)
$\langle \cdot   \cdot \rangle$	$\psi(x) = \langle x   \psi \rangle$		Skalarprodukt
$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$		Einheitsmatrix
$A^*$	$(a + ib)^* := a - ib$		konjugiert komplexer Ausdruck
$A^T$	$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^T := \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$		transponierter Ausdruck
$A^\dagger$	$A^\dagger := (A^*)^T$		adjungierter Ausdruck

Tabelle C.1: Nomenklatur der Vektorräume und Matrizen.

<i>Zeichen</i>	<i>Definition</i>	<i>Bedeutung</i>
$\hat{A}$	Seite 31	Operatoren sind durch ein „Dach“ gekennzeichnet
$\hat{1}$		Eins-Operator (Identität)
$[\hat{A}, \hat{B}]_-$	$[\hat{A}, \hat{B}]_- := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$	Kommutator
$[\hat{A}, \hat{B}]_+$	$[\hat{A}, \hat{B}]_+ := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$	Antikommutator
$\{A, B\}$	Seite 37	Poisson-Klammer

Tabelle C.2: Operatoren und Operatorsymbole.

# Tabellenverzeichnis

3.1	Entartungsgrad . . . . .	187
3.2	Magische Zahlen . . . . .	188
4.1	Darstellungsarten der Spinfunktion für Elektronen . . . . .	212
4.2	Mögliche Zustände in gekoppelter und ungekoppelter Basis . . . . .	243
5.1	Spinkombinationen des Zweifermionen-Spin-0-Systems . . . . .	301
6.1	Die verschiedenen Bilder im Überblick . . . . .	318
7.1	Phasenverschiebung der asymptotischen Lösung . . . . .	383
8.1	Permutationen . . . . .	405
A.1	Griechisches Alphabet . . . . .	513
B.1	Physikalische Konstanten (aus [Particles]) . . . . .	514
C.1	Nomenklatur der Vektorräume und Matrizen . . . . .	515
C.2	Operatoren und Operatorsymbole . . . . .	516

# Abbildungsverzeichnis

1	Schematischer Aufbau des Doppelspalt-Experiments . . . . .	5
2	Verteilung der Kugeln bei abgedecktem linken Spalt . . . . .	5
3	Verteilung der Kugeln bei abgedecktem rechten Spalt . . . . .	5
4	Gesamtverteilung der Kugeln beim Doppelspalt . . . . .	6
5	Intensitätsverteilung beim Doppelspalt mit Lichtwellen . . . . .	7
6	Doppelspaltversuch mit Elektronen . . . . .	8
7	Photoeffekt . . . . .	12
8	Comptoneffekt . . . . .	13
9	Spektrum eines Schwarzen Körpers . . . . .	13
10	Stehende Wellen im Hohlraumstrahler . . . . .	13
1.1	Wahrscheinlichkeitsdichte . . . . .	17
1.2	Potentialverlauf . . . . .	20
1.3	Impuls-Wahrscheinlichkeitsdichte . . . . .	30
1.4	Kontinuitätsgleichung . . . . .	45
1.5	klassisch stationärer Zustand . . . . .	54
1.6	Konstantes Potential . . . . .	54
1.7	Stückweise konstantes Potential . . . . .	56
1.8	Sinus im Kasten . . . . .	59
1.9	Harmonischer Oszillator . . . . .	62
1.10	Lennard-Jones-Potential . . . . .	63
1.11	Energien in Parabel (S.102 Fließbach) . . . . .	71
2.1	Aufspaltung von $ \psi\rangle$ im 2-dimensionalen Vektorraum . . . . .	81
2.2	Nicht-orthogonale Basis . . . . .	83
2.3	Orthogonale Basis . . . . .	83
2.4	Orthogonale Basistransformation . . . . .	86
2.5	Sinus im Kasten . . . . .	104
2.6	Doppelspalt . . . . .	108
2.7	Häufigkeit der Energiezustände . . . . .	108
2.8	Energieverteilung mit Messung am Spalt und ohne Messung . . . . .	109
2.9	Diskretes Spektrum . . . . .	114
2.10	Vektorenbeispiel . . . . .	116
2.11	Generalisierte Koordinaten bei einer Rotation . . . . .	125
2.12	Minimum der Energie . . . . .	144
3.1	Klassische Drehimpulsvektoren . . . . .	153
3.2	Bild zu den Eigenwerten . . . . .	156
3.3	Eigenwerte in Parabel . . . . .	159

3.4	$j$ gegen $m$ abgetragen . . . . .	162
3.5	Koordinatensystem . . . . .	163
3.6	Topfpotential mit effektiven Potential . . . . .	180
3.7	Koordinatensystem . . . . .	181
3.8	Potentialverlauf . . . . .	184
3.9	Pauliprinzip . . . . .	188
3.10	Zweiteilchensystem von außen betrachtet . . . . .	189
3.11	Schematische Skizze der Energieniveaus im Wasserstoffatom . . . . .	195
3.12	Das Wasserstoffspektrum . . . . .	196
3.13	Wellenfunktionen . . . . .	196
3.14	Wellenfunktion für $l = 1, m = 0$ . . . . .	196
3.15	Wellenfunktion für $l = 1, m = \pm 1$ . . . . .	197
3.16	Wood-Saxon-Potential . . . . .	198
3.17	Iteration der Lösungskurve . . . . .	200
3.18	Kurve . . . . .	200
3.19	Potentialtopf . . . . .	200
3.20	Sphärisches Kastenpotential . . . . .	204
4.1	Polschuhe zur Erzeugung eines inhomogenen Magnetfelds . . . . .	207
4.2	Teilchenstrahl im Magnetfeld . . . . .	207
4.3	Kreisstrom . . . . .	208
4.4	Strahlaufspaltung . . . . .	209
4.5	Energietermschema von Silber . . . . .	210
4.6	Elektronen„bahnen“ am Beispiel von ${}^3\text{Li}$ . . . . .	210
4.7	Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am Kern . . . . .	210
4.8	Translation einer Wahrscheinlichkeitsverteilung . . . . .	218
4.9	Vertauschung der hintereinander ausgeführten Translationen . . . . .	221
4.10	Drehung um die $z$ -Achse . . . . .	222
4.11	Allgemeine Drehung . . . . .	227
4.12	Versuchsaufbau . . . . .	233
4.13	Filter $\hat{F}_{z-}$ . . . . .	234
4.14	Filter $\hat{F}_{z+}$ $\hat{F}_{z+}$ nacheinander . . . . .	235
4.15	Filter $\hat{F}_{z+}$ $\hat{F}_{z-}$ nacheinander . . . . .	235
4.16	Filter $\hat{F}_{z+}$ $\hat{F}_{x\pm}$ nacheinander . . . . .	235
4.17	Filter $\hat{F}_{z+}$ $\hat{F}_{x+}$ $\hat{F}_{z\pm}$ nacheinander . . . . .	236
4.18	Drehimpulsvektoraddition . . . . .	242
4.19	Elektron und Proton kreisen umeinander . . . . .	246
4.20	Wasserstoffspektrum mit Feinstruktur . . . . .	247
4.21	Spinflip . . . . .	248
4.22	Potentialtopf der Zustände . . . . .	248
5.1	Lösungen der Eigenwertgleichung in Abhängigkeit von $\lambda$ . . . . .	252
5.2	Graphische Lösung des Eigenwertproblems . . . . .	265
5.3	Wasserstoffatom im elektrostatischen Feld . . . . .	266
5.4	Energietermschema für $l = 0$ . . . . .	267
5.5	Spektroskopie der $(n = 2)$ -Zustände . . . . .	269
5.6	Linearer Stark-Effekt der $(n = 2)$ -Zustände . . . . .	269
5.7	Abschirmung der Elektronen im Lithiumatom . . . . .	269
5.8	Energietermschema . . . . .	271
5.9	Elektron im extrem starken $B$ -Feld . . . . .	271

5.10	Heliumatom . . . . .	276
5.11	Ortswellenfunktion zweier Elektronen im Helium-Atom . . . . .	277
5.12	Ein Elektron in Tübingen und ein Kollege in Sydney . . . . .	277
5.13	Besetzung der Energieniveaus im Atom . . . . .	281
5.14	Vergleich der Energieniveaus von Para- und Orthohelium . . . . .	284
5.15	Coulomb-Potential der 2 Atome, aus der Sicht eines Elektrons . . . . .	285
5.16	Energieaufspaltung bei kleiner werdenden Atomabständen . . . . .	286
5.17	Eigenzustand zum Eigenwert $\varepsilon - V$ . . . . .	287
5.18	Eigenzustand zum Eigenwert $\varepsilon + V$ . . . . .	287
5.19	Potential eines dreiatomigen Festkörpers . . . . .	288
5.20	$N$ Atome in gleichbleibendem Abstand . . . . .	288
5.21	Energieniveaus von Festkörpern . . . . .	289
5.22	Besetzung der Energieniveaus . . . . .	289
5.23	Richtung des Kristalls zum $E$ -Feld . . . . .	290
5.24	Energieverschiebung des niedrigeren Zustands . . . . .	290
5.25	Energieverschiebung des höheren Zustands . . . . .	290
5.26	Eindimensionaler, unendlich ausgedehnter Festkörper . . . . .	291
5.27	Erlaubte Energieeigenwerte, Bandstruktur . . . . .	294
5.28	Impulskomponenten der Wechselwirkung zweier Nukleonen . . . . .	295
5.29	Nukleon 1 sendet ein Meson aus . . . . .	296
5.30	Gesamtprozess des Mesonenaustausches . . . . .	296
5.31	Yukawa-Potential des Mesonenaustausches . . . . .	298
5.32	Energieübertrag im zeitlichen „Ablauf“ . . . . .	299
5.33	Prinzip des Experiments der Spinmessung . . . . .	300
6.1	Translation . . . . .	311
6.2	$c_2^2$ . . . . .	321
6.3	Maximum von $c_2^2$ . . . . .	321
6.4	Termschema für das Wasserstoffatom . . . . .	327
6.5	$\psi(\vec{x}'(t_0))$ zu $\psi(\vec{x}(t))$ . . . . .	329
6.6	Integration um Polstelle . . . . .	331
6.7	Green'sche Funktion . . . . .	336
6.8	Feynmandiagramm . . . . .	336
6.9	Wegintegrale in Teilschritten . . . . .	338
7.1	Schematischer Aufbau eines Streuexperiments . . . . .	343
7.2	Stoßparameter „ $b$ “ bei klassischer Behandlung der Streuung . . . . .	345
7.3	Zusammensetzung der auslaufenden Stromdichte . . . . .	347
7.4	Streuung der einlaufenden Welle am Target . . . . .	349
7.5	Verschiedene Streuwinkel beim Atomgitter . . . . .	349
7.6	Ortsvektoren beim Streuprozess . . . . .	359
7.7	Impulsvektoren und Winkel bei der Streuung . . . . .	361
7.8	Blackbox $\mathcal{T}$ zur Beschreibung von Mehrfachstreuprozessen . . . . .	364
7.9	In Vorwärtsrichtung „gestreute“ Teilchen . . . . .	367
7.10	Limesbildung an der Polstelle einer Funktion . . . . .	367
7.11	Zweifachstreuprozess . . . . .	375
7.12	Dreifachstreuprozess . . . . .	375
7.13	Feynman-Diagramme als Born'sche Reihe . . . . .	375
7.14	Formfaktor eines Protons . . . . .	381
7.15	Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für $l = 0$ . . . . .	383



7.16	„Zentrifugalpotential“ durch den Drehimpuls des Teilchens . . . .	384
7.17	Streuphase $\delta_l$ in Abhängigkeit der Projektilenergie . . . . .	384
7.18	Wellenfunktion in Abhängigkeit der Projektilenergie . . . . .	385
7.19	Vereinfachung der Darstellung für kurzreichweitige Potentiale . .	388
7.20	Proton-Nukleonkern-Streuexperiment . . . . .	390
7.21	Potentialanteile bei der Streuung von Protonen am Kern . . . . .	390
7.22	Nukleonenprojektil auf Atomkern-Target . . . . .	394
8.1	Viele Teilchen mit Ortsvektoren . . . . .	400
8.2	Niveauschema . . . . .	419
8.3	Coulomb-Wechselwirkung im Atom mit vielen Elektronen . . . .	433
8.4	Einteilchen-Potential . . . . .	439
8.5	Besetzte Einteilchen-Zustände . . . . .	439
8.6	Koeffizient $v_k$ . . . . .	445
8.7	Energieniveaus des Wasserstoff-Atoms . . . . .	446
8.8	Kern-Schalenmodell für $^4\text{Helium}$ . . . . .	446
8.9	Schalenmodell der Baryonenkonstituenten . . . . .	446
8.10	Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Fermionen und von Bosonen .	447
9.1	Relativistisch bewegtes Teilchen in verschiedenen Koordinaten . .	479
9.2	Vielteilchensystem als Quasiteilchen-Vakuum . . . . .	495
9.3	Anheben eines Teilchens aus dem Quasiteilchen-Vakuum . . . . .	495
9.4	Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichten . . . . .	504

# Literaturauswahl

## Quantenmechanik

- [Cohen-1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë:  
*Quantenmechanik*, Teil 1  
Walter de Gruyter, 1997
- [Cohen-2] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë:  
*Quantenmechanik*, Teil 2  
Walter de Gruyter, 1997
- [Messiah-1] Albert Messiah:  
*Quantenmechanik*, Teil 1  
Walter de Gruyter, 2. Auflage, 1991
- [Messiah-2] Albert Messiah:  
*Quantenmechanik*, Teil 2  
Walter de Gruyter, 3. Auflage, 1990
- [Fließbach] Torsten Fließbach:  
*Quantenmechanik*  
Spektrum Akademischer Verlag, 2. Auflage, 1995
- [Feynman] Richard P. Feynman:  
Vorlesungen über Physik Band 3: *Quantenmechanik*  
Oldenbourg, 1988
- [Sakurai-1] Jun John Sakurai:  
*Modern Quantum Mechanics*  
Addison-Wesley, revised edition, 1994
- [Sakurai-2] Jun John Sakurai:  
*Advanced Quantum Mechanics*  
Addison-Wesley, tenth printing, 1984
- [Schwabl-1] Franz Schwabl:  
*Quantenmechanik: QM I*  
Springer-Verlag, 5. Auflage, 1998
- [Schwabl-2] Franz Schwabl:  
*Quantenmechanik für Fortgeschrittene: QM II*  
Springer-Verlag, 1997
- [Dawydow] A.S. Dawydow:  
*Quantenmechanik*  
Barth Verlagsgesellschaft mbH, 8. Auflage, 1992

### Mechanik

- [Bergmann-1] Ludwig Bergmann, Clemens Schäfer:  
Lehrbuch der Experimentalphysik Band 1: *Mechanik, Akustik, Wärme*  
Walter de Gruyter, 10. Auflage, 1990

### Atom- und Kernphysik

- [Bergmann-4] Ludwig Bergmann, Clemens Schäfer:  
Lehrbuch der Experimentalphysik Band 4: *Teilchen*  
Walter de Gruyter, 1992
- [Griffiths] David Griffiths:  
*Einführung in die Elementarteilchenphysik*  
Akademie Verlag, 1. Auflage 1996
- [Povh] Bogdan Povh, Klaus Rith, Christoph Scholz, Frank Zetsche:  
*Teilchen und Kerne*  
Eine Einführung in die physikalischen Konzepte  
Springer-Verlag, 3. Auflage, 1995
- [Haken/Wolf] Hermann Haken, Hans Christoph Wolf:  
*Atom- und Quantenphysik*  
Springer-Verlag, 4. Auflage, 1990
- [Particles] Particle Data Group:  
*Particle Physics Booklet*  
American Institute of Physics, July 1996

### Numerische Physik

- [Schmid] Erich W. Schmid, Gerhard Spitz, Wolfgang Lösch:  
*Physikalische Simulationen mit dem Personalcomputer*  
Springer-Verlag, 2. Auflage, 1993

### Mathematik

- [Heuser-1] Harro Heuser:  
*Lehrbuch der Analysis, Teil 1*  
Teubner – Mathematische Leitfäden, 11. Auflage, 1994
- [Heuser-2] Harro Heuser:  
*Lehrbuch der Analysis, Teil 2*  
Teubner – Mathematische Leitfäden, 9. Auflage, 1995
- [Heuser-3] Harro Heuser:  
*Gewöhnliche Differentialgleichungen*  
Teubner – Mathematische Leitfäden, 3. Auflage, 1995
- [Kaul-1] Helmut Fischer, Helmut Kaul:  
*Mathematik für Physiker, Band 1*  
Teubner – Studienbücher, 2. Auflage, 1990
- [Bronstein] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew:  
*Taschenbuch der Mathematik*  
Verlag Harri Deutsch, 1989

**Sonstige zitierte Literatur**

- [Hermann] Armin Hermann:  
*Einstein*  
Der Weltweise und sein Jahrhundert – Eine Biographie  
Piper, 1994
- [Grätzer] George A. Grätzer:  
*Math into L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X* – An Introduction to L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X and A<sub>M</sub>S-L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X  
Birkhäuser, 1996