

Quantenmechanik I

Skript zur Vorlesung von Prof. Dr. W. Rühl

Wintersemester 2000/2001

Inhaltsverzeichnis

1 Die begriffliche Struktur der Quantenmechanik	3
1.1 Rückblick auf die klassische Mechanik	3
1.2 Die Zustände und Observablen der Quantenmechanik	4
1.3 Die Observablenalgebra des linearen harmonischen Oszillators	8
1.4 Die statistischen Ensembles der Quantenmechanik	11
1.5 Die Präparation von Zuständen	16
2 Koordinaten- und Impulsmessungen	17
2.1 Die Schrödinger-Realisierung der Heisenberg-Algebra	17
2.2 Impuls- und Koordinaten-Operatoren für ein Teilchen	21
2.3 Freies Teilchen in einem Kasten	26
2.4 Entartung, Vertauschbarkeit von Operatoren und die simultane Mes- sung von Observablen	27
2.5 Der Drehimpuls, algebraisch	30
2.6 Der Bahndrehimpuls, analytisch	32
2.7 Ebene Welle und Kugelwellen	37
2.8 Unschärferelationen	42
2.9 Thermische Gesamtheit und andere gemischte Zustände	44
3 Die Dynamik	46
3.1 Die Schrödingergleichung	46
3.2 Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion freier Teilchen	49
3.3 Die Greensche Funktion für das Anfangswertproblem	53
3.4 Das Ehrenfestsche Theorem und die Erhaltungsgrößen	55
3.5 Eindimensionale Probleme	57
3.6 Das Wasserstoffatom	63
3.7 Die Streuphasen	68
3.8 Wirkungsquerschnitt und Streuamplitude	73
3.9 Die Streuung am Coulomb-Potential	78
4 Näherungsverfahren	81
4.1 Die Bornsche Reihe für die Streuamplitude	81
4.2 Die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie für diskrete Spektren	85
4.3 Ein Beispiel: Der normale Zeemann-Effekt	94
5 Der Spin des Elektrons	96
5.1 Die Beschreibung des Spin-Freiheitsgrades (klassisch)	96
5.2 Die Beschreibung des Spin-Freiheitsgrades (quantenmechanisch)	97
5.3 Der Gesamtdrehimpuls des Elektrons	100
5.4 Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms	102
A Mathematische Erläuterungen	107
A.1 Fourier-Theorem	107
A.2 Spektralsatz	108
A.3 Weierstraß-Approximation für Kugelfunktionen	109

1 Die begriffliche Struktur der Quantenmechanik

1.1 Rückblick auf die klassische Mechanik

Die nichtrelativistische Quantenmechanik, mit der wir uns hier auseinandersetzen, befasst sich mit punktförmigen Teilchen und deren Wechselwirkungen untereinander, sowie mit äusseren Potentialen. Die Geschwindigkeit dieser Teilchen soll klein gegen die Lichtgeschwindigkeit ($v \leq 1/100c$) sein. Die Quantenmechanik korrespondiert in einem später zu präzisierenden Sinne mit der klassischen Mechanik von Punkt – Teilchen. Wir werden uns im Laufe der Vorlesung genauestens mit der Struktur der Quantenmechanik der physikalischen Theorie auseinandersetzen zu haben. Daher erscheint es zweckmäßig, zunächst einmal die Struktur der klassischen Mechanik ins Gedächtnis zu rufen.

Ein System mit N Freiheitsgraden (sei es konservativ und holonom) wird beschrieben durch kanonische Koordinaten

$$q_1, q_2, \dots, q_N$$

und Impulse

$$p_1, p_2, \dots, p_N,$$

d. h. die $2N$ Parameter

$$\{(p_i, q_i)\}_{i=1}^N$$

beschreiben einen Zustand des Systems. Tatsächlich bilden die Zustände eine $2N$ -dimensionale Mannigfaltigkeit im Sinne der Differentialgeometrie.

An einem System lassen sich Messungen durchführen. Das bedeutet, daß nach einem Zahlenwert einer Meßgröße oder Observable gefragt wird. Beispiele sind Impuls (je eine der drei Komponenten), Drehimpuls, ebenso Energie, kinetische Energie, irgendeine Kraftkomponente. Alle diese Observablen werden beschrieben durch eine reelle Funktion der kanonischen Koordinaten und Impulse

$$F(p_i, q_i)$$

Die Observablen erzeugen somit eine Funktionenalgebra, die Observablenalgebra; das ist die Algebra der stetigen Funktionen von $\{(p_i, q_i)\}$ unter der gewöhnlichen Addition und Multiplikation. Apropos Stetigkeit: zwei Massenpunkte mit Coulombwechselwirkung besitzen die Menge der Zustände

$$\{(\vec{x}_1, \vec{p}_1), (\vec{x}_2, \vec{p}_2) | \vec{x}_1 \neq \vec{x}_2\},$$

so daß die möglichen Punkte der Unstetigkeit von vornherein ausgeschlossen werden.

Die experimentelle Beobachtung eines Zustandes macht in der klassischen Mechanik keine begrifflichen Schwierigkeiten. Es ist zwar klar, daß eine Beobachtung (Messung) einen Eingriff darstellt, daß dieser aber beliebig klein gehalten werden kann und damit das System sich vor und nach der Messung in beliebig nahe liegenden Zuständen befindet. Ob und wie man ein System in einen vorgegebenen Zustand bringen kann (Präparation), ist in der klassischen Mechanik trivial.

Schließlich ist eine zentrale Frage der theoretischen Physik, wie sich ein System zeitlich entwickelt (Dynamik), und welche Meßwerte eine Observable dabei annehmen wird (Vorhersage). In der klassischen Mechanik wird die Dynamik bestimmt durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p_i, q_i)$$

und die Differentialgleichungen erster Ordnung (Bewegungsgleichungen)

$$\begin{aligned}\dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \\ \dot{q}_i &= +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}.\end{aligned}$$

Diese Gleichungen werden gelöst durch die Vorgabe von Anfangswerten bei $t = 0$

$$p_i(0), q_i(0)$$

Die Vorhersage geschieht durch Einsetzen der Lösung $p_i(t), q_i(t)$ in die Observable F

$$F : F(p_i(t), q_i(t))$$

Die klassische Mechanik ist determiniert:

Falls die Bewegungsgleichungen eine Lipschitz-Bedingung erfüllen (Stetigkeit von \mathcal{H} ist nicht ausreichend), ist auch die Lösung $p_i(t), q_i(t)$ eindeutig durch die Anfangswerte (auch „Cauchy-Daten“) bestimmt und der vorhergesagte Wert von F ebenfalls eindeutig.

Wir sehen, daß die begriffliche Struktur der Quantenmechanik zwar ebenfalls über die fundamentalen sechs Begriffe

- Zustand
- Observable
- Messung
- Präparation
- Dynamik
- Vorhersage

verfügt, aber diesen Begriffen solche mathematischen Objekte bzw. Operationen zuordnet, daß eine grundsätzlich andere Theorie resultiert. Die Struktur der Quantenmechanik ist viel reichhaltiger. Man muß sich an eine neue Art zu denken gewöhnen, was umso leichter fällt, je weniger man die begrifflichen Strukturen der klassischen Mechanik für selbstverständlich akzeptiert.

1.2 Die Zustände und Observablen der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik gibt es zwei Arten von Zuständen:

1. reine Zustände
2. gemischte Zustände (Zustandsgemische)

Wir werden uns zunächst auf die reinen Zustände beschränken. Aus den experimentellen Erfahrungen, speziell dem Doppelspalt-Beugungsexperiment mit Elektronen, weiß man, daß sich Zustände linear superponieren können. Man ist daher zum Schluß gekommen, daß Zustände als Elemente eines komplexen Vektorraumes zu beschreiben sind. Ein solcher Vektorraum

$$\mathcal{V} = \{\phi\}$$

sei gegeben. Er hat folgende Eigenschaften:

1. $\phi_{1,2} \in \mathcal{V} \Rightarrow \phi_1 + \phi_2 \in \mathcal{V}$
 Gruppenstruktur bezüglich der Addition
 Nullvektor ist neutrales Element
2. $\phi \in \mathcal{V}, \lambda \in \mathbb{C} \Rightarrow \lambda\phi \in \mathcal{V}$
 „skalare Multiplikation“
 Es gelten Distributivgesetze der Addition und Multiplikation,
 ferner $0 \cdot \phi = \text{Nullvektor}$

Wichtig für die Quantenmechanik ist, daß dieser Raum \mathcal{V} noch ein Skalarprodukt tragen muß

$$\begin{aligned} \phi_{1,2} \in \mathcal{V} &\Rightarrow (\phi_1, \phi_2) \in \mathbb{C} \\ a \in \mathbb{C} : & (\phi_1, a\phi_2) = a(\phi_1, \phi_2) \\ \text{oder :} & (a\phi_1, \phi_2) = \overline{a}(\phi_1, \phi_2) \\ & (\phi_1, \phi_2) = \overline{(\phi_2, \phi_1)} \end{aligned}$$

Die Dimension des Vektorraums ist verschieden, entweder endlich (dann nennen wir den Raum \mathbb{C}^n) oder unendlich (dann sprechen wir von einem Hilbert-Raum). Das Skalarprodukt impliziert eine Topologie:

$$\begin{aligned} \|\phi\|^2 = (\phi, \phi) &\geq 0 \quad (= 0 \text{ für den Nullvektor}) \\ \|\phi_1 - \phi_2\| &\text{ ist ein Abstand,} \\ \{\phi; \|\phi - \phi_0\| \leq \varepsilon\} &\text{ ist eine Kugel mit Radius } \varepsilon \text{ um } \phi_0 \end{aligned}$$

Betrachten wir zwei Beispiele. Der \mathbb{C}^2 kann als Raum

$$\mathbb{C}^2 = \left\{ \phi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; \alpha, \beta \in \mathbb{C} \right\}$$

verstanden werden. Dann ist

$$\begin{aligned} (\phi_2, \phi_1) &= \overline{\alpha_2}\alpha_1 + \overline{\beta_2}\beta_1 \\ &= (\overline{\alpha_2}, \overline{\beta_2}) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \quad (\text{Matrixmultiplikation}) \end{aligned}$$

Ein anderes Beispiel ist der Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ von quadratintegrablen Funktionen

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{C}^1 \\ (\phi_1, \phi_2) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \overline{\phi_1(x)} \phi_2(x) \end{aligned}$$

Solche Vektoren ϕ heißen auch Wellenfunktionen, während Vektoren aus \mathbb{C}^2 z. B. Spinzustände eines Elektrons beschreiben.

Bei unendlich dimensionalen Unterräumen treten typische Schwierigkeiten auf. Zunächst müssen solche Unterräume vollständig sein, d. h. jede Cauchyfolge muß gegen einen Grenzwert streben, der dem Raum angehört. Der Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ist vollständig in diesem Sinne. Benutzen wir als Basis in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ eine Folge von ∞ -differenzierbaren Funktionen (wir werden eine solche Basis später kennenlernen),

$$\{\phi_i, i \in \mathbb{N}\}$$

so erscheinen als Grenzwerte auch Funktionen, die nicht differenzierbar sind. Zwei verschiedene Funktionen, deren Abstand verschwindet,

$$0 = \|\phi_a - \phi_b\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\phi_a(x) - \phi_b(x)|^2$$

die sich daher nur auf einer Menge vom Maß null unterscheiden, sind als Vektoren des $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ als gleich anzusehen bezüglich der Äquivalenz. Vektoren von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ sind durch Klassen $\{\phi\}, |\phi_1 - \phi_2| = 0$ charakterisiert. Wir werden später sehen, daß reine Zustände durch Klassen $\{\phi\}, \phi_1 = e^{i\alpha}\phi_2, |\phi| = 1$, charakterisiert werden.

Wir wollen nun zu den Observablen übergehen. Observable werden durch lineare selbstadjungierte Operatoren auf den Zustandsräumen dargestellt. Sei $\phi, \psi \in \mathcal{V}, \alpha \in \mathbb{C}$. A ist linear, falls

$$\begin{aligned} A(\phi) &\in \mathcal{V} \quad \text{und} \\ A(\phi) + A(\psi) &= A(\phi + \psi) \\ A(\alpha\phi) &= \alpha A(\phi) \end{aligned}$$

Die Eigenschaft der Selbstadjungiertheit ist nur bei den \mathbb{C}^n einfach, bei den Hilbert-Räumen aber ziemlich kompliziert. Auf den \mathbb{C}^n ist A selbstadjungiert, falls

$$(\phi_1, A\phi_2) = (A\phi_1, \phi_2)$$

für alle $\phi_1, \phi_2 \in \mathcal{V}$. Seien $\phi_i, i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ eine Basis in \mathbb{C}^n . Dann ist

$$A\phi_i = \sum_j a_{ji}\phi_j$$

und die $\{a_{ij}\}$ bilden die Matrix des Operators bezüglich der Basis $\{\phi_i\}$. Diese Matrix ist hermitesch, falls A selbstadjungiert ist

$$\begin{aligned} (\phi_j, A\phi_i) &= (A\phi_j, \phi_i) = \overline{(\phi_i, A^+\phi_j)} \\ &\Rightarrow a_{ji} = \overline{a_{ij}} \end{aligned}$$

Falls der Hilbert-Raum (wie $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$) ∞ -dimensional ist, unterscheiden sich beschränkte von unbeschränkten Operatoren wesentlich:

$$\sup_{\phi \in \mathcal{V}} \frac{|A\phi|}{|\phi|} \quad \begin{cases} = \infty & \text{unbeschränkt} \\ < \infty & \text{beschränkt} \end{cases}$$

- beschränkt: A ist auf dem ganzen Hilbert-Raum definiert, Selbstadjungiertheit wie bei endlich-dimensionalen Hilberträumen
- unbeschränkt: A ist auf einem dichten Unterraum definiert. Wir müssen A abschließen. Dann ist A selbstadjungiert, falls $A^+ = A$.

Gerade unbeschränkte Operatoren sind aber in der Physik sehr häufig. Sie sind dann nur auf einem Unterraum definierbar, der im ganzen Raum dicht liegt. $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ist der Raum aller meßbaren Funktionen, die quadratintegrabel sind. Als Beispiel betrachten wir den Operator

$$\frac{d}{dx} \quad \text{in } \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$$

Er ist z. B. definierbar auf dem Unterraum aller differenzierbaren Funktionen aus $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, deren Ableitung ebenfalls in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ liegt. Natürlich ist durch partielle Integration

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\overline{\phi_1(x)} \frac{d}{dx} \phi_2(x) \right) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d}{dx} \overline{\phi_1(x)} \phi_2(x),$$

da für quadratintegrale differenzierbare Funktionen notwendigerweise gilt

$$\begin{aligned} \phi' &\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}), \phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \\ 2 \int_0^x d\xi \phi'(\xi)\phi(\xi) &\text{ existiert für alle } x \\ &= \phi^2(x) - \phi^2(0) \\ \Rightarrow \lim_{x \rightarrow \infty} \phi^2(x) &\text{ existiert } (= \phi^2(\infty)) \\ \text{und } \int_0^\infty d\xi |\phi^2(\xi)|^2 &\text{ existiert} \\ &\Rightarrow \phi^2(\infty) = 0 \\ \Rightarrow \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) &= 0. \end{aligned}$$

Wir sehen, daß $\pm i \frac{d}{dx}$ ein selbstadjungierter unbeschränkter Operator auf $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ist.

Sei der Hilbert-Raum der quadratintegralen Funktionen auf dem Einheitskreis gegeben,

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^1) = \left\{ \phi(\alpha), 0 \leq \alpha \leq 2\pi, \phi(\alpha) = \phi(2\pi + \alpha), \|\phi\|^2 = \int_0^{2\pi} d\alpha |\phi(\alpha)|^2 < \infty \right\}.$$

In diesem Raum ist $\left\{ e^{in\alpha} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, n \in \mathbb{Z} \right\}$ eine Basis. Der Operator $-i \frac{d}{d\alpha}$ entspricht auf dieser Basis der diagonalen Matrix $a_{nn'} = n \cdot \delta_{nn'}$, da

$$-i \frac{d}{d\alpha} \left(e^{in\alpha} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) = n \cdot e^{in\alpha} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Wieder ist dieser Operator definierbar auf allen Funktionen, deren Ableitung existiert und selbst quadratintegral ist.

Die Observablen eines quantenmechanischen Systems bilden eine Algebra von Operatoren auf einem Hilbert-Raum (die auf einem hinreichend kleinen, aber immer noch dichten Unterraum definiert ist). Diese Algebra heißt Observablenalgebra. Allen Operatorenalgebren quantenmechanischer Systeme von Massenpunkten sind Operatoren

$$P_i, Q_i, \quad i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

gemeinsam, die den Vertauschungsrelationen

$$P_i Q_j - Q_j P_i = \frac{\hbar}{i} \mathbf{I} \delta_{ij}, \quad \mathbf{I} : \text{Einheitsoperator}$$

genügen. Die Algebra aus Polynomen der P_i, Q_j (und des Einheitsoperators) heißt eine Heisenberg-Algebra. Im allgemeinen bildet die Heisenberg-Algebra eine Unter-algebra der Observablenalgebra. Diese P_i, Q_j entsprechen den (lokalen) Koordinaten p_i, q_j des „korrespondierenden“ klassischen Systems im „Phasenraum“ (kanonischer Formalismus) bezüglich des kartesischen Koordinatensystems in \mathbb{R}^{3n} . Dann genügen diese p_i, q_j den Poissonklammern

$$\{p_i, q_j\}_{Poisson} = -\delta_{ij}$$

Die Poissonklammern definieren eine schiefe Form auf der klassischen Observablenalgebra, entsprechend definieren die Vertauschungsrelationen eine schiefe Form auf der quantenmechanischen Observablenalgebra. Sei $F(P, Q)$ ein Polynom in den P_i, Q_j , $G(P, Q)$ ebenso. Dann ist der Kommutator

$$F(P, Q)G(P, Q) - G(P, Q)F(P, Q) = [F, G](P, Q),$$

der sich aus $[P_i, Q_j] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{I} \delta_{ij}$ berechnen läßt. Zunächst seien in F, G die Monome so geordnet, daß die P s links stehen, die Q s rechts:

$$\prod_i P_i \cdot \prod_j Q_j$$

Dann müssen wir zeigen, wie man

$$\left[\prod_i P_i \cdot \prod_j Q_j, \prod_k P_k \cdot \prod_l Q_l \right]$$

ausrechnet.

1.3 Die Observablenalgebra des linearen harmonischen Oszillators

... ist eine Heisenberg-Algebra mit $N = 1$, d. h.

$$PQ - QP = \frac{\hbar}{i} \mathbf{I}$$

In dieser Algebra ist das Polynom

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu} P^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 Q^2$$

ausgezeichnet. Dies ist der Hamilton-Operator, der, wie wir später sehen werden, die Dynamik des Systems bestimmt. Wir werden weiter erkennen, daß diesem System das klassische System mit der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2\mu} p^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 q^2$$

entspricht (μ : Masse, ω : Kreisfrequenz des klassischen linearen harmonischen Oszillators). Wir werden entsprechend P den Impuls- und Q den Ortsoperator nennen.

Wir wollen uns zunächst die Aufgabe stellen, nach einer Hilbert-Raum-Realisierung der Operatoren P, Q zu suchen. Wir definieren zwei neue Operatoren:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} Q + \frac{i}{(\mu\omega\hbar)^{\frac{1}{2}}} P \right]$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} Q - \frac{i}{(\mu\omega\hbar)^{\frac{1}{2}}} P \right]$$

Sollen in der Hilbert-Raum-Darstellung Q, P selbstadjungiert werden, so muß a^+ der adjungierte Operator zu a werden

$$(a^+ \phi_1, \phi_2) = (\phi_1, a \phi_2)$$

für alle $\phi_{1,2}$ (aus dem Definitionsbereich von P, Q). Wir berechnen

$$\begin{aligned} N = a^+ a &= \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar\omega} \left\{ \frac{P^2}{\mu} + \mu\omega^2 Q^2 \right\} - \frac{i}{2\hbar} (PQ - QP) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \mathcal{H} - \frac{1}{2} \mathbf{I} \end{aligned}$$

sowie (ohne neue Bezeichnung)

$$aa^+ = \frac{1}{\hbar\omega}\mathcal{H} + \frac{1}{2}\mathbf{I}$$

Wir bekommen als neue Vertauschungsrelation

$$aa^+ - a^+a = \frac{1}{2}\mathbf{I} + \frac{1}{2}\mathbf{I}$$

sowie

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

Wenn A ein selbstadjungierter Operator ist, so nennen wir α einen Eigenwert, ϕ_α einen Eigenvektor, falls

$$A\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha, \quad \phi_\alpha \neq 0$$

α ist notwendigerweise reell. Wir suchen nach den Eigenvektoren und -werten von N . Sei angenommen, daß

$$N\phi_\lambda = \lambda\phi_\lambda, \quad \phi_\lambda \neq 0, \text{ z. B. } |\phi_\lambda| = 1$$

Wir betrachten den Vektor $a\phi_\lambda$. Dann ist

$$\begin{aligned} N(a\phi_\lambda) &= (a^+a)a\phi_\lambda \\ &= (aa^+ - \mathbf{I})a\phi_\lambda \\ &= a[(a^+a) - \mathbf{I}]\phi_\lambda \\ &= a \cdot (\lambda - 1)\phi_\lambda \\ &= (\lambda - 1)a\phi_\lambda \end{aligned}$$

Also ist $a\phi_\lambda$ entweder Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda - 1$ oder der Nullvektor. Ist $\|a\phi_\lambda\| \neq 0$, so setzen wir

$$\phi_{\lambda-1} = \frac{a\phi_\lambda}{\|a\phi_\lambda\|}$$

und wiederholen danach die Operation. Wenn a^+ der adjungierte Operator von a ist, so ist $a^+a = N$ ein positiver Operator. Für positive Operatoren ist

$$(\phi, A\phi) \geq 0 \quad \text{für alle } \phi \text{ (aus dem Definitionsbereich)}$$

also ist

$$\begin{aligned} \|a\phi_\lambda\|^2 &= (a\phi_\lambda, a\phi_\lambda) \\ &= (\phi_\lambda, a^+a\phi_\lambda) \\ &= (\phi_\lambda, N\phi_\lambda) \\ &= \lambda(\phi_\lambda, \phi_\lambda) \\ &= \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

Falls $\lambda > 0$ ist, muß also auch $\lambda - 1 \geq 0$ gelten. Das bedeutet aber, daß irgendeinmal null erreicht wird, d. h. es gibt ein $m \in \mathbb{N}$, so daß $\lambda - m = 0$. Es gibt dann ein ϕ_0 , so daß

$$\begin{aligned} N\phi_0 &= 0 \rightarrow (\phi_0, N\phi_0) = \|a\phi_0\|^2 = 0 \\ a\phi_0 &= 0 \\ \|\phi_0\| &= 1 \end{aligned}$$

Sei ϕ_n bis auf eine Phase $e^{i\alpha}$ definiert durch

$$\begin{aligned} N\phi_n &= n\phi_n \\ \|\phi_n\| &= 1, \end{aligned}$$

dann ist

$$\begin{aligned} Na^+\phi_n &= (a^+a)a^+\phi_n \\ &= a^+(a^+a + \mathbf{I})\phi_n \\ &= (n+1)a^+\phi_n \\ \|a^+\phi_n\| &= (\phi_n, aa^+\phi_n) \\ &= (n+1)|\phi_n|^2 \\ &= n+1. \end{aligned}$$

Wir definieren daher

$$\phi_{n+1} = \frac{a^+\phi_n}{\sqrt{n+1}}$$

und bekommen durch Auflösen der Rekursion

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\phi_0.$$

Da verschiedene ϕ_n zu verschiedenen Eigenwerten von N gehören, müssen sie orthogonal¹ sein. Wir betrachten dann den Hilbert-Raum, der von den $\{\phi_n, n \in \mathbb{N}\}$ aufgespannt wird. Die Operatoren a, a^+ haben die Matrixform

$$\begin{aligned} a\phi_n &= \sqrt{n}\phi_{n-1} \\ a^+\phi_n &= \sqrt{n+1}\phi_{n+1} \end{aligned}$$

woraus

$$\begin{aligned} N\phi_n &= n\phi_n, \\ \mathcal{H}\phi_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\phi_n \end{aligned}$$

folgt. Der Hamilton-Operator \mathcal{H} hat die Eigenwerte

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

Wir wollen anmerken, daß die Operatoren a, a^+ „Leiter-Operatoren“ genannt werden, da sie die „Leiter“ der Vektoren ϕ_n in auf- oder absteigender Reihenfolge verknüpfen.

1

$$\begin{aligned} A\phi_1 = \lambda_1\phi_1 \quad , \quad A\phi_2 = \lambda_2\phi_2; \\ (\phi_2, A\phi_1) &= \lambda_1(\phi_2, \phi_1) \\ &= (A\phi_2, \phi_1) \\ &= \lambda_2(\phi_2, \phi_1); \\ (\lambda_1 - \lambda_2)(\phi_2, \phi_1) &= 0, \\ \lambda_1 \neq \lambda_2 &\Rightarrow (\phi_2, \phi_1) = 0 \end{aligned}$$

Experimentelle Messungen von Energiedifferenzen an quantenmechanischen Systemen, die als harmonische Oszillatoren angesehen werden, sind im Einklang mit der Formel

$$E_n - E_m = (n - m)\hbar\omega$$

Daraus ziehen wir den Schluß:

1. der Hamilton-Operator ist die Beschreibung der Energie-Observablen;
2. befindet sich das System im Zustand ϕ_n , so liefert eine Energiemessung den Wert $E_n + \text{const.}$

Daß hier eine Konstante auftritt, liegt an der Eigenart von Energiemessungen, nur Differenzen angeben zu können. Die Energie ist immer (additiv) normierbar. Die sogenannte „Nullpunktsenergie“ E_0 ist physikalisch bedeutungslos. Wir wollen unsere Schlüsse komplettieren um den Fall

3. Befindet sich das System im Zustand ϕ (also nicht notwendigerweise in einem Eigenzustand von \mathcal{H}), so ist mit

$$\begin{aligned} \phi &= \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \phi_i, & \|\phi\| &= 1 \\ (\phi_i, \phi_j) &= \delta_{ij} \Rightarrow \sum_{i=0}^{\infty} |\alpha_i|^2 &= 1 \end{aligned}$$

bei einer Messung immer ein E_n zu beobachten, aber bei einer unendlichen Wiederholung am gleichen System ein Mittelwert

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2 E_n \\ &= (\phi, \mathcal{H}\phi). \end{aligned}$$

Die Koeffizienten α_n spielen also die Rollen von „Wahrscheinlichkeitsamplituden“

$$w_n = |\alpha_n|^2, \quad \sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1.$$

Um ϕ zu bestimmen, liefern die $|\alpha_n|^2$ nicht die komplette Information.

1.4 Die statistischen Ensembles der Quantenmechanik

In der Thermodynamik und ihrer statistischen Begründung treten uns in der Physik zum ersten Mal Wahrscheinlichkeitsaussagen entgegen. Sei ein reales Gas in einem Kasten eingeschlossen und energetisch abgeschlossen. Dann gibt es nur wenige Makrovariable, wie Druck und innere Energie, die dieses System im thermodynamischen Sinne charakterisieren. Eine komplette Bestimmung des Mikrozustands, d. h. aller kanonischer Variablen p_i, q_i , ist unmöglich. Stattdessen macht man eine Wahrscheinlichkeitsannahme über die Verteilung im Raum der p_i, q_i , dem Zustandsraum. Dabei stellt man sich sehr viele gleiche Systeme nebeneinander im gleichen Makrozustand vor. Diese Gesamtheit der Systeme heißt Schar oder Ensemble, und über sie wird gemittelt. Ich wiederhole: Die Schar oder das Ensemble besteht nicht aus den Molekülen des Gases, sondern aus gleichartigen Kopien des gesamten Gases mit gleichartigen Wänden. Bei gleichem Makrozustand befindet sich das erste im

Mikrozustand $\{p_i, q_i\}_1$, das nächste im Mikrozustand $\{p_i, q_i\}_2$ etc. Messen wir nun eine Observable an jedem System des Ensembles, so kommt als Ensemblemittelwert

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N F(\{p_i, q_i\}_k)$$

heraus. Wenn man eine Vorstellung davon hat, daß die Mikrozustände mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(\{p_i, q_i\})$ im Ensemble auftreten, so wird auch

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int dp_i dq_i w(\{p_i, q_i\}) F(\{p_i, q_i\}), \\ (1 &= \int dp_i dq_i w(\{p_i, q_i\})). \end{aligned}$$

Die statistische Interpretation der Quantenmechanik macht von ähnlichen Ensembles Gebrauch. Zunächst stellen wir jedoch fest, daß die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantenmechanik nicht durch fehlende Information über den Zustand (Makrozustand gegenüber dem Mikrozustand) heraufbeschworen werden. Sei etwa ein harmonischer Oszillator gegeben. Sein Zustand sei ϕ . Dann gibt es keine Möglichkeit, mehr Informationen über den Zustand zu bekommen. ϕ ist die maximale Information. Dennoch denken wir uns nun als quantenmechanisches Ensemble $N (\rightarrow \infty)$ gleiche harmonische Oszillatoren alle im Zustand ϕ gegeben und Messungen der Energie, z. B. $E - E_0$, ausgeführt. Die relative Häufigkeit der Meßergebnisse $E_n - E_0$ ist dann w_n mit

$$w_n = |(\phi_n, \phi)|^2$$

und dem Mittelwert (Erwartungswert)

$$\langle E - E_0 \rangle = \sum_n w_n (E_n - E_0) = (\phi, (\mathcal{H} - E_0 \mathbf{I}) \phi)$$

wobei E_n der zu ϕ_n gehörende Eigenwert des Hamilton-Operators ist.

Seien $\{\phi_n\}$ weiterhin die Eigenvektoren des Hamilton-Operators. Wir definieren den Projektionsoperator \tilde{P}_n als den (selbstadjungierten) Operator, der auf den Zustand ϕ_n orthogonal projiziert: ϕ beliebig

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n \phi &= \alpha_n \phi_n, \\ \alpha_n &= (\phi_n, \phi). \end{aligned}$$

In der Basis der $\{\phi_n\}$ ist \tilde{P}_n die Matrix

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c|c|c} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \leftarrow n \\ \uparrow \\ n \end{array}$$

Sie ist diagonal mit Eigenwert 1 bei ϕ_n und Eigenwerten 0 sonst. Diese Operatoren $\{\tilde{P}_n\}$ erfüllen die Relationen

$$\tilde{P}_n \tilde{P}_m = \tilde{P}_m \tilde{P}_n = \delta_{nm} \tilde{P}_n$$

Man kann zu jedem Vektor ϕ ($|\phi| = 1$) einen Projektionsoperator \tilde{P}_ϕ konstruieren:

$$\text{für alle } \psi \begin{cases} \tilde{P}_\phi \psi = \alpha \phi \\ \alpha = (\phi, \psi) \end{cases}$$

Diese Projektionsoperatoren \tilde{P}_n sind offenbar ebenfalls Observable. Denn w_n läßt sich umschreiben als

$$\begin{aligned} w_n &= |(\phi_n, \phi)|^2 \\ &= (\phi, \tilde{P}_n \phi) \end{aligned}$$

Nun war aber der Mittelwert der Energie im Zustand ϕ gegeben durch

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} w_n E_n \\ &= (\phi, \mathcal{H} \phi). \end{aligned}$$

Also ist w_n der Mittelwert (synonym: Erwartungswert) der Observablen \tilde{P}_n . Bestimmung von w_n bedeutet eine Messung der Observablen \tilde{P}_n !

Die bisherigen Projektionsoperatoren projizieren orthogonal auf eindimensionale Unterräume

$$Sp \tilde{P}_n = Sp \tilde{P}_\phi = 1. \quad (SP = \text{Spur})$$

Weiterhin gilt für sie

$$\begin{aligned} \tilde{P}_\phi^2 &= \tilde{P}_\phi, \text{ denn} \\ \tilde{P}_\phi(\tilde{P}_\phi \psi) &= \tilde{P}_\phi \alpha \phi \\ &= \alpha \phi \\ &= \tilde{P}_\phi \psi \end{aligned}$$

und für die Spur SpA bei endlich-dimensionalen Räumen, wenn man A in einer Basis als Matrix $\{A_{ij}\}$ schreibt

$$SpA = \sum_i A_{ii}$$

Für unendlich-dimensionale Räume ist SpA nicht immer definiert. Man kann natürlich auf beliebige endliche oder unendliche (dann abgeschlossene) Unterräume orthogonal projizieren. \mathcal{V} sei ein solcher Unterraum,

$$\begin{aligned} \tilde{P}_\mathcal{V}, \quad \dim \mathcal{V} = Sp \tilde{P}_\mathcal{V} \text{ (kann } \infty \text{ sein)} \\ \tilde{P}_\mathcal{V}^2 = \tilde{P}_\mathcal{V}, \quad \tilde{P}_\mathcal{V} = \tilde{P}_\mathcal{V}^+ \end{aligned}$$

Projektionsoperatoren sind natürlich beschränkt. An der Bildung der Erwartungswerte

$$\langle A \rangle = (\phi, A \phi)$$

erkennen wir, daß jeder Zustand ϕ mit einem Phasenfaktor $e^{i\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}$ (fest) multipliziert werden kann, ohne daß die physikalischen Meßwerte geändert werden, d. h. als Beschreibung eines reinen Zustands sind ϕ und $e^{i\alpha} \cdot \phi$ gleichwertig. Wir erkennen, daß ein Zustand durch eine Klasse von Vektoren charakterisiert wird

$$\text{reiner Zustand} \longleftrightarrow \{e^{i\alpha} \cdot \phi, \alpha \in \mathbb{R}\} \text{ „Strahl“}$$

Diese Vieldeutigkeit der Phase verschwindet, wenn wir als Beschreibung eines Zustands nicht einen Vektor ϕ , sondern den Projektionsoperator

$$\tilde{P}_\phi = P_{e^{i\alpha}\phi}$$

heranziehen. Dann ist

$$\langle A \rangle = (\phi, A\phi) = Sp(\tilde{P}_\phi A).$$

In der Quantenmechanik gibt es, ähnlich wie in der klassischen statistischen Mechanik, unvollständig bestimmte Zustände. Zwei Fälle sind typisch. Im ersten haben wir ein System, z. B. unseren linearen Oszillator, in Kontakt mit einem Wärmebad. Nachdem der Kontakt mit dem Wärmebad hergestellt ist, macht die mangelnde Kenntnis dieses (makroskopischen) Systems fast jede Kenntnis des Oszillatorzustandes zunichte. Wir haben jedoch eine gewisse experimentell verifizierbare Information. Die Energieverteilung des Oszillators sollte die Boltzmann-Verteilung sein. Sei T die Temperatur des Bades und

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad (k: \text{ Boltzmann-Konstante})$$

(Z ist eine Normierungskonstante). Dann ist die Wahrscheinlichkeit, den Oszillator im Zustand ϕ_n zu finden

$$w_n = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{E_n}{kT}}. \quad (\text{ Boltzmann-Verteilung})$$

Hieraus können wir keinen reinen Zustand

$$\phi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \phi_n, \quad \text{mit } |\alpha_n|^2 = w_n$$

bilden, denn die w_n reichen zur Bestimmung der Phasen von $\{\alpha_n\}$ nicht aus. Der Kontakt mit dem Wärmebad zerstört die Phasenkorrelation der α_n (dies ist eine mögliche Sprechweise). Wir haben es mit einem Zustandsgemisch zu tun. Wir beschreiben es durch den Operator

$$\varrho(T) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n \tilde{P}_n, \quad \langle A \rangle = Sp(\varrho(T)A),$$

den „statistischen Operator“. Eine andere Formulierung benutzt die „Spektraldarstellung des Hamilton-Operators“

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n \tilde{P}_n \\ e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}} \cdot \tilde{P}_n \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \varrho(T) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}} \\ Z = Sp\left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}}\right) \end{cases}$$

In dieser Formel erscheint der statistische Operator für alle Systeme mit Hamilton-Operator \mathcal{H} im Wärmekontakt mit einem Bad der Temperatur T . Der Zustand heißt

auch „Gibbs-Zustand“.

Ein anderer typischer Fall, bei dem wir eine unvollständige Information über einen Zustand besitzen, entsteht durch unvollständige Messungen. Wir wollen hier nur andeuten, wie solch unvollständige Information zustande kommt. Gegeben sei ein H-Atom, von dem wir wissen, daß vier Quantenzahlen n, l, m, s_z zur Festlegung eines Energiezustands erforderlich sind. Angenommen, wir bestimmen nur n . Nach der Messung wird man eine Gleichverteilung über die freien Quantenzahlen l, m, s_z annehmen. Wir werden später sehen, daß durch n ein Unterraum der Dimension $2n^2$ fixiert wird. Dann setzt man

$$\varrho = \frac{1}{2n^2} \tilde{P}_n, \quad Sp \tilde{P}_n = 2n^2$$

Der Mangel an Information, der in einem Zustandsgemisch vorliegt, heißt Entropie. Man berechnet ihn aus

$$\begin{aligned} S &= -Sp \varrho \ln \varrho \\ \varrho &= \text{statistischer Operator} \end{aligned}$$

Für einen reinen Zustand ist

$$\begin{aligned} \varrho \ln \varrho &= \text{Nulloperator} \\ S &= 0 \end{aligned}$$

Für einen Gibbs-Zustand ist S die thermodynamische Entropie (genauer $S \cdot k$, k : Boltzmann-Konstante). Für obigen Zustand des H-Atoms ist

$$S = \ln(2n^2)$$

Die quantenmechanische Gesamtheit für ein Zustandgemisch ist identisch dieselbe, wie für einen reinen Zustand: Das komplette System (inklusive Wärmebad, falls vorhanden) ist N mal zu wiederholen. Dann ist an jedem System die Messung durchzuführen. Wir wiederholen noch einmal die Eigenschaft des statistischen Operators

$$\begin{aligned} \varrho &= \varrho^+, \varrho \geq 0, \quad (\text{nichtnegative Eigenwerte}) \\ Sp \varrho &= 1, \\ \langle A \rangle &= Sp(\varrho A) \end{aligned}$$

Wir wollen uns nun einmal ein typisches Experiment ansehen: die Beugung von Elektronen am Doppelspalt. Ein ohne äußere Einwirkung sich fortbewegendes Elektron wird quantenmechanisch durch eine ebene Welle beschrieben. Diese ebene Welle wird am Doppelspalt gebeugt. Beide sich vom Spalt entwickelnden Wellen werden überlagert, und die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron auf dem Schirm (im Zähler) zu finden, ist

$$|\psi_1 + \psi_2|^2(x)$$

Es entsteht das bekannte Interferenzbild.

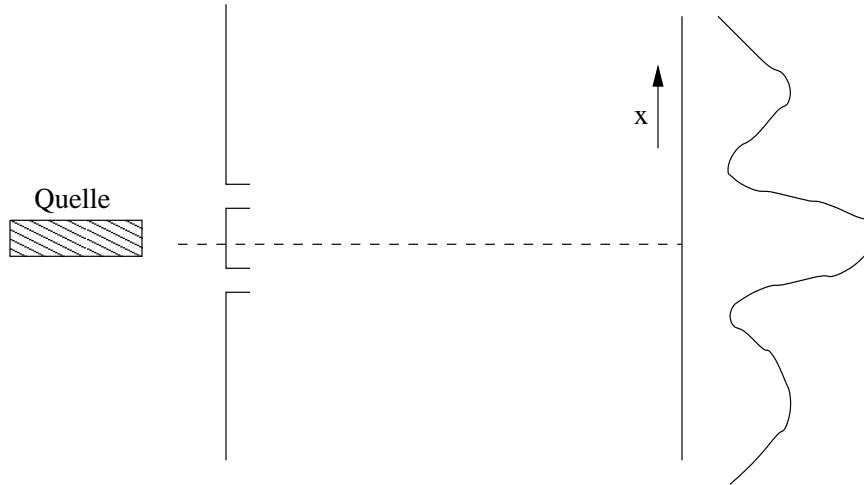


Abbildung 1: Blende mit Doppelspalt

Die quantenmechanische Gesamtheit besteht aus einer N -maligen Wiederholung ($N \rightarrow \infty$) des gleichen Experiments mit einem Elektron. Ist es erlaubt, ein Experiment mit einem Elektronenstrahl zu machen, wie es die Experimentalphysiker tun? Bei einem Strahl mit großem Teilchenfluß tritt mit Sicherheit eine gegenseitige Beeinflussung der Elektronen auf. Dann wird das Ergebnis verfälscht. Wenn wir den Strahl aber immer dünner machen, das heißt die Elektronen mit zeitlichem Abstand einzeln austreten lassen, so werden wir die quantenmechanische Gesamtheit aus Experimenten an einzelnen (unabhängigen) Elektronen immer besser approximieren.

Ähnlich ist die Untersuchung des Spektrums von Atomen zu interpretieren. Die quantenmechanischen Prinzipien schreiben wiederholte Messungen am einzelnen Atom vor. Der Experimentator benutzt dagegen oft genug ein Gas. Das ist wieder nur bei einem stark verdünnten Gas zu rechtfertigen. Es ist übrigens bemerkenswert, daß mit modernen Techniken auch Untersuchungen des einzelnen Elektrons bzw. Atoms möglich sind. Die quantenmechanischen Gesamtheiten sind damit auch exakt realisierbar.

1.5 Die Präparation von Zuständen

Wir kehren zum linearen Oszillator zurück. Nachdem wir eine Messung der Energie durchgeführt haben, bei der wir E_n gefunden haben, befindet sich das System im Zustand ϕ_n . Wir wollen uns diese Aussage genauer ansehen. Wenn wir durch Messungen an einem klassischen mechanischen System den Zustand $\{p_i, q_i\}$ festgestellt haben, so bedeutet dies, daß eine unmittelbar darauf folgende erneute Messung diesen Zustand bestätigt. Zwar wird die Dynamik, der das System unterliegt, diesen Zustand langsam verändern, aber in stetiger Weise.

Diese Vorstellung ist so elementar, daß wir sie in die Quantenmechanik übernehmen. Wir betrachten also eine einzelne Messung (der Energie), die uns den Wert E_n liefert, und wiederholen darauf die gleiche Messung am gleichen System.

$$\phi \xrightarrow{\text{1. Messung}} \phi_n \xrightarrow{\text{Wiederholung}} \phi_n$$

Führen wir die erste Messung an einer Gesamtheit aus, so ist ϕ_n mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_n = |(\phi_n, \phi)|^2$$

vertreten. Führe ich dann an einer Gesamtheit, die sich im Zustand ϕ_n befindet, die Wiederholungsmessung durch, so erscheint ϕ_m mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_m = |(\phi_m, \phi_n)| = \delta_{mn},$$

d. h. mit Sicherheit geht ϕ_n in ϕ_n über. Damit ist die Konsistenz unserer Annahme gezeigt.

Wenden wir nun unsere Aufmerksamkeit der ersten Messung zu. Die Änderung des Zustandes ϕ in ϕ_n ist radikal und läßt sich nicht durch „vorsichtigeres“ Experimentieren kleiner machen. Diese Wirkung einer Messung wird auch „Reduktion“ eines Zustandes genannt.

Wir wollen hiermit die Diskussion der Interpretation der Quantenmechanik abbrechen. Wir werden sie später noch einmal aufnehmen, wenn wir mehr Systeme kennengelernt haben.

2 Koordinaten- und Impulsmessungen

2.1 Die Schrödinger-Realisierung der Heisenberg-Algebra

Wir betrachten die Heisenberg-Algebra

$$P_i Q_j - Q_j P_i = \frac{\hbar}{i} \mathbf{I} \delta_{ij}; \quad i, j \in \{1, 2, \dots, N\}.$$

Offensichtlich können wir diese Algebra auf folgende Weise realisieren: Wir wählen den Hilbert-Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ und dann den Unterraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ von ∞ -differenzierbaren und stark abfallenden Funktionen, d. h.

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \|x\|_{\mathbb{R}^N}^k Df(x) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ und } f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N), D \text{ irgendeine Differentiation}$$

dann kann man für $f(x) \in \mathcal{S}$ definieren

$$\begin{cases} Q_i f(x) = x_i f(x) \\ P_i f(x) = +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} f(x). \end{cases}$$

Dann ist die Heisenberg-Algebra erfüllt. Jedes Polynom den P_i, Q_i ist damit definiert, und das Ergebnis liegt im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$. Das ist die Schrödinger-Realisierung der Heisenberg-Algebra. Man kann sogar zeigen, daß diese Realisierung „bis auf Äquivalenz“ die einzige ist. Solch eine äquivalente bekommen wir auf folgende Weise: Wir betrachten wieder das Paar von Räumen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \supset \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ und bezeichnen Elemente mit $g(k)$. Dann definieren wir

$$\begin{cases} Q_i g(k) = -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k_i} g(k), \\ P_i g(k) = \hbar k_i g(k). \end{cases}$$

Zwischen beiden Realisierungen besteht nun ein Zusammenhang. Wenn wir für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ definieren

$$g(k) := (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int dx e^{-ikx} f(x), \quad dx = dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_N$$

so ist $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$. (Es wird durch diese Fouriertransformation $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ eineindeutig abgebildet.) Wir schreiben $g = \mathcal{F}(f)$. Ferner ist (Parseval'sche Gleichung)

$$|g|^2 = |f|^2$$

so daß \mathcal{F} fortgesetzt werden kann zu einer eineindeutigen Abbildung der beiden Hilbert-Räume.

\mathcal{F} kann umgekehrt werden:

$$\mathcal{F}^{-1} : f(x) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int dk e^{+ikx} g(k)$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} Q_i g &= \mathcal{F}(Q_i f), \\ P_i g &= \mathcal{F}(P_i f). \end{aligned}$$

und die Umkehrung gilt natürlich auch. Diese Relationen bilden den Inhalt dessen, was wir unter Äquivalenz verstehen wollen.

Wir wollen nun zum linearen harmonischen Oszillator ($N = 1$) zurückkehren und die „Koordinatenrealisierung“ benutzen

$$\begin{aligned} f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) &\subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \\ Qf(x) &= xf(x) \\ Pf(x) &= +\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f(x). \end{aligned}$$

Damit ist der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}f(x) = \left[\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right] f(x)$$

Wir haben also eine Realisierung der Zustände ϕ durch Funktionen $f(x)$, die wir Wellenfunktionen im Koordinatenraum nennen wollen. Wie sieht dann die Basis der ϕ_n aus, speziell der Grundzustand ϕ_0 ? Offensichtlich ist

$$\begin{aligned} a &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot x + \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} \right], \\ a^+ &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot x - \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} \right]. \end{aligned}$$

Da $a\phi_0 = 0$ den Grundzustand definiert, erwarten wir $\phi_0 \rightarrow f_0(x)$ mit

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot x + \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} \right] f_0(x) = 0.$$

Wir führen eine neue Koordinate ξ ein:

$$\begin{aligned} \xi &= \left(\frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x, \\ f_0(x) &= \tilde{f}_0(\xi), \\ \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \tilde{f}_0(\xi) &= 0, \\ \tilde{f}_0(\xi) &= C \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \xi^2} \end{aligned}$$

Wir bestimmen C aus der Normierungsbedingung (bis auf eine Phase):

$$\begin{aligned} 1 \stackrel{!}{=} |f_0|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |f_0(x)|^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} |C|^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\pi} |C|^2. \end{aligned}$$

Dann setzen wir

$$C = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Damit sind alle Eigenfunktionen von \mathcal{H} auch festgelegt

$$\begin{aligned} \phi_n &\longrightarrow f_n(x) = \tilde{f}_n(\xi) \\ \tilde{f}_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \right]^n C \cdot e^{-\frac{1}{2}\xi^2}; \end{aligned}$$

Was kommt dabei explizit heraus? Zunächst haben wir

$$\begin{aligned} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} &= 2\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \\ \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} &= (4\xi^2 - 2) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D_1 f : e^{\frac{1}{2}\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \left[e^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi) \right] &= 2\xi f(\xi) - f'(\xi) \\ D_2 f : e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) \left[e^{-\xi^2} f(\xi) \right] &= 2\xi f(\xi) - f'(\xi) \end{aligned}$$

$$\implies D_1 = D_2 \text{ (die Differential-Operatoren sind gleich)}$$

und wir erkennen, daß

$$e^{\frac{1}{2}\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = p_n(\xi)$$

Polynome n -ten Grades sind. Sie haben die Eigenschaft, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} p_n(\xi) p_m(\xi) = 0 \text{ für } n \neq m$$

sowie

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} p_n(\xi)^2 = \frac{2^n n!}{C^2} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} = 2^n n! \sqrt{\pi}.$$

nach Konstruktion. Weiterhin gilt das Korollar

$$\begin{aligned}
 p_n(\xi) &= e^{\frac{1}{2}\xi^2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \cdot \mathbf{I} \\
 &= D_1^n \cdot \mathbf{I} = D_2^n \cdot \mathbf{I} \\
 &= e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \cdot \mathbf{I} \\
 F_x(t) &= e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} Q_n(x) \\
 Q_n(x) &= \left(\frac{d}{dt} \right)^n e^{-t^2+2tx} \Big|_{t=0} \\
 &= e^{x^2} \left(\frac{d}{dt} \right)^n e^{-(t-x)^2} \Big|_{t=0} \\
 &= e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} = p_n(x)
 \end{aligned}$$

Sei $w(\xi)$ eine stetige nichtnegative reelle Funktion. Die Forderungen

$$\int_a^b d\xi w(\xi) f_n(\xi) f_m(\xi) = h_n \delta_{nm}$$

erlauben es, rekursiv reelle Polynome $f_n(\xi)$ vom Grad n bis auf ein Vorzeichen eindeutig zu bestimmen. Die entstehenden Polynome heißen Orthogonale Polynome: Sie sind bis auf ein Vorzeichen bestimmt und in Tabellenwerken für viele Fälle aufgelistet. Wir benutzen [A. + St.] (Kap. 22) Für

$$\begin{aligned}
 w(\xi) &= e^{-\xi^2}, \\
 -a &= b = \infty, \\
 h_n &= 2^n n! \sqrt{\pi}
 \end{aligned}$$

finden wir dort die Hermiteschen Polynome

$$p_n(\xi) = H_n(\xi).$$

Sie genügen der Differentialgleichung

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0.$$

Diese Gleichung erhalten wir direkt auf folgende Weise: Die Eigenwertgleichung für den Hamilton-Operator lautet

$$\mathcal{H}f_n(x) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \tilde{f}_n(\xi).$$

Nun betrachten wir den Ansatz

$$\tilde{f}_n(\xi) = \frac{C}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Damit ergibt sich die gesuchte Gleichung

$$-H_n''(\xi) + 2\xi H_n'(\xi) + H_n(\xi) = (2n + 1)H_n(\xi).$$

2.2 Impuls- und Koordinaten-Operatoren für ein Teilchen

Aus der bisherigen Diskussion können wir die allgemeine Lehre ziehen, daß für ein Teilchen im \mathbb{R}^3 eine mögliche Realisierung des Koordinaten- bzw. Impuls-Operators in kartesischen Koordinaten

$$\begin{cases} Q_i \psi(x) = x_i \psi(x) \\ P_i \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x) \end{cases} \quad i \in \{1, 2, 3\}$$

ist. Wir betrachten zunächst die drei Komponenten des Impuls-Operators. Nach dem jetzt festgelegten Schema fragen wir nach den Eigenwerten und Eigenfunktionen dieser Operatoren. Wir beginnen mit dem Impuls-Operator.

Eigenfunktion ist offensichtlich die ebene Welle (und zwar gleichzeitig für alle drei Komponenten).

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \hbar k_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

Bezeichnen wir den Eigenwert aller drei Komponenten als Vektor, so ist

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

Die ebene Welle ist gemeinsame Eigenfunktion aller drei Impuls-Operatoren. Wir kommen gleich darauf zurück. Die Relation

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

ist überall im Bereich der Quantenphysik bestätigt, und zwar zuerst durch Beugungsmessungen. Der Impuls eines Elektrons ist eine mechanische Größe, die ein klassisches Gegenstück hat. Man erwartet, daß ein Elektron beim Durchfallen der Spannung U den Impuls

$$|\vec{p}| = (2meU)^{\frac{1}{2}}$$

gewinnt. Ein anschließendes Beugungsexperiment gestattet, die Wellenlänge λ zu bestimmen. Dann ist

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{\hbar} (2meU)^{\frac{1}{2}}$$

Wir haben oben gesagt, daß die Ortsrealisierung einen Hilbert-Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ benutzt. Zur Definition des Operators P_i wurde dann der Unterraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ eingeführt.

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \supset \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$$

(dem auch die Basis $\{f_n(x)\}$ des harmonischen Oszillators im Falle $N = 1$ angehört). Jetzt ist ein neues Problem mit dem unbeschränkten Operator

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$$

aufgetaucht:

1. das Spektrum der Eigenwerte p_i ist kontinuierlich: $-\infty < p_i < +\infty$,
2. Eigenfunktionen sind nicht mehr zum Hilbert-Raum gehörig, da sie nicht quadratintegabel sind;

$$\int d^3x \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \right|^2 = \infty$$

Um die Situation zu klären, benötigen wir den Begriff des linearen Funktionals auf Vektorräumen. Da wir nur Vektorräume mit Topologie betrachten, können wir Stetigkeit des linearen Funktionals fordern: F stetiges lineares Funktional auf \mathcal{V} bedeutet $F : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Abbildung:

$$(F, \phi) \in \mathbb{C}$$

die linear in ϕ ist

$$(F, (\alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2)) = \alpha_1 (F, \phi_1) + \alpha_2 (F, \phi_2)$$

und stetig in der Topologie von \mathcal{V} . Ist \mathcal{V} ein Hilbert-Raum, so ist die Topologie immer durch die Länge $\| \cdot \|$ definiert. In diesem Fall gilt der Satz von Riesz: zu jedem stetigen linearen Funktional F auf einem Hilbertraum \mathfrak{H} gibt es einen Vektor $\psi \in \mathfrak{H}$, so daß

$$(F, \phi) = (\psi, \phi) \quad ^2$$

wobei rechts das Skalarprodukt gemeint ist.

Lineare stetige Funktionale bilden einen Vektorraum, den dualen Raum. Das Riesz'sche Theorem sagt aus, daß der duale Raum eines Hilbert-Raums mit dem Hilbert-Raum identifiziert werden kann. Falls wir ϕ auf einen Unterraum \mathcal{V} des Hilbert-Raums einschränken, so bilden die stetigen linearen Funktionale einen „Überraum“ \mathcal{V}'

$$\mathcal{V}' \supset \mathfrak{H} \supset \mathcal{V}$$

Für die Zwecke der Quantenmechanik ist \mathcal{V} in der Regel ein „abzählbar normierter Raum“ (wie $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$) oder ein Hilbert-Raum. Für diese Räume gilt „Reziprozität“

$$(\mathcal{V}')' = \mathcal{V}$$

oder

$$F \in \mathcal{V}' \quad , \quad \phi \in \mathcal{V}$$

$$(F, \phi) = \overline{(\phi, F)}$$

d. h. die linearen stetigen Funktionale auf \mathcal{V}' sind die ursprünglichen Elemente ϕ aus \mathcal{V} . Ein simples Beispiel:

$$\begin{aligned} \mathfrak{H} &= \mathcal{L}^2(\langle 0, 1 \rangle) \\ (\phi_1, \phi_2) &= \int_0^1 dx \overline{\phi_1(x)} \phi_2(x) \\ \mathcal{V} &= \left\{ \phi(x), \text{ stetig}, 0 \leq x \leq 1, \|\phi\|_{\text{sup}} = \sup_{0 \leq x \leq 1} |\phi(x)| \right\} \\ &= C(\langle 0, 1 \rangle) \subset \mathcal{L}^2(\langle 0, 1 \rangle) \end{aligned}$$

Dann enthält \mathcal{V}' die Delta-Funktion, denn

$$(\delta_{x_0}, \phi) = \int_0^1 \delta(x - x_0) \phi(x) = \phi(x_0) \quad (0 \leq x_0 \leq 1)$$

ist eine stetige lineare Abbildung von $C(\langle 0, 1 \rangle)$ in \mathbb{C} , denn

$$\begin{aligned} \phi_n \rightarrow \phi \quad \text{heißt:} \quad \sup_{0 \leq x \leq 1} |\phi_n(x) - \phi(x)| &\rightarrow 0 \\ \phi_n(x) &\rightarrow \phi(x) \quad \text{gleichmäßig,} \end{aligned}$$

²Die Schreibweise (F, ϕ) bedeutet eine Erweiterung der Bezeichnung für das Skalarprodukt (ψ, ϕ) , falls ϕ einem Hilbert-Raum angehört.

also speziell

$$(\delta_{x_0}, \phi_n) = \phi_n(x_0) \longrightarrow \phi(x_0) = (\delta_{x_0}, \phi)$$

Wir betrachten entsprechend

$$\mathcal{S}'(\mathbb{R}^3) \supset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \supset \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$$

Die linearen Funktionale aus \mathcal{S}' enthalten singuläre Funktionen, die im Unendlichen wie Polynome beschränkt sind und lokal höchstens so singulär sind, wie eine endliche Ableitung der Delta-Funktion. Sie heißen temperierte Distributionen.

Die Eigenfunktionen

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

sind offenbar in $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^3)$ enthalten (sie sind beschränkt durch eins und unendlich oft differenzierbar). Die Operation der Adjunktion

$$\begin{aligned} A &\longmapsto A^+ \\ (\phi_1, A\phi_2) &= (A^+\phi_1, \phi_2) \end{aligned}$$

läßt sich formal auf lineare Funktionale ausdehnen. Beispiel:

$$\begin{aligned} A &\mapsto \frac{d}{dx} \\ \phi_1 &\mapsto F = \delta(x - x_0) \\ \phi_2 &\mapsto \text{„Testfunktion“ } g(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \end{aligned}$$

$$g'(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) \frac{d}{dx} g(x) \stackrel{\text{def}}{=} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{d}{dx} \delta(x - x_0) \right) g(x)$$

Allgemein, falls $A : \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ stetig

$$\begin{aligned} (F, A\phi) &= (A^+F, \phi) \\ F \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^3) \quad , \quad \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \end{aligned}$$

Bei selbstadjungierten Operatoren $A^+ = A$ lassen sich Eigenfunktionale (anstelle von Eigenfunktionen = Eigenvektoren) definieren:

$$AF = \lambda F, \quad \lambda \text{ reell}$$

heißt

$$(F, A\phi) = \lambda(F, \phi) \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$$

Für den Impulsoperator P_i und $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ergibt sich speziell

$$\begin{aligned} &\int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} P_i g(x) \\ &= \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} g(x) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int d^3x \left(\frac{\partial}{\partial x_i} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right) g(x) \\ &= \hbar k_i \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} g(x). \end{aligned}$$

Schluß: $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^3)$ ist gemeinsames Eigenfunktional aller drei Komponenten P_i des Impulsoperators.

Die Eigenfunktionale (= Eigendistributionen = verallgemeinerte Eigenfunktionen) $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ besitzen zwar keine Hilbert-Raum-Norm, sind aber dennoch normierbar „auf Delta-Funktionen“: Mit

$$\varphi_{\vec{k}}(x) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

wird

$$\int d^3x \overline{\varphi_{\vec{k}_1}(x)} \varphi_{\vec{k}_2}(x) = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$$

Dies ist die Verallgemeinerung von

$$\int d^3x \overline{f_n(x)} f_m(x) = \delta_{mn}$$

beim harmonischen Oszillator mit der Energie-Basis $\{f_n\}_{n=0}^\infty$. Wir wollen daher die $\{\varphi_{\vec{k}}(x), \vec{k} \in \mathbb{R}^3\}$ eine verallgemeinerte Basis nennen.

Als nächstes interpretieren wir die Messung von Observablen mit kontinuierlichem Spektrum am Beispiel des Impulses. Sei in der Koordinaten-Realisierung ein Zustand $\psi(x)$ gegeben.

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

Führen wir eine Impulsmessung aus, die so geartet ist, daß das Gerät ein endliches Volumen V im Impulsraum $V \in \mathbb{R}^3$ diskriminiert, so ist die Wahrscheinlichkeit, einen Impuls \vec{p} aus V zu finden

$$\begin{aligned} W_\psi(V) &= \int_{\hbar\vec{k} \in V} d^3k |(\varphi_{\vec{k}}, \psi)|^2 \\ &=: (\psi, P_V \psi) \end{aligned}$$

P_V : Projektion auf $\hbar\vec{k} \in V$ ist definiert durch das angegebene Integral. P_V ist eine Observable, $W_\psi(V)$ ein ganz gewöhnlicher Erwartungswert. Natürlich ist

$$W_\psi(\mathbb{R}^3) = 1$$

denn

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3k \varphi_{\vec{k}}(x) \overline{\varphi_{\vec{k}}(y)} = \delta(x - y)$$

also

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k |(\varphi_{\vec{k}}, \psi)|^2 &= \int d^3x \int d^3y \int d^3k \left(\overline{\varphi_{\vec{k}}(x)} \psi(x) \right) \left(\varphi_{\vec{k}}(y) \overline{\psi(y)} \right) \\ &= \int d^3x \int d^3y \psi(x) \overline{\psi(y)} \delta(x - y) \\ &= \|\psi\|^2 = 1 \end{aligned}$$

Also definiert die „Projektion“ von ψ auf $\varphi_{\vec{k}}$ eine Wahrscheinlichkeitsamplitude, ihr Betragsquadrat

$$|(\varphi_{\vec{k}}, \psi)|^2$$

eine Wahrscheinlichkeitsdichte im \vec{k} -Raum. Wir kehren zurück zur k -Realisierung aus 2.1, S. 17, die mit der Koordinaten-Realisierung verknüpft ist durch

$$\begin{aligned} g(k) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(x) \\ &= (\varphi_{\vec{k}}, \psi) \end{aligned}$$

Die Impuls-Realisierung des Vektors ψ (der Wellenfunktion $\psi(x)$) ist identisch mit der Wahrscheinlichkeitsamplitude für eine \vec{k} - (bzw. \vec{p} -) Messung am Zustand ψ . Dies ist wieder in voller Analogie zum Fall des diskreten Spektrums des Hamilton-Operators für den linearen harmonischen Oszillator. Denn bezüglich der Basis $\{\phi_n\}$ sind die

$$\{\alpha_n, \alpha_n = (\phi_n, \psi)\}$$

die Realisierung des Vektors ϕ . Andererseits ist

$$|\alpha_n|^2 = w_n$$

die Wahrscheinlichkeit für das Auffinden des Eigenwertes E_n im Zustand ϕ . Falls wir die Eigenfunktionale $\varphi_{\vec{k}}$ des Impuls-Operators in k -Realisierung umschreiben, so erhalten wir (\vec{k}_0 : Eigenwert)

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{\vec{k}_0}(\vec{k}) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \varphi_{\vec{k}_0}(x) \\ &= \delta(\vec{k} - \vec{k}_0) \end{aligned}$$

wobei also die Distributionseigenschaft der Eigendistribution besonders deutlich wird (siehe auch A.1 S. 107).

Der Koordinaten- oder Orts-Operator ist vollständig analog zum Impuls-Operator zu behandeln. Wir fassen dieses Abschnitts in folgender Tabelle zusammen:

Observable	Eigenwert	Eigenfunktion x-Realisierung	Eigenfunktion k-Realisierung	Meßmethoden
P_i	$\hbar\kappa_i$	$(2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{x}}$	$\delta(\vec{k} - \vec{\kappa})$	Laufzeitverfahren, Ablenkung im elektromag. Feld
Q_i	ξ_i	$\delta(\vec{x} - \vec{\xi})$	$(2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{\xi}\cdot\vec{x}}$	lichtoptisch, elektronenop- tisch, lokalisier- te Ionisation (Blasenkammer etc.)

Wir haben auch ein paar Methoden aufgelistet, mit denen Impulse oder Koordinaten gemessen werden. Dazu ist zu bemerken, daß im kontinuierlichen Spektrum grundsätzlich keine Messung möglich ist, die einen exakten Impuls-Eigenzustand liefert. Denn diesem würde ja ein Funktional entsprechen und nicht ein Vektor des Hilbert-Raumes, wie wir fordern müssen. Das bedeutet, daß es experimentell unmöglich ist, ein Meßgerät mit diesen Eigenschaften zu bauen. Die Situation ändert sich grundsätzlich, wenn es gelingt, die zu beobachtenden Teilchen in einem beschränkten Raumgebiet V einzusperren (z. B. „magnetische Flasche“, endliches Metallstück, allgemein: „Kasten“). Dann wird das Impuls-Spektrum diskret.

2.3 Freies Teilchen in einem Kasten

Wir wollen ein Teilchen in einem Kasten betrachten, der eine quaderförmige Gestalt hat:

$$-l_i \leq x_i \leq +l_i, \quad i \in \{1, 2, 3\}$$

Wir wollen den Impuls-Operator in Koordinaten-Realisierung verwenden. Ist er von der Form $P_i \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$? Wir betrachten zuerst den eindimensionalen Fall

$$(\psi_1, P\psi_2) = \int_{-l}^{+l} dx \overline{\psi_1(x)} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_2(x)$$

Partielle Integration ergibt

$$= \frac{\hbar}{i} \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) \Big|_{-l}^{+l} + \int_{-l}^{+l} dx \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \overline{\psi_1(x)} \cdot \psi_2(x)$$

Damit $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ selbstadjungiert ist, muß der ausintegrierte Bestandteil verschwinden. Das ist ein notwendige, aber keine hinreichende Bedingung. Wir können das Verschwinden von

$$\overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) \Big|_{-l}^{+l}$$

auf verschiedene Weise erreichen.

1. $\psi_{1,2}(-l) = \psi_{1,2}(+l)$, entsprechend für alle Wellenfunktionen. Das sind periodische Randbedingungen. Mit ihnen ist besonders bequem zu rechnen. Experimentell sind diese Randbedingungen nur durch eine besondere geometrische Konfiguration zu erreichen (Ring, Zylinder).
2. $\psi(x) = 0$ für $x = \pm l$. Diese Bedingungen sind physikalisch durch ein unendlich hohes abstoßendes Potential am Rand zu realisieren³. Wenn der Operator $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ selbstadjungiert ist, muß er sich diagonalisieren lassen. Sei $f_p(x)$ Eigenfunktion:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

Diese Gleichung liefert nach Integration

$$\begin{aligned} f_p(x) &= C \cdot e^{i \frac{p}{\hbar} x} \\ f_p(\pm l) &= C \cdot e^{\pm i \frac{p}{\hbar} l} = 0, \end{aligned}$$

was $C = 0$ impliziert.

Im Dirichletschen Fall besitzt der Operator $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ keine Eigenfunktion, er ist nicht selbstadjungiert. Anders im periodischen Fall:

$$\begin{aligned} e^{i \frac{p}{\hbar} l} &= e^{-i \frac{p}{\hbar} l} \\ \frac{p}{\hbar} &= \pi \cdot \frac{1}{l} \cdot n, \quad n \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

In diesem Fall haben wir also ein diskretes Impuls-Spektrum. Wir haben gleichzeitig eine Basis von Eigenfunktionen erhalten

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{2\pi i \frac{x}{2l} n}; \quad n \in \mathbb{Z} \right\}$$

³Diese Randbedingungen heißen vom „Dirichletschen Typ“.

Tatsächlich existiert im Dirichletschen Fall der Impuls-Operator nicht. Das hat einen tiefen Grund. In der klassischen Mechanik ist der Impuls die erzeugende Funktion für eine kanonische Transformation, die der infinitesimalen Translation

$$x \longrightarrow x' = x + dx$$

entspricht. In der Quantenmechanik gibt es etwas Analoges (wird in QM II behandelt). Voraussetzung dieser Transformation ist, daß das physikalische System sie erlaubt. Das ist aber im Dirichletschen Fall nicht so. Das unendlich hohe Potential ist an einer ganz bestimmten Stelle im Raum fixiert, es erlaubt keine Translation des Systems. In der Quantenmechanik fällt dies auf, weil die mathematischen Anforderungen an eine Observable (**Selbstadjungiertheit** des Operators) sehr einschneidend sind.

Der Operator der kinetischen Energie ist

$$T = \frac{1}{2m} \vec{P}^2$$

in Koordinatenrealisierung (Laplace-Operator = Δ)

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

dieser Operator ist in beiden Fällen 1, 2 eine physikalische Observable (im Fall 2 ist also \vec{P} nicht, aber \vec{P}^2 doch definiert!). Seine Eigenfunktionen sind ($t_{\vec{n}}$ = Eigenwerte)

1. Fall:

$$\left\{ (8l_1 l_2 l_3)^{-\frac{1}{2}} e^{2\pi i \cdot \sum_{j=0}^3 \frac{n_j x_j}{2l_j}}, \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 \right\}$$

$$t_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right]$$

2. Fall:

$$\left\{ (l_1 l_2 l_3)^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi}{2} \frac{n_1 x'_1}{l_1} \sin \frac{\pi}{2} \frac{n_2 x'_2}{l_2} \sin \frac{\pi}{2} \frac{n_3 x'_3}{l_3} \right\}$$

$$x'_i = x_i + l_i, \quad \{n_i\} \in \mathbb{N}^3$$

$$t_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \left[\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right]$$

Das Spektrum von T ist diskret. Endlich ausgedehnte Systeme haben immer ein diskretes Spektrum. Falls $l_1 = l_2 = l_3 = l$ treten Entartungen auf: Zum gleichen Eigenwert von T gehört ein ganzer endlich-dimensionaler Unterraum von Eigenfunktionen (Siehe auch A.2 S. 108). Beispiel: Fall 1. mit

$$\vec{n} = (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$$

Die Entartung ist sechsfach, d. h. der Unterraum hat $\dim = 6$. Wir werden uns mit diesem Phänomen im folgenden Abschnitt beschäftigen.

2.4 Entartung, Vertauschbarkeit von Operatoren und die simultane Messung von Observablen

Wir betrachten zwei Operatoren A und B und eine Basis $\{\psi_n\}$, auf der beide Operatoren diagonal sind:

$$A\psi_n = a_n \psi_n$$

$$B\psi_n = b_n \psi_n$$

Die beiden Diagonalmatrizen können in beliebiger Reihenfolge multipliziert werden, sie sind kommutativ. Es gilt also

$$\begin{aligned} AB\psi_n &= a_n b_n \psi_n \\ &= b_n a_n \psi_n \\ &= BA\psi_n \\ AB = BA &\text{ oder } [A, B] = 0 \end{aligned}$$

Umgekehrt sei die Vertauschbarkeit von A und B vorausgesetzt. Wir werden dann von dem „Spektralsatz“ (A.2 S. 108) Gebrauch machen, der besagt, daß zu jedem selbstadjungierten Operator eine Basis (eigentlicher oder uneigentlicher) Eigenvektoren $\{\psi_\lambda\}$ gehört, auf der dieser Operator also diagonal ist. Sei ψ Eigenvektor zu A

$$A\psi = a\psi$$

Dann ist

$$\begin{aligned} B(A\psi) &= aB\psi \\ &= A(B\psi) \end{aligned}$$

Also ist $B\psi = 0$ oder Eigenvektor zu A mit dem gleichen Eigenwert a . Ist dieser Eigenwert a nicht entartet, so ist also auch

$$B\psi = b\psi$$

($b = 0$ ist auch möglich). Gibt es mehrere linear unabhängige Eigenvektoren von A zum Eigenwert a , so spannen diese den Unterraum \mathcal{V}_a auf. Dann gilt

$$\psi \in \mathcal{V}_a \implies B\psi \in \mathcal{V}_a$$

Schränken wir B auf \mathcal{V}_a ein, so bekommen wir einen selbstadjungierten Operator. Wir können dann in \mathcal{V}_a eine Basis bestimmen, so daß

$$\{\psi_b^{(a)}\} : B\psi_b^{(a)} = b\psi_b^{(a)}$$

Dann gilt auch noch gleichzeitig

$$A\psi_b^{(a)} = a\psi_b^{(a)}$$

Führen wir diese Konstruktion für alle Eigenwerte a von A aus, so ist

$$\bigcup_a \{\psi_b^{(a)}\}$$

eine Basis des gesamten Raums \mathcal{V}_a , die beide Operatoren A und B diagonalisiert. Der Spektralsatz A.2 (S. 108) erlaubt, diese Argumentation auf kontinuierliche Spektren zu übertragen.

Als einfachste Anwendung betrachten wir die drei Impuls-Operatoren P_i

$$[P_i, P_j] = 0, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}$$

Wenn wir zwei Observable zu vertauschbaren Operatoren messen, so passiert folgendes: Wird zuerst A gemessen (im diskreten Spektrum), so reduziert sich der Zustand auf einen Eigenvektor zu A

$$\begin{aligned} \phi &\xrightarrow{A} \phi_a \text{ „}a\text{“ entarteter Eigenwert} \\ A\phi_a &= a\phi_a \end{aligned}$$

Eine unmittelbar anschließende Messung von B reduziert ϕ_a auf einen Eigenvektor zu B in \mathcal{V}_a , dem Raum der Eigenvektoren zum Eigenwert a ,

$$\begin{aligned}\phi_a &\xrightarrow{B} \phi_{ab} \\ A\phi_{ab} &= a\phi_{ab} \\ B\phi_{ab} &= b\phi_{ab}\end{aligned}$$

Wir können tatsächlich A und B gleichzeitig messen, ohne daß die Messungen sich gegenseitig beeinträchtigen. Die Messungen sind kompatibel. Um einen Zustand optimal durch Messungen festzulegen, wird man einen Satz von Observablen suchen, die einerseits kompatibel sind, andererseits ein gemeinsames nicht entartetes Spektrum besitzen. Dies ist nicht immer, aber oft möglich.

Wir betrachten dazu ein Beispiel: Der dreidimensionale harmonische Oszillator hat den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 \\ \mathcal{H}_i &= \frac{1}{2\mu} P_i^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 Q_i^2 \\ P_i &\longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad Q_i \longrightarrow x_i\end{aligned}$$

Mit $f_n(x)$, den Eigenfunktionen des linearen harmonischen Oszillators

$$\mathcal{H}_i f_n(x_i) = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) f_n(x_i)$$

ist

$$\begin{aligned}\{\psi_{n_1 n_2 n_3} : \psi_{n_1 n_2 n_3}(x) = f_{n_1}(x_1) f_{n_2}(x_2) f_{n_3}(x_3)\} \\ \mathcal{H} \psi_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \psi_{n_1 n_2 n_3}\end{aligned}$$

Der Eigenwert

$$\begin{aligned}E_n &= \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right) \\ N &= n_1 + n_2 + n_3\end{aligned}$$

ist g_N -fach entartet mit

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

Diese Entartung ist aber leicht „aufzuheben“, wenn wir die Operatoren \mathcal{H}_i selbst betrachten. Tatsächlich ist ($i \neq j$)

$$[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$$

und

$$\mathcal{H}_i \psi_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \psi_{n_1 n_2 n_3}$$

Wir können also noch neben \mathcal{H} die Operatoren \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 benutzen, um den Eigenvektor vollständig zu charakterisieren.

2.5 Der Drehimpuls, algebraisch

In der klassischen Mechanik ist der Bahndrehimpuls eines Massenpunktes durch

$$\vec{M} = \vec{x} \times \vec{p} = -\vec{p} \times \vec{x}$$

gegeben. Analog machen wir für den Drehimpuls-Operator in der Quantenmechanik den Ansatz

$$\begin{aligned} M_i &= \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} Q_j P_k \\ &= - \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} P_j Q_k \end{aligned}$$

(Beachten Sie die Nichtvertauschbarkeit von P_j und Q_k !). In Koordinatenrealisierung ist z. B.:

$$\vec{M} = \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Wir führen der Einfachheit halber noch den Operator

$$\vec{L} = \frac{1}{\hbar} \vec{M}$$

ein. Aus den Vertauschungsrelationen der Q_j, P_k ergibt sich dann

$$[L_j, L_k] = i \sum_m \varepsilon_{jkm} L_m$$

Wir werden zunächst einmal diese durch die $\{L_i\}$ aufgespannte Algebra studieren, bevor wir uns um eine spezielle Realisierung kümmern.

Die uns interessierende Algebra ist die Algebra der Polynome in den $\{L_i\}$, die die obige Vertauschungsrelation berücksichtigen. Wie beim harmonischen Oszillator suchen wir eine abstrakte Darstellung dieser Operatoren in einem möglichst kleinen Hilbert-Raum (irreduzible Darstellung), die außerdem noch

$$L_i^+ = L_i$$

befriedigt. Dazu bilden wir die Operatoren

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2$$

und bekommen

$$[L_3, L_{\pm}] = \pm L_{\pm}$$

Sei ψ_m ein Eigenvektor von L_3

$$L_3 \psi_m = m \psi_m$$

Dann ist

$$\begin{aligned} L_3(L_{\pm} \psi_m) &= L_{\pm} L_3 \psi_m \pm L_{\pm} \psi_m \\ &= (m \pm 1) L_{\pm} \psi_m \end{aligned}$$

d. h. L_{\pm} sind wieder „Leiter-Operatoren“, die den Eigenwert von L_3 um eins erhöhen oder erniedrigen. Wir betrachten ferner den Operator

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

der selbstadjungiert und nicht-negativ ist (Eigenwerte ≥ 0). Wir nehmen an, daß es einen Vektor ψ_m gibt, so daß

$$L_+\psi_m = 0 \quad \text{für } m = l$$

ist. Ferner sei ψ_l (bis auf einen skalaren Faktor) eindeutig. Dann ist zu verwenden, daß

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= L_+L_- + i[L_1, L_2] + L_3^2 \\ &= L_+L_- - L_3 + L_3^2 \\ &= L_-L_+ + L_3 + L_3^2 \end{aligned}$$

Also ist

$$\vec{L}^2\psi_l = l(l+1)\psi_l$$

Wie man leicht nachrechnet, ist

$$[\vec{L}^2, L_k] = 0 \quad \text{für alle } k \in \{1, 2, 3\}$$

speziell auch

$$[\vec{L}^2, L_\pm] = 0$$

Wir betrachten nun $L_-\psi_l$. Falls $L_-\psi_l \neq 0$ ist, ist er Eigenvektor zu \vec{L}^2

$$\vec{L}^2(L_-\psi_l) = l(l+1)(L_-\psi_l)$$

Ferner ist wegen der Selbstadjungiertheits-Forderung an die $\{L_i\}$

$$\begin{aligned} \|L_-\psi_l\|^2 &= (L_-\psi_l, L_-\psi_l) \\ &= (\psi_l, L_+L_-\psi_l) \\ &= (\psi_l, (\vec{L}^2 + L_3 - L_3^2)\psi_l) \\ &= (l(l+1) + l - l^2)\|\psi_l\|^2 \\ &= 2l\|\psi_l\|^2 \end{aligned}$$

Es folgt

$$l \geq 0$$

Falls $l = 0$ ist, so ist ψ_0 ein Basisvektor des eindimensionalen Raumes, der die triviale Darstellung der Drehimpuls-Algebra trägt

$$\begin{aligned} L_3\psi_0 &= 0 \\ \vec{L}^2\psi_0 &= 0 \\ L_\pm\psi_0 &= 0 \end{aligned}$$

Sei also $l > 0$. Dann ist mit

$$\|\psi_l\|^2 = 1$$

auch

$$\frac{L_-\psi_l}{(2l)^{\frac{1}{2}}} = \psi_{l-1}$$

ein Basisvektor mit

$$\begin{aligned} \vec{L}^2\psi_{l-1} &= l(l+1)\psi_{l-1} \\ L_3\psi_{l-1} &= (l-1)\psi_{l-1} \end{aligned}$$

Wir nehmen an, daß wir nach einer gewissen Zahl von Schritten durch Anwendung von L_- auf analoge Weise einen normierten Vektor ψ_m erhalten haben.

$$\begin{aligned} L_3\psi_m &= m\psi_m \\ \vec{L}^2\psi_m &= l(l+1)\psi_m \end{aligned}$$

Dann ist

$$\|L_-\psi_m\|^2 = (l(l+1) + m - m^2)\|\psi_m\|^2$$

Die Zahl der Schritte ist n

$$m = l - n.$$

Natürlich ist zu fordern

$$l(l+1) + m - m^2 \geq 0$$

Die Gleichung

$$l(l+1) + m - m^2 = 0$$

hat zwei Lösungen

$$m = \begin{cases} +l+1 \\ -l \end{cases}$$

Um von $m = l$ bis $m = -l$ zu gelangen, muß $2l$ ganzzahlig sein, dann werden $2l+1$ Schritte benötigt. In diesem Fall ist also

$$L_-\psi_{-l} = 0$$

Ist $2l$ nicht ganz, so wird

$$l(l+1) + (l-n) - (l-n)^2 = 2l + (2l-1)n - n^2 < 0$$

für hinreichend große n . Das ist aber ein Widerspruch (in diesem Fall ist die Forderung $L_k^+ = L_k$ nicht zu erfüllen.). Entsprechen läßt sich begründen, daß es einen Vektor ψ_l gibt, der von L_+ annihilert wird. Damit haben wir folgendes Ergebnis:

Unsere Drehimpuls-Algebra besitzt zu jedem $l \geq 0$, $2l$ ganz, eine $(2l+1)$ -dimensionale Darstellung mit der Basis

$$\{\psi_m; -l \leq m \leq +l, \text{ ganzzahlige Schritte}\}$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{L}^2\psi_m &= l(l+1)\psi_m \\ L_3\psi_m &= m\psi_m \\ L_\pm\psi_m &= +(l(l+1) \mp m - m^2)^{\frac{1}{2}}\psi_{m\pm 1} \end{aligned}$$

Hier wurde die Phase von $L_\pm\psi_m$ willkürlich fixiert.

2.6 Der Bahndrehimpuls, analytisch

Wir betrachten nun die Drehimpuls-Algebra in Koordinatenrealisierung

$$L_j = \frac{1}{i} \sum_{k,l} \varepsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}$$

Falls wir Polarkoordinaten einführen,

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos \phi \sin \Theta \\ x_2 &= r \sin \phi \sin \Theta \\ x_3 &= r \cos \Theta \end{aligned}$$

so bekommen wir

$$\begin{aligned} L_3 &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ L_{\pm} &= e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \Theta} + i \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \bar{L}^2 &= -\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left[\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right] - \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \end{aligned}$$

Die radiale Variable ist also herausgefallen. Als Eigenfunktionen suchen wir also Funktionen $Y(\Theta, \phi)$, die einen $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$ bilden mit

$$(Y_1, Y_2) = \int d\phi \int d\Theta \sin \Theta \overline{Y_1(\Theta, \phi)} Y_2(\Theta, \phi)$$

(das Integrationsmaß ist dasselbe, das bei d^3x in Polarkoordinaten übrigbleibt; es ist drehinvariant, da d^3x und $r^2 dr$ drehinvariant sind).

Den Zugang zu den Eigenfunktionen Y der Operatoren L_3 ; \bar{L}^2 findet man am leichtesten über die sogenannten homogenen Polynome. Wir betrachten

$$\sum_{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = l} C_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} x_3^{\alpha_3}$$

$l \in \mathbb{N}$, $C_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}$ zunächst beliebig. Es ist offensichtlich, daß die Anwendung der Operatoren L_k auf ein solches Polynom wieder ein analoges Polynom liefert, denn diese Eigenschaft hat jeder Operator $x_k \frac{\partial}{\partial x_i}$. Dabei bleibt l ungeändert. Die homogenen Polynome vom Grad l spannen einen Raum der Dimension

$$d_l = \binom{l+2}{2} = \frac{1}{2}(l+1)(l+2)$$

auf, während wir nach einem Raum der Dimension $2l+1$ suchen. Das ist aber leicht zu verstehen, denn bei $l=2$ ist

$$\begin{aligned} d_2 &= 6; \\ 2 \cdot 2 + 1 &= 5. \end{aligned}$$

Tatsächlich gibt es einen eindimensionalen invarianten Unterraum, aufgespannt durch

$$r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

r^2 ist invariant. Also kann man auch den Raum vom Grad l zerlegen in einen Raum $r^2 \times$ beliebige Polynome vom Grad $l-2$ und den Rest. Dieser Rest hat die Dimension

$$d_l - d_{l-2} = 2l + 1$$

Also: Suche alle Polynome vom Grad l , die nicht durch r^2 teilbar sind.

Da die L_k nur auf die Winkelvariablen wirken, definieren wir

$$x_i = r \cdot e_i(\phi, \Theta); \quad \begin{cases} e_1 = \sin \Theta \cos \phi \\ e_2 = \sin \Theta \sin \phi \\ e_3 = \cos \Theta \end{cases}$$

und eliminieren r^l aus den homogenen Polynomen. Die der Basis

$$\{\psi_m; -l \leq m \leq +l; \underline{l \text{ ganz}}\}$$

entsprechenden Funktionen

$$Y_m^l(\Theta, \phi)$$

heißen Kugelfunktionen. Aus

$$L_3 Y_m^l(\Theta, \phi) = m Y_m^l(\Theta, \phi)$$

folgt

$$Y_m^l(\Theta, \phi) = y_m^l(\Theta) e^{im\phi}$$

Wir haben für

$$Y_{-l}^l(\Theta, \phi) : L_- Y_{-l}^l(\Theta, \phi) = 0$$

also

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \Theta} + l \cot \Theta \right) y_{-l}^l(\Theta) = 0.$$

Diese Gleichung ist einfach zu lösen:

$$\begin{aligned} y_{-l}^l(\Theta) &= c_l (\sin \Theta)^l; \\ y_{-l}^l(\Theta) \cdot e^{-il\phi} &= c_l (e_1 - ie_2)^l. \end{aligned}$$

Wir machen den Ansatz

$$\begin{aligned} y_m^l(\Theta) &= (\sin \Theta)^m U_{l,m}(\cos \Theta); \\ U_{l,-l} &= c_l (\sin \Theta)^{2l} = c_l (1 - \cos^2 \Theta)^l. \end{aligned}$$

Dann folgt durch Anwenden von L_+ :

$$\begin{aligned} L_+ e^{im\phi} y_m^l(\Theta) &= e^{i(m+1)\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} - m \cot \Theta \right) y_m^l(\Theta) \\ \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} - m \cot \Theta \right) (\sin \Theta)^m U_{l,m}(\cos \Theta) &= (\sin \Theta)^m \frac{\partial}{\partial \Theta} U_{l,m}(\cos \Theta) \\ &= -(\sin \Theta)^{m+1} \frac{\partial}{\partial \cos \Theta} U_{l,m}(\cos \Theta) \end{aligned}$$

und damit für $n \in \mathbb{N}$, $n - l = m$:

$$(L_+)^n Y_{-l}^l(\Theta, \phi) = (-1)^n c_l e^{im\phi} (\sin \Theta)^m \left(\frac{\partial}{\partial \cos \Theta} \right)^n (1 - \cos^2 \Theta)^l.$$

Nun definiert man die assozierten Legendre-Polynome (Funktionen) durch

$$\begin{aligned} P_l^m(\varrho) &= \frac{1}{2^l l!} (1 - \varrho^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{d\varrho} \right)^{l+m} (\varrho^2 - 1)^l, \\ -1 \leq \varrho \leq 1 \quad &(\text{Polynome, falls } m \text{ gerade}) \end{aligned}$$

die im Falle $m = 0$ in die Legendre-Polynome übergehen

$$P_l(\varrho) := P_l^0(\varrho).$$

Damit können wir schreiben

$$(L_+)^n Y_{-l}^l(\Theta, \phi) = (-1)^m c_l \cdot 2^l \cdot l! \cdot e^{im\phi} \cdot P_l^m(\cos \Theta).$$

Andererseits ist dieser Ausdruck gleich (2.5, S. 32)

$$= \left\{ \prod_{m'=-l}^{m-1} [l(l+1) - m' - m'^2]^{\frac{1}{2}} \right\} Y_m^l(\Theta, \phi).$$

Der Vorfaktor ist leicht auszurechnen

$$\begin{aligned} l(l+1) - m' - m'^2 &= (l+m'+1)(l-m'); \\ \prod_{m'=-l}^{m-1} (l+m'+1) &= (l+m)!; \\ \prod_{m'=-l}^{m-1} (l-m') &= \frac{(2l)!}{(l-m)!}; \end{aligned}$$

also zusammen

$$\left[(2l)! \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} Y_m^l(\Theta, \phi).$$

Nun ist nur c_l festzulegen. Die Normierung von Y_{-l}^l liefert

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta |Y_{-l}^l|^2 \\ &= |c_l|^2 \cdot 2\pi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta (\sin \Theta)^{2l} \end{aligned}$$

Dieses Integral berechnen wir rekursiv:

$$\begin{aligned} I_k &= \int_0^\pi d\Theta (\sin \Theta)^k, \quad k \in \mathbb{N} \\ &= \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta (\sin \Theta)^{k-1} \\ &= \int_0^\pi d\Theta \cos \Theta (k-1) (\sin \Theta)^{k-2} \cos \Theta \\ &\quad \text{(für } k \geq 2 \text{ verschwinden die ausintegrierten Bestandteile)} \\ &= (k-1)(I_{k-2} - I_k) = \frac{k-1}{k} I_{k-2}. \end{aligned}$$

Da $I_1 = 2$ ist, folgt

$$\begin{aligned} I_{2l+1} &= \frac{2l}{2l+1} \cdot \frac{2l-2}{2l-1} \cdots \frac{2}{3} I_1 \\ &= \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!} \cdot 2. \end{aligned}$$

Wir bekommen (Phase ad hoc):

$$c_l = \frac{1}{2^l l!} \left[\frac{(2l+1)!}{2\pi} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Damit ist endgültig

$$Y_m^l(\Theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} (-1)^m e^{im\phi} P_l^m(\cos \Theta).$$

Nun einige Bemerkungen zu den Legendre-Funktionen. Nach Definition ist

$$2^l l! P_l^m(\varrho) = (1 - \varrho^2)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{d\varrho} \right)^{l+m} (\varrho^2 - 1)^l.$$

wir zerlegen

$$(\varrho^2 - 1)^l = (\varrho - 1)^l (\varrho + 1)^l$$

und wenden die Leibniz-Formel an⁴

$$2^l l! P_l^m(\varrho) = (l!)^2 (l+m)! \sum_{k=0}^{l+m} \frac{(-1)^{l-k}}{k!(l-k)!(k-m)!(l+m-k)!} (1-\varrho)^{l-k+\frac{m}{2}} (1+\varrho)^{k-\frac{m}{2}}.$$

Wenn man in der Summe $m = -m'$ setzt, ferner den Summationsindex k durch k' ersetzt

$$k - \frac{m}{2} = k' - \frac{m'}{2} \quad (k - m = k', \quad k = k' - m')$$

so entsteht dieselbe Summe wieder, aber mit $(-1)^{m'}$ multipliziert. Folglich gilt

$$P_l^m(\varrho) = \frac{(l+m)!}{(l-m)!} (-1)^m P_l^{-m}(\varrho).$$

Damit erhalten wir eine zweite Darstellung der Kugelfunktionen

$$Y_m^l(\Theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{im\phi} P_l^{-m}(\cos \Theta).$$

Sei nun $m \geq 0$. Dann folgt aus der Orthogonalität der Kugelfunktionen

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \overline{Y_{m_1}^{l_1}(\Theta, \phi)} Y_{m_2}^{l_2}(\Theta, \phi) = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2},$$

$$\int_{-1}^{+1} d\varrho P_{l_1}^m(\varrho) P_{l_2}^m(\varrho) = \frac{2}{2l_1+1} \frac{(l_1+m)!}{(l_1-m)!} \delta_{l_1 l_2}.$$

Schreiben wir

$$P_l^m(\varrho) = (1 - \varrho^2)^{\frac{m}{2}} f_l^m(\varrho)$$

und halten wir m fest, so sind die $\{f_l^m(\varrho)\}$ orthogonale Polynome vom Grad $l - m$ mit der Gewichtsfunktion

$$\int_a^b d\varrho w(\varrho) \overline{f_l(\varrho)} f_{l'}(\varrho) = \delta_{ll'} h_l$$

$$w(\varrho) = (1 - \varrho^2)^m;$$

$$-a = +b = +1;$$

$$h_l = \frac{2}{2l+1} \cdot \frac{(l+m)!}{(l-m)!}.$$

Im Falle $m = 0$ ergeben sich die analogen Formeln für die Legendre-Polynome.

Die Operatoren L_K waren im Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$ definiert. Da die $\{Y_m^l(\Theta, \phi)\}$ alle in diesem Raum liegenden simultanen Eigenfunktionen von \vec{L}^2, L_3 bilden, sind

⁴Hier ist $(n!)^{-1}$ für negatives ganzes n gleich null zu setzen.

die $\{Y_m^l(\Theta, \phi)\}$ eine Basis in $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$. Jede Funktion $F(\Theta, \phi) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$ läßt sich entwickeln

$$F(\Theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{lm} Y_m^l(\Theta, \phi);$$

$$a_{lm} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta F(\Theta, \phi) \overline{Y_m^l(\Theta, \phi)}$$

und die Konvergenz der Reihe ist im Sinne der Topologie von $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$. Diese Entwicklung werden wir im nächsten Abschnitt benutzen. (Siehe auch A.3 S. 109)

Wir haben mit den Bahndrehimpulsen als Differentialoperatoren begonnen und aus diesen eine Vertauschungs-Algebra (Lie-Algebra) gewonnen. Mit algebraischen Methoden wurde zu jedem l , $2l \in \mathbb{N}$, eine Darstellung konstruiert. Durch Rückgang auf die Differentialoperatorform haben wir dann aber nur für ganzzahliges l eine konkrete Realisierung dieser Darstellung als Unterraum im $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2)$ gefunden. Die halbzahligen l kommen dabei nicht vor. Wenn wir uns auf den Standpunkt stellen, die Lie-Algebra sei eine fundamentale Struktur, die einen Drehimpuls auszeichnet, so müssen wir uns fragen, ob der Bahndrehimpuls tatsächlich die vollständige Drehimpulsobservable eines quantenmechanischen Massenpunktes ist. In der Tat hat ein Elektron einen Spin mit dem Eigenwert $l = \frac{1}{2}$ und wir müssen den gesamten Drehimpuls des Elektrons aus einem Bahn- und einem Spin-Drehimpuls zusammensetzen. Wie das gemacht wird, werden wir später sehen.

2.7 Ebene Welle und Kugelwellen

Ein freier Massenpunkt bewegt sich in der klassischen Mechanik auf einer geraden Bahn. Sein Bahndrehimpuls bezüglich eines festen Koordinatenanfangspunktes P_0 ist

$$\vec{M} = \vec{x} \times \vec{p}$$

und ebenfalls konstant. In der Quantenmechanik sind \vec{p} und \vec{M} nicht vertauschbare Operatoren. Die ebene Welle

$$\psi_{\vec{k}}(x) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

ist nicht Eigenfunktion des Drehimpuls-Operators. Nehmen wir \vec{k} in z -Richtung an und führen Polarkoordinaten ein, so können wir eine Reihenentwicklung nach den Kugelfunktionen vornehmen.

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ikr \cos \Theta} = \sum_{l,m} a_{lm}(r) Y_m^l(\Theta, \phi)$$

mit

$$a_{lm}(r) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \overline{Y_m^l(\Theta, \phi)} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ikr \cos \Theta}.$$

Da die Welle nicht von ϕ abhängt, ist

$$a_{lm}(r) = a_{l_0}(r) \delta_{l_0},$$

$$a_{l_0}(r) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta e^{ikr \cos \Theta} \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos \Theta).$$

Dieses Integral kann einfach integriert werden. Mit

$$\rho = kr, \quad \varrho = \cos \Theta$$

haben wir

$$\int_{-1}^1 d\varrho e^{i\rho\varrho} P_l(\varrho) = \frac{1}{2^l l!} \int_{-1}^1 d\varrho e^{i\rho\varrho} \left(\frac{d}{d\varrho} \right)^l (\varrho^2 - 1)^l.$$

Partielle Integration liefert

$$= \frac{(-i\rho)^l}{2^l l!} \int_{-1}^1 d\varrho e^{i\rho\varrho} (\varrho^2 - 1)^l$$

Hilfsdifferentiation ergibt

$$\frac{(+i\rho)^l}{2^l l!} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 \right)^l \frac{2 \cdot \sin \rho}{\rho}.$$

Wir wollen jedoch noch einen anderen Weg gehen. Die ebene Welle ist eine Eigenfunktion des Operators der kinetischen Energie $T = \frac{1}{2m} \vec{P}^2$

$$\begin{aligned} T\psi_{\vec{k}}(x) &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \psi_{\vec{k}}(x); \\ T &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \end{aligned}$$

Im Ansatz

$$T\psi(x) = E\psi(x), \quad E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

föhren wir Polarkoordinaten ein. Dabei verwenden wir Formeln aus der klassischen Mechanik oder Elektrodynamik

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \cdot \vec{L}^2$$

mit dem Drehimpulsoperator \vec{L}^2 wie in 2.6.1 (S. 33) angegeben. Wir erkennen, daß wir T und \vec{L}^2 sowie L_3 gleichzeitig diagonalisieren können und machen den Ansatz

$$\psi(x) = X_{Elm}(r) Y_m^l(\Theta, \phi).$$

Damit ergibt sich als Gleichung für $X_{Elm}(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} l(l+1) \right] X_{Elm}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} X_{Elm}(r)$$

oder

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} l(l+1) + k^2 \right] X_{Elm}(r) = 0.$$

Wir sehen, daß $X_{Elm}(r)$ nicht von m abhängt und schreiben dementsprechende für $X_{Elm}(r)$ $X_{El}(r)$. Ferner föhren wir die dimensionslose Variable $\varrho = kr$ ein. Substituieren wir

$$X_{El}(r) = \frac{Z_{l+\frac{1}{2}}(\varrho)}{\sqrt{\varrho}}$$

so ergibt sich für $Z_{l+\frac{1}{2}}(\varrho)$ die Besselsche Differentialgleichung

$$Z_{l+\frac{1}{2}}''(\varrho) + \frac{1}{\varrho} Z_{l+\frac{1}{2}}'(\varrho) + \left(1 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{\varrho^2}\right) Z_{l+\frac{1}{2}}(\varrho) = 0$$

mit den Lösungen $Z_{l+\frac{1}{2}}(\varrho)$, Zylinderfunktionen zum Index $l + \frac{1}{2}$. Die Funktionen

$$\begin{aligned} j_l(\varrho) &= \left(\frac{\pi}{2\varrho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\varrho) \quad (\text{Bessel}) \\ y_l(\varrho) &= \left(\frac{\pi}{2\varrho}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{l+\frac{1}{2}}(\varrho) \quad (\text{Neumann}) \\ h_n^{(1,2)}(\varrho) &= \left(\frac{\pi}{2\varrho}\right)^{\frac{1}{2}} H_{n+\frac{1}{2}}^{(1,2)}(\varrho) \quad (\text{Hankel}) \end{aligned}$$

heißen sphärische Zylinderfunktionen ([A. + St.] Kap. 10) Damit ist

$$X_{El}(r) = \begin{cases} j_l(\varrho) \text{ reell} \\ h_l^{(1,2)}(\varrho) \text{ komplex} \\ y_l(\varrho) \text{ reell} \end{cases}, \quad \text{irgendeine Linearkombination}$$

Ferner können wir verwenden

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\varrho) &= j_l(\varrho) + iy_l(\varrho) \\ h_l^{(2)}(\varrho) &= j_l(\varrho) - iy_l(\varrho) \end{aligned}$$

In [A. + St.] finden wir (Gleichung 10.1.14)

$$j_l(\varrho) = \frac{(-i)^l}{2} \int_{-1}^{+1} d\xi e^{i\varrho\xi} P_l(\xi)$$

so daß wir auch bekommen

$$a_{l_0}(r) = \left(\frac{2l+1}{2\pi^2}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot i^l \cdot j_l(kr)$$

Die Besselfunktionen $j_l(\varrho)$ verhalten sich bei $\varrho \rightarrow 0$ regulär, die anderen $h_l^{(1,2)}(\varrho)$, $y_l(\varrho)$ singular gemäß⁵ [A. + St.] 10.1.2, 10.1.3

$$\begin{aligned} j_l(\varrho) &= +\frac{\varrho^l}{(2l+1)!!} (1 + O(\varrho^2)) \\ y_l(\varrho) &= -\frac{(2l-1)!!}{\varrho^{l+1}} (1 + O(\varrho^2)) \\ l &\in \mathbb{N} \end{aligned}$$

Bei der Zerlegung der ebenen Welle treten nur die bei $\varrho = 0$ regulären Besselfunktionen auf, da die ebene Welle selbst bei $\varrho = 0$ unendlich oft differenzierbar ist.

Die Funktion $j_l(\varrho)$ ist oft definiert durch [A. + St.] 10.1.25

$$j_l(\varrho) = \varrho^l \left(-\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho}\right)^l \frac{\sin \varrho}{\varrho}$$

⁵Die „Doppel-Fakultät“ bedeutet $(2n-1)!! = (2n-1)(2n-3)(2n-5)\dots 3 \cdot 1$

Hieraus folgt

$$j_0(\varrho) = \frac{\sin \varrho}{\varrho}$$

sowie die Rekursion

$$(2.7.1) \quad j_{l+1}(\varrho) = \varrho^{l+1} \left(-\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right) \varrho^{-l} j_l(\varrho)$$

Mit Hilfe der Differentialgleichung (=Schrödingergleichung)

$$(2.7.2) \quad \left[\frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} - \frac{1}{\varrho^2} l(l+1) + 1 \right] j_l(\varrho) = 0$$

ergibt sich mit etwas Algebra die Rekursion

$$(2.7.1) + (2.7.2) \Rightarrow j_{l+1}(\varrho) = \frac{1}{2(l+1)} \varrho^{l+1} \left[\frac{d^2}{d\varrho^2} + 1 \right] \varrho^{-l} j_l(\varrho)$$

also wird daraus

$$j_l(\varrho) = \frac{1}{2^l l!} \varrho^l \left[\frac{d^2}{d\varrho^2} + 1 \right]^l \frac{\sin \varrho}{\varrho}$$

womit wir noch einmal (2.7 S. 39)

$$a_{l_0}(r) = \left(\frac{2l+1}{2\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot i^l \cdot j_l(kr)$$

erhalten. Damit haben wir die Entwicklung der ebenen Welle als

$$\begin{aligned} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ikr \cos \Theta} &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+1}{2\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot i^l \cdot j_l(kr) \cdot Y_0^l(\Theta, \phi) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} (2l+1) i^l j_l(kr) \cdot P_l(\cos \Theta) \end{aligned}$$

Wir kehren noch einmal zur Eigenwertgleichung

$$T\psi(x) = E\psi(x)$$

zurück. Die allgemeine Lösung für ψ bei festem E ist eine beliebige Linearkombination

$$j_l(kr) \cdot Y_m^l(\Theta, \phi), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Die $h_0^{(1,2)}(kr)$ sind sogar quadratintegabel bei $\varrho = 0$,

$$\int_0^\varepsilon dr r^2 |h_0^{(1,2)}(kr)|^2 < \infty, \quad \varepsilon > 0$$

Warum also werden sie aus der Lösungsmannigfaltigkeit ausgeschlossen? Die Antwort ist einfach: Im Sinne von Distributionen sind sie nicht Lösung der Eigenwertgleichung für T , sondern erfüllen, wie wir zeigen werden⁶:

$$(\Delta + k^2)h_0^{(1,2)}(kr) = \pm i \frac{4\pi}{k} \cdot \delta(\vec{x})$$

⁶(1) entspricht dem oberen, (2) dem unteren Vorzeichen

Mit

$$h_0^{(1,2)}(\varrho) = \mp i \varrho^l \left(-\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{e^{\pm i k \varrho}}{\varrho}$$

haben wir also zu beweisen

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{\pm i k r}}{r} = -4\pi \cdot \delta(\vec{x})$$

Dazu benutzen wir eine Testfunktion $g(s)$. Natürlich ist

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{\pm i k r}}{r} = 0, \quad r > 0;$$

also ist

$$\int_0^\varepsilon dr r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta g(x) (\Delta + k^2) \frac{e^{\pm i k r}}{r}$$

von ε unabhängig. Führen wir die Differentiation aus, so ergibt sich als maximal singulärer Term

$$\Delta \cdot \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{x})$$

Alle anderen Terme liefern bei der Integration $O(\varepsilon)$. Damit ist die Behauptung bewiesen.

Seien drei Einheitsvektoren aus dem \mathbb{R}^3 gegeben

$$\vec{e}, \vec{e}_1, \vec{e}_2 \quad \begin{cases} \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = \cos \Theta_{12} \\ \vec{e} \cdot \vec{e}_1 = \cos \Theta_1 \\ \vec{e} \cdot \vec{e}_2 = \cos \Theta_2 \end{cases}$$

oder ausführlicher in einer Basis

$$\vec{e} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{e}_{1,2} = \begin{pmatrix} \sin \Theta_{1,2} \cos \phi_{1,2} \\ \sin \Theta_{1,2} \sin \phi_{1,2} \\ \cos \Theta_{1,2} \end{pmatrix}$$

Dann gilt der „Kosinussatz der sphärischen Trigonometrie“ (wie man leicht nachrechnet)

$$\cos \Theta_{12} = \cos \Theta_1 \cdot \cos \Theta_2 + \sin \Theta_1 \cdot \sin \Theta_2 \cdot \cos(\phi_1 - \phi_2)$$

Das ist der Spezialfall der allgemeineren Formel (für $l = 1$)

$$P_l(\cos \Theta_{12}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} \overline{Y_m^l(\Theta_1, \phi_1)} Y_m^l(\Theta_2, \phi_2)$$

Auf den Beweis möchte ich hier nicht eingehen, da er mit den entsprechenden Methoden (die uns später zur Verfügung stehen werden) sehr einfach ist.

Unter Benutzung dieser Formel können wir jetzt jede ebene Welle entwickeln:

$$\vec{k} = k \cdot \vec{e}_1$$

$$\vec{x} = r \cdot \vec{e}_2$$

$$\vec{e} \quad : \quad z\text{-Achse des Polarkoordinatensystems}$$

Dann setzt man diesen Ausdruck für $P_l(\cos \Theta_{12})$ in die Entwicklung von $e^{i k r \cos \Theta_{12}}$ ein.

2.8 Unschärferelationen

Wir beobachten zwei Observable A und B in einem Zustand ψ , $|\psi| = 1$. Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß die Erwartungswerte verschwinden

$$(\psi, A\psi) = (\psi, B\psi) = 0$$

indem wir A durch

$$A - (\psi, A\psi) \cdot \mathbf{I}$$

ersetzen etc. Die Streuung von A und B ist danach

$$\begin{aligned} (\psi, (A - (\psi, A\psi)\mathbf{I})^2\psi) &= (\Delta A)^2 \\ &= (\psi, A^2\psi) - (\psi, A\psi)^2 \\ &= (\psi, A^2\psi) \\ (\Delta B)^2 &= (\psi, B^2\psi) \end{aligned}$$

(allgemein wäre $(\Delta C)^2 = (\psi, C^2\psi) - (\psi, C\psi)^2$).

Wir betrachten nun den Erwartungswert des positiven selbstadjungierten Operators

$$(A + i\lambda B)(A - i\lambda B), \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Es ergibt sich

$$(\psi, (A + i\lambda B)(A - i\lambda B)\psi) = (\psi, A^2\psi) + \lambda(\psi, i[B, A]\psi) + \lambda^2(\psi, B^2\psi)$$

Dies ist ein quadratisches nichtnegatives Polynom in λ

$$a\lambda^2 + b\lambda + c \geq 0$$

Folglich ist

$$b^2 - 4ac \leq 0$$

Nun ist jedoch

$$\begin{aligned} a &= (\Delta B)^2 \\ b &= (\Delta A)^2 \end{aligned}$$

also

$$\begin{aligned} 4(\Delta A \Delta B)^2 &\geq (\psi, i[B, A]\psi)^2 \\ \Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{1}{2} |(\psi, i[B, A]\psi)| \end{aligned}$$

(der Erwartungswert von $i[B, A]$ ist reell). Dies ist die allgemeine Unschärferelation der Quantenmechanik. Falls

$$[A, B] = 0$$

so ist die triviale Aussage

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq 0$$

Wir wollen uns nun einige Beispiele ansehen. Der bekannteste Fall ist

$$\text{in } \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad \begin{cases} A = P_i \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \\ B = Q_j \longrightarrow x_j \end{cases}$$

also

$$\Delta P_i \cdot \Delta Q_j \geq \delta_{ij} \frac{\hbar}{2}$$

Man kann sich hier die Frage stellen, für welche ψ das Gleichheitszeichen gilt. Das wollen wir jedoch den Übungen überlassen.

Wenn ein Massenpunkt frei auf einer Kreisbahn laufen kann, so gibt es einen Hilbertraum $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^1)$ von Wellenfunktionen $f(\varphi)$, $-\pi \leq \varphi \leq +\pi$. Der Impuls ist dann

$$P \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Was ist der Ortsoperator? Wenn wir ihn mit dem Multiplikationsoperator φ identifizieren, so müssen wir den Sprung bei $\varphi = \pm\pi$ beachten

$$[P, Q] \longrightarrow \frac{\hbar}{i} [1 - 2\pi\delta(\varphi - \pi)]$$

Mit der Eigenfunktion von P

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

wird

$$\Delta P = 0, \quad \Delta Q = \frac{\pi}{\sqrt{3}}$$

während

$$(f_m, i[P, Q]f_m) = \hbar(1 - 1) = 0.$$

Die Deltafunktion bewahrt uns vor einem Widerspruch.

Schließlich betrachten wir die Drehimpuls-Operatoren M_1 , M_2 ,

$$[M_1, M_2] = i\hbar M_3$$

und einen Eigenzustand ψ_m^l von \vec{M}^2 und M_3 . Tatsächlich ist dann

$$(\psi_m^l, (M_1 \pm iM_2)\psi_m^l) \sim (\psi_m^l, \psi_{m\pm 1}^l) = 0.$$

Wir erhalten dann

$$\Delta M_1 \cdot \Delta M_2 \geq \frac{1}{2} \hbar^2 |m|.$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned} (\psi_m^l, M_1^2 \psi_m^l) &= (\psi_m^l, M_2^2 \psi_m^l) \\ &= \frac{1}{2} (\psi_m^l, (\vec{M}^2 - M_3^2) \psi_m^l) \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 [l(l+1) - m^2], \end{aligned}$$

so daß die Unschärferelation in diesem Fall beinhaltet

$$\frac{1}{2} \hbar^2 [l(l+1) - m^2] \geq \frac{1}{2} \hbar^2 |m|$$

Das ist bei $m = \pm l$ eine Gleichung, bei $m = 0$ aber eine schlechte Abschätzung.

2.9 Thermische Gesamtheit und andere gemischte Zustände

In einem Mikro- oder Makrosystem ist bei Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T die Wahrscheinlichkeit, die Energie E zu messen

$$w(E) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{kT}}$$

wobei

$$Z = \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Zustände}}} e^{-\frac{E}{kT}}$$

Die ursprünglich klassische Aussage läßt sich leicht auf die Quantenmechanik übertragen. Sei also ein Mikrosystem (Atom etc.) mit diskretem Energiespektrum $\{E_n\}$ gegeben. Dann ist

$$\begin{aligned} w(E_n) &= \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{kT}} \\ Z &= \sum_{\substack{\text{alle Eigenfunk-} \\ \text{tionen von } \mathcal{H}}} e^{-\frac{E_n}{kT}} \\ &= \sum_n g_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad g_n \in \mathbb{N} : \text{Entartungsgrad} \end{aligned}$$

Es ist dann offensichtlich der Erwartungswert der Energie

$$\langle E \rangle = \sum_{\substack{\text{alle Eigenfunk-} \\ \text{tionen von } \mathcal{H}}} \frac{E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z}$$

Wir wollen diese Formel in der Quantenmechanik als

$$\langle E \rangle = Sp(\varrho \mathcal{H})$$

schreiben. Was ist dann ϱ ? Rechnen wir die Spur in der Basis der Eigenvektoren von \mathcal{H} aus, so ist

$$\langle E \rangle = \sum_{\substack{\text{alle Eigenfunk-} \\ \text{tionen von } \mathcal{H}}} E_n \cdot \varrho_{nn}$$

also

$$\varrho_{nn} = \frac{E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z}$$

Seien $\{P_n\}$ die Projektions-Operatoren auf den Unterraum mit Eigenwert E_n . Dann ist

$$\mathcal{H} = \sum_{\substack{\text{alle Eigenvektoren,} \\ \text{alle } E_n}} P_n E_n$$

Wir definieren nun

$$\begin{aligned} e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}} &= \sum_{E_n} P_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \\ Z &= Sp e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}} \\ \varrho &= \frac{e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}}}{Sp e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}}} \\ Sp \varrho &= 1 \end{aligned}$$

Wir sehen: ϱ ist selbstadjungiert und

1. ϱ hat nur nichtnegative Eigenwerte
2. $Sp \varrho = 1$.

Das ist die allgemeine Definition von ϱ als „Dichte-Operator“. ϱ muß eine Spur haben, also auch ein diskretes Spektrum.

Zur Vorbereitung der Diskussion unvollständiger Messungen werden wir uns eine Projektion auf einen Raum der Dimension unendlich vorstellen. Sei etwa $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ gegeben. Dann läßt sich jedes $f(x) \in \mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ schreiben als

$$f(x) = \sum_n \xi_{\langle n, n+1 \rangle}(x) \cdot f(x)$$

wobei

$$\xi_{\langle n, n+1 \rangle}(x) = \begin{cases} 1 & n < x \leq n+1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Entsprechend ist

$$\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty) = \bigoplus_n \mathcal{L}^2(n, n+1)$$

Jeder Raum $\mathcal{L}^2(n, n+1)$ ist ein Unterraum der Dimension unendlich. Als Basis in diesem Raum können wir die $\{P_l(z)\}_0^\infty$ benutzen (genauer $\sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(z)$), denn

1.

$$\int_{-1}^{+1} dz P_{l_1}(z) P_{l_2}(z) = \frac{2}{2l_1+1} \delta_{l_1 l_2}$$

2. Wir bilden das Intervall $\langle -1, +1 \rangle$ linear auf $\langle n, n+1 \rangle$ ab durch

$$z = ax + b, \quad an + b = -1, \quad a(n+1) + b = +1$$

$$a = 2, \quad b = -1 - 2n$$

$$a \int_n^{n+1} dx P_{l_1}(ax+b) P_{l_2}(ax+b) = \frac{2}{2l_1+1} \delta_{l_1 l_2}$$

Wenn wir eine Messung in einem kontinuierlichen Spektrum vernehmen, ist das Ergebnis (z. B. bei Ortsmessungen) nie ein Eigenwert, sondern ein Intervall aus dem Spektrum: „ x liegt zwischen x_1 und x_2 “. Also wird in den danach präparierten Zustand die Funktion

$$\xi_{\langle x_1, x_2 \rangle}(x)$$

eingehen. Nun ist aber durch dieses $\xi_{\langle x_1, x_2 \rangle}(x)$ gerade die Projektion $P_{\langle x_1, x_2 \rangle}$ definiert:

$$(P_{\langle x_1, x_2 \rangle} f)(x) = \xi_{\langle x_1, x_2 \rangle}(x) f(x)$$

Messungen im Kontinuum sind also grundsätzlich unvollständig.

Messen wir an einem H-Atom die Energie und finden die Hauptquantenzahl $n = 2$, so haben wir einen (ohne Spin) vierdimensionalen Unterraum vorliegen mit entsprechendem Projektions-Operator $P_{n=2}$. Wie ist der Zustand nach der Messung bestimmt? Er wird wieder durch einen Dichte-Operator ϱ wie oben beschrieben. Die

Antwort ist: der vor der Messung vorhandene Zustand ϱ_1 schlägt durch.

Man kann sich überlegen, daß alle physikalischen Vorstellungen durch folgenden Ansatz befriedigt werden können:

$$\varrho = \frac{P_{\langle x_1, x_2 \rangle} \varrho_1 P_{\langle x_1, x_2 \rangle}}{Sp(P_{\langle x_1, x_2 \rangle} \varrho_1 P_{\langle x_1, x_2 \rangle})}$$

oder im anderen Fall

$$\varrho = \frac{P_{n=2} \varrho_1 P_{n=2}}{Sp(P_{n=2} \varrho_1 P_{n=2})}$$

Operatoren, die eine Spur besitzen, heißen „Spurklasse-Operatoren“. Von selbstadjungierten Operatoren überträgt man den Begriff auf beliebige Operatoren gemäß

$$\left\{ \begin{array}{l} M \in \text{Spurklasse, falls } M = U_1 A U_2 \\ U_{1,2} \text{ unitär, } A \text{ selbstadjungiert und } \in \text{Spurklasse} \end{array} \right.$$

Dann gibt es einen Satz: Falls $\varrho \in$ Spurklasse ist, dann ist auch $\varrho \cdot M \in$ Spurklasse, falls M beschränkt ist. Damit ist gemeint (1 und 2 sind äquivalent):

1. $M = U_1 A U_2$, $\{\lambda\}$ Eigenwerte von A (auch Kontinuum erlaubt), $\sup |\lambda| < \infty$
- 2.

$$\sup_{\psi} \frac{\|M\psi\|}{\|\psi\|} := \|M\| < \infty$$

mit $\|M\|$ der „Operatornorm“

Benutzen wir in 2. für ψ Eigenvektoren, so sehen wir

$$\|M\| = \sup |\lambda|$$

Aus dem Satz folgt ($P^2 = P$ für alle Projektions-Operatoren):

$$Sp(P_{\langle x_1, x_2 \rangle} \varrho_1 P_{\langle x_1, x_2 \rangle}) = Sp(P_{\langle x_1, x_2 \rangle} \varrho_1)$$

ist wohldefiniert, da $\varrho_1 \in$ Spurklasse und $P_{\langle x_1, x_2 \rangle}$ beschränkt ist (Norm 1 ist selbstverständlich).

Also: Alle Zustände werden durch $\varrho \in$ Spurklasse beschrieben, und diese Eigenschaft wird durch unvollständige Messungen nicht gestört. Diese Eigenschaft wird auch nicht durch Zeitentwicklung gestört, wie wir später sehen werden.

Bei den thermischen (allgemein: statistischen) Gesamtheiten werden Statistik und Quantenmechanik verschmolzen. Messungen an einer Gesamtheit von Systemen im gleichen Zustand erfordern, daß auch das Wärmebad in allen Systemen gleich ist.

3 Die Dynamik

3.1 Die Schrödingergleichung

Als Dynamik bezeichnet man die Ursachen der zeitlichen Entwicklung eines physikalischen Systems. In der klassischen Mechanik wird die Dynamik z. B. durch die kanonischen Bewegungsgleichungen erfaßt,

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial t} = +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, f\}$$

wobei die Hamilton-Funktion $\mathcal{H}(p, q, t)$ also die gesamte Information über die im System wirkenden Kräfte enthält. Neben der Hamilton-Funktion ist die Kenntnis der Anfangswerte

$$p_i(0), q_i(0), \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, f\}$$

erforderlich, um die Lösung (Bahnkurve) $p_i(t), q_i(t)$ festzulegen. Mit dieser Lösung ist dann auch jede Observable $F(p, q)$ zur Zeit t bekannt: $F(p(t), q(t))$. Die Berechenbarkeit der Lösungen folgt aus den bekannten Existenz- und Eindeutigkeitsätzen aus der Theorie der Differentialgleichungen. Ein klassisches System heißt „lösbar“, wenn es eine hinreichende Zahl (nämlich f) von „Integralen der Bewegung“

$$G_i(p, q, t) = C_i, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, f\}$$

gibt, aus denen sich die Bahn durch algebraische Elimination ergibt. Dabei sind die Konstanten C_i durch die Anfangswerte ausdrückbar.

Solche Bewegungsabläufe von lösbaren Systemen sind „stabil“ in folgendem Sinne. Eine kleine Änderung der Anfangswerte $\{p_i(0), q_i(0)\}$ zieht auch kleine Änderungen der t -Werte $\{p_i(t), q_i(t)\}$ nach sich. Diese Stabilität wird im Rahmen der Lyapunowschen Theorie behandelt.

Neben den lösbaren dynamischen Systemen gibt es die chaotischen Systeme, deren Charakteristikum gerade das Fehlen von Stabilität ist. Ihre Bewegungsgleichungen lassen sich nur mit besonderen Vorsichtsmaßnahmen numerisch integrieren. Die Theorie der chaotischen Systeme ist noch nicht abgeschlossen. Wir werden in diesem Kapitel sehen, wie die quantenmechanischen Entsprechungen dieser Begriffe aussehen.

Wir nehmen an, ein System befinde sich im reinen Zustand ψ . Es ist natürlich nach der zeitlichen Änderung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

zu fragen. Die Antwort ist die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi.$$

Der Operator \mathcal{H} heißt Hamilton-Operator.

Ein intuitives Verfahren zum Auffinden eines Operator-Ansatzes für \mathcal{H} ist das sogenannte „Korrespondenzprinzip“. Man geht vom klassischen Ausdruck für die Hamilton-Funktion $\mathcal{H}(p, q, t)$ aus und versucht darin p_i, q_i durch quantenmechanische Operatoren P_i, Q_i zu ersetzen. Wegen der Nichtvertauschbarkeit der Operatoren ist dieses Verfahren nicht eindeutig. In den einfachen Fällen

$$\mathcal{H} = T(p) + V(q)$$

tritt allerdings noch kein Problem auf, da die Funktionen T und V sich auf eindeutige Operatoren fortsetzen lassen. Ein typischer Ausdruck, der keinen korrespondierenden Operator hat, ist

$$\sum_i q_i p_i$$

da

$$\sum_i Q_i P_i \neq \sum_i P_i Q_i$$

Doch das Postulat der Selbstadjungiertheit legt nahe, die Form

$$+\frac{1}{2} \sum_i (P_i Q_i + Q_i P_i)$$

zu wählen. Bei Ausdrücken der Form

$$\sum_i p_i^2 q_i^n \quad n \geq 2$$

hilft das Postulat auch nicht mehr. Es bleiben alternative Möglichkeiten wie ($n \geq 2$)

$$(3.1.1) \quad +\frac{1}{2} \sum_i (P_i^2 Q_i^n + Q_i^n P_i^2)$$

$$(3.1.2) \quad \sum_i P_i Q_i^n P_i$$

$$(3.1.1) - (3.1.2) = n(n-1) \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sum_i Q_i^{n-2}$$

offen.

Zur Definition eines Operators \mathcal{H} als Differential-Operator gehören eventuelle Randbedingungen dazu, falls Ränder existieren. Die Randbedingungen müssen linear sein, sonst ist der Operator selbst nicht linear. Ein freies Teilchen z. B., das sich auf der Halbgeraden $x \geq 0$ bewegen kann, hat den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = T = \frac{1}{2m} P^2 \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Dieser Operator erfordert zu seiner eindeutigen Bestimmung lineare Randbedingungen bei $x = 0$ von der allgemeinen Form

$$\begin{aligned} \alpha\psi(0) + \beta\psi'(0) &= 0, \\ |\alpha| + |\beta| &> 0. \\ \overrightarrow{a}e^{ikx} + \overleftarrow{b}e^{-ikx}, \quad \frac{a}{b} &= \frac{-\alpha+ik\beta}{+\alpha+ik\beta} \end{aligned}$$

Eine Bedingung von der Form

$$\psi(0) = 1$$

ist nicht linear und damit verboten. Denn bei der Konstruktion der Eigenfunktionen würde man sofort auf Schwierigkeiten stoßen. Die obige lineare Randbedingung regelt die Reflektion der Welle $\psi(x)$ bei $x = 0$ (nämlich die auftretende Phasenverschiebung). Sie enthält folglich die physikalische Information über die Wechselwirkung zwischen Wand und Teilchen.

In den meisten Fällen der Atomphysik ist die Ortsrealisierung des Hamilton-Operators durch ihre Einfachheit ausgezeichnet. Die in der Atomphysik auftretenden Probleme behandeln Elektronen in Wechselwirkung untereinander, mit den Kernen, und möglicherweise auch mit einem äußeren elektromagnetischen Feld. Der klassische Ausdruck für die Hamilton-Funktion eines Elektrons mit einem äußeren Feld

$$\varphi(\vec{x}, t), \quad \vec{A}(\vec{x}, t)$$

ist

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

(Gaußsche Einheiten). Der quantenmechanische Operator ist am einfachsten zu formulieren, wenn Q_i Multiplikationsoperatoren sind, also in der Ortsrealisierung,

$$\psi \longrightarrow Q_i \psi(\vec{x}) = x_i \psi(\vec{x}).$$

Dann entsprechen den klassischen Funktionen φ, \vec{A} die Multiplikationsoperatoren

$$\begin{aligned} \psi &\longrightarrow A_i(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \\ \psi &\longrightarrow \varphi(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

und

$$\mathcal{H}\psi(\vec{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e\hbar}{2mci} \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\nabla} \right] + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2(\vec{x}, t) + e\varphi(\vec{x}, t) \right\} \psi(\vec{x})$$

Dabei ist

$$\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \right) \psi = \left(\text{div } \vec{A} \right) \psi + 2\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi.$$

3.2 Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion freier Teilchen

Ein freies Teilchen mit dem Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2$$

und mit Zuständen $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ genügt der Schrödingergleichung

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

Wir benutzen die Eigenfunktionen von \mathcal{H} , um $\psi(\vec{x}, t)$ zu entwickeln.

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ \psi(\vec{x}, t) &= \int d^3k \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{k}, t) \end{aligned}$$

Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\psi(\vec{x}, t) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left(-\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{\psi}(\vec{k}, t) \right) \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{x}, t) &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t}(\vec{k}, t) \right] \end{aligned}$$

Aus der Eindeutigkeit der Fourier-Zerlegung folgt

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t}(\vec{k}, t) = -\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{\psi}(\vec{k}, t)$$

also nach Integration

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{k}, t) &= \hat{\psi}(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} \\ \omega(\vec{k}) &= \frac{E}{\hbar} \\ E &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \end{aligned}$$

Nebenbei: Falls ψ ein Eigenzustand von \mathcal{H} ist

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

gilt

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

Wir benutzen hiervon einen Spezialfall. Unser Ergebnis ist also

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3k \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) e^{-i\omega(k)t} \hat{\psi}(\vec{k})$$

Natürlich ist

$$\begin{aligned} \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 &= \int d^3k |\hat{\psi}(\vec{k}, t)|^2 \\ &= \int d^3k |\hat{\psi}(\vec{k})|^2 \end{aligned}$$

Die Norm ist zeitlich konstant. Das ist wieder ein Spezialfall der allgemeinen Aussage. Seien ψ_1, ψ_2 Zustände, die derselben Dynamik unterworfen sind. Dann ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\psi_1, \psi_2) &= \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t}, \psi_2 \right) + \left(\psi_1, \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{i} [-(\mathcal{H}\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \mathcal{H}\psi_2)] \\ &= 0 \end{aligned}$$

Wegen der zeitlichen Konstanz der Norm ist es zunächst schwer verständlich, daß bei glatten Wellenfunktionen und festem x gelten soll

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \psi(\vec{x}, t) = 0$$

Dafür kann man zwei Phänomene verantwortlich machen:

1. Weglaufen der Welle (Translation);
2. Auseinanderlaufen der Welle (Deformation).

Das Phänomen 2. läßt sich wie folgt behandeln: Sei $\psi(\vec{x}, t)$ (bei festem t) aus $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (glatt und stark abfallend) und die Wellenfunktion für ein freies Teilchen. Dann betrachten wir die Fourier-Zerlegung in \vec{k}

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

als eindimensionales Fourier-Integral in ω

$$= \int_0^\infty d\omega g(\omega) e^{-i\omega t}$$

Das gelingt auf folgende elementare Weise:

$$\begin{aligned} k &= |\vec{k}| = \left(\frac{2m}{\hbar} \omega \right)^{\frac{1}{2}} \\ d^3k &= k^2 dk d\Omega \\ k^2 \frac{dk}{d\omega} &= \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2} \omega^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Wir setzen dann

$$g(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \omega^{\frac{1}{2}} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d\Omega_k \hat{\psi}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

wobei im Integral nach der Integration k durch ω zu ersetzen ist. Das Integral hat danach eine Taylorreihe in ω um $\omega = 0$.

Nun kann man leicht zeigen, daß

$$g(\omega) \sim \omega^\alpha \quad \alpha \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{N} \\ (\omega \rightarrow 0)$$

impliziert

$$\int_0^\infty d\omega g(\omega) e^{-i\omega t} \underset{t \rightarrow \pm\infty}{\sim} |t|^{-\alpha-1}$$

(vgl. die Fourier-Transformierte der Distribution $\omega^\alpha \cdot \Theta(\omega)$). Also ist

$$\psi(\vec{x}, t) \sim |t|^{-\frac{3}{2}} \text{ für } t \rightarrow \pm\infty, x \text{ fest}$$

Das Auseinanderfließen wird also bewirkt durch die spezielle Funktion

$$\vec{k} \longrightarrow \omega(k)$$

die sogenannte Dispersions-Funktion. In der Elektrodynamik ist statt dessen

$$\omega(k) = c \cdot |\vec{k}|$$

In diesem Fall gibt es formstabile Wellenpakete, die nur durch Weglaufen verschwinden (mit Lichtgeschwindigkeit).

Die Verschiebung und das Auseinanderfließen lassen sich am Beispiel des Gaußschen Paketes rechnerisch einfach verfolgen. Wir setzen im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

$$\psi(\vec{x}, 0) = \alpha e^{-\frac{1}{2b^2} \vec{x}^2 + i\vec{k}_0 \cdot \vec{x}} \\ \alpha : \text{ Normierungskonstante}$$

Daraus ist $\psi(\vec{x}, t)$ zu berechnen. Dies ist das typische Anfangswert-Problem der Schrödingergleichung. Zur Lösung entwickeln wir nach den Eigenfunktionen von \mathcal{H} , in diesem Fall ebenen Wellen. Damit bekommen wir

$$\psi(\vec{x}, 0) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3k \hat{\psi}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

und durch Umkehrung

$$\hat{\psi}(\vec{k}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3x \psi(\vec{x}, 0) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \alpha \int d^3x e^{-\frac{1}{2b^2} \vec{x}^2 - i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{x}}$$

Die quadratische Ergänzung des Exponenten ist

$$\frac{1}{b^2} \vec{x}^2 + 2i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{x} = \left(\frac{\vec{x}}{b} + i(\vec{k} - \vec{k}_0)b \right)^2 + b^2(\vec{k} - \vec{k}_0)^2$$

Da die komplexe Translation

$$\vec{x} \longrightarrow \vec{x} + i(\vec{k} - \vec{k}_0)b^2$$

den Wert des Integrals nicht ändert, und

$$\int d^3x e^{-\frac{1}{2b^2}\vec{x}^2} = (2\pi b^2)^{\frac{3}{2}}$$

haben wir

$$\hat{\psi}(\vec{k}) = \alpha b^3 e^{-\frac{1}{2}b^2(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}$$

Also ist $\hat{\psi}(\vec{k})$ eine Gauß-Funktion mit Zentrum bei \vec{k}_0 .

Nun ist die Zeitentwicklung jeder ebenen Welle $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x})$ durch den Faktor

$$e^{-i\omega(\vec{k})t}$$

gegeben. Folglich ist

$$\psi(\vec{x}, t) = \alpha b^3 (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3k e^{-\frac{1}{2}b^2(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \cdot e^{-i\omega(\vec{k})t}$$

Der Exponent wird wieder quadratisch ergänzt

$$\begin{aligned} b^2(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 - 2i\vec{k} \cdot \vec{x} + 2i\frac{\hbar k^2}{2m}t &= \left(b^2 + i\frac{\hbar t}{m}\right) \vec{k}^2 \\ &\quad - 2(b^2\vec{k}_0 + i\vec{x}) \cdot \vec{k} \\ &\quad + b^2\vec{k}_0^2 \\ &= \left[\left(b^2 + i\frac{\hbar t}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \vec{k} - \left(b^2 + i\frac{\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} (b^2\vec{k}_0 + i\vec{x}) \right]^2 \\ &\quad + b^2 \left[\vec{k}_0^2 - \frac{(b^2\vec{k}_0 + i\vec{x})^2}{1 + i\frac{\hbar t}{mb^2}} \right] \end{aligned}$$

Nun ist ein Gauß-Integral

$$\int dx e^{-\frac{1}{2}Ax^2}$$

in A analytisch fortsetzbar von $A > 0$ in die ganze Halbebene $\mathbf{Re} A > 0$. Das machen wir uns zunutze:

$$\psi(\vec{x}, t) = \alpha \left(1 + \frac{i\hbar t}{mb^2}\right)^{-\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2}b^2 \left(\vec{k}_0^2 - \frac{(b^2\vec{k}_0 + i\vec{x})^2}{1 + i\frac{\hbar t}{mb^2}} \right) \right]$$

Für $t \rightarrow 0$ wird der Anfangswert $\psi(\vec{x}, 0)$ angenommen wie erwartet. Für $|t| \rightarrow \infty$ ist

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &\sim \alpha e^{-\frac{1}{2}b^2\vec{k}_0^2} \left(1 + \frac{i\hbar t}{mb^2}\right)^{-\frac{3}{2}} \\ &\sim t^{-\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

wie allgemein gezeigt wurde.

Die Verformung und Verschiebung des Gauß-Pakets erkennt man am besten am Betragsquadrat

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 = |\alpha|^2 \cdot \left(\frac{b}{b(t)}\right)^3 \cdot e^{-\frac{1}{b(t)^2} \left(\vec{x} - \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} \cdot t\right)^2}$$

$$b(t) = b \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{mb^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Die Translationsgeschwindigkeit ist

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m}$$

und die Verformung wird durch die zunehmende Breite

$$b(t) = b \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{mb^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

erfaßt. Der hier auftretende Ausdruck für die Translationsgeschwindigkeit \vec{v} ist identisch mit der Gruppengeschwindigkeit, die definiert wird durch

$$\vec{v} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \omega(k) \quad (\text{Gradient, zu nehmen im Maximum (Schwerpunkt) von } \psi(k))$$

und die Fortbewegung eines allgemeinen Wellenpaketes erfaßt.

3.3 Die Greensche Funktion für das Anfangswertproblem

Es gibt eine weitere Möglichkeit, die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ aus dem Anfangswert $\psi(\vec{x}, 0)$ zu berechnen, nämlich die Verwendung der Greenschen Funktion. Bei zeitlich konstantem \mathcal{H} (konservatives System) kann die Schrödingergleichung

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

formal integriert werden durch

$$\psi(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \psi(0)$$

Der Operator

$$U_t = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}$$

hat die Eigenschaft, unitär zu sein, d. h.

$$U_t^+ = U_t^{-1}$$

sowie

$$\begin{aligned} U_{t_1} U_{t_2} &= U_{t_1+t_2} \\ U_t^{-1} &= U_{-t} \\ U_0 &= \mathbf{I} \end{aligned}$$

zu erfüllen. Als Greensche Funktion bezeichnet man den zum abstrakten Operator U_t gehörenden Integralkern in Ortsrealisierung

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3 x' G(\vec{x}, \vec{x}'; t) \psi(\vec{x}', 0)$$

G genügt dann selbst der Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{x}} + V(\vec{x}) + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\right)G(\vec{x}, \vec{x}'; t) = 0$$

mit der Anfangsbedingung

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; 0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

In seltenen Fällen läßt sich die Greensche Funktion explizit berechnen. Dazu gehören der Fall des freien Teilchens und des harmonischen Oszillators. Wir betrachten die zeitseparierte Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise sei das Spektrum diskret angenommen, $\{E_n\}$

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

Dann entwickeln wir den Anfangswert $\psi(0)$ und den t -Wert $\psi(t)$ in diese Basis

$$\begin{aligned}\psi(0) &= \sum_n c_n \psi_n \\ \psi(t) &= \sum_n c_n(t) \psi_n\end{aligned}$$

Anwenden der Schrödingergleichung ergibt

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt}c_n(t) &= E_n c_n(t) \\ c_n(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \cdot c_n\end{aligned}$$

also ist

$$\begin{aligned}\psi(t) &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} c_n \psi_n \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\psi_n, \psi(0))\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\vec{x}) \overline{\psi_n(\vec{x}')}$$

Nun zurück zum freien Teilchen

$$\begin{aligned}\psi_n(\vec{x}) &\longrightarrow \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad \text{auf Deltafunktionen normiert (bez. } \vec{k}) \\ \sum_n &\longrightarrow \int d^3k, \quad \text{dazu gehöriges Maß} \\ E_n &\longrightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad G(\vec{x}, \vec{x}'; t) = (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}') - i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\end{aligned}$$

Das eindimensionale Integral

$$(2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik\cdot(x-x') - i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

konvergiert als uneigentliches Integral für $t \neq 0$. Sei $t > 0$. Wir haben als quadratische Ergänzung

$$-\frac{i}{2} \left[\left(\frac{\hbar t}{m} \right)^{\frac{1}{2}} k - \left(\frac{\hbar t}{m} \right)^{-\frac{1}{2}} (x - x') \right]^2 + \frac{i}{2} \left(\frac{\hbar t}{m} \right)^{-1} (x - x')^2$$

Das „Fresnelsche Integral“ (bedingt konvergent)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi e^{-\frac{i}{2}\varphi^2} &= e^{-\frac{\pi}{4}i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varphi e^{-\frac{1}{2}\varphi^2} \\ &= (2\pi)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\pi}{4}i} \end{aligned}$$

ist aus der Optik bekannt. Die Greensche Funktion ist dann das Produkt dreier eindimensionaler Integrale

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{3}{4}i\pi} \cdot e^{+\frac{i}{2}\frac{m}{\hbar t}(\vec{x}-\vec{x}')^2}$$

Tatsächlich kann man zeigen, daß im Limes der Distributionen

$$\lim_{t \rightarrow 0} G(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

gilt, wie gefordert.

3.4 Das Ehrenfestsche Theorem und die Erhaltungsgrößen

Das Ehrenfestsche Theorem stellt den Zusammenhang zwischen der klassischen und der Quanten-Physik dar. Es lautet: Die quantenmechanischen Erwartungswerte genügen den klassischen Bewegungsgleichungen. Beim Gaußschen Wellenpaket hatten wir schon beobachtet, daß der Schwerpunkt (Erwartungswert des Ortes) sich mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} = \frac{\vec{p}_0}{m}$$

verschob, wobei \vec{p}_0 der Schwerpunkt der Impulsverteilung (Erwartungswert des Impulses) war. Also

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle$$

Das ist offenbar ein Spezialfall des Ehrenfestschen Theorems. Zum Beweis des allgemeinen Satzes bemerken wir, daß

$$\frac{d}{dt} (\psi, A\psi) = -\frac{i}{\hbar} (\psi, [A, \mathcal{H}]\psi)$$

als Folge der Schrödingergleichung. Sei nun

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}(P, Q) \\ [P_i, Q_j] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \end{aligned}$$

Dann ist z. B.

$$\begin{aligned} [P_i^2, Q_j] &= P_i [P_i, Q_j] + [P_i, Q_j] P_i \\ &= 2\frac{\hbar}{i} \delta_{ij} P_i \\ [f(P_i), Q_j] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} f'(P_i) \quad (f' \text{ i stetig}) \\ [\mathcal{H}(P, Q), Q_j] &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_j}(P, Q) \end{aligned}$$

Also ist die erste Gleichung

$$\frac{d}{dt}(\psi, Q_j \psi) = (\psi, \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_j} \psi)$$

Entsprechend erhalten wir

$$[P_j, f(Q)] = + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial Q_j}$$

und damit

$$\frac{d}{dt}(\psi, P_j \psi) = -(\psi, \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_j} \psi)$$

Speziell gilt also die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\vec{x}) \\ \frac{d}{dt}(\psi, \vec{P} \psi) &= -(\psi, \vec{\nabla} V \psi) \end{aligned}$$

Wir haben hier nur die Vertauschungsrelationen benutzt. Man kann den Beweis natürlich auch unter Benutzung der Ortsrealisierung führen. Beim Korrespondenzprinzip war die Anordnung der Operatoren P, Q in \mathcal{H} nur eindeutig, wenn \mathcal{H} die Form

$$\mathcal{H} = T(P) + V(Q)$$

hatte. Das gleiche gilt für die Differentiation

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i}$$

Im Zweifelsfalle rechne man die Kommutatoren aus!

In der klassischen Physik ist eine Erhaltungsgröße $F(p, q)$ eine Observable, die längs der Bahn konstant bleibt

$$\frac{d}{dt} F(p(t), q(t)) = 0$$

Wir nennen entsprechend eine Erhaltungsgröße in der Quantenmechanik eine Observable A , für die gilt

$$\frac{d}{dt}(\psi, A\psi) = 0 \quad \underline{\text{für alle } \psi}$$

Dann muß gelten

$$[A, \mathcal{H}] = 0$$

Denn

$$i[A, \mathcal{H}]$$

ist selbst selbstadjungierter Operator. Lassen wir ψ durch alle Eigenvektoren laufen, so müssen alle Eigenwerte verschwinden, der Operator der Nulloperator sein.

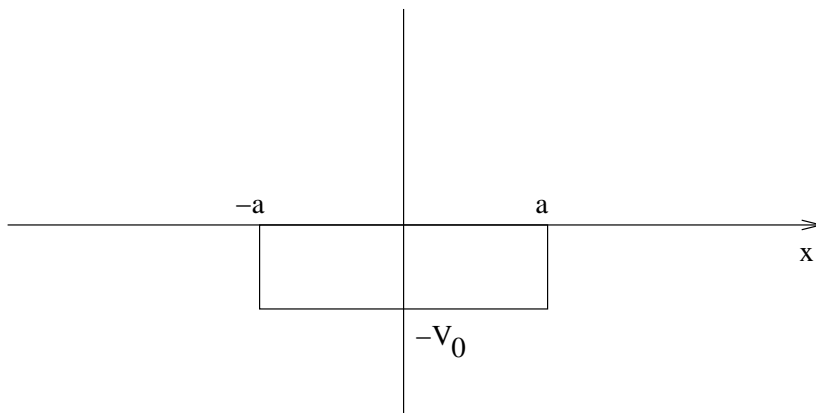


Abbildung 2: Eindimensionaler Potentialtopf

3.5 Eindimensionale Probleme

Eindimensionale Probleme sind nicht nur Spielzeugmodelle des Theoretikers, sondern treten tatsächlich in der Physik auf. Als Beispiel wollen wir den „Potentialtopf“ (Siehe Abbildung 2) behandeln.

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

Wir lösen die Schrödingergleichung stückweise in den Intervallen konstanten Potentials und passen die Wellenfunktionen an den Unstetigkeitsstellen auf folgende Weise aneinander an: In

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

ist die Unstetigkeit von $V(x)$ durch die zweite Ableitung zu kompensieren, z. B.

$$\begin{aligned} \psi(a+0) &= \psi(a-0) = \psi(a) \\ \psi'(a+0) &= \psi'(a-0) = \psi'(a) \\ \psi''(a+0) - \psi''(a-0) &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(a+0) - V(a-0)]\psi(a) \end{aligned}$$

Wir machen ψ stetig und stetig differenzierbar.

Wir betrachten zunächst negative Energien. Alle Lösungen der Schrödingergleichung wachsen für $x \rightarrow +\infty$ oder $-\infty$ exponentiell an, falls

$$E < -V_0$$

Als allgemeine Lösungen sind aber polynomial beschränkte Distributionen erlaubt: keine Lösungen für $E < -V_0$. Sei nun $0 > E > -V_0$. Wir machen den Ansatz

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \begin{cases} \tau_2 e^{-\kappa x} & x > a \\ \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & |x| < a \\ \tau_1 e^{+\kappa x} & x < -a \end{cases} \\ \kappa &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} |E| \right)^{\frac{1}{2}} \\ k &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Aneinanderstückeln bei $x = a$ ergibt

$$\begin{aligned}\tau_2 e^{-\kappa a} &= \alpha e^{ika} + \beta e^{-ika} \\ -\kappa \tau_2 e^{-\kappa a} &= ik (\alpha e^{ika} - \beta e^{-ika})\end{aligned}$$

und bei $x = -a$

$$\begin{aligned}\tau_1 e^{-\kappa a} &= \alpha e^{-ika} + \beta e^{ika} \\ +\kappa \tau_1 e^{-\kappa a} &= ik (\alpha e^{-ika} - \beta e^{ika})\end{aligned}$$

Jedes Gleichungssystem erlaubt, α, β als Funktionen von τ_1 bzw. τ_2 auszudrücken. Setzen wir die Lösung aus dem ersten System in das zweite ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned}\tau_1 &= f_1(\tau_2) \\ \tau_1 &= f_2(\tau_2)\end{aligned}$$

Die Verträglichkeit dieser Gleichungen ist nur für bestimmte k, κ gewährleistet. Das sind dann die Eigenwerte. Explizit:

$$\begin{aligned}\alpha &= -\frac{1}{2} \begin{vmatrix} \tau_1 e^{-\kappa a} & e^{ika} \\ \frac{\kappa}{ik} \tau_1 e^{-\kappa a} & -e^{ika} \end{vmatrix} \\ \beta &= -\frac{1}{2} \begin{vmatrix} e^{-ika} & \tau_1 e^{-\kappa a} \\ e^{-ika} & \frac{\kappa}{ik} \tau_1 e^{-\kappa a} \end{vmatrix} \\ \alpha &= \frac{1}{2} \tau_1 e^{-\kappa a + ika} \left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right) \\ \beta &= \frac{1}{2} \tau_1 e^{-\kappa a - ika} \left(1 - \frac{\kappa}{ik}\right) \\ \tau_2 &= \tau_1 \left[\cos 2ka + \frac{\kappa}{k} \sin 2ka \right] \\ \tau_2 &= \tau_1 \left[\sin 2ka - \frac{\kappa}{k} \cos 2ka \right] \frac{k}{\kappa}\end{aligned}$$

Verträglichkeit erfordert

$$\tan 2ka = \frac{2\frac{\kappa}{k}}{1 - \frac{\kappa^2}{k^2}} = \frac{2 \tan ka}{1 - \tan^2 ka} = \frac{-2 \cot ka}{1 - \cot^2 ka}$$

Diese Bedingung hat die beiden Lösungen

1. $\tan ka = \frac{\kappa}{k}$. Eingesetzt in

$$\begin{aligned}\tau_2 &= \tau_1 [\cos 2ka + \tan ka \cdot \sin 2ka] \\ &= \tau_1 [\cos^2 ka - \sin^2 ka + 2 \sin^2 ka] \\ &= \tau_1\end{aligned}$$

2. $-\cot ka = \frac{\kappa}{k}$. Eingesetzt in

$$\begin{aligned}\tau_2 &= \tau_1 [\cos 2ka - \cot ka \cdot \sin 2ka] \\ &= \tau_1 [\cos^2 ka - \sin^2 ka - 2 \cos^2 ka] \\ &= -\tau_1\end{aligned}$$

Entsprechend:

1.

$$\begin{aligned}
1 + \frac{\kappa}{ik} &= 1 - i \tan ka = \frac{e^{-ika}}{\cos ka} \\
1 - \frac{\kappa}{ik} &= 1 + i \tan ka = \frac{e^{+ika}}{\cos ka} \\
\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{\tau_1}{2 \cos ka} e^{-\kappa a} \\ \beta &= \frac{\tau_1}{2 \cos ka} e^{-\kappa a} \end{aligned} \right\} \psi &= \frac{\tau_1}{\cos ka} e^{-\kappa a} \cdot \cos kx
\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
1 + \frac{\kappa}{ik} &= 1 + i \cot ka = \frac{i}{\sin ka} e^{-ika} \\
1 - \frac{\kappa}{ik} &= 1 - i \cot ka = \frac{-i}{\sin ka} e^{+ika} \\
\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{+i}{2 \sin ka} \tau_1 e^{-\kappa a} \\ \beta &= \frac{-i}{2 \sin ka} \tau_1 e^{-\kappa a} \end{aligned} \right\} \psi &= -\frac{\tau_1}{\sin ka} e^{-\kappa a} \cdot \sin kx
\end{aligned}$$

Die Lösungen lassen sich graphisch am leichtesten überblicken. Wir benutzen die Abkürzung

$$\eta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2, \quad \eta > 0$$

und setzen in die Gleichungen für κ, k ein:

$$\frac{\kappa}{k} = \frac{(\eta^2 - k^2 a^2)^{\frac{1}{2}}}{ka} = f(ka)$$

Wir lassen V_0 von 0 aus anwachsen.

Die Schrödingergleichung ist symmetrisch unter Spiegelung $x \rightarrow -x$. Unter dieser Spiegelung muß $\psi(x)$ wieder in eine Lösung desselben Eigenwerts übergehen. Da die Eigenwerte nicht entartet sind, ist

$$\psi(-x) = \varepsilon \psi(x), \quad \varepsilon^2 = 1$$

Bei gegebenem V_0 zählen wir die Eigenwerte ab gemäß

$$\begin{aligned}
k_0 &< k_1 < k_2 < \dots \\
k_0 &: \text{Grundzustand} \\
E_n &= E(k_n)
\end{aligned}$$

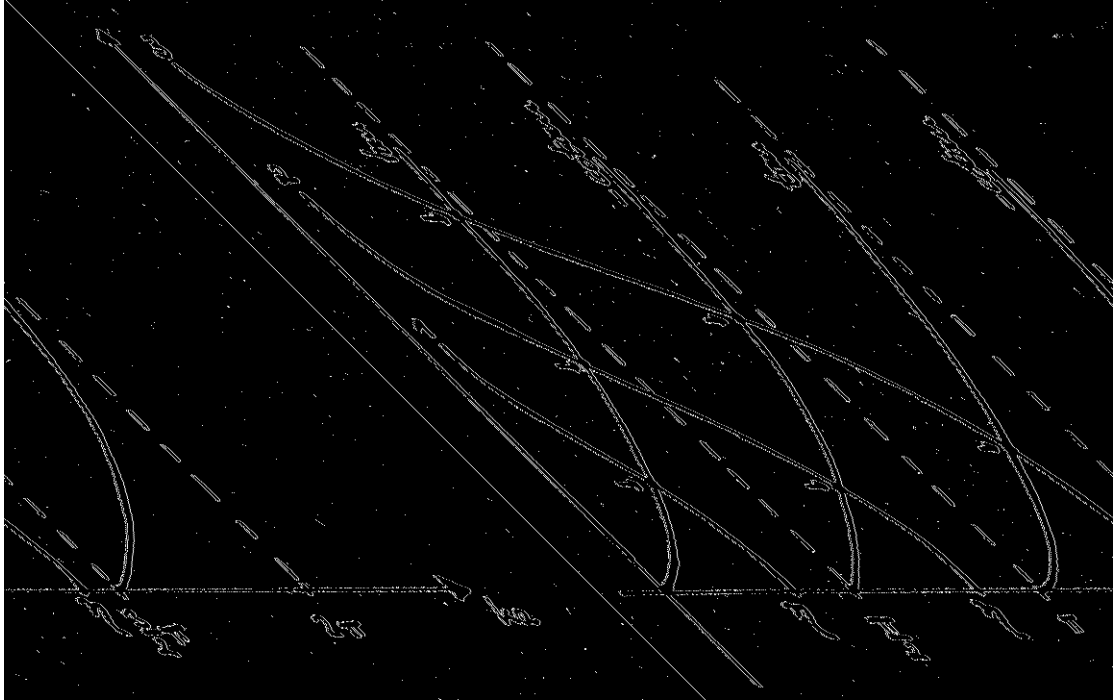
Die Parität ist für

$$k_n : \varepsilon = (-1)^n.$$

Die Wellenfunktionen sind nämlich wie in Abbildung 4. Die Zahl der Nullstellen ist entsprechend n für ψ_n („Knotensatz“).

Nun zu den Struzuständen bei $E > 0$. Wir betrachten die physikalische Situation, bei der Teilchen von $x = -\infty$ eingestrahlt werden. Dann werden am Potentialopf Teilchen zurückgestreut, andere durchgelassen („reflektiert“ bzw. „transmitiert“).

$$\psi(x) = \begin{cases} \tau e^{ikx}, & x > a \\ \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, & -a < x < a \\ e^{ikx} + \varrho e^{-ikx}, & x < -a \end{cases}$$



Kurve	1:	$0 < \eta < \frac{\pi}{2}$	1 Bindungszustand
	2:	$\frac{\pi}{2} < \eta < \pi$	2 Bindungszustände
	3:	$\pi < \eta < \frac{3}{2}\pi$	3 Bindungszustände

Abbildung 3: Graphische Lösung des eindimensionalen Potentialkastens

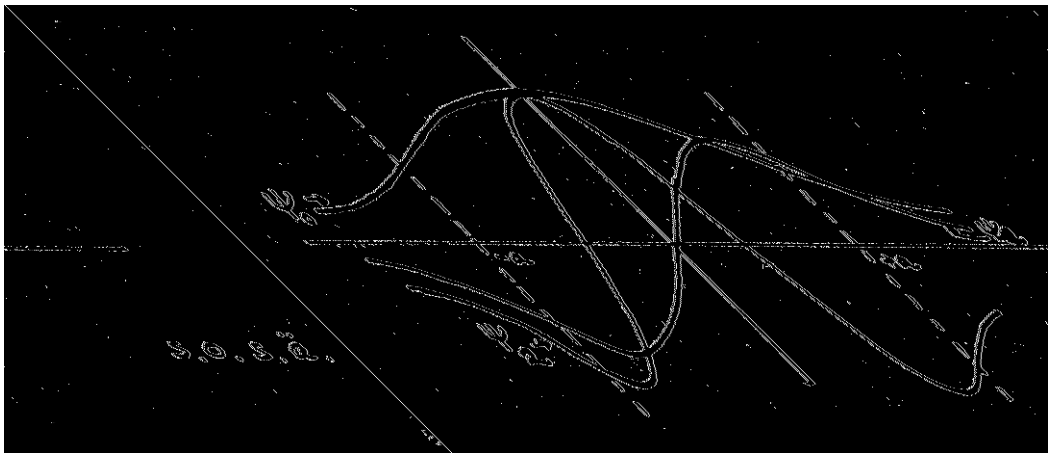


Abbildung 4: Wellenfunktionen des eindimensionalen Potentialkastens

Hier ist

$$(3.5.1) \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} - V_0.$$

Die detaillierte Rechnung ist analog zu vorher. Im Bereich $x < -a$ haben wir zwei freie Parameter im Vergleich zu einem bei den Bindungszuständen. Daher bekommen wir nun ein kontinuierliches Spektrum. Das Ergebnis ist

$$(3.5.2) \quad \tau = \frac{2\kappa\kappa e^{-2i\kappa a}}{2\kappa k \cos(2\kappa a) - i(\kappa^2 + k^2) \sin(2\kappa a)},$$

$$(3.5.3) \quad \varrho = \frac{i(\kappa^2 - k^2) \sin(2\kappa a) e^{-2i\kappa a}}{2\kappa k \cos(2\kappa a) - i(\kappa^2 + k^2) \sin(2\kappa a)}.$$

Im Zusammenhang mit solchen Streuproblemen ist es zweckmäßig, folgende Begriffsbildung einzuführen: Neben der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\varrho(x) = |\psi(x)|^2$$

definieren wir, falls

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

die Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

$$\vec{j}(x) = \frac{\hbar}{2im} (\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi})(x).$$

Diese Begriffsbildung wird gerechtfertigt durch die Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

nach

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \\ \operatorname{div} \vec{j} &= \frac{\hbar}{2im} (\bar{\psi} \Delta \psi - \psi \Delta \bar{\psi}) \\ &= \frac{i}{\hbar} (\bar{\psi} (\mathcal{H} - V) \psi - \psi (\mathcal{H} - V) \bar{\psi}) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\bar{\psi} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi - \psi \left(+\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \bar{\psi} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\psi} \psi) \end{aligned}$$

Wenn wir einen Streuprozess (zur Realisierung der quantenmechanischen Gesamtheit) statt N ($\rightarrow \infty$) mal mit einem Teilchen zu wiederholen, mit einem dünnen Teilchenstrahl ausführen, so wird

$$N \vec{j}(x)$$

die Teilchenstromdichte darstellen.

Nun wenden wir diesen Begriff auf die eindimensionale Streuung an. Für unseren Ansatz (j positiv in x -Richtung)

$$j(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m} |\tau|^2, & x > a \\ \frac{\hbar k}{m} (|\alpha|^2 - |\beta|^2), & -a \leq x \leq a \\ \frac{\hbar k}{m} (1 - |\varrho|^2), & x < -a \end{cases}$$

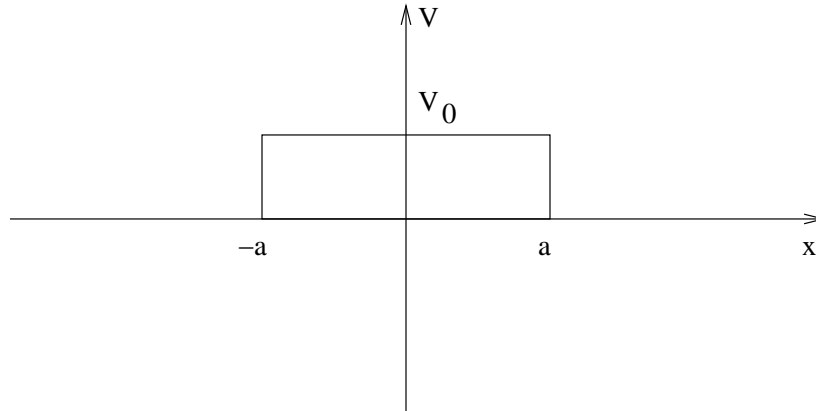


Abbildung 5: Eindimensionale Potentialschwelle

Aus Gründen der Wahrscheinlichkeitserhaltung (Teilchenzahlerhaltung) muß gelten (Da ψ und ψ' stetig sind, ist auch $j(x)$ stetig)

$$\begin{aligned} |\varrho|^2 + |\tau|^2 &= 1 \\ |\tau|^2 &= \frac{\kappa}{k} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) \end{aligned}$$

Nun betrachten wir den Fall der Potentialschwelle (Abbildung 5). Dazu setzen wir die gerade benutzten Formeln von V_0 nach $-V_0$ fort. Wir haben die beiden Fälle

1. $E > V_0$
2. $0 < E < V_0$

Bindungszustände gibt es nicht mehr. Im Fall 1 gelten die Formeln für die Wellenfunktion ψ der Struzustände sowie ϱ, τ ungeändert. Nun ist κ definiert durch

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Im Fall 2 ist die Streufunktion ψ für $|x| > a$ wie in 1, aber im Inneren abzuändern in

$$\psi(x) = \alpha e^{-\sigma x} + \beta e^{\sigma x}, \quad |x| < a$$

Wir erhalten sie aus der bisherigen Formel ((3.5.1), S. 61) durch die Fortsetzung

$$\kappa = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} = i\sigma$$

Einsetzen dieser Formel in τ, ϱ ((3.5.2), (3.5.3), S. 61) liefert

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{2\sigma k e^{-2ika}}{2\sigma k \cosh(2\sigma a) - i(k^2 - \sigma^2) \sinh(2\sigma a)}; \\ \varrho &= \frac{-i(\sigma^2 + k^2) \sinh(2\sigma a) e^{-ika}}{2\sigma k \cosh(2\sigma a) - i(k^2 - \sigma^2) \sinh(2\sigma a)}. \end{aligned}$$

An der Schwelle $\sigma = 0$ wird

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{e^{-2ika}}{1 - ika}; \\ \varrho &= \frac{e^{-2ika}}{1 - ika} (-ika). \end{aligned}$$

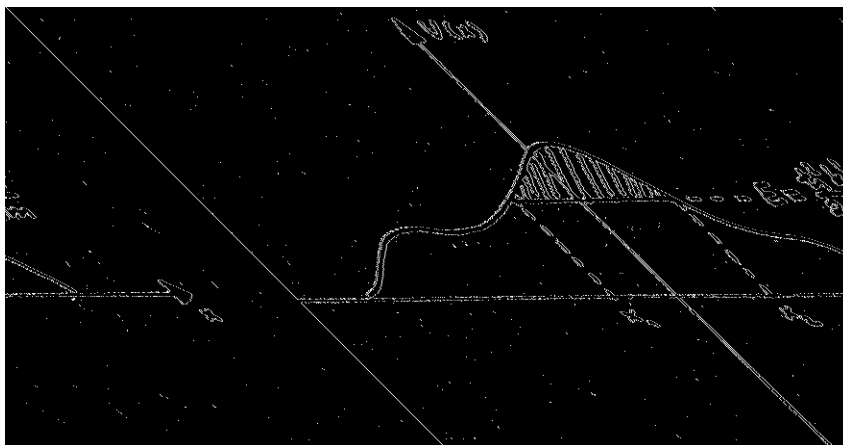


Abbildung 6: Zum Tunneleffekt

Fällt die Energie unter die Schwelle ab und ist $\sigma a \gg 1$, so wird die Transmission τ exponentiell klein und ϱ eine Phase

$$\tau \approx \left(1 - i \frac{k^2 - \sigma^2}{2\sigma k}\right)^{-1} e^{-2\sigma a - 2ika}$$

$$\varrho \approx (2\sigma k - i(k^2 - \sigma^2))^{-1} (-i(\sigma^2 + k^2)) e^{-2ika}, \quad |\varrho| = 1$$

Daß überhaupt für $\sigma > 0$ (d. h. unterhalb der Schwelle) noch Transmission stattfindet, heißt der Tunneleffekt. Für den Exponentialfaktor der Tunneleffekt-Transmission kann man die (im quasi-klassischen Limes gültige) Näherungsformel

$$\psi(x_2) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(S(x_2) - S(x_1))\right] \psi(x_1) \frac{|\psi(x_2)|}{|\psi(x_1)|}$$

$$S(x_2) - S(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial S}{\partial x} dx, \quad \frac{\partial S}{\partial x} = P$$

$$\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx = \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \underbrace{[2m(E - v(x))]^{\frac{1}{2}}}_{<0} dx$$

$$= \mp \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} [2m(V(x) - E)]^{\frac{1}{2}} dx \quad \text{oberes Vorzeichen relevant!}$$

aufstellen, die in unserem Fall

$$e^{-2a\sigma}$$

ergibt, also exakt richtig ist.

3.6 Das Wasserstoffatom

Wir wollen das Wasserstoffatom

- im Grenzfall des unendlich schweren Protons;
- bei Vernachlässigung des Elektronenspins und alleiniger Coulombwechselwirkung zwischen Elektron und Proton

behandeln. Wie in der klassischen Mechanik sind unsere Formeln aber auch richtig, wenn wir m als reduzierte Masse verstehen und die Protonenmasse als endlich angenommen wird. Die Reduktion des Zweikörperproblems durch Abspalten der Schwerpunktbewegung werden wir später behandeln. Wir wollen noch etwas weiter verallgemeinern und statt des Wasserstoffatoms das $(Z - 1)$ -fach ionisierte Z -Atom untersuchen. Dann ist die Coulombwechselwirkung

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

Das Potential hängt nur von r ab, also kommutieren \vec{L}^2 und L_3 mit \mathcal{H} . Damit sind als mögliche Quantenzahlen

$$E, l, m$$

festgelegt. Für die zeitseparierte Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

machen wir den Separationsansatz

$$\psi = u_l(r)Y_m^l(\Theta, \phi)$$

Dann ergibt sich als Gleichung für $u_l(r)$ (Abschnitt 2.7, S. 38)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] u_l(r) = Eu_l(r)$$

Wir interessieren uns zuerst für die Bindungszustände mit $E < 0$. Dann setzen wir

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

und führen den Bohrschen Radius

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

ein. Wir skalieren mit κ :

$$\varrho = \kappa r, \quad \varrho_0 = \kappa r_0$$

Das ergibt die Differentialgleichung

$$\left[\frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} + \frac{2Z}{\varrho\varrho_0} - 1 \right] u_l(\varrho) = 0.$$

Wir versuchen einen Ansatz zur Lösung, der auf Sommerfeld zurückgeht. Dazu betrachten wir das asymptotische Verhalten bei

1. $\varrho \rightarrow \infty$,
2. $\varrho \rightarrow 0$.

1. Hier dominiert in der Differentialgleichung der Term

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - 1 \right) u_l(\varrho) &= 0, \\ u_l(\varrho) &\sim e^{-\varrho}; \end{aligned}$$

2. Hier dominiert (der Coulomterm fällt weg)

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u_l(\rho) &= 0, \\ u_l(\rho) &\sim \rho^\alpha, \\ [\alpha(\alpha-1) + 2\alpha - l(l+1)] \rho^{\alpha-2} &= 0, \\ \alpha(\alpha+1) - l(l+1) &= 0 \\ &\Rightarrow \alpha_1 = l, \\ &\alpha_2 = -l - 1 \end{aligned}$$

Die reguläre Lösung gehört zu α_1 , wie wir von der exakten Lösung der freien Gleichung wissen.

Jetzt kombinieren wir beide Informationen und machen den Ansatz

$$\begin{aligned} u_l(\rho) &= \rho^l f_l(\rho) e^{-\rho}, \\ f_l(\rho) &: \text{Polynom, } f_l(0) \neq 0 \end{aligned}$$

(daher „Sommerfeldsches Polynom-Verfahren“). Das Polynom $f_l(\rho)$ genügt der Differentialgleichung

$$f_l'' + 2(l+1-\rho) \frac{1}{\rho} f_l' + \left(\frac{2Z}{\rho_0} - 2 - 2l \right) \frac{1}{\rho} f_l = 0.$$

Der Potenzreihenansatz

$$f_l(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu$$

ergibt die Rekursion

$$(\nu+1)(\nu+2l+2)a_{\nu+1} - 2 \left(l+1+\nu - \frac{Z}{\rho_0} \right) a_\nu = 0.$$

Wenn die Reihe der a_ν nicht abbricht, so folgt aus

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} = \frac{2 \left(l+1+\nu - \frac{Z}{\rho_0} \right)}{(\nu+1)(\nu+2l+2)} \stackrel{\nu \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2}{\nu+1}, \quad a_\nu \sim \text{const} \cdot \frac{2^\nu}{\nu!}$$

Daraus ergibt sich

$$f_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^\nu}{\nu!} = e^{2\rho}.$$

Wir schließen, daß eine quadratintegrale Funktion $u_l(\rho)$ nur entstehen kann, wenn die Rekursion abbricht.

$$a_{N+1} = 0 \implies l+1+N = \frac{Z}{\rho_0} \quad N \geq 0$$

(in der umgekehrten Richtung bricht die Rekursion immer mit $a_{-1} = 0$ ab!). Wir führen die Hauptquantenzahl n ein

$$\begin{aligned} n &= l + N + 1 \\ \rho_0 &= \frac{Z}{n} \\ E_n &= -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\rho_0}{r_0} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{r_0} \cdot \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

Das ist die Balmer-Formel. Bei gegebener Hauptquantenzahl n ist

$$0 \leq l \leq n - 1$$

Jeder Eigenwert E_n ist n^2 -fach entartet, da

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

Wir wollen nun die Eigenfunktionen genauer untersuchen. Wir haben zu jedem $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$, $l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$ eine Eigenfunktion

$$u_{n,l}(\varrho) = \varrho^l e^{-\varrho} f_{n,l}(\varrho)$$

wobei die Energieabhängigkeit in ϱ enthalten ist

$$\begin{aligned} \varrho &= \kappa_n r \\ \kappa_n &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} |E_n| \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\kappa_1}{n} \end{aligned}$$

Aus

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} = \frac{2(\nu - N)}{(\nu + 1)(\nu + 2l + 2)}$$

folgt⁷

$$\begin{aligned} a_\nu &= C \frac{2^\nu \Gamma(\nu - N)}{\nu! \Gamma(\nu + 2l + 2)} \\ &= C \frac{2^\nu (-N)_\nu}{\nu! (2l + 2)_\nu} \end{aligned}$$

Man bezeichnet

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+a)}{n! \Gamma(n+b)} z^n &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n! (b)_n} z^n \\ &= {}_1F_1(a, b; z) \end{aligned}$$

als Kummersche Reihe oder konfluente hypergeometrische Funktion ${}_1F_1$. Diese Funktion ist ganz analytisch. Ist $-a \in \mathbb{N}$, so entartet sie zu einem Polynom vom Grad $-a$. In unserem Fall tritt das gerade ein:

$$u_{n,l}(\varrho) = C_{n,l} (2\varrho)^l e^{-\varrho} \underbrace{{}_1F_1(l-n+1, 2l+2; 2\varrho)}_{\sim \mathcal{L}_{n-l-1}^{(2l+1)}(2\varrho)}$$

7

$$\begin{aligned} \Gamma(1+a) &= \Gamma(a) \cdot a \\ \Gamma(2+a) &= \Gamma(a) \cdot a(a+1) \\ &\vdots \\ \Gamma(n+a) &= \Gamma(a) \cdot a(a+1) \cdots (a+n-1) \\ \frac{\Gamma(n+a)}{\Gamma(a)} &= (a)_n \quad \text{„Pochhammer-Symbol“} \\ \implies (1)_n &= n! \end{aligned}$$

Die konfluenten hypergeometrischen Polynome heißen Laguerre-Polynome. Man bezeichnet ([A. + St.], nicht aber Grawert) für $\mu \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} L_\mu(x) &= L_\mu^{(0)}(x) \\ &= {}_1F_1(-\mu, 1; x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mu)_n}{n!n!} x^n \quad \text{Abbruch bei } n = \mu : (-\mu)_\mu = (-1)^\mu \mu! \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} L_\mu^{(\alpha)}(x) &= \left(-\frac{d}{dx}\right)^\alpha L_{\mu+\alpha}(x) \\ &= \sum_{n=\alpha}^{\infty} \frac{(-\mu-\alpha)_n}{n!n!} (-1)^\alpha \cdot n(n-1)\cdots(n-\alpha+1) \cdot x^{n-\alpha} \\ &= \sum_{n=\alpha}^{\infty} \frac{(-\mu-\alpha)_n (-1)^\alpha}{n!(n-\alpha)!} x^{n-\alpha} \end{aligned}$$

Weiterhin gilt

$$L_\mu^{(\alpha)} = \binom{\mu+\alpha}{\mu} {}_1F_1(-\mu, \alpha+1; x)$$

Wir substituieren $n - \alpha = m$ und verwenden

$$\begin{aligned} (m+\alpha)! &= (\alpha+1)_m \cdot \alpha! \\ (-\mu-\alpha)_{m+\alpha} &= \underbrace{(-\mu-\alpha)(-\mu-\alpha-1)\cdots(-\mu-1)}_{\alpha} \underbrace{(-\mu)\cdots(-\mu+m-1)}_m \\ &= (-1)^\alpha \frac{(\mu+\alpha)!}{\mu!} (-\mu)_m \end{aligned}$$

so daß

$$\begin{aligned} L_\mu^{(\alpha)}(x) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\mu-\alpha)_{m+\alpha} (-1)^\alpha}{(m+\alpha)!m!} x^m \\ &= \frac{1}{\alpha!} \frac{(\mu+\alpha)!}{\mu!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\mu)_m x^m}{(\alpha+1)_m \cdot m!} \\ &= \binom{\mu+\alpha}{\alpha} {}_1F_1(-\mu, \alpha+1; x) \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} L_\mu(x) &= \sum_{n=0}^{\mu} \frac{(-1)^n}{n!} \binom{\mu}{n} x^n \\ &= \frac{1}{\mu!} e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^\mu (x^\mu e^{-x}) = \frac{(-1)^\mu}{\mu!} x^\mu + \dots \quad (\text{höchste Potenz}) \end{aligned}$$

Diese Polynome sind orthogonale Polynome, denn

$$\int_0^{\infty} dx e^{-x} L_{\mu_1}(x) L_{\mu_2}(x) = \delta_{\mu_1 \mu_2}$$

wegen $(\mu_1 \geq \mu_2)$

$$\int_0^\infty dx \frac{1}{\mu_1!} \left(\frac{d}{dx}\right)^{\mu_1} (x^{\mu_1} e^{-x}) L_{\mu_2}(x) = \frac{(-1)^{\mu_1}}{\mu_1!} \int_0^\infty dx x^{\mu_1} e^{-x} \left(\frac{d}{dx}\right)^{\mu_1} L_{\mu_2}(x)$$

$$\stackrel{\mu_1 \geq \mu_2}{=} 0$$

$$\stackrel{\mu_1 = \mu_2}{=} \frac{1}{\mu_1!} \int_0^\infty dx x^{\mu_1} e^{-x} = 1$$

Wir wollen zum Schluß die bei $r = 0$ regulären Lösungen des Wasserstoffproblems für $E > 0$ und Kugelwellenform ableiten. Wir machen den Ansatz

$$\psi = u_l(r) Y_m^l(\Theta, \phi),$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \varrho = kr,$$

$$u_l(\varrho) = \varrho^l f_l(\varrho) e^{i\varrho}.$$

Für $f_l(\varrho)$ bekommen wir die Gleichung

$$f_l'' + 2(l+1+i\varrho) \frac{1}{\varrho} f_l' + \left(\frac{2Z}{\varrho_0} + 2i(l+1) \right) \frac{1}{\varrho} f_l = 0.$$

Der Potenzreihenansatz für $f_l(\varrho)$ liefert nun

$$f_l(\varrho) = {}_1F_1 \left(l+1 - i \frac{z}{\varrho_0}, 2l+2; -2i\varrho \right)$$

wobei die Energieabhängigkeit nur in ϱ_0 und ϱ enthalten ist

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E},$$

$$\varrho = rk, \quad \varrho_0 = r_0 k.$$

Die Verwandtschaft mit den Wellenfunktionen der gebundenen Zustände ist offensichtlich.

Laß die Moleküle rasen
Was sie auch zusammenhobeln
Laß das Tüfteln, laß das Knobeln
Heilig halte die Ekstasen

(Christian Morgenstern)

3.7 Die Streuphasen

Beim eindimensionalen Streuproblem am Potentialtopf wurde aus einer von $x = -\infty$ einfallenden Welle $\sim e^{ik \cdot x}$ eine Überlagerung aus einer einlaufenden und einer reflektierten Welle

$$e^{ikx} + \varrho e^{-ikx}, \quad x < -a$$

und eine durchgelassene Welle

$$\tau e^{ikx}, \quad x > +a$$

Diese durchgelassene Welle ist in ihrer Amplitude verkleinert und phasenverschoben

$$\begin{aligned}\tau e^{ikx} &= |\tau| e^{ikx+2i\delta(k)} \\ |\tau| &< 1\end{aligned}$$

Bei dreidimensionalen Streuproblemen ist dies ein wesentlicher Gesichtspunkt. Wir nehmen ein rotationssymmetrisches Potential $V(r)$ an, das auf

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$$

normiert ist. Zu jeder Drehimpulsquantenzahl l gibt es dann Lösungen der radialen Schrödingergleichung mit

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

die sich bei $r \rightarrow 0$ regulär verhält

$$u_l(r) \sim r^l$$

wobei nur vorausgesetzt werden muß, daß $V(r)$ in diesem Bereich $r \rightarrow 0$ gegenüber dem „Zentrifugalpotential“ (abstoßend!)

$$+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

vernachlässigt werden kann. Nehmen wir dann an, daß $V(r)$ bei $r \rightarrow \infty$ stärker abfällt als das Coulomb-Potential (z. B. $V(r) \sim r^{-1-\varepsilon}$, $\varepsilon > 0$), so kann man zeigen, daß die radiale Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] + V(r) \right\} u_l(r) = 0$$

asymptotisch durch

$$u_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} c_l \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right)}{kr}$$

gelöst wird. Dazu werden alle Terme $O(r^{-2-\varepsilon})$ vernachlässigt. Aus der unbestimmten Phase der sin-Funktion wurde $-l \cdot \frac{\pi}{2}$ herausgezogen, damit bei $V = 0$ auch $\delta_l(k) = 0$ wird

$$\begin{aligned}\varrho = kr : \quad j_l(\varrho) &= \varrho^l \left(-\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin \varrho}{\varrho} \\ &\approx \frac{1}{\varrho} \sin \left(\varrho - l\frac{\pi}{2} \right)\end{aligned}$$

$\delta_l(k)$ heißt die Streuphase. Sie ist modulo π bestimmt und durch das asymptotische Verhalten der regulären Lösung der Schrödingergleichung definiert. Wir können das Ergebnis auch so formulieren: Wenn die regulären Lösungen $u_l(r)$ in eine einfallende Kugelwelle $u_l^-(r)$ und eine auslaufende Kugelwelle $u_l^+(r)$ zerlegt werden (beide sind einzeln genommen singulär bei $r = 0$),

$$\begin{aligned}u_l(r) &= u_l^-(r) + u_l^+(r) \\ u_l^\pm(r) &\approx \frac{c_l e^{\pm i(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}}{2i kr} \quad (c_l \text{ reell})\end{aligned}$$

so ist

$$+2\delta_l - (l+1)\pi$$

die relative Phasenverschiebung beider Wellen. In der Quantenmechanik sind die Streuphasen leider nicht direkt meßbar (nach dem heutigen Stand der Experimentiertechnik).

Bei einem Coulombpotential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad Z \in \mathbb{R} \text{ beliebig}$$

ist der Ansatz für die reguläre Lösung im Bereich $r \rightarrow \infty$

$$u_l(r) \approx c_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + f_l(r))}{kr}$$

mit

$$f_l(r) = +\frac{Ze^2m}{\hbar^2k} \ln(2kr) + \sigma_l$$

wieder unter Vernachlässigung von $O(r^{-2-\varepsilon})$. Dann nennt man die σ_l die Streuphasen.

Als Beispiel für solch ein Potential haben wir nicht nur das exakte Coulombproblem (Wasserstoffatom, Abschnitt 3.9, S. 78), sondern auch die Proton-Kern-Wechselwirkung, die bei kleinen Abständen durch die starke Wechselwirkung beherrscht wird, bei großen Abständen aber durch die Coulomb-Abstoßung (starke Wechselwirkung klingt ab wie

$$\text{Yukawa-Potential} \quad \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

mit $\mu = (\text{Comptonwellenlänge})^{-1} = \frac{m\pi c}{\hbar}$, $\mu^{-1} \approx 1 \text{ fm}$). Die Streuphasen enthalten auch Information über Bindungszustände. Sie sind in der Regel analytische Funktionen des Impulsbetrages und können auf die imaginäre k -Achse fortgesetzt werden. Dort ist

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = i\kappa, \quad \kappa > 0$$

also

$$E < 0, \quad \delta_l(i\kappa) \text{ komplex}$$

$$u_l^\pm(r) = \pm \frac{c_l}{2i} e^{\mp \kappa r \pm i(-l\frac{\pi}{2} + \delta_l(i\kappa))} \cdot \frac{1}{i\kappa r}$$

An der Stelle des Bindungszustandes muß im Verhältnis der beiden Kugelwellen die exponentiell anwachsende Funktion aussterben, da Bindungszustände durch die Existenz einer regulären exponentiell abfallenden Wellenfunktion ausgezeichnet sind. Also muß gelten

$$e^{-2i\delta_l(i\kappa)} \Big|_{\kappa = \sqrt{\frac{2m|E_n|}{\hbar^2}}} = 0$$

$$E_n < 0, \text{ Bindungsenergie}$$

Wir wollen nun ein elementares Beispiel durchrechnen. Wir betrachten den Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R, \\ 0, & r > R \end{cases} \quad V_0 > 0$$

mit Reichweite R . Sei

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E > 0 \\ \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) > k^2 \end{aligned}$$

Dann machen wir den Ansatz

$$u_l(r) = \begin{cases} j_l(\kappa r), & r < R \\ A_l^{(+)} h_l^{(+)}(kr) + A_l^{(-)} h_l^{(-)}(kr), & r > R \end{cases}$$

mit

$$\begin{aligned} h_l^{(\pm)}(\varrho) &= \varrho^l \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{e^{\pm i\varrho}}{\varrho} \\ h_l^{(\frac{1}{2})} &= \mp i h_l^{(\pm)} \end{aligned}$$

Dieser Ansatz garantiert die Regularität bei $r = 0$. Bei $r = R$ werden die beiden Stücke der Lösung stetig und stetig differenzierbar aneinander gepaßt.

$$\begin{aligned} j_l(\kappa R) &= A_l^{(+)} h_l^{(+)}(kR) + A_l^{(-)} h_l^{(-)}(kR) \\ \kappa j_l'(\kappa R) &= k \left[A_l^{(+)} h_l'^{(+)}(kR) + A_l^{(-)} h_l'^{(-)}(kR) \right] \end{aligned}$$

ergibt

$$A_l^{(\pm)} = \pm \frac{k j_l(\kappa R) h_l'^{(\mp)}(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l^{(\mp)}(kR)}{k h_l^{(+)}(kR) h_l'^{(-)}(kR) - k h_l'^{(+)}(kR) h_l^{(-)}(kR)}$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \varrho \rightarrow \infty : \quad h_l^{(+)}(\varrho) &= \overline{h_l^{(-)}(\varrho)} \\ &\approx \frac{1}{\varrho} e^{+i(\varrho - l\frac{\pi}{2})} \end{aligned}$$

also, da $u_l(r)$ reell ist

$$\begin{aligned} A_l^{(+)} &= \overline{A_l^{(-)}} \\ &= |A_l^{(+)}| \cdot (-i) e^{i\delta_l} \end{aligned}$$

und für $r \rightarrow \infty$

$$u_l(r) \approx \frac{2|A_l^{(+)}|}{kr} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)$$

wie erwünscht. Ferner haben wir

$$\begin{aligned} e^{2i\delta_l} &= -\frac{A_l^{(+)}}{A_l^{(-)}} \\ &= \frac{k j_l(\kappa R) h_l'^{(-)}(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l^{(-)}(kR)}{k j_l(\kappa R) h_l'^{(+)}(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l^{(+)}(kR)} \\ e^{2i\delta_l} - 1 &= -2i \cdot \frac{k j_l(\kappa R) j_l'(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) j_l(kR)}{k j_l(\kappa R) h_l'^{(+)}(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l^{(+)}(kR)} \end{aligned}$$

wobei

$$h_l^{(+)}(\varrho) - h_l^{(-)}(\varrho) = 2i j_l(\varrho)$$

benutzt wurde. Setzen wir die Energie unter die Schwelle fort

$$-V_0 < E < 0$$

so bleibt κ noch reell, aber k wird rein imaginär, $k = i\sigma$, $\sigma > 0$, und am Bindungszustand ist

$$A_l^{(-)}(i\sigma) \sim +i\sigma \cdot j_l(\kappa R) h_l'^{(+)}(i\sigma R) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l^{(+)}(i\sigma R) = 0$$

Beweis:

1. In diesem Fall muß die Lösung für $r > R$ exponentiell abfallen, also

$$\begin{aligned} u_l(r) &= \begin{cases} j_l(\eta r) & r < R \\ B_l h_l^{(+)}(i\sigma r), & r > R \end{cases} \\ &\quad \downarrow \\ &\sim \frac{1}{i\sigma r} e^{+i(i\sigma r - \frac{l\pi}{2})} \\ &= \frac{1}{i\sigma r} e^{-\sigma r - i\frac{l\pi}{2}} \end{aligned}$$

Aneinanderstückeln der Lösung gibt

$$\begin{aligned} j_l(\eta R) &= B_l h_l^{(+)}(i\sigma R) \\ \kappa j_l'(\eta R) &= i\sigma B_l h_l'^{(+)}(i\sigma R) \\ \kappa &= i\sigma \cdot \frac{j_l(\kappa R) h_l'^{(+)}(i\sigma R)}{j_l'(\kappa R) h_l^{(+)}(i\sigma R)} \\ &(\text{ = Gleichung für Eigenwert E}) \end{aligned}$$

2. wir können natürlich auch fordern, daß

$$\begin{aligned} B_l &= A_l^{(+)} \\ 0 &= A_l^{(-)} \\ e^{-2i\delta_l(i\sigma)} &= -\frac{A_l^{(-)}}{A_l^{(+)}} = 0 \end{aligned}$$

Den Spezialfall $l = 0$, d. h. die S-Welle wollen wir uns genauer ansehen. Dann ist

$$\begin{aligned} h_0^{(\pm)}(\varrho) &= \frac{e^{\pm i\varrho}}{\varrho} \\ j_0(\varrho) &= \frac{\sin \varrho}{\varrho} \\ h_0'^{(\pm)}(\varrho) &= \left(\pm i - \frac{1}{\varrho} \right) h_0^{(\pm)}(\varrho) \\ j_0'(\varrho) &= \frac{\cos \varrho}{\varrho} - \frac{\sin \varrho}{\varrho^2} \end{aligned}$$

Einsetzen liefert

$$\begin{aligned}
 e^{2i\delta_0} &= \frac{1 + i\frac{k}{\kappa} \tan \kappa R}{1 - i\frac{k}{\kappa} \tan \kappa R} e^{-2ikR} \\
 e^{2i(\delta_0 + kR)} &= \frac{1 + i \tan(\delta_0 + kR)}{1 - i \tan(\delta_0 + kR)} \\
 \tan(kR + \delta_0) &= \frac{k}{\kappa} \tan \kappa R \\
 \delta_0 &= -kR + \arctan\left(\frac{k}{\kappa} \tan \kappa R\right) \quad \left(\text{mod } \frac{\pi}{4}\right)
 \end{aligned}$$

Bei kleinen Energien ist dann

$$\begin{aligned}
 \delta_0 &= -k \left(R - \frac{\tan \kappa_0 R}{\kappa_0} \right) + O(k^3) \\
 \kappa_0 &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

3.8 Wirkungsquerschnitt und Streuamplitude

Wenn ein monoenergetischer Teilchenstrahl (hinreichend dünn, damit die einzelnen Teilchen als unabhängig angesehen werden können) auf ein Target einfällt, so werden Teilchen in den ganzen Raumwinkel 4π gestreut. In großem Abstand r vom Streuzentrum und außerhalb des Primärstrahls wird in Richtung \vec{n} ein Teilchenstrom (Teilchen pro Zeiteinheit)

$$\begin{array}{ccc}
 dN & = & j_{\text{Streu}}(\vec{n}) \quad r^2 d\Omega \\
 \uparrow & & \uparrow \\
 \text{Teilchen} & & \text{Teilchen pro} \\
 \text{pro Zeit} & & \text{(Zeit} \times \text{Fläche)} \\
 & & \text{nimmt ab wie } \frac{1}{r^2}
 \end{array}$$

$d\Omega$: Raumwinkelelement

beobachtet. Dieser Teilchenstrom ist proportional der einfallenden Stromdichte j_{ein} . Man bezeichnet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j_{\text{ein}}} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{j_{\text{Streu}}(\vec{n})}{j_{\text{ein}}} \cdot r^2$$

(für große r unabhängig von r) als differentiellen Wirkungsquerschnitt (Dimension: Fläche) und

$$\int d\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \sigma$$

als totalen Wirkungsquerschnitt.

In einer Wellentheorie wie in der Quantenmechanik wird der Wirkungsquerschnitt mit einer Streuamplitude in Verbindung gebracht. Dazu gehen wir von einer regulären Lösung der Schrödingergleichung zum Energiewert

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 \quad \left(\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \right)$$

aus. Wir fordern, daß sie das asymptotische Verhalten

$$\psi_{\vec{k}}(x) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} e^{ikz} + f(\Theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}$$

haben soll. Bisher haben wir nur reguläre Lösungen der Art

$$u_{l,E}(r)Y_m^l(\Theta, \phi)$$

betrachtet. Das $\psi_{\vec{k}}(x)$ mit der asymptotischen Eigenschaft läßt sich aus Überlagerung aus solchen Kugelwellen aufbauen (siehe später). Diese Wellen existieren wieder nur, wenn $V(r)$ stärker abfällt als $\frac{1}{r}$ ($r \rightarrow \infty$).

Wenn wir aus solchen Wellen ein Wellenpaket bilden, so erwarten wir folgendes: Bei $t \rightarrow -\infty$ haben wir ein freies Wellenpaket, das sich auf das Zentrum zu bewegt. Sobald es in die Reichweite des streuenden Potentials eintritt, bildet sich eine Kugelwelle aus, die sich als Paket im ganzen Raum ausbreitet. Ferner wird ein geschwächtes Wellenpaket in der ursprünglichen Richtung weiterlaufen.

Rechnerisch läßt sich das auf folgende Weise erfassen: Sei etwa das Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int d^3k \psi_{\vec{k}}(x) \hat{\varphi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}$$

betrachtet und mit dem freien Wellenpaket

$$\varphi(x, t) = \int d^3k e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\varphi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}$$

verglichen. Die Behauptung ist: für $t \rightarrow -\infty$ ist

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (\psi(x, t) - \varphi(x, t)) = 0$$

Das gilt tatsächlich im starken Hilbert-Raum-Limes (nicht punktweise), es läßt sich mit folgenden simplen Argumenten plausibel machen: $\varphi(x, t)$ sei ein Wellenpaket⁸, das sich mit der Geschwindigkeit

$$\frac{\hbar \vec{k}_0}{m}$$

ausbreitet. Der Schwerpunkt befinde sich bei

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) + \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} t$$

und zur Zeit t_0 im Ursprung (Streuzentrum)

$$\begin{aligned} 0 = \vec{x}(t_0) &= \vec{x}(0) + \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} t_0 \\ \vec{x}(t) &= \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} (t - t_0) \end{aligned}$$

⁸ $\hat{\varphi}(k)$ ist bei $\vec{k} = \vec{k}_0$ konzentriert.

In der Kugelwelle entwickeln wir um \vec{k}_0

$$\begin{aligned}
 kr : k &= \left| \vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0) \right| \\
 &= |k_0| \cdot \left(1 + \frac{2\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}{k_0^2} + \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{k_0^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &= |k_0| \cdot \left(1 + \frac{\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}{k_0^2} + \dots \right) \\
 &= |k_0| + \frac{\vec{k}_0 \cdot \vec{k}}{|k_0|} - |k_0| + O(|\vec{k} - \vec{k}_0|^2) \\
 &= \frac{\vec{k}_0 \cdot \vec{k}}{|k_0|} + O(|\vec{k} - \vec{k}_0|^2) \\
 \frac{1}{r} \int d^3k f(\Theta, k) e^{ikr} \hat{\varphi}(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} &\approx \frac{f(\Theta, k_0)}{r} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \left(\frac{\vec{k}_0}{|k_0|}r\right)} \hat{\varphi}(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \\
 &\approx \frac{f(\Theta, k_0)}{r} \varphi\left(\frac{\vec{k}_0}{|k_0|}r, t\right)
 \end{aligned}$$

Das ist eine Kugelwelle der gleichen Gestalt wie $\varphi(x, t)$, sie breitet sich jedoch konzentrisch aus mit Schwerpunkt

$$r(t) = \frac{\hbar k_0}{m}(t - t_0)$$

Für $t < t_0$ ist sie nicht vorhanden. Dann muß

$$\psi(x, t) = \varphi(x, t)$$

sein.

Nun zum asymptotischen Ansatz für die Streuwellenfunktion $\psi_{\vec{k}}(x)$. Dieser Ansatz ist tatsächlich korrekt, falls

- $V(r)$ kugelsymmetrisch
- $V(r)$ stärker abfallend als $\frac{1}{r}$ für $r \rightarrow \infty$

Wenn er gilt, können wir den Strom der Kugelwelle und der ebenen Welle einzeln berechnen.

$$\vec{J}_{Streu} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\Theta)|^2}{r^2} \vec{n} + O\left(\frac{1}{r^3}\right)$$

(\vec{n} : Radial-Einheitsvektor) Die Tangentialkomponenten ($\sim \frac{d}{d\Theta} f(\Theta)$) sind alle $O\left(\frac{1}{r^3}\right)$. Ferner haben wir

$$\vec{J}_{ein} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}$$

Das ergibt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Theta)|^2$$

Beim Experiment ist der Strahl seitlich begrenzt. Man muß das Nachweisgerät aus der Interferenzzone zwischen Kugelwelle und (seitlich begrenzten) ebenen Wellen heraushalten. Die Messung der Vorwärtstreuung ($\Theta = 0$) ist sehr delikate. Bei

Potentialen mit langer Reichweite ist $f(\Theta)$ bei $\Theta = 0$ singulär!

In vielen Fällen ist eine Integration der Schrödingergleichung, die für $r \rightarrow \infty$ die gewünschte Randbedingung ($\psi_{\vec{k}}(x)$) erfüllt und damit die Streuamplitude liefert, nicht analytisch möglich. Statt dessen können wir, wenn auch oft nur numerisch, die Streuphasen δ_l bestimmen. Wir suchen daher nach einem Ausdruck von $f(\Theta)$ durch die δ_l , die sogenannte Streuphasenentwicklung der Streuamplitude.

Wir nehmen an, $\psi_{\vec{k}}(x)$ sei gegeben. Als reguläre Lösung muß sie die Entwicklung

$$\psi_{\vec{k}}(x) = \sum_l u_l(r) Y_0^l(\Theta), \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}$$

besitzen. \vec{k} liegt in z -Richtung: Rotationen um die z -Achse lassen $\psi_{\vec{k}}(x)$ ungeändert. Weiterhin hängt $e^{ikz} = e^{ikr \cos \Theta}$ nicht von ϕ ab, und damit ist $m = 0$. Dabei ist für jedes $u_l(r)$ (mit unbestimmtem c_l)

$$u_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} c_l \frac{1}{r} \sin \left(kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l \right)$$

also

$$\psi_{\vec{k}}(x) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_l \frac{c_l}{2i} \left[e^{i(kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l)} - e^{-i(kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l)} \right] Y_0^l(\Theta) \cdot \frac{1}{r}$$

Im Abschnitt 2.7 (S. 37) haben wir die ebene Welle zerlegt gemäß

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l j_l(kr) Y_0^l(\Theta),$$

wobei

$$j_l(kr) \approx \frac{1}{kr} \sin \left(kr - l \frac{\pi}{2} \right)$$

Ferner machen wir den Ansatz

$$f(\Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l Y_0^l(\Theta)$$

Dann ist

$$e^{ikz} + f(\Theta) \frac{e^{ikr}}{r} \approx \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2ik} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l \frac{e^{+i(kr - l \frac{\pi}{2})}}{r} + a_l \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{1}{2ik} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l \frac{e^{-i(kr - l \frac{\pi}{2})}}{r} \right\} Y_0^l(\Theta)$$

Das erlaubt uns, die Koeffizienten c_l zu berechnen, wenn wir die einlaufenden Kugelwellen vergleichen:

$$c_l = \frac{1}{k} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \cdot i^l \cdot e^{i\delta_l}$$

also in den auslaufenden Kugelwellen

$$\frac{c_l}{2i} e^{i(-l \frac{\pi}{2} + \delta_l)} = \frac{1}{2ik} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \underbrace{i^l e^{i(-l \frac{\pi}{2})}}_{=1} + a_l$$

oder

$$a_l = \frac{1}{2ik} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{k} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

Damit haben wir die gewünschte Entwicklung

$$\begin{aligned} f(\Theta) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_0^l(\Theta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \Theta) \\ \text{mit } Y_0^l(\Theta) &= \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} P_l(\cos \Theta) \end{aligned}$$

Im Limes $k \rightarrow 0$ ($E \rightarrow 0$) zeigen die Streuphasen ein gewisses Schwellenverhalten. Dies wird durch die Abstoßung des Zentrifugalpotentials bewirkt. Diese Abstoßung nimmt mit l zu und verdrängt das Elektron aus dem Streuzentrum. Dadurch wird die Wirkung des Potentials abgeschwächt. Dieses Schwellenverhalten kann man im Fall des Potentialtopfes leicht nachweisen. Wir schreiben zuerst

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l = - \frac{k j_l(\kappa R) j_l'(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) j_l(kR)}{k j_l(\kappa R) h_l'^{(+)}(kR) - \kappa j_l'(\kappa R) h_l'^{(+)}(kR)}$$

Dann verwenden wir die asymptotischen Formeln (Abschnitt 2.7)

$$\begin{aligned} j_l(kR) &= \frac{(kR)^l}{(2l+1)!!} (1 + O((kR)^2)); \\ j_l'(kR) &= \frac{l(kR)^{l-1}}{(2l+1)!!} (1 + O((kR)^2)); \\ h_l^{(+)}(kR) &= \frac{(2l-1)!!}{(kR)^{l+1}} (1 + O(kR)); \\ h_l'^{(+)}(kR) &= \frac{-(l+1)(2l-1)!!}{(kR)^{l+2}} (1 + O(kR)). \end{aligned}$$

Eingesetzt ergibt dies (mit $\kappa_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$):

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{(kR)^{2l+1} (1 + O(kR))}{(2l-1)!! (2l+1)!!} \frac{l j_l(\kappa_0 R) - \kappa_0 R j_l'(\kappa_0 R)}{(l+1) j_l(\kappa_0 R) + \kappa_0 R j_l'(\kappa_0 R)}.$$

Das Schwellenverhalten

$$\delta_l = O((kR)^{2l+1})$$

gilt für jedes Potential mit endlicher Reichweite R (z. B. auch das Yukawa-Potential $\frac{e^{-\mu r}}{r}$, mit $R = \mu^{-1}$).

Der differentielle Wirkungsquerschnitt kann durch die Streuphasen δ_l ausgedrückt werden. Erst die Integration zum totalen Wirkungsquerschnitt liefert eine Vereinfachung

$$\sigma = 2\pi \int_{-1}^{+1} |f(\Theta)|^2 d(\cos \Theta) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

In der Nähe der Schwelle überwiegen damit kleine l , die Streuphasenentwicklung konvergiert gut. An der Schwelle dominiert immer die S-Welle.

Hat man umgekehrt die Aufgabe, einen (gemessenen) differentiellen Wirkungsquerschnitt durch die Streuphasen auszudrücken („Streuphasenanalyse“), so macht man zuerst einen Potenzreihenansatz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{n=0}^{2N} a_n \cos^n \Theta$$

Dann bestimmt man die Streuphasen δ_l , $0 \leq l \leq N$ aus quadratischen Gleichungen für die $\sin \delta_l$, $\cos \delta_l$. Das führt auf charakteristische Mehrdeutigkeiten, die nur schwer zu beseitigen sind.

3.9 Die Streuung am Coulomb-Potential

Das Coulomb-Potential hat als besonderen Vorzug, sowohl in der Form der Kugelwellen $u_l(r)$, als auch in der Form der Streuwellenfunktionen (die sich asymptotisch aus ebener Welle und gestreuter Kugelwelle zusammensetzen) exakt lösbar zu sein. Wir schreiben den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$$

behalten uns aber vor, Z gegebenfalls auch negativ zu wählen.

Nach Abseparation der Kugelfunktionen (Abschnitt 3.6, S. 63) haben wir die Lösungen

$$u_l(r) = (2kr)^l e^{ikr} {}_1F_1\left(l+1 - i\frac{Z}{\varrho_0}, 2l+2; -2ikr\right)$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \text{ „Bohrscher Radius“}, \quad \varrho_0 = kr_0$$

Für $r \rightarrow \infty$ haben diese Funktionen das asymptotische Verhalten ([A. + St.] 13.5.1)

$${}_1F_1(a, b; \underbrace{-2ikr}_{=:z}) = \left[e^{\pm i\pi a} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-2ikr)^{-a} + e^{-2ikr} (-2ikr)^{a-b} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \right] \left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right) \right)$$

dabei gilt

$$e^{+i\pi a} \quad \text{falls} \quad -\frac{1}{2}\pi < \arg(-2ikr) < \frac{3}{2}\pi$$

$$e^{-i\pi a} \quad \text{falls} \quad -\frac{3}{2}\pi < \arg(-2ikr) \leq -\frac{1}{2}\pi$$

Das ergibt in unserem Fall ($\arg(-2ikr) = -\frac{\pi}{2}$)

$$u_l(r) = \frac{(2l+1)!}{\left| \Gamma\left(l+1 + i\frac{Z}{\varrho_0}\right) \right|} (2kr)^{-1} \cdot$$

$$\left[\exp\left\{ -\frac{i\pi}{2} \left(l+1 - i\frac{Z}{\varrho_0} \right) - i \arg \Gamma\left(l+1 + i\frac{Z}{\varrho_0} \right) + i\frac{Z}{\varrho_0} \ln(2kr) + ikr \right\} \right.$$

$$\left. + \exp\left\{ i\frac{\pi}{2} \left(l+1 + i\frac{Z}{\varrho_0} \right) + i \arg \Gamma\left(l+1 + i\frac{Z}{\varrho_0} \right) - i\frac{Z}{\varrho_0} \ln(2kr) - ikr \right\} \right]$$

$$\cdot \left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right) \right)$$

$$= \frac{(2l+1)! e^{-\frac{\pi}{2} \frac{Z}{\varrho_0}}}{\left| \Gamma\left(l+1 + i\frac{Z}{\varrho_0} \right) \right|} \cdot \frac{1}{kr} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \frac{Z}{\varrho_0} \ln(2kr) + \sigma_l \right) \left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right) \right)$$

wobei

$$\sigma_l = \arg \Gamma \left(l + 1 - i \frac{Z}{\varrho_l} \right).$$

Diese σ_l sind die Coulomb-Streuphasen. Unter Verwendung der Stirlingschen Formel für die Gamma-Funktion ([A. + St.] 6.1.7)

$$\begin{aligned} \ln \Gamma(\xi) &= \xi \ln \xi - \xi - \frac{1}{2} \ln \xi + \frac{1}{2} \ln 2\pi + O(\xi^{-1}); \\ \xi &= l + 1 - i \frac{Z}{\varrho_0}; \\ \sigma_l &= \frac{1}{2i} \ln \frac{\Gamma \left(l + 1 - i \frac{Z}{\varrho_0} \right)}{\Gamma \left(l + 1 + i \frac{Z}{\varrho_0} \right)}; \end{aligned}$$

erhalten wir für große l :

$$\sigma_l = -\frac{Z}{\varrho_0} \ln(l+1) + O(l^{-1})$$

und für kleine k (d. h. $\varrho_0 \rightarrow 0$, $\frac{Z}{\varrho_0} \rightarrow \infty$):

$$\sigma_l = \frac{Z}{\varrho_0} - \frac{\pi}{2}(l+1) + O(k)$$

Von dem Schwellenverhalten für Potentiale endlicher Reichweite ist nichts mehr zu erkennen.

Nun berechnen wir die Streuwellenfunktionen. Dazu machen wir den Ansatz

$$\psi_{\vec{k}}(x) = e^{ikz} F(ik(r-z)), \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}$$

Dann bekommen wir für F die Differentialgleichung

$$\eta F''(\eta) + (1-\eta)F'(\eta) - i \frac{Z}{\varrho_0} F(\eta) = 0$$

Diese besitzt die reguläre Lösung

$$F(\eta) = {}_1F_1 \left(+i \frac{Z}{\varrho_0}, 1; \eta \right)$$

wegen

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a, 1; \eta) : \quad \eta F''(\eta) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n!} \frac{\eta^{n-1}}{(n-2)!} \\ -aF(\eta) &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n \eta^n}{n!n!} a \\ F'(\eta) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n!} \frac{\eta^{n-1}}{(n-1)!} \end{aligned}$$

und

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n!(n-1)!} \left[\frac{a+n}{n+1} + \frac{a+n}{n(n+1)} - 1 - \frac{a}{n} \right] = 0$$

Um diese Lösung bei $r \rightarrow \infty$ zu untersuchen, müssen wir einen kleinen Winkel $|\Theta| < \varepsilon$ ausschließen! Außerhalb dieses Winkels geht

$$\eta = ik(r - z) = +ikr(1 - \cos \Theta)$$

mit r gegen $+i\infty$. Wir verwenden dieselbe asymptotische Formel wie vorhin und bekommen

$$F(\eta) = \left[\frac{e^{-\pi \frac{Z}{\varrho_0}} \cdot e^{-i \frac{Z}{\varrho_0} \ln ikr(1 - \cos \Theta)}}{\Gamma\left(1 - i \frac{Z}{\varrho_0}\right)} + \frac{\exp\left[ikr(1 - \cos \Theta) + i \frac{Z}{\varrho_0} \ln ikr(1 - \cos \Theta)\right]}{+ikr(1 - \cos \Theta) \cdot \Gamma\left(+i \frac{Z}{\varrho_0}\right)} \right] \cdot (1 + O(r^{-1}))$$

und unter Verwendung von

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma\left(1 - i \frac{Z}{\varrho_0}\right)}{\Gamma\left(i \frac{Z}{\varrho_0}\right)} &= +i \frac{Z}{\varrho_0} \cdot \frac{\Gamma\left(1 - i \frac{Z}{\varrho_0}\right)}{\Gamma\left(1 + i \frac{Z}{\varrho_0}\right)} \\ &= i \frac{Z}{\varrho_0} e^{2i\sigma_0} \end{aligned}$$

bekommen wir

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(x) &= \frac{e^{-\frac{\pi}{2} \frac{Z}{\varrho_0}}}{\Gamma\left(1 - i \frac{Z}{\varrho_0}\right)} \left\{ \exp\left(ikz - i \frac{Z}{\varrho_0} \ln\left(2kr \sin^2 \frac{\Theta}{2}\right)\right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{f_c(\Theta)}{r} e^{ikr + i \frac{Z}{\varrho_0} \ln 2kr} \right\} \cdot (1 + O(r^{-1})) \end{aligned}$$

mit

$$f_c(\Theta) = \frac{Z}{\varrho_0 k (1 - \cos \Theta)} e^{2i\sigma_0 + i \frac{Z}{\varrho_0} \ln(\sin^2 \frac{\Theta}{2})}$$

Sowohl die ebene Welle, als auch die Kugelwelle werden für $r \rightarrow \infty$ durch $\ln r$ -Terme modifiziert. Der Wirkungsquerschnitt wird wie früher als das Verhältnis der beiden Stromdichten mal r^2 definiert, im Limes $r \rightarrow \infty$. Dann ergibt sich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c(\Theta)|^2 = \frac{Z^2}{4\varrho_0^2 k^2 \sin^4 \frac{\Theta}{2}}$$

Dieser Wirkungsquerschnitt ist in Vorwärtsrichtung stark singulär.

Um die Bezeichnung „Streuphasen“ für die σ_l zu rechtfertigen, sollte eine Entwicklung

$$f_c(\Theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{+i\sigma_l} \sin \sigma_l (2l + 1) P_l(\cos \Theta) \quad (\Theta \neq 0)$$

oder umgekehrt

$$e^{i\sigma_l} \sin \sigma_l = \frac{k}{2} \int_{-1}^{+1} f_c(\Theta) P_l(\cos \Theta) d(\cos \Theta)$$

gelten. Das Integral konvergiert jedoch nicht, da

$$P_l(1) = 1 \quad \text{für alle } l$$

ist und

$$f_c(\Theta) = C \cdot (1 - \cos \Theta)^{-1+i\frac{z}{e_0}}$$

Ebenso divergiert die Summe, da σ_l für $l \rightarrow \infty$ nicht gegen null geht. Mit distributionstheoretischen Methoden ist die Summe jedoch ausführbar und liefert das erwartete Ergebnis.

4 Näherungsverfahren

4.1 Die Bornsche Reihe für die Streuamplitude

Näherungsmethoden gehören zum täglichen Brot des Physikers. Sobald in einer Theorie ein Parameter als klein bekannt ist, wird man versuchen, nach ihm zu entwickeln. Dabei ist es möglich, daß die Abhängigkeit vom kleinen Parameter analytisch (im besten Fall) oder nur asymptotisch entwickelbar (im schlechtesten Fall) ist. Wir werden uns hier nur mit den Verfahren zur Gewinnung solcher Reihen befassen, nicht aber mit dem Beweis von Konvergenzsätzen.

Wir wollen uns zuerst mit der Reihenentwicklung für die Streuwellenfunktion bzw. Streuamplitude beschäftigen, die unsere Techniken zur Gewinnung dieser Amplitude um ein wertvolles Verfahren bereichert. Wir betrachten den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(x)$$

mit einem nicht notwendigerweise kugelsymmetrischen Potential $V(x)$. Die Schrödingergleichung wird zuerst in eine Integralgleichung umgeschrieben:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\psi(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi(x) \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

Sei $G(x, x')$ eine Greensche Funktion wie in Abschnitt 2.7 behandelt:

$$(\Delta + k^2)G(x, x') = \delta(x - x')$$

Wir kennen aus unserer früheren Diskussion die Lösungen dieser Gleichung:

$$\begin{aligned} G(x, x') &= -\frac{k}{4\pi} h_0^{(\pm)}(kr), \quad r = |x - x'| \\ h_0^{(\pm)}(\varrho) &= \frac{e^{\pm i\varrho}}{\varrho}, \quad \varrho = kr \end{aligned}$$

Diese Greensche Funktion löst die Gleichung

$$(\Delta + k^2)f(x) = g(x) \quad g \text{ gegeben}$$

durch

$$f(x) = f_0(x) + \int d^3x' G(x, x')g(x')$$

wobei $f_0(x)$ eine beliebige Lösung der homogenen Gleichung

$$(\Delta + k^2)f_0(x) = 0$$

darstellt. Unsere Schrödingergleichung enthält auf der rechten Seite nicht eine vorgegebene Funktion $g(x)$, sondern als Faktor ebenfalls die unbekannte Funktion $\psi(x)$

$$g(x) \longrightarrow \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi(x)$$

Entsprechend bekommen wir aus der Schrödingergleichung die Integralgleichung

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \int dx' V(x')\psi(x')G(x, x')$$

Für jede Lösung $\psi_0(x)$ der freien Gleichung

$$(\Delta + k^2)\psi_0(x) = 0$$

und jede der beiden Greensfunktionen bekommen wir als Lösung der Integralgleichung eine Lösung der Schrödingergleichung. Für die Umwandlung einer Differentialgleichung in eine Integralgleichung gilt grundsätzlich, daß eine Integralgleichung schon die Randbedingungen explizit enthält, die bei der Lösung der Differentialgleichung erst im Rahmen des Lösungsverfahrens benötigt werden. Als Lösung der freien Gleichung wählen wir

$$\psi_0(x) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

Wir wählen das positive Vorzeichen in G

$$G(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|x-x'|}}{|x-x'|}$$

Wenn das Potential endliche Reichweite hat, so können wir das Integral

$$-\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int dx' \frac{e^{ik|x-x'|}}{|x-x'|} V(x')\psi(x')$$

für $|x| \rightarrow \infty$ asymptotisch auswerten. Es ist mit $|x| = r$

$$\begin{aligned} k|x-x'| &= kr \left(1 - \frac{2\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r^2} + \frac{\vec{x}'^2}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= kr \left(1 - \frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r^2} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right) \\ &= kr - k\frac{\vec{x}}{r}\cdot\vec{x}' + O\left(\frac{1}{r}\right) \end{aligned}$$

und für das Integral

$$-\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int dx' e^{-ik\frac{\vec{x}}{r}\cdot\vec{x}'} V(x')\psi(x') + O(r^{-2})$$

Die Lösung unserer Integralgleichung ist in diesem Fall von der Form der Streuwellenfunktion, die Randbedingungen sind also durch die Wahl von ψ_0 und G berücksichtigt worden:

$$\psi_{\vec{k}}(x) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

mit der Streuamplitude

$$f = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int dx' e^{-ik\frac{\vec{x}}{r}\cdot\vec{x}'} V(x')\psi_{\vec{k}}(x')$$

Falls $V(x')$ kugelsymmetrisch ist, hängt f nur vom Winkel Θ zwischen der Beobachtungsrichtung \vec{x} und dem Wellenvektor \vec{k} ab. Es ist offensichtlich, daß die Verwendung der anderen Greenschen Funktion eine Wellenfunktion mit einlaufendem Kugelwellenteil ergeben hätte.

Der Ausdruck für die Streuamplitude ist exakt, aber nur sinnvoll, wenn $\psi_{\vec{k}}(x)$ bekannt ist. Dazu müssen wir also die Integralgleichung lösen. Die Integralgleichung kann nun zum Ausgangspunkt eines Iterationsverfahrens gewählt werden. Dazu setzen wir

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_{\vec{k}}^{(n)}(x) \\ \psi_{\vec{k}}^{(0)}(x) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \\ \psi_{\vec{k}}^{(n)}(x) &= -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|x-x'|}}{|x-x'|} V(x') \psi_{\vec{k}}^{(n-1)}(x') dx' \\ &\quad (n \geq 1)\end{aligned}$$

Falls⁹

$$\sup_x \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{|V(x')|}{|x-x'|} dx' = \gamma < 1$$

so ist

$$\sup_x |\psi_{\vec{k}}^{(n)}(x)| \leq \gamma^n$$

und diese Reihe konvergiert gleichmäßig. Beim Yukawa-Potential ist diese Forderung erfüllt, falls die Kopplungskonstante g in

$$V(x) = g \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

klein genug ist¹⁰.

Die Reihenentwicklung heißt Bornsche Reihe. In niedrigster Näherung (1. Bornsche Näherung) bekommen wir für die Streuamplitude:

$$\begin{aligned}f^{(1)} &= -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int dx' e^{+i\vec{x}'(\vec{e}_0 - \vec{e}_1)k} V(x') \\ \text{mit } \vec{e}_0 &= \frac{\vec{k}}{k}, \quad \vec{e}_1 = \frac{\vec{x}}{r}\end{aligned}$$

Falls $V(x) = V(r)$ ist, so können wir die Richtung des Impulsübertrags

$$\vec{q} = \hbar(\vec{e}_0 - \vec{e}_1)k$$

⁹ $V(x') = \tilde{V}(r')$: Vereinfachung durch $\int d\Omega'$

$$\gamma = \frac{2m}{\hbar^2\mu} \cdot g \cdot \underbrace{\sup_x \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{-r'}}{r'|x-x'|} d^3x'}_{=\text{Zahl}=1}$$

$$\text{Beweis: } \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{-r'}}{r'|x-x'|} d^3x' = \frac{1}{r} (1 - e^{-r})$$

als Achse des Polarkoordinatensystems wählen, um über die Winkel zu integrieren:

$$\begin{aligned} |(\vec{e}_0 - \vec{e}_1)k| &= k(2 - 2\vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1)^{\frac{1}{2}} \\ \vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1 &= \cos \Theta \quad (\text{Streuwinkel}) \\ |(\vec{e}_0 - \vec{e}_1)k| &= 2k \sin \frac{\Theta}{2}, \quad 0 \leq \Theta \leq \pi \\ \int dx' e^{i\vec{x}'(\vec{e}_0 - \vec{e}_1)k} V(r') &= 2\pi \int_0^\infty dr' r' \frac{2 \sin(2k \sin \frac{\Theta}{2} r')}{2k \sin \frac{\Theta}{2}} V(r') \\ f^{(1)} &= -\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{k \sin \frac{\Theta}{2}} \int_0^\infty dr' r' \sin\left(2k \sin \frac{\Theta}{2} r'\right) V(r') \end{aligned}$$

Für das Yukawa-Potential ist das

$$f^{(1)}(\Theta) = -\frac{2mg}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\Theta}{2} + \mu^2}$$

Im Limes $\mu \rightarrow 0$ geht das Yukawa-Potential in das Coulomb-Potential über. In diesem Limes geht $f^{(1)}(\Theta)$ für das Yukawa-Potential in die exakte Formel für die Streuamplitude des Coulomb-Potentials über, bis auf einen im Wirkungsquerschnitt unwesentlichen Phasenfaktor¹¹. Das ist ein Zufall ohne tiefere physikalische Bedeutung.

Wir können in der ersten Bornschen Näherung auch eine Formel für die Streuphasen δ_l ableiten. Dazu entwickeln wir

$$f(\Theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\delta_l} \sin \delta_l [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} Y_0^l(\Theta)$$

Andererseits seien in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} \vec{x}' &: r', \Theta', \phi' && \text{bezogen auf die Polarachse } \vec{e}_0 \\ \vec{e}_1 &: 1, \Theta, \phi && \text{mit der gleichen Polarachse} \\ \vec{e}_0 \cdot \vec{e}_1 &= \cos \Theta && \Theta : \text{Streuwinkel wie bisher} \end{aligned}$$

Damit wird

$$\begin{aligned} e^{ik\vec{e}_0 \cdot \vec{x}'} &= \sum_l [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l j_l(kr') Y_0^l(\Theta') : \\ e^{-ik\vec{e}_1 \cdot \vec{x}'} &= \sum_l 4\pi(-i)^l j_l(kr') \sum_{m=-l}^{+l} \overline{Y_m^l(\Theta', \phi')} Y_m^l(\Theta, \phi) \end{aligned}$$

(nach dem Additionstheorem der Kugelfunktionen, Abschnitt 2.7, S. 41). Multiplikation dieser Ausdrücke, Einsetzen in das Integral der 1. Bornschen Näherung und Integration über Θ', ϕ' ergibt

$$f^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_l [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \left[\int_0^\infty dr' r'^2 V(r') (j_l(kr'))^2 \right] Y_0^l(\Theta)$$

und Vergleich mit der obigen Streuphasenentwicklung

$$e^{i\delta_l^{(1)}} \sin \delta_l^{(1)} = -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 (j_l(kr))^2 V(r).$$

¹¹Wie man leicht sieht, ist der Phasenfaktor $1 + O(Ze^2)$, also ist mit dem Vorfaktor die Abweichung von 1 mindestens 2. Ordnung.

4.2 Die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie für diskrete Spektren

Gegeben sei der Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1, \quad \lambda : \text{kleiner Parameter, } \mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1 \text{ selbstadjungiert}$$

bei dem das Spektrum und die Eigenvektoren von \mathcal{H}_0 vollständig bekannt sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 \varphi_{n\alpha} &= E_n \varphi_{n\alpha} \\ (\varphi_{n\alpha}, \varphi_{n'\alpha'}) &= \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned}$$

α ist ein Index, der die Entartung der Energieniveaus E_n erfassen soll. Die Idee der Störungsentwicklung ist, daß die Eigenvektoren und Eigenwerte von \mathcal{H}

$$\mathcal{H} \psi_{n\alpha}(\lambda) = E_{n\alpha}(\lambda) \psi_{n\alpha}(\lambda)$$

eine Potenzreihenentwicklung in λ besitzen

$$\begin{aligned} E_{n\alpha}(\lambda) &= E_{n\alpha}^{(0)} + \lambda E_{n\alpha}^{(1)} + \lambda^2 E_{n\alpha}^{(2)} + \dots \\ \psi_{n\alpha}(\lambda) &= \psi_{n\alpha}^{(0)} + \lambda \psi_{n\alpha}^{(1)} + \lambda^2 \psi_{n\alpha}^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

mit der Anfangsbedingung

$$\begin{aligned} E_{n\alpha}^{(0)} &= E_n \\ \psi_{n\alpha}^{(0)} &= \varphi_{n\alpha} \end{aligned}$$

Man setzt die Reihenentwicklung in die Eigenwertgleichung für \mathcal{H} ein und vergleicht die Koeffizienten von gleichen Potenzen von λ . Das gibt

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 \psi_{n\alpha}^{(0)} &= E_{n\alpha}^{(0)} \psi_{n\alpha}^{(0)}; \\ \mathcal{H}_0 \psi_{n\alpha}^{(1)} + \mathcal{H}_1 \psi_{n\alpha}^{(0)} &= E_{n\alpha}^{(0)} \psi_{n\alpha}^{(1)} + E_{n\alpha}^{(1)} \psi_{n\alpha}^{(0)} \\ \mathcal{H}_0 \psi_{n\alpha}^{(2)} + \mathcal{H}_1 \psi_{n\alpha}^{(1)} &= E_{n\alpha}^{(0)} \psi_{n\alpha}^{(2)} + E_{n\alpha}^{(1)} \psi_{n\alpha}^{(1)} + E_{n\alpha}^{(2)} \psi_{n\alpha}^{(0)} \\ &\vdots \end{aligned}$$

etc. Die erste Gleichung ist angesichts der Anfangsbedingungen trivial.

Ein einfaches Beispiel: Das Zweizustandssystem

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} \lambda_1(\sigma) & 0 \\ 0 & \lambda_2(\sigma) \end{pmatrix}$$

Damit die Funktionen $\lambda_{1,2}(\sigma)$ identifiziert werden können, müssen sie z. B. analytisch von σ abhängen. Wir wollen \mathcal{H}_1 stören durch

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ \varepsilon & 0 \end{pmatrix}$$

Statt σ können wir einen anderen Parameter wählen, z. B.

$$\Delta = \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)$$

Was sind dann die Eigenwerte von

$$\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad ?$$

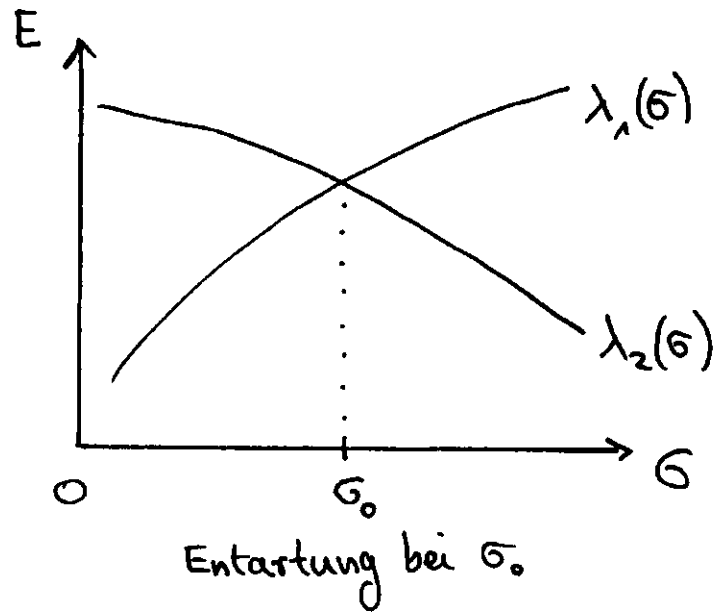
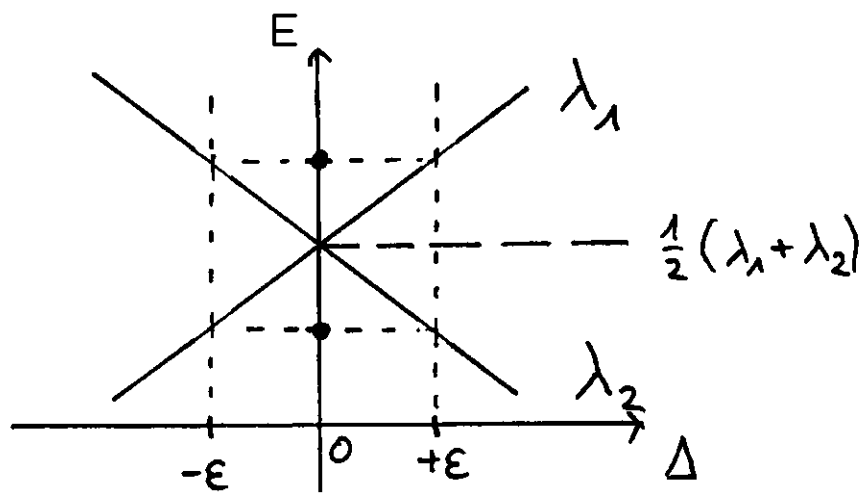


Abbildung 7: Zweizustandssystem (ungestört)

Abbildung 8: Zur Wahl von Δ

Das charakteristische Polynom ist

$$\det \begin{pmatrix} \lambda_1 - \lambda & \varepsilon \\ \varepsilon & \lambda_2 - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \lambda(\lambda_1 + \lambda_2) + \lambda_1 \lambda_2 - \varepsilon^2$$

$$\lambda = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \pm \left[\left(\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2) \right)^2 + \varepsilon^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \pm [\Delta^2 + \varepsilon^2]^{\frac{1}{2}}$$

Nun ist für $|\varepsilon| < |\Delta|$ eine Potenzreihenentwicklung nach ε möglich, die nur gerade Potenzen von ε enthält (wir werden die Potenzen störungstheoretische „Ordnungen“ nennen, also zweite, vierte, sechste Ordnung usw.).

$$\lambda = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \pm \Delta \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^{2n}$$

Der nullte Term ergibt

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{cases} \pm \Delta \sum_{n=1}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^{2n}$$

Hier haben wir den normalen Fall der Störungstheorie: Fall (1.) $|\varepsilon| < |\Delta|$, die Störung ε ist kleiner als der Niveauabstand.

Nun zu Fall (2.): „Entartung“

$$\Delta = 0; \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_0$$

Eingesetzt in die allgemeinen Lösungen für λ ergibt sich

$$\lambda = \underbrace{\frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)}_{=\lambda_0} \pm \varepsilon$$

Schließlich der Fall (3.): „Quasientartung“

$$|\Delta| < |\varepsilon|$$

Es ist klar, daß wir in diesem Fall obige Formel für λ nach $\frac{\Delta}{\varepsilon}$ entwickeln werden:

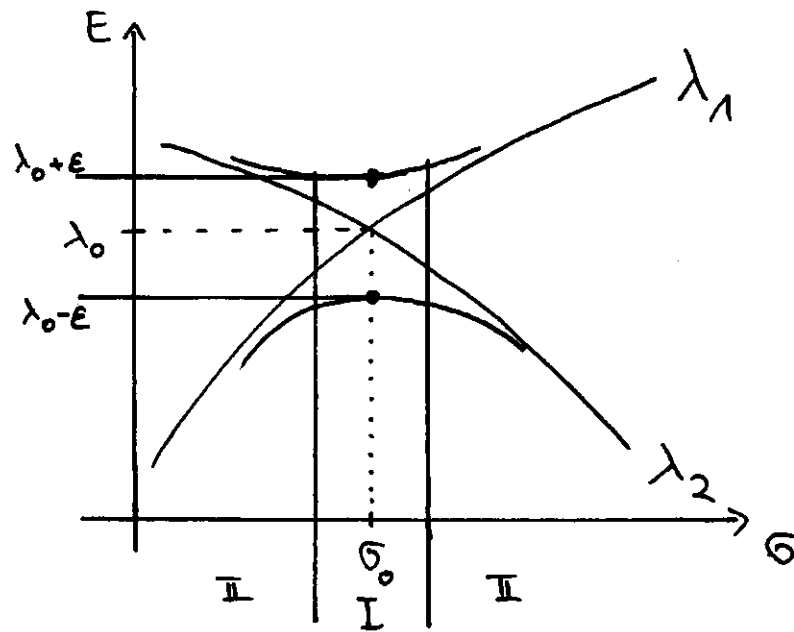
$$\lambda = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \pm \varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} \left(\frac{\Delta^2}{\varepsilon^2} \right)^n$$

Hier haben wir in der nullten Näherung ($n = 0$)

$$\begin{aligned} \lambda^{(0)} &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) \pm \varepsilon \\ &= \lambda_0 \pm \varepsilon \end{aligned}$$

d. h. wir gehen vom entarteten Fall aus und benutzen $\frac{\Delta}{\varepsilon}$ als kleinen Entwicklungsparameter. Das Ergebnis ist in Abbildung 9 zu sehen. Wir haben das Crossover-Phänomen gefunden: λ_1 geht am Entwicklungspunkt glatt in λ_2 über.

Das ist bisher nur die halbe Wahrheit, denn neben den Eigenwerten interessieren auch die Eigenfunktionen. Für die obigen Fälle gilt:



Gebiet der Entwicklung nach

$$\text{I} : \begin{pmatrix} \Delta \\ \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{II} : \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \Delta \end{pmatrix}$$

Abbildung 9: Crossover-Phänomen

1. Fall:

$$\xi_i = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_i^{(n)} \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^n$$

Eigenvektoren von \mathcal{H}_0

$$\begin{aligned} \xi_1^{(0)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{zu Eigenwert } \lambda_1 \\ \xi_2^{(0)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{zu Eigenwert } \lambda_2 \end{aligned}$$

Hier sind die Vektoren $\xi_i^{(0)}$ als normiert angenommen, die Normierung nach Addition der störungstheoretischen Terme muß nachkontrolliert werden.

2. Fall: Die Matrix

$$\begin{pmatrix} \lambda_0 & \varepsilon \\ \varepsilon & \lambda_0 \end{pmatrix}$$

hat die Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \tilde{\xi}_1^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{Eigenwert } \lambda_0 + \varepsilon \\ \tilde{\xi}_2^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{Eigenwert } \lambda_0 - \varepsilon \end{aligned}$$

Entartungspunkte erfordern also schon in nullter Näherung korrigierte Eigenvektoren. Diese werden auch im ganzen Bereich von Fall 3 angewandt:

$$\xi_i = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\xi}_i^{(n)} \left(\frac{\Delta}{\varepsilon} \right)^n$$

3. In diesem Bereich können wir dann $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ annähernd auf Diagonalform bringen

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_{\substack{\text{transponiert} \\ \text{(adjungiert)}}} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Eigenvektoren}} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \lambda_1 + \varepsilon & \lambda_2 + \varepsilon \\ \lambda_1 - \varepsilon & -\lambda_2 + \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \lambda_1 + \lambda_2 + 2\varepsilon & \lambda_1 - \lambda_2 \\ \lambda_1 - \lambda_2 & \lambda_1 + \lambda_2 - 2\varepsilon \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_0 + \varepsilon & \Delta \\ \Delta & \lambda_0 - \varepsilon \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mit $\lambda_0 = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)$. Hier geht es dann weiter wie in Fall 1, aber mit Δ als Störung. Die störungstheoretischen Reihen für die Eigenvektoren ergeben sich aus den exakten Lösungen, die wir leicht angeben können.

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \lambda_0 + \Delta & \varepsilon \\ \varepsilon & \lambda_0 - \Delta \end{pmatrix} \xi_{\pm} &= \left(\lambda_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \right) \xi_{\pm} \\
\begin{pmatrix} \Delta \mp \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} & \varepsilon \\ \varepsilon & -\Delta \mp \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \end{pmatrix} \xi_{\pm} &= 0 \\
\xi_+ &= N_+ \begin{pmatrix} \Delta + \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \\ \varepsilon \end{pmatrix} \\
&\xrightarrow{(\varepsilon \rightarrow 0)} \xi_1^{(0)} \\
N_+^2 &= \left(\left(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \right)^2 + \varepsilon \right)^{-1} \\
&= \left(2\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \cdot \Delta + 2\Delta^2 + 2\varepsilon^2 \right)^{-1} \\
\xi_- &= N_- \begin{pmatrix} -\varepsilon \\ \Delta + \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \end{pmatrix} \\
&\xrightarrow{(\varepsilon \rightarrow 0)} \xi_2^{(0)} \\
N_-^2 &= \left(2\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2} \cdot \Delta + 2\Delta^2 + 2\varepsilon^2 \right)^{-1} \\
&= N_+^2
\end{aligned}$$

Nun weiter mit der allgemeinen Diskussion: Ist ein Energieniveau E_n nicht entartet, $\varphi_{n\alpha} \rightarrow \varphi_n$, so ist die Störungstheorie denkbar einfach. Die zweite Gleichung besagt

$$\mathcal{H}_0 \psi_n^{(1)} + \mathcal{H}_1 \varphi_n = E_n \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \varphi_n$$

Multiplikation mit φ_m ergibt mit

$$\begin{aligned}
(\varphi_m, \mathcal{H}_0 \psi_n^{(1)}) &= E_m (\varphi_m, \psi_n^{(1)}) \\
(E_m - E_n) (\varphi_m, \psi_n^{(1)}) &= E_n^{(1)} \delta_{nm} - (\varphi_m, \mathcal{H}_1 \varphi_n)
\end{aligned}$$

also für $m = n$

$$E_n^{(1)} = (\varphi_n, \mathcal{H}_1 \varphi_n)$$

und für $m \neq n$

$$\begin{aligned}
(\varphi_m, \psi_n^{(1)}) &= \frac{(\varphi_m, \mathcal{H}_1 \varphi_n)}{E_n - E_m} \\
\psi_n^{(1)} &= \sum_{m \neq n} \frac{(\varphi_m, \mathcal{H}_1 \varphi_n)}{E_n - E_m} \varphi_m + b \varphi_n
\end{aligned}$$

wobei die Vollständigkeit der $\{\varphi_m\}$ vorausgesetzt ist, und b unbestimmt bleibt. Wir werden gleich zeigen, daß man alle Korrekturen $\psi_n^{(k)}$, $k \geq 1$ eines Zustands $\psi_n^{(0)} = \varphi_n$ als zu diesem orthogonal annehmen kann, also

$$(\varphi_n, \psi_n^{(k)}) = 0 \Rightarrow b = 0$$

Gehen wir mit den Ergebnissen der ersten Ordnung in die dritte Gleichung ein, so lassen sich aus ihr auf analoge Weise $E_n^{(2)}$ und $\psi_n^{(2)}$ bestimmen. Es ergibt sich mit $(\varphi_n, \psi_n^{(1)}) = (\varphi_n, \psi_n^{(2)}) = 0$

$$E_n^{(2)} = (\varphi_n, \mathcal{H}_1 \psi_n^{(1)}) = \sum_{m \neq n} \frac{(\varphi_n, \mathcal{H}_1 \varphi_m) (\varphi_m, \mathcal{H}_1 \varphi_n)}{E_n - E_m}$$

Komplizierter und physikalisch interessanter ist der Fall eines entarteten Niveaus E_n , dessen Entartung durch die Störung ganz oder teilweise aufgehoben wird. Wir

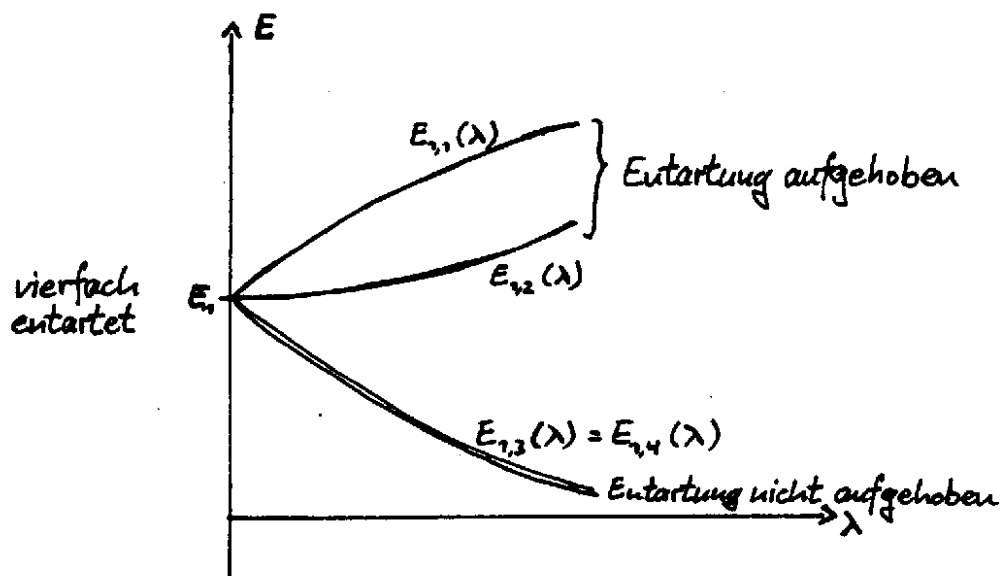


Abbildung 10: Zur Entartung von Energieniveaus

bemerken zunächst, daß durch unsere Gleichungen bisher die Norm des Zustandes $\psi_{n\alpha}$ nicht fixiert ist. Entsprechend enthalten die Gleichungen einen Freiheitsgrad, den wir willkürlich ausfüllen können. Sei die Komponente von $\psi_{n\alpha}^{(k)}$

$$\begin{aligned} \psi_{n\alpha}^{(0)} = \varphi_{n\alpha} : \psi_{n\alpha}^{(k)} &= \sigma_{n\alpha}^{(k)} \varphi_{n\alpha} + \tilde{\psi}_{n\alpha}^{(k)} \\ (\varphi_{n\alpha}, \tilde{\psi}_{n\alpha}^{(k)}) &= 0 \end{aligned}$$

Dann haben wir ($\sigma_{n\alpha}^{(0)} = 1$)

$$\psi_{n\alpha} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_{n\alpha}^{(k)} \lambda^k \right) \varphi_{n\alpha} + \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \tilde{\psi}_{n\alpha}^{(k)}$$

Da die Normierung willkürlich ist, können wir durch

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_{n\alpha}^{(k)} \lambda^k = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \sigma_{n\alpha}^{(k)} \lambda^k$$

dividieren und neu nach Potenzen von λ^k ordnen

$$\psi'_{n\alpha} = \varphi_{n\alpha} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \psi_{n\alpha}^{(k)'}$$

mit

$$(\varphi_{n\alpha}, \psi_{n\alpha}^{(k)'}) = 0.$$

Diese Bedingung ist also mit unseren Gleichungen verträglich. Natürlich können wir am Ende unserer Rechnung $\psi_{n\alpha}$ normieren wie wir wollen.

Wir betrachten die Gleichung erster Ordnung mit

$$E_{n\alpha}^{(0)} = E_n$$

und multiplizieren mit $\varphi_{m\beta}$. Damit erhalten wir

$$(E_m - E_n)(\varphi_{m\beta}, \psi_{n\alpha}^{(1)}) + (\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha}) = E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}$$

Diese Gleichung wird zunächst für $m = n$ betrachtet

$$(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha}) = E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{\alpha\beta}$$

Wir nennen die linke Seite die „Störmatrix erster Ordnung“. Diese Gleichung ist nun keineswegs automatisch erfüllt, denn die Störmatrix ist nicht immer diagonal. Aber um eine konsistente Störungsentwicklung zu ermöglichen, können wir die $\varphi_{n,\alpha}$ so wählen, daß die Störmatrix erster Ordnung diagonal wird. Denn für gegebenes n sind die $\varphi_{n,\alpha}$ zunächst eine willkürliche Basis im Eigenraum des Eigenwerts E_n . Sei etwa

$$W_{n,\alpha\beta}^{(1)} = (\tilde{\varphi}_{n\beta}, \mathcal{H}_1 \tilde{\varphi}_{n\alpha})$$

eine Störmatrix zum System $\{\tilde{\varphi}_{n\alpha}\}$. Diese Matrix ist hermitesch, kann also durch eine unitäre Matrix diagonalisiert werden

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha', \beta'} \bar{u}_{\beta'\beta} W_{n,\beta'\alpha'}^{(1)} u_{\alpha'\alpha} &= \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} \\ (u^{-1})_{\alpha\beta} &= \bar{u}_{\beta\alpha} \end{aligned}$$

Dann definieren wir als „richtige“ Zustände nullter Ordnung

$$\varphi_{n\alpha} = \sum_{\alpha'} \tilde{\varphi}_{n\alpha'} u_{\alpha'\alpha} = \psi_{n,\alpha}^{(0)}$$

Ferner ergibt sich

$$E_{n,\alpha}^{(1)} = \varepsilon_\alpha$$

Wenn die ε_α (bei festem n) alle verschieden sind, ist die Wahl der $\psi_{n,\alpha}^{(0)} = \varphi_{n\alpha}$ endgültig. Wir sagen, die Entartung ist in erster Ordnung vollständig aufgehoben worden. Wenn jedoch einige ε_α gleich sind (für festes n), so bleibt die Wahl der $\varphi_{n,\alpha}$ für diese ε_α weiterhin willkürlich.

Nun sei $m \neq n$. Dann ist $E_m \neq E_n$ und

$$(\varphi_{m\beta}, \psi_{n\alpha}^{(1)}) = \frac{(\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m}$$

oder

$$\psi_{n\alpha}^{(1)} = \sum_{\substack{m,\beta \\ (m \neq n)}} \frac{(\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \varphi_{m\beta} + \sum_{\beta} b_{n,\beta\alpha} \varphi_{n\beta}$$

mit unbekanntem Koeffizienten $b_{n,\alpha\beta}$ (bis auf $b_{n,\alpha\alpha} = (\varphi_{n\alpha}, \psi_{n\alpha}^{(1)}) = 0$). Die freien Parameter $b_{n,\alpha\beta}$ werden in der (2.) nächsten Ordnung bestimmt. Bei Fehlen der Entartung bleiben keine unbestimmten Parameter $b_{n,\alpha\beta}$ übrig.

Damit sind die störungstheoretischen Korrekturen erster Ordnung $E_{n,\alpha}^{(1)}$ und $\psi_{n,\alpha}^{(1)}$ soweit möglich berechnet.

Nun betrachten wir die Gleichung zweiter Ordnung, die wir wieder von links mit $\varphi_{m\beta}$ multiplizieren. Das ergibt

$$(E_m - E_n)(\varphi_{m\beta}, \psi_{n\alpha}^{(2)}) + (\varphi_{m\beta}, (\mathcal{H}_1 - E_{n\alpha}^{(1)}) \psi_{n\alpha}^{(1)}) = E_{n\alpha}^{(2)} \delta_{mn} \delta_{\beta\alpha}$$

Zuerst setzen wir wieder $m = n$. Dann ergibt Einsetzen von $\psi_{n,\alpha}^{(1)}$ und $E_{n,\alpha}^{(1)} = \varepsilon_\alpha$

$$\sum_{\substack{m,\beta \\ (m \neq n)}} \frac{(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} + (\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha) b_{n,\beta\alpha} = E_{n,\alpha}^{(2)} \delta_{\alpha\beta}$$

Wir nennen den ersten Term „die Störmatrix zweiter Ordnung“ $W_{n,\beta\alpha}^{(2)}$ und haben

$$W_{n,\beta\alpha}^{(2)} + (\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha) b_{n,\beta\alpha} = E_{n,\alpha}^{(2)} \delta_{\alpha\beta}$$

Jetzt betrachten wir ein ε_α , so daß für alle $\beta \neq \alpha$ auch $\varepsilon_\beta \neq \varepsilon_\alpha$ ist. Das bedeutet, ε_α gehört zu einem Niveau, das in erster Näherung nicht mehr entartet ist. Dann ist diese Gleichung zu lösen durch

$$b_{n,\alpha\beta} = \frac{W_{n,\beta\alpha}^{(2)}}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \quad E_{n\alpha}^{(2)} = W_{n,\alpha\alpha}^{(2)}$$

Sei andererseits ε_α mit einigen ε_β ($\alpha \neq \beta$) entartet. Wenn α, β über diese Indexmenge der entarteten ε läuft, so ist

$$W_{n,\beta\alpha}^{(2)} = E_{n\alpha}^{(2)} \delta_{\beta\alpha}$$

zu lösen. Das gelingt wie bei der Störmatrix erster Ordnung durch Anpassung der Eigenvektoren $\varphi_{n,\alpha}$ nullter Ordnung für festes n und diese Teilmenge der Indizes α . Die $b_{n,\beta\alpha}$ bleiben unbestimmt bis zur nächsten Ordnung.

Schließlich betrachten wir $m \neq n$ und bekommen

$$\begin{aligned} (\varphi_{m\beta}, \psi_{n\alpha}^{(2)}) &= \frac{1}{E_n - E_m} \left(\varphi_{m\beta}, \left(\mathcal{H}_1 - E_{n\alpha}^{(1)} \right) \psi_{n\alpha}^{(1)} \right) \\ &= \frac{1}{E_n - E_m} \left[\sum_{\substack{s,\gamma \\ (s \neq n)}} \frac{(\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{s\gamma})(\varphi_{s\gamma}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha})}{E_n - E_s} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\gamma} b_{n,\gamma\alpha} (\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\gamma}) - E_{n,\alpha}^{(1)} \frac{(\varphi_{m\beta}, \mathcal{H}_1 \varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \right] \end{aligned}$$

also

$$\psi_{n\alpha}^{(2)} = \sum_{\substack{m,\beta \\ (m \neq n)}} \left(\varphi_{m\beta}, \psi_{n\alpha}^{(2)} \right) \varphi_{m\beta} + \sum_{\beta} c_{n,\beta\alpha} \varphi_{n\beta}$$

mit neuen unbestimmten Koeffizienten $c_{n,\beta\alpha}$.

Falls die Entartung in keiner Näherung aufgehoben wird, so kann ein entsprechender Satz von Parametern

$$b_{n,\beta\alpha}, c_{n,\beta\alpha} \text{ etc.}$$

unbestimmt bleiben. Es spricht nichts dagegen, diese Parameter null zu setzen. Generell ist das vorgestellte Verfahren kompliziert und unübersichtlich. Ein algebraischer Ansatz kann zu erheblichen Vereinfachungen führen.

Sei K ein Operator, der mit \mathcal{H}_0 und \mathcal{H}_1 vertauschbar ist. Wir benutzen dann ein gemeinsames System von Eigenvektoren von K und \mathcal{H}_0 :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 \varphi_{n,\alpha} &= E_n \varphi_{n,\alpha} \\ K \varphi_{n,\alpha} &= \kappa_{n,\alpha} \varphi_{n,\alpha} \end{aligned}$$

Hierbei ist es wichtig, daß $\kappa_{n,\alpha}$ von α abhängt, sonst bekommen wir kein Ergebnis. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 &= (\varphi_{n\alpha}, (K\mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_1K) \varphi_{n\beta}) \\ &= (\kappa_{n\alpha} - \kappa_{n\beta}) (\varphi_{n\alpha}, \mathcal{H}_1\varphi_{n\beta}) \\ &= (\kappa_{n\alpha} - \kappa_{n\beta}) W_{n,\alpha\beta}^{(1)} \end{aligned}$$

Falls

$$\kappa_{n\alpha} \neq \kappa_{n\beta}$$

ist

$$W_{n,\alpha\beta}^{(1)} = 0$$

Falls alle $\kappa_{n\alpha}$ verschieden sind, so ist $W_{n,\alpha\beta}^{(1)}$ diagonal. Diese Aussage ist nicht auf die Störmatrix erster Ordnung beschränkt. Man sieht nämlich

$$\begin{aligned} W_{n,\alpha\beta}^{(2)} &= \sum_{\substack{m\gamma \\ (m \neq n)}} \frac{(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1\varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, \mathcal{H}_1\varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \\ 0 &= \sum_{\substack{m\gamma \\ (m \neq n)}} \frac{(\varphi_{n\beta}, [K, \mathcal{H}_1]\varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, \mathcal{H}_1\varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \\ 0 &= \sum_{\substack{m\gamma \\ (m \neq n)}} \frac{(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1\varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, [K, \mathcal{H}_1]\varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \\ 0 &= \sum_{\substack{m\gamma \\ (m \neq n)}} \left[(\kappa_{n\beta} - \kappa_{m\gamma}) \frac{(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1\varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, \mathcal{H}_1\varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \right. \\ &\quad \left. + (\kappa_{m\gamma} - \kappa_{n\alpha}) \frac{(\varphi_{n\beta}, \mathcal{H}_1\varphi_{m\gamma})(\varphi_{m\gamma}, \mathcal{H}_1\varphi_{n\alpha})}{E_n - E_m} \right] \\ &= (\kappa_{n\beta} - \kappa_{n\alpha}) W_{n,\alpha\beta}^{(2)} \end{aligned}$$

und damit, daß für $\kappa_{n\alpha} \neq \kappa_{n\beta}$

$$W_{n,\alpha\beta}^{(k)} = 0$$

für alle Ordnungen k impliziert. Damit ist das Problem der Entartung teilweise oder ganz auf algebraische Weise lösbar.

4.3 Ein Beispiel: Der normale Zeemann-Effekt

Ein Elektron in einem Potential ϕ und einem Magnetfeld \vec{H} (\vec{B})

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$$

wird durch den Hamilton-Operator

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

beschrieben. Wir wollen annehmen, $\vec{B} = (0, 0, B)$ sei homogen. Dann können wir \vec{A} wählen als

$$\vec{A} = +\frac{1}{2}B \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

so daß \vec{A} linear in den Koordinaten ist. Ferner gilt

$$\operatorname{div} \vec{A} = \frac{1}{2}B(0 + 0 + 0) = 0$$

Ersetzen von

$$\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

ergibt

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e\hbar i}{2mc} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \right) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

Wir wollen die linearen Terme in der Abhängigkeit von B berechnen. Dann können wir den \vec{A}^2 -Term weglassen. Ferner ist wegen $\operatorname{div} \vec{A} = 0$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = 2\vec{A} \cdot \vec{\nabla}$$

Wir nehmen an, $\phi(r)$ sei kugelsymmetrisch. Dann ist

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Parameter}}}{B} \mathcal{H}_1 + O(B^2)$$

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + e\phi(r)$$

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e\hbar i}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}$$

Diesen Ausdruck wollen wir weiter berechnen.

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} &= \frac{1}{2}B \left(-y \cdot \frac{\partial}{\partial x} + x \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \frac{1}{2}B \left(\vec{x} \times \vec{\nabla} \right)_z \\ \frac{\hbar}{i} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} &= \frac{1}{2}B (\vec{x} \times \vec{p})_z \\ &= \frac{1}{2}B \cdot L_z \\ \mathcal{H}_1 &= -\frac{e}{2mc} B \cdot L_z \end{aligned}$$

Da die Wechselwirkung eines klassischen Magnet-Dipols $\vec{\mu}$ mit einem Magnetfeld \vec{B} die Wechselwirkungsenergie

$$E_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

ergibt, so ist für die Bahnbewegung des Elektrons der magnetische Dipol-Operator

$$\vec{\mu} = +\frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Bei einem kugelsymmetrischen Potential wählen wir als Wellenfunktionen für \mathcal{H}_0

$$u_{E,l}(r) Y_m^l(\Theta, \varphi) \longrightarrow |E, l, m\rangle$$

($E = E_n$). In erster störungstheoretischer Näherung haben wir nun mit diesen Funktionen die „Säkularmatrix“ auszurechnen. Ha \mathcal{H}_1 bis auf Zahlenfaktoren gleich L_z ist, ist

$$\begin{aligned} W_{E_1, l_1, m_1, E_2, l_2, m_2}^{(1)} &= \langle E_1, l_1, m_1 | \mathcal{H}_1 | E_2, l_2, m_2 \rangle \\ &= \delta_{E_1 E_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \left(-\frac{e\hbar}{2mc} B \right) \cdot m_2 \end{aligned}$$

Die Säkularmatrix ist diagonal, d. h. die Störung bewirkt

$$\begin{aligned} E_{n,l} &\longrightarrow E_{n,l} + \left(-\frac{e\hbar}{2mc} B \right) \cdot m + O(B^2) \\ &\quad -l \leq m \leq +l \end{aligned}$$

5 Der Spin des Elektrons

5.1 Die Beschreibung des Spin-Freiheitsgrades (klassisch)

Hinweise auf die Existenz des Spins stammen aus der Festkörperphysik (Einstein-de Haas-Effekt) und der Feinstruktur des Wasserstoffatoms. Darunter versteht man die Aufspaltung der Niveaus zu fester Hauptquantenzahl angefangen bei $n = 2$ (allgemein $n \geq 2$). Dabei ist z. B.

$$E(2P^{\frac{3}{2}}) - E(2P^{\frac{1}{2}}) = h \cdot 10950 \cdot 10^6 s^{-1}$$

Schreiben wir das Niveau allgemein

$$n l^j \quad j = l \pm \frac{1}{2}$$

so ist die Feinstrukturaufspaltung die Aufspaltung zu gleichem n und l , verschiedenem j . Daneben gibt es noch den Lamb-Shift

$$E(2S^{\frac{1}{2}}) - E(2P^{\frac{1}{2}}) = h \cdot 1058 \cdot 10^6 s^{-1}$$

der nur noch mit den Methoden der Quantenelektrodynamik (QED) zu behandeln ist.

Nachweis und Aufklärung über den Charakter des Spinfreiheitsgrades bringt der Stern-Gerlach-Versuch. Ein Wasserstoff- oder Alkali-Atom im Grundzustand befindet sich in einem s-Zustand ($l = m = 0$). Dennoch kommt es im inhomogenen Magnetfeld zu einer Aufspaltung in zwei Untergesamtheiten. Der s-Zustand ist also kein reiner Zustand. Die Abhängigkeit der Aufspaltung vom Magnetfeld weist darauf hin, daß ein magnetisches Dipol-Moment für die Ablenkung verantwortlich sein muß. Das Elektron hat also gleichzeitig einen

- inneren Drehimpuls (Spin) \vec{s} und ein
- magnetisches Dipol-Moment $\vec{\mu}$

Stellt man sich das Elektron als mit der Ladung $-e_0$ angefüllte kleine Kugel vor, die um eine Achse rotiert, so liefert diese Rotation vermöge der Masseverteilung den Drehimpuls \vec{s} , vermöge der Ladungsverteilung das magnetische Dipol-Moment $\vec{\mu}$. Obwohl dieses Bild falsch ist, ergibt es einen im Prinzip korrekten Zusammenhang zwischen \vec{s} und $\vec{\mu}$

$$\vec{\mu} = -\frac{e_0}{2mc} g \vec{s}$$

wobei g eine kleine Zahl ist, der „g-Faktor“. Im Modell der rotierenden Kugel bei proportionaler Massen- und Ladungsverteilung ist

$$g = 1$$

Aus dem Einstein-de Haas-Effekt ergibt sich experimentell

$$g = 2$$

Bemerkenswert ist, daß das gyromagnetische Verhältnis

$$\frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{s}|} = \frac{e_0}{2mc} |g|$$

\hbar nicht enthält, also klassisch ist. Es müßte also eine klassische Theorie eines Punktteilchens mit Spin und magnetischem Dipol geben, in der g nicht notwendig ein

freier Parameter ist. In der Diracschen Theorie der relativistischen Quantenmechanik ist im Einklang mit dem Einstein-de Haas-Effekt

$$g = 2$$

Das ist eine der Stützen der Diracschen Theorie.

Wir wissen heute, daß bei allen Fermiteilchen von Spin $\frac{\hbar}{2}$ (Elektron, Müon, Proton) g aus zwei Anteilen besteht (dabei ist m jeweils die Masse des Teilchens)

$$g = q \cdot 2 + g_{dyn}$$

wobei q die Zahl der Elementarladungen ($-e_0$) ist. Aus der QED ergibt sich für das Elektron

$$\begin{aligned} q &= 1 \\ g - 2 = g_{dyn} &= \frac{\alpha}{\pi} - 0,656 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 + O(\alpha^3) \\ \alpha &= \frac{e_0^2}{\hbar c} \quad (\text{Feinstrukturkonstante}) \sim \frac{1}{137} \end{aligned}$$

Also ist der dynamische Anteil des g-Faktors sehr klein.

Die Energie eines magnetischen Dipol-Moments in einem Magnetfeld ist

$$E_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Ist \vec{B} inhomogen, so wirkt auf das Moment die Kraft

$$\vec{K} = -\nabla E_m = +\nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$$

Bei homogenem Magnetfeld gibt es nur ein Drehmoment

$$\vec{N} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Als Energie für das Elektron im Magnetfeld bekommen wir damit klassisch

$$E = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e_0}{c} \vec{A} \right)^2 - e_0 \phi - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Ich habe hier mit Absicht nicht \mathcal{H} statt E geschrieben, da dieser Ausdruck nicht notwendigerweise Ausgangspunkt einer klassischen kanonischen Theorie des Elektrons mit Spin ist.

5.2 Die Beschreibung des Spin-Freiheitsgrades (quantenmechanisch)

Die Observablenalgebra des Elektrons wird erzeugt durch die Observablen

$$\begin{aligned} &Q_1, Q_2, Q_3 \\ &P_1, P_2, P_3 \\ &[Q_i, P_j] = -\frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \end{aligned}$$

sowie die Observablen

$$S_1, S_2, S_3$$

des Spins. Diese Spin-Observablen sind unabhängig von Ort und Impuls zu beobachten, also gilt

$$[Q_i, S_j] = [P_i, S_j] = 0$$

Außerdem sollen sie einen Drehimpuls beschreiben. Daher postulieren wir die gleiche Algebra wie für den Bahndrehimpuls-Operator

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$$

Wir haben diesen Typ Algebra sorgfältig untersucht und alle irreduziblen Realisierungen konstruiert. Jede solche Realisierung ist charakterisiert durch den Eigenwert von

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) \\ 2s \in \mathbb{N}$$

Da beim Stern-Gerlach-Versuch zwei Eigenwerte von S_3 mit dem Wert $\pm \frac{\hbar}{2}$ gefunden wurden, kommt nur

$$s = \frac{1}{2}$$

in Betracht. Die Matrizen S_i , $i = 1, 2, 3$ werden dann dargestellt durch

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \\ \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

wobei die σ_i die Pauli-Matrizen sind (die gerade für diesen Zweck erfunden wurden). S_3 ist in dieser Realisierung diagonal.

In der Atomphysik ist die Ortsrealisierung am bequemsten. Wir können beim Elektron alle Q_i und S_3 gleichzeitig diagonal machen. Ein Vektor ψ hat dann die Form

$$Q_i \psi = x_i \psi \quad x_i \in \mathbb{R}^3 \\ S_3 \psi = \frac{\hbar}{2} \sigma \psi \quad \sigma \in \{1, -1\}$$

Dann können wir ψ durch eine zweikomponentige Wellenfunktion $\psi_\sigma(x)$ realisieren. Es gilt z. B.

$$\|\psi\|^2 = \int d^3x \sum_{\sigma=\pm 1} |\psi_\sigma(x)|^2 \\ (\psi, \varphi) = \int d^3x \sum_{\sigma=\pm 1} \overline{\psi_\sigma(x)} \varphi_\sigma(x)$$

Wir hatten im Abschnitt 2.5 (S. 30) die allgemeine Darstellung für eine Drehimpulsalgebra ($\hbar = 1$ gesetzt)

$$[L_j, L_k] = i \sum_l \varepsilon_{jkl} L_l$$

erhalten. Mit

$$L_\pm = L_1 \pm iL_2$$

erhalten wir $2l + 1$ orthogonale Basisvektoren (daraus folgt, daß $2l + 1$ ganz ist).

$$\{\psi_m^l\}_{m=-l}^{+l}$$

(siehe auch S. 32)

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 \psi_m^l &= l(l+1) \psi_m^l \\ L_3 \psi_m^l &= m \psi_m^l \\ L_{\pm} \psi_m^l &= \pm(l(l+1) \mp m - m^2)^{\frac{1}{2}} \psi_{m\pm 1}^l\end{aligned}$$

Wenn $2l + 1 = 2$ ist, also $l = \frac{1}{2}$, so haben wir einen zweidimensionalen Unterraum aufgespannt durch

$$\begin{aligned}\psi_{+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}, \psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \\ \vec{L}^2 \psi_{\pm\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \psi_{\pm\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{cases} L_+ \psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \psi_{+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \\ L_+ \psi_{+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = 0 \\ L_- \psi_{+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \\ L_- \psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}\psi_{+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^+ \\ \psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^- \\ L_+ &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ L_- &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ L_1 &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_1 \\ L_2 &= \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_2 \\ L_3 &\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_3\end{aligned}$$

Die Darstellung der Drehimpulse mit $l = \frac{1}{2}$ durch Pauli-Matrizen folgt also aus unserer früher entwickelten allgemeinen Darstellung („kanonische Darstellung“).

Der Hilbert-Raum der ψ ist ein Tensorprodukt

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

Sei $\{\varphi_n(x), n \in \mathbb{N}\}$ eine Basis in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ und $\{e^{\pm}\}$ eine Basis in \mathbb{C}^2 . Die Basis im Tensorprodukt ist durch die formalen Produkte

$$\{\varphi_n(x) \cdot e^{\pm}\}$$

gegeben. Für die e^\pm können wir die Basisvektoren

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

verwenden, d. h.

$$(e^\pm)_\sigma = \delta_{\sigma,\pm 1}$$

Wir bemerken noch, daß $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ auch einem Tensorprodukt, nämlich

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$$

isomorph ist, und daß wir bei der Lösung des dreidimensionalen harmonischen Oszillators davon Gebrauch gemacht haben. Nachdem die Kinematik durch die Observablen und ihre Hilbert-Raum-Darstellung fixiert ist, kommen wir zur Dynamik. Wir definieren als Hamilton-Operator für ein Elektron in einem äußeren elektromagnetischen Feld \vec{A} , ϕ , $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (g = 2)$$

Die Gleichung (vom Schrödingerschen Typ)

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

heißt „Pauli-Gleichung“. Im Falle des Coulomb-Potentials

$$\phi = +\frac{Ze}{r}, \quad \vec{B} = \vec{A} = 0$$

ist \mathcal{H} vertauschbar mit \vec{L}^2 , L_3 und S_3 . Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms sind dann separierbar wie

$$u_{nl}(r) Y_m^l(\Theta, \varphi) e_\sigma^\pm$$

und die Niveaus sind $2n^2$ -fach entartet.

5.3 Der Gesamtdrehimpuls des Elektrons

Ein Elektron besitzt einen Gesamtdrehimpuls \vec{J} , der sich aus einem Bahndrehimpuls \vec{L} und einem Spindrehimpuls \vec{S} im klassischen Fall zusammensetzt durch Vektor-Addition

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Diese Gleichung gilt in entsprechender Interpretation auch in der Quantenmechanik. Dabei sind die J_i Operatoren im $\mathcal{L}^2(\mathbb{S}^2) \otimes \mathbb{C}^2$. Der Anteil L_i wirkt als Differentialoperator auf den ersten Faktor und sollte korrekterweise

$$L_i \otimes \mathbf{I}$$

geschrieben werden. Im Gegensatz dazu wirkt S_i nur auf den zweiten Anteil und in präziser Notation schreiben wir

$$\mathbf{I} \otimes S_i$$

also

$$J_i = L_i \otimes \mathbf{I} + \mathbf{I} \otimes S_i$$

Wir wollen uns darauf einigen, in dieser wie in den folgenden Gleichungen dieses Abschnittes \hbar aus den Gleichungen herauszudividieren, so daß

$$S_i = \frac{1}{2} \sigma_i \text{ etc.}$$

Die Operatoren J_i erfüllen die Algebra

$$[J_j, J_k] = i \sum_l \varepsilon_{jkl} J_l$$

da

$$[L_i, S_j] = 0.$$

Also sind die irreduziblen Darstellungen der \vec{J} -Algebra durch die Quantenzahlen j von

$$\vec{J}^2 = j(j+1) \cdot \mathbf{I}, \quad 2j \in \mathbb{N}$$

charakterisiert. In einer solchen Darstellung gibt es eine Basis

$$\begin{aligned} \{ |j, j_3\rangle, -j \leq j_3 \leq +j \}, \\ J_3 |j, j_3\rangle = j_3 |j, j_3\rangle \end{aligned}$$

Das Problem besteht allgemein darin, aus zwei gegebenen Basen mit festen $l^{(1)}, l^{(2)}$

$$\begin{aligned} \{ |l^{(1)}, m^{(1)}\rangle, -l^{(1)} \leq m^{(1)} \leq +l^{(1)} \} \\ \{ |l^{(2)}, m^{(2)}\rangle, -l^{(2)} \leq m^{(2)} \leq +l^{(2)} \} \end{aligned}$$

(d. h. Kugelfunktionen $Y_{m^{(1)}}^{l^{(1)}}(\Theta, \phi), Y_{m^{(2)}}^{l^{(2)}}(\Theta, \phi)$) diese Basis für den Gesamtdrehimpuls zu konstruieren. Dann ist $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ nur ein Spezialfall von $\vec{J} = \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)}$.

Wir beginnen also mit dem Tensorprodukt zweier Räume, des $\mathbb{C}^{2l^{(1)}+1}$ und des $\mathbb{C}^{2l^{(2)}+1}$, aufgespannt durch die Basis

$$|l^{(1)}, m^{(1)}\rangle \cdot |l^{(2)}, m^{(2)}\rangle = |l^{(1)}, m^{(1)}; l^{(2)}, m^{(2)}\rangle$$

Erinnern wir uns noch einmal an die allgemeine Drehimpuls-Algebra, aus der wir

$$\begin{aligned} L_+ |l, m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle \\ L_- |l, m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - (-m)(-m+1)} |l, m-1\rangle \end{aligned}$$

wissen. Damit ergibt sich für den Basisvektor mit dem höchsten Gewicht (der Eigenwert zu J_3 , also $m^{(1)} + m^{(2)}$, in diesem Fall nämlich $l^{(1)} + l^{(2)}$)

$$\begin{aligned} J_-^n |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle &= \left(L_-^{(1)} + L_-^{(2)} \right)^n |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left(L_-^{(1)} \right)^k \left(L_-^{(2)} \right)^{n-k} |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} A \cdot |l^{(1)}, l^{(1)} - k; l^{(2)}, l^{(2)} - (n-k)\rangle \end{aligned}$$

wobei A eine Linearkombination aus den oben angegebenen Eigenwerten zu $L_-^{(1)}, L_-^{(2)}$ ist

$$= A' \cdot |j, j_3\rangle$$

mit

$$\begin{aligned} j &= l^{(1)} + l^{(2)} \\ j_3 &= l^{(1)} + l^{(2)} - n \end{aligned}$$

Diese Formel läßt sich umkehren zu

$$|j, j_3\rangle = \sum |l^{(1)}, l^{(1)} - k; l^{(2)}, l^{(2)} - (n - k)\rangle \cdot C_{l^{(1)}, l^{(1)} - k; l^{(2)}, l^{(2)} - (n - k)}^{j, j_3}$$

mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$C_{l^{(1)}, m^{(1)}; l^{(2)}, m^{(2)}}^{j, j_3}$$

$$j_3 = m^{(1)} + m^{(2)}, \quad j = l^{(1)} + l^{(2)}$$

Wie rechnet man nun für $j < l^{(1)} + l^{(2)}$? Betrachten wir nochmal den Fall

$$\begin{aligned} J_- |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle &= \underbrace{\sqrt{l^{(1)}(l^{(1)} + 1) - l^{(1)}(l^{(1)} - 1)}}_{=\sqrt{2l^{(1)}}} |l^{(1)}, l^{(1)} - 1; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle \\ &+ \underbrace{\sqrt{l^{(2)}(l^{(2)} + 1) - l^{(2)}(l^{(2)} - 1)}}_{=\sqrt{2l^{(2)}}} |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)} - 1\rangle \\ &= \underbrace{\sqrt{(l^{(1)} + l^{(2)})(l^{(1)} + l^{(2)} + 1) - (l^{(1)} + l^{(2)})(l^{(1)} + l^{(2)} - 1)}}_{=\sqrt{2(l^{(1)} + l^{(2)})}} \\ &\cdot |j = l^{(1)} + l^{(2)}, j_3 = l^{(1)} + l^{(2)} - 1\rangle \end{aligned}$$

Außerdem gibt es im Unterraum mit Gewicht $j_3 = l^{(1)} + l^{(2)} - 1$ noch einen anderen Basisvektor, nämlich

$$|j = l^{(1)} + l^{(2)} - 1, j_3 = l^{(1)} + l^{(2)} - 1\rangle$$

Damit ergibt sich für die Basisvektoren

$$\begin{aligned} |j = l^{(1)} + l^{(2)}, j_3 = l^{(1)} + l^{(2)} - 1\rangle &= \sqrt{\frac{l^{(1)}}{l^{(1)} + l^{(2)}}} |l^{(1)}, l^{(1)} - 1; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l^{(2)}}{l^{(1)} + l^{(2)}}} |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)} - 1\rangle \\ |j = l^{(1)} + l^{(2)} - 1, j_3 = l^{(1)} + l^{(2)} - 1\rangle &= \sqrt{\frac{l^{(1)}}{l^{(1)} + l^{(2)}}} |l^{(1)}, l^{(1)} - 1; l^{(2)}, l^{(2)}\rangle \\ &- \sqrt{\frac{l^{(2)}}{l^{(1)} + l^{(2)}}} |l^{(1)}, l^{(1)}; l^{(2)}, l^{(2)} - 1\rangle \end{aligned}$$

5.4 Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Bisher haben wir das Wasserstoffatom unter Vernachlässigung des Elektronenspins behandelt. Dieser wird nun berücksichtigt. Im Hamilton-Operator ist bei ruhendem Proton nur das Coulomb-Feld des Protons vorhanden. Das magnetische Moment des Protons wird vernachlässigt; es wird zur Hyperfeinstruktur. Also womit kann der Elektronenspin und sein Dipol wechselwirken, wenn $\vec{A} = 0, \vec{B} = 0$ ist?

Ein Elektron, das sich durch ein Magnetfeld \vec{B} bewegt, erfährt in seinem eigenen Ruhesystem ein scheinbares elektrisches Feld

$$\vec{E}_L = \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}$$

und als dessen Folge eine Kraft

$$\vec{K} = -\vec{e} \cdot \vec{E}_L = -e \cdot \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}$$

die Lorentzkraft. Bewegt es sich durch ein elektrisches Feld \vec{E} , so „sieht“ es ein scheinbares Magnetfeld

$$\vec{B}_L = -\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}$$

Diese „Scheinfelder“ (sie sind genauso echt wie alle Felder) entstehen durch eine Lorentztransformation vom Laborsystem in das mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegte Ruhesystem des Elektrons. Dabei wird die Ordnung $\frac{v^2}{c^2}$ (von $\left[1 - \frac{v^2}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}}$) vernachlässigt. Damit gibt es im Ruhesystem des Elektrons eine Wechselwirkungsenergie

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_L = +\frac{e}{mc} \cdot \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \left(\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}\right)$$

($g - 2$ vernachlässigt). Tatsächlich kann man diese Wechselwirkungsenergie nicht in den Hamilton-Operator einsetzen, sondern man muß für die Spin-Bahnwechselwirkung den Ansatz

$$\mathcal{H}_{SB} = -\frac{1}{2} \vec{\mu} \cdot \vec{B}_L$$

machen. Denn die Wechselwirkungsenergie im Laborsystem ist verschieden von der Wechselwirkungsenergie im Ruhesystem des Elektrons. Den Faktor $\frac{1}{2}$, der hinzutritt, wird als Thomas-Faktor bezeichnet. Thomas zeigte, daß er bei einer korrekten Behandlung von Lorentztransformationen eines präzessierenden Kreisels auftritt. Am einfachsten leitet man aber \mathcal{H}_{SB} (wie das gyromagnetische Verhältnis) aus der Diracschen Theorie ab. Mit ($e = e_0$)

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi = +\frac{e}{r^2} \cdot \frac{\vec{x}}{r} \\ \vec{B}_L &= -\frac{e}{r} \left(\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{x}\right) = \frac{e}{mcr^3} (\vec{x} \times \vec{p}) = \frac{e}{mcr^3} \cdot \vec{L} \end{aligned}$$

wird

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SB} &= +\frac{1}{2} \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \frac{e}{mcr^3} \vec{L} \\ &= \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} \end{aligned}$$

Wir werden zunächst die Größenordnung dieser Energie abschätzen. Dazu setzen wir

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r_0 \quad \text{Bohrscher Radius} \\ \vec{S} \cdot \vec{L} &\rightarrow \hbar^2 \\ \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2c^2r_0^3} &= \underbrace{\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{r_0}}_{\text{Energie des Grundzustandes}} \cdot \frac{\hbar^2}{m^2c^2} \frac{1}{r_0^2} \\ \frac{\hbar}{mc} &= \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{\hbar^2}{m^2c^2} = \alpha \cdot r_0 \quad \text{Comptonwellenlänge des Elektrons} \\ \alpha &: \text{Feinstrukturkonstante} \quad \sim \frac{1}{137} \end{aligned}$$

Also: $O(\mathcal{H}_{SB}) = \text{Energie des Grundzustandes} \cdot \alpha^2$. Es handelt sich also tatsächlich um eine kleine Störung ($\sim 10^{-4}$).

Als nächstes betrachten wir

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SB} \\ \mathcal{H}_0 &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}\end{aligned}$$

Nach den Prinzipien der Störungstheorie suchen wir nach einem Operator K (siehe auch Abschnitt 4.2, S. 93), der mit \mathcal{H}_0 und \mathcal{H}_{SB} vertauscht, und uns damit die Störmatrix erster Ordnung diagonalisiert. Wir haben trivialerweise als vertauschende Operatoren mit \mathcal{H}_0

$$\vec{L}^2, L_i, S_i \quad \text{alle } i$$

damit auch

$$\begin{aligned}\vec{J}^2 &= (\vec{L} + \vec{S})^2 \\ &= \vec{L}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S}^2\end{aligned}$$

$$(\vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \mathbf{I})$$

und ebenfalls

$$J_i = L_i + S_i$$

Welche Operatoren vertauschen mit \mathcal{H}_{SB} ? Sicherlich \vec{L}^2 , aber keine einzelne Komponente von \vec{L} oder \vec{S} . Schreiben wir

$$\begin{aligned}\vec{L} \cdot \vec{S} &= \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \\ [J_i, \vec{L}^2] &= [J_i, \vec{S}^2] = 0 \\ \Rightarrow [J_i, \vec{L} \cdot \vec{S}] &= 0\end{aligned}$$

und beachten, daß

$$\left[\frac{1}{r^3}, L_i \right] = \left[\frac{1}{r^3}, S_i \right] = 0$$

so folgt, daß außerdem \vec{J}^2 und J_i mit \mathcal{H}_{SB} vertauschen.

Wenn wir den ungestörten Operator \mathcal{H}_0 diagonalisieren, so verwenden wir naheliegenderweise die Operatoren

$$\mathcal{H}_0, \vec{L}^2, L_3, S_3$$

als untereinander vertauschbare Operatoren und dementsprechend den Separationsansatz

$$\psi = u_{nl}(r) Y_m^l(\Theta, \phi) e_\sigma^{s_3}$$

Wenn wir \mathcal{H}_{SB} einbeziehen, haben wir neben \mathcal{H}_0 und \mathcal{H}_{SB}

$$\vec{L}^2, \vec{J}^2, J_3$$

zu benutzen. Der Separationsansatz ist

$$\psi = u_{nlj}(r) \mathcal{Y}_{j_3}^{j(l, \frac{1}{2})}(\Theta, \phi)_\sigma$$

mit

$$\mathcal{Y}_{j_3}^{j(l, \frac{1}{2})}(\Theta, \phi)_\sigma = \sum_{m, s_3} \underbrace{\langle j, j_3 | l, m; \frac{1}{2}, s_3 \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}} \cdot Y_m^l(\Theta, \phi) e_\sigma^{(s_3)}$$

und die radiale Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 r^3} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \right\} u_{nlj}(r) = E_{nlj} u_{nlj}(r)$$

Hier erscheint die Störung schon diagonal. Vernachlässigen wir die Störung, so sehen wir, daß in dieser nullten Näherung

$$u_{nlj}^{(0)}(r) = u_{nl}(r) \quad \text{für beide } j = l \pm \frac{1}{2}$$

Dann wird der Energieeigenwert in erster Näherung

$$(5.4.1) \quad E_{nlj}^{(1)} = E_n^{(0)} + \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \cdot \int_0^\infty dr \frac{1}{r} (u_{nl}(r))^2$$

wobei

$$\int_0^\infty dr r^2 (u_{nl}(r))^2 = 1$$

vorausgesetzt wurde.

Zum Integral in (5.4.1) ist folgendes zu bemerken: Für $l = 0$ divergiert es bei $r = 0$. Andererseits ist die Klammer bei $l = 0$ gleich Null. Denn bei $l = 0$ ist notwendig $j = \frac{1}{2}$, also

$$\left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{3}{4} \right] = 0$$

Also ist bei $l = 0$ der Störungsterm von der Form $0 \cdot \infty$. Bei $l \neq 0$ ist das Integral bei $r = 0$ konvergent. Wir kommen gleich auf diesen Schwachpunkt der Störungstheorie zurück.

Das Integral läßt sich mit einigen Tricks auswerten. Wir bekommen

$$E_{nlj}^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 - \frac{\alpha^2}{n} \cdot \frac{1}{2l+1} \begin{cases} +\frac{1}{l+1} & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \right]$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

Hier ist bei $j = l - \frac{1}{2}$ natürlich automatisch $l > 0$. Bei $j = l + \frac{1}{2}$ ist nun auch für $l = 0$ ein Wert möglich, da ein $\frac{1}{l}$ gekürzt wurde. Das Ergebnis ist tatsächlich richtig, wie man aus der Diracschen Theorie ersehen kann.

Die angegebene Formel stimmt mit dem beobachteten Spektrum nicht überein. Wenn man für die mittlere Geschwindigkeit des Elektrons im Wasserstoffatom

$$O\left(\frac{\langle v \rangle}{c}\right) = \alpha$$

beachtet, so kommt man darauf, daß es neben der Feinstrukturwechselwirkung eine Korrektur gleicher Größenordnung gibt, nämlich $O(\alpha^2)$ relativ zu $E_n^{(0)}$, die sich aus

der relativistischen Korrektur der kinetischen Energie ergibt¹²

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} - mc^2 \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right)^2 \cdot \frac{1}{mc^2} + \dots \end{aligned}$$

Als weitere Korrektur führen wir also in die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{rel} &= -\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right)^2 \cdot \frac{1}{mc^2} \\ &= -\frac{1}{2} \cdot \left(\mathcal{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \cdot \frac{1}{mc^2} \end{aligned}$$

ein. In Störungstheorie erster Näherung liefert das

$$-\frac{1}{2mc^2} \int_0^\infty dr r^2 \left(E_n^{(0)} + \frac{e^2}{r} \right)^2 (u_{nl}(r))^2 = -E_n^{(0)} \cdot \alpha^2 \frac{1}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right)$$

Wir fassen mit

$$\begin{aligned} &\frac{\alpha^2}{n} \left[\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{1}{2l + 1} \cdot \frac{\pm 1}{j + \frac{1}{2}} \right] \\ &= \frac{\alpha^2}{n} \frac{1}{2l + 1} \left[2 \mp \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \\ &= \frac{\alpha^2}{n} \frac{1}{2l + 1} \left\{ \begin{array}{l} 2j \quad \rightarrow \quad 2l + 1 \\ 2j + 1 \quad \rightarrow \quad 2l + 1 \end{array} \right\} \cdot \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \\ &= \frac{\alpha^2}{n} \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

zusammen zur Sommerfeldschen Feinstrukturformel

$$E_{nlj}^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \right]$$

Bemerkenswert ist, daß die Abhängigkeit von l herausgefallen ist. Wenn der Lamb-Shift vernachlässigt wird, ist dies korrekt.

¹²im Allgemeinen wird $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$

A Mathematische Erläuterungen

A.1 Fourier-Theorem

$$\hat{G}(k) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} G(x) d^N x$$

1.

$$\begin{aligned} G(x) &= e^{-\frac{1}{2}x^2} \\ \hat{G}(k) &= G(k) \quad ! \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \\ \widehat{(g \cdot f)}(x) &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} g(k) \hat{f}(k) d^N k \\ &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} g(k) \cdot \left[(2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-iky} f(y) d^N y \right] d^N k \end{aligned}$$

Da

$$\int_{\mathbb{R}^{2N}} |g(k) f(y)| d^N y d^N k$$

existiert, gilt das Fubini-Theorem über die Vertauschbarkeit der Integrationen

$$= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} f(y) \hat{g}(x+y) d^N y$$

3.

$$\begin{aligned} g(k) &= G(\varepsilon k), \quad \varepsilon \searrow 0 \text{ später} \\ \hat{g}(x) &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} G(\varepsilon k) d^N k \\ &= \varepsilon^{-N} \hat{G}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \\ &= \varepsilon^{-N} G\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} &(2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} G(\varepsilon k) \hat{f}(k) d^N k \\ &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \varepsilon^{-N} \int_{\mathbb{R}^N} f(y) G\left(\frac{x+y}{\varepsilon}\right) d^N y \\ &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} f(-x+\varepsilon s) G(s) d^N s \end{aligned}$$

$\varepsilon \rightarrow 0$: $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} G(\varepsilon k) \hat{f}(k) = \hat{f}(k)$ ist absolut integrierbar.
 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f(-x+\varepsilon s) G(s) = f(-x) G(s)$ ist absolut integrierbar (über s).

Also können die Limites unter dem Integral ausgeführt werden (Lebesgue-Theorie).

$$\begin{aligned}
 & (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ikx} \hat{f}(k) d^N k \\
 &= \hat{f}(x) \\
 &= f(-x) \underbrace{(2\pi)^{-\frac{N}{2}} \int_{\mathbb{R}^N} G(s) d^N s}_{=\hat{G}(0)=G(0)=1} \\
 &= f(-x)
 \end{aligned}$$

A.2 Spektralsatz

Seien \mathfrak{H} ein Hilbertraum, A ein selbstadjungierter Operator darauf. Dann heißt das

$$\text{Spektrum von } A : \begin{cases} \text{diskreter Anteil } \{a_n\} \\ \text{kontinuierlicher Anteil } \{a_\lambda\} \end{cases}$$

mit

$$\begin{aligned}
 A\varphi_n &= a_n \varphi_n & : & \quad \varphi_n \in \mathfrak{H} \quad \text{Eigenfunktion oder Eigenvektor von } A \\
 (\varphi_n, \varphi_m) &= \delta_{nm} \\
 A\varphi_\lambda &= a_\lambda \varphi_\lambda & : & \quad \varphi_\lambda \notin \mathfrak{H} \quad \text{Eigenfunktional von } A \\
 (\varphi_m, \varphi_\lambda) &= 0, \quad (\varphi_\lambda, \varphi_{\lambda'}) & \sim & \delta(\lambda - \lambda')
 \end{aligned}$$

Sei $\psi \in \mathfrak{H}$, dann kann man ψ schreiben als

$$\psi = \sum_n (\varphi_n, \psi) \varphi_n + \int d\lambda (\varphi_\lambda, \psi) \varphi_\lambda$$

Man kann auch ein anderes Maß $d\sigma(\lambda)$ auf dem kontinuierlichen Spektrum benutzen:

$$\begin{aligned}
 (\varphi_{\lambda'}, \psi) &= \int d\sigma(\lambda) (\varphi_\lambda, \psi) \underbrace{(\varphi_{\lambda'}, \varphi_\lambda)}_{=\frac{\delta(\lambda-\lambda')}{|\frac{d\sigma(\lambda)}{d\lambda}|} = \delta(\sigma(\lambda) - \sigma(\lambda'))} \\
 &= \int d\sigma(\lambda) (\varphi_\lambda, \psi) \delta(\sigma(\lambda) - \sigma(\lambda'))
 \end{aligned}$$

Wie wählt man nun $d\sigma(\lambda)$? Betrachten wir als Beispiel die eindimensionale ebene Welle:

$$p = \text{Impuls}, \quad \mathfrak{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$$

$$\left. \begin{aligned}
 p e^{ikx} &= \hbar k e^{ikx} \\
 \varphi_\lambda &\longrightarrow \varphi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \\
 d\sigma(\lambda) &= dk
 \end{aligned} \right\} \text{Fourierintegral}$$

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

Man integriert hier zunächst über ein kompaktes Gebiet

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

und macht dann nach dem Riemannsches Lemma einen Grenzübergang im Sinne der Distributions-Topologie („schwache Topologie“)

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin M(x - x')}{x - x'} = \delta(x - x')$$

Also: Falls

$$\begin{array}{ccc} \Phi & \subset & \mathfrak{H} \subset \Phi' \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{Testfunktionen} & & \text{Eigenfunktionen} \end{array}$$

in (der Topologie von) Φ'

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \overline{\varphi_k(x')} \varphi_k(x) = \delta(x' - x)$$

Merke: Man kann die Eigenfunktionale des kontinuierlichen Spektrum „auf Delta-funktionen“ normieren, dabei ist das Maß $d\sigma(\lambda)$ äquivalent zu $d\lambda$, falls $\frac{d\sigma(\lambda)}{d\lambda} \neq 0$ fast überall und ferner

$$\int d\lambda \overline{\varphi_\lambda(x')} \varphi_\lambda(x) = \delta(x' - x)$$

A.3 Weierstraß-Approximation für Kugelfunktionen

Sei $f(\Theta, \varphi)$ stetig auf der Einheitskugel. Dann ist mit

$$F(x_1, x_2, x_3) = r^\alpha f(\Theta, \varphi) \quad (\alpha > 0)$$

eine stetige Funktion in

$$|x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2 = r^2 \leq 1$$

definiert. Der Weierstraßsche Approximationssatz sagt dann aus, daß es ein N und Koeffizienten $a_{n_1 n_2 n_3}$ gibt, so daß

$$\sup_{0 \leq r \leq 1} \left| F(x_1, x_2, x_3) - \sum_{\substack{\sum_{i=1}^3 n_i \leq N \\ 0 \leq n_i \in \mathbb{N}}} a_{n_1 n_2 n_3} x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \right| \leq \varepsilon$$

gilt, falls $N(\varepsilon)$ hinreichend groß und die $a_{n_1 n_2 n_3}$ passen gewählt werden. Speziell gilt dann

$$\sup_{\mathbb{S}^2} \left| f(\Theta, \varphi) - \sum_i a_{n_1 n_2 n_3} e_1^{n_1} e_2^{n_2} e_3^{n_3} \right| \leq \varepsilon$$

Nun lassen sich die Monome

$$e_1^{n_1} e_2^{n_2} e_3^{n_3}, \quad n_1 + n_2 + n_3 \leq N$$

linear durch die Y_m^l , $l \leq N$ ausdrücken. Sei

$$n_1 + n_2 + n_3 = l$$

Dann gibt es $\binom{l+2}{2}$ solcher Monome der e_i . Von diesen lassen sich aber $\binom{l}{2}$ als Produkte

$$\begin{aligned} (e_1^2 + e_2^2 + e_3^2)e_1^{n'_1}e_2^{n'_2}e_3^{n'_3} \\ n'_1 + n'_2 + n'_3 = l - 2 \end{aligned}$$

zusammenfassen. Also bleiben

$$\begin{aligned} \binom{l+2}{2} - \binom{l}{2} &= \frac{1}{2}[(l+2)(l+1) - l(l-1)] \\ &= \frac{1}{2}[3l+2+l] \\ &= 2l+1 \end{aligned}$$

unabhängige Monome vom Grad l . Diese entsprechen dann den $2l+1$

$$Y_m^l(\Theta, \varphi)$$

In den Übungen haben wir den Fall $l=1$ explizit berechnet. Für $l > 1$ können wir unsere Darstellung der Y_m^l benutzen. Sei z. B. $m \geq 0$. Wir benutzen

$$\begin{aligned} Y_m^l &= \left[\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} (-1)^m e^{im\varphi} P_l^m(\cos \Theta) \\ P_l^m(\cos \Theta) &= \frac{1}{2^l l!} (\sin \Theta)^m \left(\frac{d}{d(\cos \Theta)} \right)^{l+m} (\cos^2 \Theta - 1)^l \end{aligned}$$

Wir fassen zusammen

$$e^{im\varphi} (\sin \Theta)^m = (e_1 + ie_2)^m$$

Ferner

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d(\cos \Theta)} \right)^{l+m} (\cos^2 \Theta - 1)^l &= \text{Polynom in } \cos \Theta \text{ vom Grad } l-m \\ &\begin{cases} \text{gerade, wenn } l+m \text{ gerade ist} \\ \text{ungerade, wenn } l+m \text{ ungerade ist} \end{cases} \end{aligned}$$

Im zweiten Fall

$$= \cos \Theta \times \text{gerades Polynom}$$

die geraden Polynome sind Polynome in $\cos^2 \Theta$ und lassen sich als homogene Polynome von

$$e_3^2 \text{ und } e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1$$

schreiben. Damit wird Y_m^l immer ein homogenes Polynom vom Grad l in e_1, e_2, e_3 .

Literatur

[A. + St.] **Milton Abramowitz, Irene A. Stegun**, Handbook of Mathematical Functions, Dover 0-486-61272-4, Bibliothek: 110/019