

Universität Hamburg
Theoretische Physik II
Sommersemester 2006
Dozent: Jan Louis

Skript

zur Vorlesung

Quantenmechanik I

Autoren:

Alexander Clausius (alexander.clausius@physnet.uni-hamburg.de)
Sebastian Jakobs (seb_jakobs@web.de)
Franziska Klingberg (fklingbe@physnet.uni-hamburg.de)
Thomas Pöhlson (thomas@poehlsen.de)

Stand: 26.06.2006

Inhaltsverzeichnis

1	Vorlesung 2	3
1.1	Quadratintegrale Wellenfunktionen	3
1.2	Formale Grundlagen	5
2	Freies Teilchen und Potentialtopf	7
2.1	Die Zeitunabhängige Schrödingergleichung	7
2.2	Freies Teilchen	7
2.3	Potentialtopf	9
3	Eigenwerte, Eigenfunktionen und der harmonische Oszillator	12
3.1	Eigenwerte und Eigenfunktionen	12
3.2	Harmonischer Oszillator eindimensional	14
4	Potentialstufe	19
5	Zusammenfassung 1-dim Probleme	21
6	Der Drehimpuls	22
6.1	Konstruktion der Eigenfunktionen mit Leiteroperatoren	23
6.2	Konstruktion von ψ_{lm} durch Differentialoperatoren	25
7	Drehimpuls	29
8	Teilchen im Zentralpotential (H-Atom)	31
9	Der Zeeman-Effekt	36
9.1	Quantenmechanik geladener Teilchen	37
10	Abstrakte Formulierung der Quantenmechanik	42
10.1	Basiswechsel im Hilbertraum	42
10.2	Matrixdarstellung von Operatoren	43
10.3	Dirac-Notation	45
11	Gesamtdrehimpuls	47
11.1	Zusammenhang der Basen	47
11.2	Welche Werte können j, m_j annehmen?	48
12	Spin	52
12.1	Motivation	52
12.2	Formale Einführung des Spins	52

12.3 Auf- und Absteige-Operator	53
12.4 Der Spin-Operator in Matrix-Darstellung	54
12.5 Teilchen und ihr Spin	55
12.6 Beispiel: harmonischer Oszillator mit kubischer Störung	58
12.7 Entartete Störungstheorie und Stark-Effekt	60
13 Mehrteilchensysteme	63
14 Heliumatom	65
15 Heisenberg- und Dirac-Bild	68
15.1 Heisenberg-Bild	68
15.2 Dirac-Bild	70
16 Zeitabhängige Störungstheorie	71
17 Streutheorie	75

1 Vorlesung 2

1.1 Quadratintegrale Wellenfunktionen

Die Größe $\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} zu finden. Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden zu allen Zeiten gleich 1 sein muss, müssen wir fordern:

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = 1 \quad \forall t \quad (1.1)$$

In der Mathematik bezeichnet man eine Funktion $\psi(\vec{x})$ als quadratintegabel, falls gilt:

$$\int \psi^*(\vec{x}) \cdot \psi(\vec{x}) d^3x = I < \infty \quad (1.2)$$

Mit Hilfe der Normierung

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{\psi(\vec{x})}{\sqrt{I}} \quad (1.3)$$

erhalten wir somit:

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x})|^2 = 1 \quad (1.4)$$

Da dies jedoch für alle Zeiten t gelten soll, bleibt noch zu zeigen:

$$\frac{d}{dt} \int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = 0 \quad (1.5)$$

Um dies zu zeigen, gehen wir in zwei Schritten vor: Zuerst zeigen wir, dass alle Funktionen, die der Schrödinger Gleichung genügen, die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (1.6)$$

erfüllen, wobei ρ die bereits oben definierte Wahrscheinlichkeitsdichte bedeutet und \vec{j} ein noch näher zu bestimmender Strom ist. Im zweiten Schritt dann zeigen wir, dass das Erfüllen der Kontinuitätsgleichung (Gl.1.6) ein hinreichendes Kriterium dafür darstellt, dass Gl.1.5 erfüllt ist.

Behauptung.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = H \Psi(\vec{x}, t) \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Beweis. Aus der Schrödinger Gleichung erhalten wir:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \Psi$$

sowie

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= \left(\frac{1}{i\hbar} H \Psi \right)^* \\ &= -\frac{1}{i\hbar} H \Psi^* \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} (- (H \Psi^*) \Psi + \Psi^* H \Psi) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\left(\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V \right) \Psi^* \right) \Psi + \Psi^* \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [\Psi (\Delta \Psi^*) - \Psi^* (\Delta \Psi)] \end{aligned}$$

Wir bestimmen den Strom \vec{j} nun so, dass die Kontinuitätsgleichung erfüllt ist. Es gilt $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$, und so scheint folgender Ansatz sinnvoll:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* (\vec{\nabla} \Psi) - \Psi (\vec{\nabla} \Psi^*)] \quad (1.7)$$

Damit ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} [(\vec{\nabla} \Psi^*) (\vec{\nabla} \Psi) + \Psi^* (\Delta \Psi) - (\Delta \Psi^*) \Psi - (\vec{\nabla} \Psi^*) (\vec{\nabla} \Psi)] \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} [\Psi (\Delta \Psi^*) - \Psi^* (\Delta \Psi)] \end{aligned}$$

und somit folgt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (1.8)$$

□

Behauptung.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \int \rho(x, t) d^3x = 0 \quad (1.9)$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int \rho d^3x &= \int \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3x \\
 &= - \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3x && \text{Gl. 1.8} \\
 &= - \int_{\partial V} \vec{j} d\vec{A} && \text{Satz v. Gauß}
 \end{aligned}$$

Beachten wir nun noch, dass wir Ψ als quadratintegabel vorausgesetzt haben

$$\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} |\Psi|^2 = \lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} \rho = \frac{1}{|\vec{x}|^\alpha}, \quad \alpha > 1 \quad (1.10)$$

und legen wir die Oberfläche des Volumens ins Unendliche, so verschwindet das letzte Integral. Damit erhalten wir schließlich:

$$\frac{d}{dt} \int \rho(x, t) d^3x = 0 \quad (1.11)$$

□

Wir haben nun also gezeigt, dass die zeitliche Änderung des Integrals über die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ verschwindet, falls die Wellenfunktion Ψ quadratintegabel ist und die Schrödinger Gleichung erfüllt.

1.2 Formale Grundlagen

Die quadratintegablen Wellenfunktionen sind Elemente des (∞ -dimensionalen) Vektorraums L^2 .

Multiplikation mit komplexen Zahlen

$$c\Psi \in L^2; \quad c \in \mathbb{C}, \quad \Psi \in L^2$$

Addition

$$\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \in L^2; \quad c_i \in \mathbb{C}, \quad \Psi_i \in L^2, \quad i = 1, 2$$

Die Wellenfunktionen Ψ^* sind Elemente des dualen Vektorraums L^{2*} .

Definition. Skalarprodukt

$$\begin{aligned}
 \langle \cdot | \cdot \rangle : L^{2*} \times L^2 &\rightarrow \mathbb{R} \\
 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &:= \int \Psi_1^* \Psi_2 d^3x
 \end{aligned} \quad (1.12)$$

Eigenschaften. Skalarprodukt

1. $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle^* = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$
2. $\langle \Psi_3 | c_1 \Psi_1 + c_2 \cdot \Psi_2 \rangle = c_1 \langle \Psi_3 | \Psi_1 \rangle + c_2 \langle \Psi_3 | \Psi_2 \rangle$
3. $\langle c_1 \Psi_1 + c_2 \cdot \Psi_2 | \Psi_3 \rangle = c_1^* \langle \Psi_1 | \Psi_3 \rangle + c_2^* \langle \Psi_2 | \Psi_3 \rangle$
4. $\langle \Psi | \Psi \rangle \geq 0$; $\langle \Psi | \Psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0$

Definition. Norm von Ψ .

$$\|\Psi\| := \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Operatoren auf L^2 :

Ein Operator \mathcal{A} ist eine Abbildung von dem L^2 in den L^2):

$$\mathcal{A} : L^2 \rightarrow L^2$$

Definition.

Ein Operator \mathcal{A} heißt linear, falls gilt:

$$\mathcal{A}(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = c_1 \mathcal{A}(\Psi_1) + c_2 \mathcal{A}(\Psi_2)$$

Definition. Summe von Operatoren

$$(\mathcal{A} + \mathcal{B}) \Psi = \mathcal{A}(\Psi) + \mathcal{B}(\Psi)$$

Definition. Produkt von Operatoren

$$(\mathcal{A} \cdot \mathcal{B}) \Psi = \mathcal{A}(\mathcal{B}(\Psi))$$

Definition. Inverser Operator

Ein Operator \mathcal{A}^{-1} heißt zu \mathcal{A} inverser Operator, falls gilt:

$$\mathcal{A}^{-1} \mathcal{A} = \mathcal{A} \mathcal{A}^{-1} = 1$$

Definition. Kommutator

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

Definition. Adjungierter Operator

Ein Operator \mathcal{A}^\dagger heißt zu \mathcal{A} adjungierter Operator, falls für alle Wellenfunktionen $\Psi_1, \Psi_2 \in L^2$ gilt:

$$\langle \Psi_1 | \mathcal{A}^\dagger | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \mathcal{A} | \Psi_1 \rangle^*$$

2 Freies Teilchen und Potentialtopf

Autor: Thomas Pöhlken

2.1 Die Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Zunächst führen wir als Vereinfachung $f(t)$ und $\psi(\vec{x})$ ein, so dass gilt: $\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})f(t)$

Für den Fall, dass der Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit abhängt, vereinfacht sich somit die Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= H\Psi \\i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \psi(\vec{x}) &= f(t)H\psi(\vec{x}) \\ \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} &= \frac{H\psi(\vec{x})}{\psi(\vec{x})} = E\end{aligned}$$

wobei dann gilt: $E = \text{const}$, denn die linke Seite ist in \vec{x} konstant und die rechte Seite ist in t konstant.

Somit gilt für die Zeitabhängigkeit:

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E \Rightarrow f(t) = f_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Da sich $f_0 = 1$ wählen lässt, da ψ noch unbestimmt ist, folgt dann:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Zu lösen bleibt die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

2.2 Freies Teilchen

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für $V = 0$ lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = E\psi \quad (2.1)$$

Als Lösung testen wir $\psi(\vec{x}) = Ae^{i\vec{k}\vec{x}}$ mit $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$

Wegen

$$\Delta\psi(\vec{x}) = -\|\vec{k}\|^2\psi(\vec{x}) \quad (2.2)$$

folgt, dass die Schrödingergleichung erfüllt ist, falls

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \|\vec{k}\|^2 \quad (2.3)$$

Somit haben wir als Lösung die ebene Welle

$$\Psi(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \quad (2.4)$$

mit der Dispersionsrelation

$$\omega(\vec{k}) = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar \|\vec{k}\|^2}{2m} \quad (2.5)$$

Zusätzliche Forderung an die Lösung:

$$\int_V d^3x |\Psi|^2 = 1 \quad (2.6)$$

Wegen

$$|\Psi|^2 = |A|^2 \quad (2.7)$$

folgt für A

$$A = \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (2.8)$$

mit dem Volumen V. Diese Lösung ist also nur bei einem endlichen Volumen sinnvoll.

Erwartungswerte für $\Psi = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$ _____

$$\langle \vec{x} \rangle = \langle \Psi | \vec{x} | \Psi \rangle = \int_V d^3x |A|^2 \vec{x} = \vec{0}, \text{ falls } V \text{ symmetrisch um } \vec{0} \text{ liegt.}$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_V d^3x \Psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi = \int_V d^3x \Psi^* \frac{\hbar}{i} i \vec{k} \Psi = \hbar \vec{k}$$

$$\langle H \rangle = \int_V d^3x \Psi^* \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi = \int_V d^3x \Psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \|\vec{k}\|^2 \Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \|\vec{k}\|^2 = E$$

Die allgemeinste Lösung ist eine Summe über alle möglichen \vec{k} Werte

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3k \Phi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} \frac{1}{(2\pi)^3} \quad (2.9)$$

Wobei $\Phi(\vec{k})$ zum Beispiel ein Gaußpaket sein kann. (Vergleiche Aufgabe 4)

2.3 Potentialtopf

Teilchen in 1d in einem unendlich hohem Potentialtopf

$$\begin{aligned} V &= 0 && \text{für } -a \leq x \leq a \\ V &= \infty && \text{sonst} \end{aligned}$$

Randbedingung:

$$\psi(a) = 0 = \psi(-a)$$

Lösen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$H\psi = E\psi \quad (2.10)$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und $V = 0$ für $|x| \leq a$ erhalten wir

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi \quad (2.11)$$

oder auch

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (2.12)$$

So dass wir als allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (2.13)$$

erhalten.

Aus den Randbedingungen

$$\psi(a) = A \sin ka + B \cos ka = 0$$

$$\psi(-a) = -A \sin ka + B \cos ka = 0$$

folgern wir, dass

$$B = 0 \vee ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2}$$

und

$$A = 0 \vee ka = 2n \frac{\pi}{2}$$

gilt, wobei $n \in \mathbb{N}$

Somit erhalten wir diskrete, abzählbar unendlich viele Energiewerte:

$$\begin{aligned} \text{Für } k = \frac{n\pi}{a} & : \psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{a} x && \text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \\ k = \frac{(n + \frac{1}{2})\pi}{a} & : \psi(x) = B \cos \frac{(n + \frac{1}{2})\pi}{a} x && E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n + \frac{1}{2})^2 \pi^2}{a^2} \end{aligned}$$

Um die Lösung zu normieren bestimmen wir

$$\int_V dx \Psi^* \Psi = \begin{cases} |A|^2 \int_{-a}^a \sin kx \, dx = |A|^2 a \\ |B|^2 \int_{-a}^a \cos kx \, dx = |B|^2 a \end{cases}$$

Wobei zum Ausrechnen der Integrale folgende Regeln benutzt wurden:

A little known fact _____

Für $p, q \in \mathbb{Z}$ gilt

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a dx \sin \frac{p\pi x}{a} \sin \frac{q\pi x}{a} &= a\delta_{pq} \\ \int_{-a}^a dx \cos \frac{p\pi x}{a} \cos \frac{q\pi x}{a} &= a\delta_{pq} \\ \int_{-a}^a dx \cos \frac{p\pi x}{a} \sin \frac{q\pi x}{a} &= 0 \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung ψ lässt sich jetzt als Linearkombination von ψ_n^1 und ψ_n^2 darstellen

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^1 \psi_n^1 e^{-i\frac{E_n^1}{\hbar}t} + c_n^2 \psi_n^2 e^{-i\frac{E_n^2}{\hbar}t} \quad \text{mit } c_n^{1,2} \in \mathbb{C}$$

$$\begin{aligned} \psi_n^1 &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \\ \psi_n^2 &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{(n + \frac{1}{2})\pi}{a} x \end{aligned}$$

Wegen

$$\langle \psi_n^1 | \psi_m^1 \rangle = \int \psi_n^{1*} \psi_m^1 = \delta_{mn} = \langle \psi_n^2 | \psi_m^2 \rangle, \quad \langle \psi_n^1 | \psi_n^2 \rangle = 0$$

bilden $\psi_n^{1,2}$ eine orthonormale Basis im Raum der Wellenfunktionen.

Betrachten wir noch die Normierungsbedingung für die allgemeine Lösung ψ :

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \langle c_n^1 \psi_n^1 + c_n^2 \psi_n^2 | c_m^1 \psi_m^1 + c_m^2 \psi_m^2 \rangle \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (c_n^{1*} c_m^1 \langle \psi_n^1 | \psi_m^1 \rangle + c_n^{2*} c_m^1 \langle \psi_n^2 | \psi_m^1 \rangle \\
 &\quad + c_n^{1*} c_m^2 \langle \psi_n^1 | \psi_m^2 \rangle + c_n^{2*} c_m^2 \langle \psi_n^2 | \psi_m^2 \rangle) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (c_n^{1*} c_m^1 \delta_{mn} + 0 + 0 + c_n^{2*} c_m^2 \delta_{mn}) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} (|c_n^1|^2 + |c_n^2|^2) \stackrel{!}{=} 1
 \end{aligned}$$

3 Eigenwerte, Eigenfunktionen und der harmonische Oszillator

VON F. KLINGBERG, S. JAKOBS

3.1 Eigenwerte und Eigenfunktionen

Die Eigenwertgleichung taucht bei der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung auf und hat weitreichende Bedeutung:

$$A\psi_n = a_n\psi_n \quad \text{mit } m = 1, 2, \dots \quad (3.1)$$

Dabei ist A ein Operator auf L^2 , $\psi \in L^2$ und $a \in \mathbb{C}$.

Satz 1. Falls A hermitesch ist ($A = A^\dagger$), sind alle Eigenwerte reell

Beweis:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle^* &= (\langle \psi_m | A | \psi_m \rangle)^* = \langle \psi_m | A^\dagger | \psi_m \rangle^* = \langle \psi_m | A | \psi_m \rangle = a_m \\ \langle A \rangle^* &= (\langle \psi_m | A | \psi_m \rangle)^* = \underbrace{(a_m \langle \psi_m | \psi_m \rangle)^*}_{=1, \in \mathbb{R}} = a_m^* \\ &\Rightarrow a_m^* = a_m \end{aligned}$$

Physikalische Bedeutung: Physikalische Observablen müssen reelle Größen sein.

Satz 2. Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten stehen orthogonal aufeinander:

$$\boxed{\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle &= a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ (\langle \psi_m | A | \psi_n \rangle)^* &= a_n^* (\langle \psi_m | \psi_n \rangle)^* = a_n^* \langle \psi_n | \psi_m \rangle \\ &\stackrel{\text{Satz 1}}{=} a_n \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | A^\dagger | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | A | \psi_m \rangle \\ &\Rightarrow \underbrace{(a_n - a_m)}_{\neq 0, n.Vor.} \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \\ &\Rightarrow \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad \text{für } n \neq m \end{aligned}$$

Es ist möglich, dass ein Eigenwert mehrere linear unabhängige Eigenfunktionen hat. Dann heißt der Eigenwert entartet:

$$A\psi_n^i = a_m\psi_m^i \quad \begin{array}{l} m = 1, \dots \\ i = 1, \dots, n_g \end{array}$$

n_g ist der Grad der Entartung.

Satz 3. Die Eigenfunktionen zu entarteten Eigenwerten können orthogonal gewählt werden.

Beweis:

Explizite Konstruktion nach dem Schmidt'schen Orthonormalisierungsverfahren. Seien ψ_n die Eigenfunktionen, dann erhält man ein System von orthonormalen Eigenfunktionen φ_n über:

$$\begin{aligned} c_1\varphi_1 &= \psi_1 \\ c_2\varphi_2 &= \psi_2 - \varphi_1 \langle \varphi_1 | \psi_2 \rangle \\ &\vdots \\ c_k\varphi_k &= \psi_k - \sum_{j=1}^{k-1} \varphi_j \langle \varphi_j | \psi_k \rangle \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} |c_1|^2 &= \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \\ &\vdots \\ |c_k|^2 &= \langle \psi_k | \psi_k \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} |\langle \varphi_j | \psi_k \rangle|^2 \end{aligned}$$

Ein System von Eigenfunktionen von H ($H\psi_n = E_n\psi_n$) heißt vollständig, falls jede Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Form

$$\boxed{\psi(\vec{x}, t) = \sum_n \sum_j c_n^j \psi_n^j(\vec{x}) \cdot e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}} \quad c_n^j \in \mathbb{C} \quad (3.2)$$

mit $H\psi_n^j = E_n\psi_n^j$ geschrieben werden kann.

3.2 Harmonischer Oszillator eindimensional

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \text{mit} \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left[-x_0^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right] \text{ mit} \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}
 \end{aligned}$$

Löse: $H\psi_n = E_n\psi_n$

Es gibt dazu zwei Möglichkeiten

- Löse DGL (\rightarrow Blatt 3 Aufg. 3)
- algebraisch lösen

Wir wählen die algebraische Vorgehensweise

Definition

$$\begin{aligned}
 a &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar} x_0 p \right) \\
 a^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar} x_0 p \right)^\dagger \stackrel{\text{Blatt 2,2}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x^\dagger}{x_0} - \frac{i}{\hbar} x_0 p^\dagger \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - \frac{i}{\hbar} x_0 p \right) \quad \text{mit} \quad p = p^\dagger \quad x = x^\dagger \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)
 \end{aligned}$$

Definition

$$\begin{aligned}
 \hat{n} = a^\dagger a &= \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - x_0^2 \frac{d^2}{dx^2} - \underbrace{\frac{d}{dx} x + x \frac{d}{dx}}_{=-1, \text{ Produktregel}} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left(\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - x_0^2 \frac{d^2}{dx^2} - 1 \right)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

Suche Eigenfunktion von \hat{n} : $\hat{n}\psi_n = n\psi_n$ da ψ_n auch Eigenfunktion von H sind:

$$\begin{aligned} H\psi_n &= \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)\psi_n = \hbar\omega n\psi_n + \hbar\omega\frac{1}{2}\psi_n \\ &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n \quad , E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

also: Eigenfunktion von H:

$H\psi_n = E_n\psi_n$ $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ sind auch Eigenfunktionen von \hat{n}

Betrachte:

$$\langle \psi_n | \hat{n} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a^\dagger a | \psi_n \rangle = \langle (a^\dagger)^\dagger \psi_n | a \psi_n \rangle = \langle a \psi_n | a \psi_n \rangle \geq 0$$

$\Rightarrow \langle \hat{n} \rangle = 0$ für $a\psi_n = 0 \Rightarrow \hat{n}\psi_n = a^\dagger a\psi_n = 0 \Rightarrow n = 0$ ist niedrigster Eigenwert

Löse:

$$\begin{aligned} a\psi_0 = 0 &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) \psi_0 = 0 \\ &\Rightarrow \psi_0 = c \cdot e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \\ 1 &\stackrel{!}{=} \int dx |\psi_0|^2 = |c|^2 \cdot \underbrace{\int dx e^{-\left(\frac{x}{x_0} \right)^2}}_{\sqrt{\pi} x_0} \\ &\Rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} \end{aligned}$$

Eigenfunktionen von \hat{n} :

$\hat{n}\psi_n = n\psi_n$ sind Eigenfunktionen von H

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

$$\langle \psi_n | \hat{n} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a^\dagger a | \psi_n \rangle = \langle a \psi_n | a \psi_n \rangle = \| |a\psi_n\rangle \|^2 \geq 0$$

niedrigster Eigenwert: $n = 0, a\psi_0 = 0$

$$\Rightarrow \text{Lsg: } \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}$$

es gilt:

$$\begin{aligned}
 [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2} \left[\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx}, \frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{x_0^2} \underbrace{[x, x]}_0 + \underbrace{\left[\frac{d}{dx}, x \right] - \left[x, \frac{d}{dx} \right]}_{2 \left[\frac{d}{dx}, x \right]} - x_0^2 \underbrace{\left[\frac{d}{dx}, \frac{d}{dx} \right]}_0 \right) \\
 &= \frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} = 1
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [a, a^\dagger] = 1 \quad (3.3)$$

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

$$\Rightarrow [\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger \quad (3.4)$$

$$[\hat{n}, a] = -a \quad (3.5)$$

Behauptung: Sei ψ_n normierte Eigenfunktion von \hat{n} , dann ist auch $a^\dagger \psi_n$ Eigenfunktion von \hat{n} :

$$\hat{n} a^\dagger \psi_n = \underbrace{a^\dagger \hat{n} \psi_n}_{n a^\dagger \psi_n} - \underbrace{a^\dagger \hat{n} \psi_n + \hat{n} a^\dagger \psi_n}_{[\hat{n}, a^\dagger] \psi_n = a^\dagger \psi_n}$$

$$\hat{n} a^\dagger \psi_n = (n+1) a^\dagger \psi_n \quad (3.6)$$

\Rightarrow Es ist also gezeigt, $a^\dagger \psi_n$ ist Eigenfunktion von \hat{n} mit Eigenwert $(n+1)$

Normierung von $a^\dagger \psi_n$:

$$\begin{aligned}
 \langle a^\dagger \psi_n | a^\dagger \psi_n \rangle &= \langle \psi_n | a a^\dagger | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \underbrace{a^\dagger a}_{\hat{n}} - \underbrace{a^\dagger a + a^\dagger}_{[a, a^\dagger]=1} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | (\hat{n} + 1) | \psi_n \rangle \\
 &= (n+1) \underbrace{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}_1
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \psi_n \text{ ist normiert}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \psi_n = \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (a^\dagger)^{n+1} \psi_0}$$

<u>Zustände</u>	<u>Eigenwerte von \hat{n}</u>	<u>Eigenwerte von H</u>
ψ_0	0	$\frac{1}{2} \hbar \omega$
$\psi_1 = a^\dagger \psi_0$	1	$\hbar \omega (1 + \frac{1}{2}) = \frac{3}{2} \hbar \omega$
$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 \psi_0$	2	$\frac{5}{2} \hbar \omega$
\vdots	\vdots	\vdots
$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0$	n	$\hbar \omega (n + \frac{1}{2})$

→ Energie ist nie =0 ↔ Grundzustandsenergie
 Die Energie wird immer um einen Energiequant $\hbar \omega$ erhöht.

Behauptung: $\{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0\}$ ist orthonormiert, d.h. es gilt:

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{für } n = m \\ 0, & \text{für } n \neq m \end{cases}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \psi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle (a^\dagger)^m \psi_0 | (a^\dagger)^n \psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | a^m (a^\dagger)^n | \psi_0 \rangle \end{aligned}$$

benutze: $[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, (a^\dagger)^n] \stackrel{\text{Blatt 2, 2}}{=} n (a^\dagger)^{n-1}$

$$\curvearrowright = \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 |^{m-1} \left((a^\dagger)^n a - \underbrace{(a^\dagger) a + a (a^\dagger)^n}_{[a, (a^\dagger)^n] = n (a^\dagger)^{n-1}} \right) | \psi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \psi_m, \psi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | a^{m-1} (a^\dagger)^{n-1} | \psi_0 \rangle = (*) \\ &= \begin{cases} \frac{n!}{\sqrt{n!}^2} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1, & \text{für } n = m \\ 0, & \text{für } n \neq m \end{cases} \end{aligned}$$

$$(*) = \dots = \overset{\text{Vorfaktor}}{\sim} \begin{cases} \langle \psi_0 | a^\dagger | \psi_0 \rangle = 0 \\ \langle \psi_0 | (a^\dagger)^i | \psi_0 \rangle = 0 \end{cases}$$

$$\boxed{\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}} \quad (3.7)$$

$a\psi_n$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $n-1$.

Behauptung:

$$\hat{n}a\psi_n = \underbrace{a\hat{n}\psi_n}_{na\psi_n} - \underbrace{a\hat{n}\psi_n + \hat{n}a\psi_n}_{[\hat{n},a]\psi_n = -a\psi_n} = (n-1)a\psi_n$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}a\psi_n}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{array}{l} a^\dagger \text{ erh\u00f6ht den Eigenwert von H um } \hbar\omega \leftrightarrow \text{Aufsteigeoperator} \\ a \text{ erniedrigt den Eigenwert von H um } \hbar\omega \leftrightarrow \text{Absteigeoperator} \end{array}}$$

Behauptung: $n \in \mathbb{N}$ sind alle Eigenwerte von \hat{n} .

Beweis durch Widerspruch: Annahme: $\nu = n + \alpha$, $\alpha \in (0, 1)$ ist Eigenwert von \hat{n} .

$$\begin{aligned} \hat{n}a\psi_\nu &= (\nu - 1)a\psi_\nu = (n + \alpha - 1)a\psi_\nu \\ \hat{n}a^n\psi_\nu &= (\nu - n)a^n\psi_\nu = \alpha a^n\psi_\nu \\ \hat{n}a^{n+1}\psi_\nu &= (\nu - (n + 1))a^{n+1}\psi_\nu = (\alpha - 1)a^{n+1}\psi_\nu < 0 \quad \text{Widerspruch!} \end{aligned}$$

Eindeutigkeit des Grundzustandes verbietet eine Entartung der Zust\u00e4nde:

$$\boxed{\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}} \quad (3.8)$$

allg. L\u00f6sung der zeitunabh\u00e4ngigen Schr\u00f6dingergleichung.

4 Potentialstufe

VON S. JAKOBS

Wir betrachten nun das Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

Der Hamilton-Operator für diese System lautet dann:

$$H = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} & x < 0 \\ \frac{p^2}{2m} + V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

Somit lautet das Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I &= E\psi_I \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II} &= (E - V_0)\psi_{II} \end{aligned}$$

Dabei ist I der Bereich mit $x < 0$ und II der Bereich mit $x \geq 0$. Aus der Stetigkeit der Lösung und deren Ableitung folgt die Forderung:

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \quad (4.1)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(x=0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(x=0) \quad (4.2)$$

Allgemein kann die Energie beliebige Werte $E > V_0$ $E < V_0$ annehmen, daher machen wir eine Fallunterscheidung:

1. $E > V_0$

$$\begin{aligned} \psi_I &= Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} & k_I &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \psi_{II} &= Ce^{ik_{II} x} + De^{-ik_{II} x} & k_{II} &= \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Aus (4.1) und (4.2) folgt dann:

$$A + B = C + D \quad (4.3)$$

$$ik_I(A - B) = ik_{II}(C - D) \quad (4.4)$$

Das sind 2 Gleichungen für 4 Konstanten. Wähle

$$A = 1, \quad D = 0, \quad B = R, \quad C = T$$

$$\Rightarrow \quad 1 + R = T$$

$$k_I(1 - R) = k_{II}T$$

$$T = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}$$

$$R = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}$$

Betrachte nun die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

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

Da das Problem eindimensional ist, braucht man nur die x-Komponente der Stromdichte zu betrachten:

$$j_x^{I,II} = \left(\psi_{I,II}^* \frac{d}{dx} \psi_{I,II} - \left(\frac{d}{dx} \psi_{I,II}^* \right) \psi_{I,II} \right)$$

$$= \dots = \begin{cases} \frac{\hbar k_I}{m} (1 - |R|^2) = j_{ein} - j_{ref} & I \\ \frac{\hbar k_{II}}{m} |T|^2 = j_{trans} & II \end{cases}$$

$$j_{ein} = \frac{\hbar k_I}{m} \quad j_{ref} := |R|^2 \frac{\hbar k_I}{m} \quad j_{trans} := |T|^2 \frac{\hbar k_{II}}{m}$$

$$j_{ref} + j_{trans} = \frac{\hbar}{m} (k_I |R|^2 + k_{II} |T|^2)$$

$$= \dots = \frac{\hbar}{m} k_I = j_{ein}$$

Physikalische Interpretation: Die Wahrscheinlichkeit die einläuft spaltet sich in einen transmittierten und einen reflektierten Teil auf.

2. $E < V_0$

$$k_{II} = iq \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_{II} = T e^{-qx}$$

$$R = \frac{k_I - iq}{k_{II} + iq}, \quad T = \frac{2k_I}{k_I + iq}$$

Damit besteht das Problem nun aus einem oszillierenden, einem reflektierten und einem exponentiell abfallenden Teil.

Bemerkung:

$$|\psi_{II}|^2 = |T|^2 e^{-2qx}$$

→ Es gibt eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im klassisch verbotenen Bereich.

Ein weiteres eindimensionales Problem ist die Potentialschwelle

Potentialschwelle Hier tritt der Tunneleffekt auf, das heißt es gibt für eine aus dem $-\infty$ einlaufende Welle mit $E < V_0$ eine von 0 verschiedene Wahrscheinlichkeit sich bei $x > a$ zu befinden. Das Potential lautet für die Potentialschwelle:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

5 Zusammenfassung 1-dim Probleme

- Falls das Potential V unbeschränkt nach oben ist ($V \rightarrow \infty$), sind die Energieeigenzustände und das Energiespektrum diskret. Beispiele sind der Potentialtopf und der harmonische Oszillator.
- Falls V beschränkt ist (V_{max}) gibt es zwei Fälle:
 - $E < V_{max}$ Es gibt gebunden Zustände mit diskreten Energien, sowie Streuzustände mit kontinuierlichem Energiespektrum, aber auch Übergänge zwischen diesen (Bsp. Tunneleffekt)
 - $E > V_{max}$ Hier gibt es Streuzustände mit kontinuierlichem Energiespektrum.

6 Der Drehimpuls

VON S. JAKOBS

Der Drehimpuls ist analog zur klassischen Mechanik definiert als:

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\text{nabla}}$$

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^3 L_i \vec{e}_i$$

$$L_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x_j p_k$$

Die Kommutatoren ergeben sich dann zu:

$$\begin{aligned} [L_i, x_l] &= \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} [x_j p_k, x_l] = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x_j \underbrace{[p_k, x_l]}_{-i\hbar\delta_{kl}} \\ &= -i\hbar \sum_j \varepsilon_{ijl} x_j \\ &= i\hbar \sum_j \varepsilon_{ilj} x_j \end{aligned}$$

Die Kommutatoren zu p_l und L_l ergeben sich analog zu x_l :

$$[L_i, p_l] = i\hbar \sum_j \varepsilon_{ilj} p_j$$

$$[L_i, L_l] = i\hbar \sum_j \varepsilon_{ilj} L_j$$

$$\begin{aligned} [\vec{L}^2, L_i] &= \sum_k [L_k L_k, L_i] = \sum_k (L_k [L_k, L_i] + [L_k, L_i] L_k) \\ &= i\hbar \sum_{j,k} L_k \varepsilon_{kij} L_j + \varepsilon_{kij} L_j L_k \\ &= i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{kij} (L_k L_j + L_j L_k) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Der ε -Tensor ist für festes i ein antisymmetrischer Tensor 2ter Stufe, $(L_k L_j + L_j L_k)$ dagegen ist symmetrisch, damit ist das Produkt aus beiden ein antisymmetrischer Tensor 2ter Stufe. Die Summe über die Elemente eines antisymmetrischen Tensors verschwindet.

Aus diesem Ergebnis folgert man nun, dass \vec{L}^2 und die Komponenten des Drehimpulses die selben Eigenfunktionen haben. Man zeichnet nun eine Richtung aus, und erhält:

$$\begin{aligned} \{\vec{L}^2, L_z\} & \quad \text{haben die selben Eigenfunktionen} \\ L_z \psi_{lm} & = m\hbar \psi_{lm} \\ \vec{L}^2 \psi_{lm} & = l(l+1)\hbar \psi_{lm} \end{aligned}$$

6.1 Konstruktion der Eigenfunktionen mit Leiteroperatoren

Um die Behandlung des Drehimpulses zu vereinfachen, und schließlich auch die Impulseigenfunktionen zu finden, definiert man sich nun die Leiteroperatoren für den Drehimpuls:

Definition 1.

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (6.1)$$

$$L_{\pm}^{\dagger} = L_x^{\dagger} - iL_y^{\dagger} = L_x - iL_y \quad (6.2)$$

$$= L_{\mp} \quad (6.3)$$

Für die Kommutatoren der Leiteroperatoren erhält man:

$$\begin{aligned} [L_z, L_{\pm}] & = \pm i\hbar L_z \\ [L_+, L_-] & = 2\hbar L_z \\ [\vec{L}^2, L_{\pm}] & = 0 \\ L_{\pm} L_{\mp} & = L_x^2 + L_y^2 \pm \hbar L_z = \vec{L}^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z \end{aligned}$$

Eigenschaften von \mathbf{l}, \mathbf{m} Die Eigenschaften der Eigenwerte kann man nun mit den Leiteroperatoren untersuchen.

•

$$\begin{aligned} \hbar^2 l(l+1) & = \langle \psi_{lm} | \vec{L}^2 | \psi_{lm} \rangle = \sum_i \langle \psi_{lm} | L_i L_i | \psi_{lm} \rangle \\ & = \sum_i \langle L_i \psi_{lm} | L_i \psi_{lm} \rangle \geq 0 \\ \Rightarrow \quad \hbar^2 l(l+1) & \geq 0 \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned}
 L_z L_{\pm} \psi_{lm} &= [L_z, L_{\pm}] \psi_{lm} + L_{\pm} L_z \psi_{lm} \\
 &= \pm \hbar L_{\pm} \psi_{lm} + m \hbar L_{\pm} \psi_{lm} \\
 &= \hbar(m \pm 1) L_{\pm} \psi_{lm}
 \end{aligned}$$

$L_{\pm} \psi_{lm}$ ist Eigenfunktion zu L_z zum Eigenwert $\hbar(m \pm 1)$.

$$\vec{L}^2 L_{\pm} \psi_{lm} = L_{\pm} \vec{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) L_{\pm} \psi_{lm}$$

$L_{\pm} \psi_{lm}$ ist Eigenfunktion von \vec{L}^2 zum Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$

•

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{lm} | \psi_{l'm'} \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\
 0 \leq \langle L_{\pm} \psi_{lm} | L_{\pm} \psi_{lm} \rangle &= \langle \psi_{lm} | L_{\pm}^{\dagger} L_{\pm} | \psi_{lm} \rangle \\
 &= \langle \psi_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} \psi_{lm} \rangle = \langle \psi_{lm} | \vec{L}^2 - L_z^2 \mp L_z | \psi_{lm} \rangle \\
 &= \hbar^2 l(l+1) - m^2 \hbar^2 \mp \hbar^2 m \\
 &= \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m(m \pm 1) \geq 0 \\
 \Rightarrow l(l+1) - m(m \pm 1) &\geq 0 \rightarrow l(l+1) \geq |m|(|m| + 1) \\
 &\rightarrow |m| \leq l
 \end{aligned}$$

Es existiert also ein größter, bzw ein kleinster Eigenwert von L_z

- $m_{max} = l$
- $m_{min} = -l$

$$\Rightarrow L_+ \psi_{lm=l} = 0, L_- \psi_{lm=-l} = 0$$

Man kann nun bei $m = l$ beginnen und den Operator L_- n-mal anwenden.

Das ist nur dann möglich, wenn:

$$\begin{aligned}
 l - n &= -l \\
 l &= \frac{n}{2} \\
 l &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, 4, \dots \\
 -m &\leq m \leq l
 \end{aligned}$$

Die Halbzahlgigen Drehimpulse sind jeweils Spins (eine "spezielle" Form eines Drehimpulses). Die Eigenfunktionen sind dann:

$$\underbrace{\{\psi_{l-l}, \psi_{l-l+1}, \dots, \psi_{ll}\}}_{2l+1}$$

6.2 Konstruktion von ψ_{lm} durch Differentialoperatoren

Die Rechnung wird wesentlich einfacher, wenn man das Problem in Kugelkoordinaten betrachtet:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cos \theta \\r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \cos \theta &= \frac{z}{r} \\ \tan \varphi &= \frac{y}{x}\end{aligned}$$

Mit

$$\partial_{x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial r}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

erhält man dann:

$$\begin{aligned}\partial_x &= \sin \theta \cos \varphi \partial_r + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \partial_\theta - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \partial_\varphi \\ \partial_y &= \sin \theta \sin \varphi \partial_r + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \partial_\theta + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \partial_\varphi \\ \partial_z &= \cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta\end{aligned}$$

Mit diesen Operatoren kann man nun die Komponenten des Drehimpulses umschreiben:

$$\begin{aligned}L_x &= -\frac{\hbar}{i} (\sin \varphi \partial_\theta + \cot \theta \cos \varphi \partial_\varphi) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} (\cos \varphi \partial_\theta - \cot \theta \sin \varphi \partial_\varphi) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi \\ L_\pm &= \hbar e^{\pm i\varphi} (\partial_\theta \pm i \cos \theta \partial_\varphi) \\ \vec{L}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \cot \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right)\end{aligned}$$

Bestimmung der ψ_{lm} Die Drehimpulseigenfunktionen werden nun durch lösen der Differentialgleichungen:

$$L_z \psi_{lm} = m \hbar \psi_{lm} \quad (6.4)$$

$$\vec{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm} \quad (6.5)$$

Für die Lösung bietet sich wieder ein Separationsansatz an:

$$\psi_{lm}(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi) \cdot \Theta(\theta)$$

$$L_z \psi_{lm} = \left(\frac{\hbar}{i} \partial_\varphi \Phi \right) \cdot \Theta = \hbar m \Phi \cdot \Theta$$

$$\partial_\varphi \Phi = im \Phi$$

$$\Rightarrow \Phi = c \cdot e^{im\varphi}$$

Die Variable φ ist 2π -periodisch

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

$$c e^{im(\varphi+2\pi)} = c e^{im\varphi}$$

$$e^{i2\pi m} = 1$$

Daraus folgt, dass m ganzzahlig sein muss. Nun zur nächsten Differentialgleichung:

$$\vec{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}$$

$$\left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta \right) \Phi \Theta = -l(l+1) \Phi \cdot \Theta$$

Wenn man die Lösung für Φ einsetzt, dann erhält man:

$$\left(-\frac{m^2}{\sin \theta} + l(l+1) + \partial_\theta^2 + \cot \theta \partial_\theta \right) = 0$$

Substitution: $\xi = \cos \theta$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \xi}$$

$$\partial_\theta^2 = -\partial_\theta (\sin \theta \partial_\xi) = -\cos \theta \partial_\xi - \sin \theta \partial_\theta \partial_\xi$$

$$= -\xi \partial_\xi + \sin^2 \theta \partial_\xi^2$$

$$= (1 - \xi^2) \partial_\xi^2 - \xi \partial_\xi$$

Damit erhält die Gleichung dann die Form:

$$\left(-\frac{m^2}{1-\xi^2} + l(l+1) + (1-\xi^2)\partial_\xi^2 - 2\xi\partial_\xi \right) \Theta = 0$$

Dies ist die **assozierte Legendre Differential-Gleichung**. Für den Fall $m = 0$ geht diese in die Legendre Differential-Gleichung über. Die Lösung der assoziierten Legendre Differentialgleichung (LDGL) sind die assoziierten Legendre-Polynome:

$$P_{lm}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi)$$

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l$$

Beispiele:

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = \xi$$

$$P_2 = \frac{1}{2} (3\xi^2 - 1)$$

Die Eigenfunktionen zum Drehimpuls ergeben sich dann zu:

$$\psi_{lm}(\theta, \varphi) = c \cdot e^{im\varphi} P_{lm}(\theta)$$

Diese sind auch besser bekannt unter dem Namen **Kugelflächenfunktionen**, oder **spherical harmonics**. Die Konstante c wird durch die Normierung festgelegt. Zu all diesen Polynomen kann man folgende Rechenregeln herleiten:

$$\int_{-1}^1 d\xi P_l(\xi) P_{l'}(\xi) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

$$\int_{-1}^1 d\xi P_{lm}(\xi) P_{l'm}(\xi) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} e^{im'\varphi} = 2\pi \delta_{mm'}$$

Damit kann man dann weiter verallgemeinern:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\xi \psi_{lm}(\varphi, \xi) \psi_{l'm'} &= |c|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} e^{im'\varphi} \int_{-1}^1 d\xi P_{lm} P_{l'm'} \\
 &= |c|^2 2\pi \delta_{mm'} \cdot \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \\
 &= |c|^2 \cdot \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{mm'} \delta_{ll'} \\
 &\stackrel{!}{=} 1
 \end{aligned}$$

Damit erhält man für c

$$c = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

7 Drehimpuls

F. KLINGBERG

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^3 L_i \vec{e}_i \quad L_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk}$$

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{für alle geraden Permutationen von } \mathbb{R} \\ 1, & \text{für alle ungeraden Permutationen von } \mathbb{R} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [L_i, x_l] &= \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \underbrace{[x_j p_k, x_l]}_{x_j \underbrace{[p_k, x_l]}_{-i\hbar\delta_{kl}}} & \vec{x} &= \sum_{i=1}^3 x_i \vec{e}_i, & \vec{p} &= \sum_{i=1}^3 p_i \vec{e}_i \\ &= -i\hbar \left(\sum_j \underbrace{\epsilon_{ijk}}_{\epsilon_{ilj}} x_j \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [L_i, x_l] &= i\hbar \sum_j \epsilon_{ilj} x_j \\ \Rightarrow [L_i, L_l] &= i\hbar \sum_j \epsilon_{ilj} L_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z & [L_y, L_z] &= i\hbar L_x & [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \\ \vec{L}^2 &= \sum_{k=1}^3 L_k L_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\vec{L}^2, L_i] &= \sum_k [L_k L_k, L_i] = \sum_k (L_k L_k, L_i + L_k, L_i L_k) \\ &= \sum_k \sum_j \epsilon_{kij} (L_k L_j + L_j L_k) i\hbar = 0 \\ &\text{mit } [L_k, L_i] = i\hbar \epsilon_{kij} L_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_i, L_z] &= i\hbar \sum \epsilon_{ilj} L_j \\ [\vec{L}^2, L_i] &= 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \{\vec{L}^2, L_z\}$ haben gleiche Eigenfunktionen

$\Rightarrow \exists$ gleiche Eigenfunktionen Ψ_{lm}

$$\boxed{L_z \psi_{lm} = \hbar m \psi_{lm} \quad L^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}}$$

Definition : $L_{\pm} := L_x \pm iL_y$

$$L_{\pm}^{\dagger} = L_x^{\dagger} \mp iL_y^{\dagger} = L_x^{\dagger} \mp iL_y = L_{\mp}$$

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

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

$$L_{\pm} L_{\mp} = L_x^2 + L_y^2 \pm \hbar L_z = \vec{L}^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z$$

Eigenschaften von l, m :

- $0 \leq \langle \psi_{lm} | \vec{L}^2 | \psi_{lm} \rangle = \sum_i \langle \psi_{lm} | L_i L_i | \psi_{lm} \rangle = \sum_i \langle L_i \psi_{lm} | L_i \psi_{lm} \rangle \geq 0$
 $\Rightarrow \hbar^2 l(l+1) \langle \psi_{lm} | \psi_{lm} \rangle = \hbar^2 l(l+1)$
 $\Rightarrow l(l+1) \geq 0$ man kann also $l \geq 0$ wählen
- $L_z L_{\pm} \psi_{lm} = [L_z, L_{\pm}] \psi_{lm} + L_{\pm} L_z \psi_{lm} = \pm \hbar L_{\pm} \psi_{lm} + \hbar m L_{\pm} \psi_{lm}$
 $= \hbar(m \pm 1) L_{\pm} \psi_{lm}$
 $\Rightarrow L_{\pm} \psi_{lm}$ ist Eigenfunktion von L_z mit dem Eigenwert $(m \pm 1)\hbar$
- $\vec{L}^2 L_{\pm} \psi_{lm} = L_{\pm} \vec{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) L_{\pm} \psi_{lm}$
 $\Rightarrow L_{\pm} \psi_{lm}$ ist Eigenfunktion von \vec{L}^2 mit Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$
- $\langle \psi_{lm} | \psi_{l'm'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
 $0 \leq \langle L_{\pm} \psi_{lm} | L_{\pm} \psi_{lm} \rangle = \langle \psi_{lm} | L_{\pm}^{\dagger} L_{\pm} | \psi_{lm} \rangle = \langle \psi_{lm} | L_{\mp} L_{\pm} | \psi_{lm} \rangle$
 $= \langle \psi_{lm} | \vec{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z | \psi_{lm} \rangle = \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m = \hbar^2 (l(l+1) - m(m \pm 1))$
 ≥ 0

8 Teilchen im Zentralpotential (H-Atom)

VON F. KLINGBERG

Anwendung im Wasserstoffatom: Elektron im Coulombpotential des Protons

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad , \quad V(\vec{r}) = -\frac{e_0^2 Z}{r} \quad \text{mit } Z=\text{Zahl der Protonen, H-Atom: } Z=1$$

$$\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 = \dots \quad \text{Kugelkoord.} \quad \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

zeitunabhängige Schrödingergleichung: $H\psi = E\psi$

$$\Leftrightarrow \boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) - E \right] \psi = 0} \quad (8.1)$$

1. Schritt: Suche vollständiges System von Operatoren (H eingeschlossen).

$$\begin{aligned} [H, L_j] &= 0 \quad \text{letzte Vorlesung} \\ &\leadsto \frac{1}{2m} \sum_j \underbrace{[p_j p_j, L_i]}_0 + \underbrace{[V(r), L_i]}_0 \end{aligned}$$

folgt aus i) letzte Vorlesung
ii) explizit berechnet

ausserdem wissen wir aus der letzten Vorlesung:

$$\begin{aligned} [L_i, x_j] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} x_k & [L_i, p_j] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} p_k \\ [L_i, L_i] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} L_k & [\vec{L}^2, L_i] &= 0 & [\vec{x}^2, L_i] &= 0 \end{aligned}$$

aus $[H, L_i] = 0$ folgt auch:

$$[H, \vec{L}^2] = \sum_k [H, L_k L_k] = \sum_k \left(\underbrace{[H, L_k]}_0 L_k + \underbrace{[H, L_k]}_0 L_k \right) = 0$$

$\Rightarrow \{H, \vec{L}^2, L_z\}$ ist ein Satz von (vollständigen) Operatoren und haben gemeinsame Eigenfunktionen.

Die zugehörigen Eigenwerte werden sein: $\{E, l, m\}$.

2. Schritt: Separationsansatz:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Psi_{lm}(\theta, \phi), \quad \text{mit} \quad \Psi_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{Kugelflächenfunktion}$$

es gilt: $\vec{L}^2\psi = \hbar^2 m\psi$
 $L_z\psi = \hbar m\psi$

in (8.1) einsetzen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] R(r)\psi_{lm}(\theta, \phi) \frac{1}{r} = 0 \quad (8.2)$$

Ansatz: $R(r) = \frac{U(r)}{r}, \quad R'(r) = \frac{U'}{r} - \frac{U}{r^2}, \quad R'' = \frac{U''}{r} - \frac{2U'}{r^2} + \frac{2U}{r^3}$

$$\leadsto (8) : \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right) U(r) = 0$$

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = V_{eff}(r), \quad \text{das effektive Potential}$$

Abspalten der asymptotischen Lösungen:

Betrachten der Differentialgleichung:

- $\boxed{r \rightarrow \infty}$: $\left(-\partial_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U = 0$

Ansatz: $U = Ar^\alpha, \quad U' = A\alpha r^{\alpha-1}, \quad U'' = A\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2}$

$$\leadsto \underbrace{(-\alpha(\alpha-1) + l(l+1))}_{=0} Ar^{\alpha-2} = 0$$

$$=0, \quad \alpha = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases}$$

$$\Rightarrow U(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \quad \text{Quadratintegrabel} \Rightarrow B = 0$$

- $\boxed{r \rightarrow \infty}$: $-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + E \right) U = 0$

$$\Rightarrow U = Ae^\kappa + Be^{-\kappa}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \quad \text{reel für } E < 0$$

Quadratintegrabilität: $A=0$ bei ∞ : $\Rightarrow U \sim e^{-\kappa r}$

⇒: volle Lösung:

$$\underline{\text{Ansatz:}} \quad U(r) = r^{l+1} e^{-\kappa r} W(r) \quad (8.3)$$

vorher Variablentransformation: $\rho := \kappa r, \quad \frac{\partial}{\partial r} = \kappa \frac{\partial}{\partial \rho}$

$$\curvearrowright \text{ in (8.3) einsetzen: } \left(-\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \partial_\rho^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1) \kappa^2}{2m \rho^2} - \frac{e_0^2 Z \kappa}{\rho} - E \right) U(\rho) = 0 \quad (8.4)$$

$$\left(\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) U = 0 \quad \text{mit} \quad \rho_0 = \frac{e_0^2 Z 2m}{\hbar^2 \kappa} = \frac{e_0^2 Z}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{-E}}$$

Setze (8.3) in (8.4):

$$\boxed{\rho W'' + 2(l+1-\rho)W' + (\rho_0 - 2(l+1))W = 0} \quad (8.5)$$

(8.5) hat nur normierbare Lösungen, falls $\rho_0 = 2n$, mit $n \in \mathbb{N}$ und $n - (l+1) \geq 0$

$$\curvearrowright \text{ Balmer-Formel: } \boxed{E = - \frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar} \frac{1}{n^2}}$$

Rydberg-Konstante

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, \dots, (n-1)$$

W sind die zugeordneten Laguerre-Polynome

$E(n) \Rightarrow$ Energie ist entartet, hängt nicht von l und m ab,

Grad der Entartung: $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \sum_{l=0}^{n-1} (l+n) = n^2 + n - n = n^2$

$$\begin{aligned} \psi_{nlm} &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ R_{nl}(r) &= \rho^l e^{-\rho} W(\rho), \quad \rho \equiv \kappa r \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \\ W(\rho) \text{ erfüllt: } &\rho \partial_\rho^2 W + 2(l+1-\rho) \partial_\rho W + [\rho_0 - 2(l+1)] W = 0 \quad (*) \\ \partial_\rho &= \frac{\partial}{\partial \rho}, \quad \rho_0 = \frac{e_0^2 Z}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{-E}} \end{aligned}$$

Potenzreihenansatz für W:

$$W(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad , \quad \partial_\rho W(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} \quad , \quad \partial_\rho^2 W(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2}$$

$$\curvearrowright (*) \sum_{k=0}^{\infty} (k(k-1)a_k \rho^{k-1} + 2(l+1-\rho)k a_k \rho^{k-1} + (\rho_0 - 2(l+1))a_k \rho^k) = 0$$

Koeffizient von jeder Potenz von ρ muss 0 sein.

$$\rho^k \quad : \quad (k+1)k a_{k+1} + 2(l+1)(k+1)a_{k+1} - 2k a_k + (\rho_0 - 2(l+1))a_k = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{a_{k+1} = \frac{2(k+l+1)-\rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k}$$

k groß werden lassen:

$$\begin{aligned} \text{große k:} \quad & \frac{a_{k+1}}{a_k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k} \\ \text{genau wie:} \quad & e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2\rho)^k \\ & \frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2^{k+1}}{(k+1)!} \frac{k!}{2^k} = \frac{2}{k+1} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{2}{k} \end{aligned}$$

\Rightarrow Potenzreihe muss abbrechen bzw. Lösung ist endliches Polynom vom N-ten Grad, d.h. $a_{N+1} = a_{N+2} = \dots = 0$

$$\text{Forderung:} \quad a_{N+1} = \frac{2(N+l+1)-\rho_0}{(N+1)(N+2l+2)} = 0 \quad !$$

$$\curvearrowright \boxed{\rho_0 = 2(N+l+1)} \quad N, l \in \mathbb{N}_0, \quad N \text{ heißt radiale Quantenzahl}$$

$n := N + l + 1$ heißt Hauptquantenzahl

$$n \in \mathbb{N} \quad l = 0, \dots, (n-1) \quad m = -l, \dots, l$$

$$\boxed{E_n = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}} \quad \text{Energie des H-Atoms}$$

$$\begin{aligned} E_n(Z=1) &= -Ry \frac{1}{n^2} & Ry &= \frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar^2} \\ E_n - E_m &= Ry \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \hbar\omega_{mn} & n &> m \end{aligned}$$

Laguerre Polynome

$$L_r(x) = \sum_k^r (-1)^k \frac{(r!)^2}{(k!)^2 (r-k)!} x^k \quad \text{erfüllt DLG: } xL_r'' + (1-x)L_r' + rL_r = 0$$

zugeordnete Laguerre-Polynome:

$$L_r^s(x) := \frac{d^s}{dx^s} L_r = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k$$

$$\text{erfüllt DLG: } \boxed{xL_r^{s''} + (s+1-x)L_r^{s'} + (r-s)L_r^s = 0}$$

Vergleich mit:

$$\begin{aligned} \rho W'' + 2(l+1-\rho)W' + 2(n-2(l+1))W &= 0 \\ \text{gibt} \quad x = 2\rho, \quad s = 2l+1, \quad r = n+l \end{aligned}$$

$$\leadsto \boxed{R_{nl}(r) = c(\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r)}$$

Orthogonalität:

$$\boxed{\int_0^\infty dx x^{s+1} e^{-x} L_r^s(x) L_p^s(x) = \frac{(2r-s+1)(r!)^3}{(r-s)!} \delta_{rp}}$$

Bestimme c so, dass gilt:

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi_{lm}^* \psi_{n'l'm'}(\vec{x}) &= \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ &\stackrel{\text{Kugelkoord.}}{=} \int \underbrace{d\theta d\phi \sin\theta}_{d\Omega} r^2 dr R_{nl}^* R_{n'l'} Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{n'l'}(\theta, \phi) \\ &= \int_0^\infty dr r^2 R_{nl} R_{n'l'} \delta_{ll'} \delta_{nn'} \\ &= c^2 \int_0^\infty dr r^2 (\kappa r)^{2l} e^{-2\kappa r} L_{n'+l}^{2l+1} L_{n+l}^{2l+1} \\ &= \delta_{nn'} \\ \Rightarrow c &= \left(\frac{(n-l-1)!}{((n+l)!)^3} \frac{1}{2n} (2\kappa)^3 \right)^{\frac{1}{2}} 2^l \end{aligned}$$

9 Der Zeeman-Effekt

VON S. JAKOBS

Betrachten wir nun geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld. Diese Teilchen haben die Bahn $\vec{x}(t)$, Masse m und Ladung q . Auf diese Teilchen wirkt die

$$\text{Lorentzkraft: } \vec{F} = q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \times \vec{B} \right)$$

Die Felder \vec{E} und \vec{B} werden beschrieben durch die Maxwell'schen Gleichungen:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (9.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (9.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (9.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (9.4)$$

Die letzten beiden Gleichungen werden die homogenen Maxwell-Gleichungen genannt. Diese werden durch die Potentiale ϕ und \vec{A} gelöst:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} \end{aligned}$$

check:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= -\underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\phi}_{=0} - \frac{1}{c} \vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \vec{A} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Die Potentiale sind nicht eindeutig festgelegt. Unter den Eichtransformationen

$$\begin{aligned} \vec{A} &\mapsto \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\lambda \\ \phi &\mapsto \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

ändern sich die Felder nicht: \vec{E} und \vec{B} sind eichinvariant. Bestimmte Eichungen sind nützlich, um Rechnungen zu vereinfachen, z.B. $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$: Die Coulomb-Eichung.

Die Lorentz-Kraft folgt aus der Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi$$

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m} \left(p_i - \frac{q}{c} A_i \right) \\ -\dot{p}_i &= \frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \partial_i \vec{A} + q \partial_i \phi \\ &= -\frac{q}{c} \dot{\vec{x}} \partial_i \vec{A} + q \partial_i \phi \end{aligned}$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_i &= \dot{p}_i - \frac{q}{c} \frac{\partial}{\partial t} A_i = \frac{q}{c} \dot{\vec{x}} \partial_i \vec{A} - q \partial_i \phi - \frac{q}{c} (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}) A_i - \frac{q}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ &= q E_i + \frac{q}{c} \left(\dot{\vec{x}} \cdot \partial_i \vec{A} - (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}) A_i \right) \\ &= q E_i + \frac{q}{c} \left(\dot{\vec{x}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right)_i \\ &= q \left(E_i + \frac{q}{c} (\dot{\vec{x}} \times \vec{B})_i \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[\dot{\vec{x}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right]_i &= \varepsilon_{ijk} \dot{x}_j (\vec{\nabla} \times \vec{A})_k = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \dot{x}_j \partial_l A_m \\ &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}) \dot{x}_j \partial_l A_m \\ &= \dot{x}_m \partial_i A_m - \dot{x}_j \partial_j A_i \\ &= \dot{\vec{x}} \cdot \partial_i \vec{A} - (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}) A_i \end{aligned}$$

9.1 Quantenmechanik geladener Teilchen

Ersetzung des klassischen Impulses durch den QM-Operator

$$\vec{p} \mapsto -i\hbar \vec{\nabla}$$

Das führt auf den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi$$

Im Gegensatz zur Lorentzkraft enthält die Schrödinger-Gleichung die Potentiale und nicht die eichinvarianten Felder \vec{E} und \vec{B} , das heißt die SGL muss nicht invariant unter Eichtransformation sein. Also brauchen wir eine neue Transformation der Wellenfunktion:

$$\psi \mapsto \psi' = e^{ix}\psi$$

Bestimme nun χ so, dass

$$\psi \text{ löst die SGL mit } \vec{A}, \phi \leftrightarrow \psi' \text{ löst die SGL mit } \vec{A}', \phi'$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}' \right)^2 + q\phi' \right] \psi' \\ \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{ix} \psi &= \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} \lambda \right)^2 + q\phi - \frac{q}{c} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \right] e^{ix} \psi \\ \leftrightarrow e^{ix} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi &= e^{ix} \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + \hbar \vec{\nabla} \chi - \frac{q}{c} \vec{A} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} \lambda \right)^2 + q\phi - \frac{q}{c} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \right] \psi \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} + \hbar \vec{\nabla} \left(\chi - \frac{q}{\hbar c} \lambda \right) \right)^2 + q\phi + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\chi - \frac{q}{\hbar c} \lambda \right) \right] \psi \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi \right] \psi \end{aligned}$$

Eichtransformation der Wellenfunktion

$$\chi = \frac{q}{\hbar c} \lambda$$

$$\begin{aligned} \vec{A} &\mapsto \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \lambda \\ \phi &\mapsto \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \\ \psi &\mapsto \psi' = e^{i \frac{q}{\hbar c} \lambda} \psi \end{aligned}$$

Die Erwartungswerte von Observablen hängen nicht von der Phase e^{ix} ab, aber wir werden sehen, dass χ zu beobachtbaren Effekten führt.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + i \frac{\hbar q}{2mc} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \right) + q\phi \\ &\text{Beachte die Wirkung des Differentialoperators} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + i \frac{\hbar q}{2mc} \underbrace{\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right)}_{=0} + i \frac{\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + q\phi \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt den Spezialfall eines konstanten \vec{B} -Feldes

$$\vec{B} = \vec{B}^0$$

Dann ist:

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x} \times \vec{B}^0$$

Denn:

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \times \vec{A})_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j \left(-\frac{1}{2} \right) (\vec{x} \times \vec{B}^0)_k \\ &= -\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \partial_j x_l B_m^0 \\ &= -\frac{1}{2} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \delta_{jl} B_m^0 \\ &= -\frac{1}{2} (1 - 3) \delta_{im} B_m^0 \\ &= B_i^0 \end{aligned}$$

Betrachte die Terme:

$$\begin{aligned} \vec{A}^2 &= \frac{1}{4} (\vec{x} \times \vec{B}^0)^2 = \frac{1}{4} (\vec{x}^2 \vec{B}^0 - (\vec{x} \cdot \vec{B}^0)^2) \\ \vec{A} \cdot \vec{\nabla} &= -\frac{1}{2} (\vec{x} \times \vec{B}^0) \cdot \vec{\nabla} = \frac{1}{2} (\vec{B}^0 \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla} \\ &= \frac{1}{2} \vec{B}^0 \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}) = \frac{i}{2\hbar} \vec{B}^0 \cdot \vec{L} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{q}{2mc} + q\phi + \frac{q^2}{2mc^2} (\vec{x}^2 \vec{B}^0 - (\vec{x} \cdot \vec{B}^0)^2)$$

Die Reihenfolge der Terme gibt auch die Größenverhältnisse der Terme wieder. Der Term $\vec{B}^0 \cdot \vec{L}$ wird als die Kopplung des Teilchens mit dem Magnetfeld bezeichnet.

(normaler) Zeemann-Effekt

Wasserstoffatom im konstanten \vec{B} -Feld, wobei dieses als schwach angenommen wird, so dass man die Terme die quadratisch in \vec{B} gehen vernachlässigt werden können.

$$\begin{aligned} q &= -e \\ \phi &= \frac{e}{r} \\ \vec{B}^0 &= B_0 \vec{e}_z \end{aligned}$$

mit m_e wird die **effektive Masse** des Elektrons im Wasserstoffatom bezeichnet, in den vorigen Formeln war das m , da aber später m für den Eigenwert von L_z benötigt wird, muss man diese Umbenennung vornehmen.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r} + \frac{eB_0}{2m_e c}L_z \\ &= \hat{H}_0 + \frac{eB_0}{2m_e c}L_z\end{aligned}$$

Da $[\hat{H}_0, L_z] = 0$ ist $[\hat{H}_0, \hat{H}] = 0$. Dann sind die Eigenfunktionen von \hat{H} die von \hat{H}_0 und die sind schon bekannt.

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi_{nlm} &= -\frac{4\pi e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = E_n\psi_{nlm} \\ \hat{H}\psi_{nlm} &= \left(\hat{H}_0 + \frac{eB_0}{2m_e c}L_z\right)\psi_{nlm} = \left(E_n + \frac{eB_0}{2m_e c}\hbar m\right)\psi_{nlm} \\ &= E_{n,m}\psi_{nlm}\end{aligned}$$

\Rightarrow Aufhebung der m -Entartung durch Splitting in äquidistante Niveaus.
Diese Beschreibung trifft allerdings nicht auf das reale Wasserstoffatom zu.
Im Stern-Gerlach-Experiment beobachtet man, dass sich für $n = 0, l = 0$ die Energie in zwei Niveaus aufspaltet
 \Rightarrow Hinweis auf Spin- $\frac{1}{2}$ Eigendrehimpuls des Elektrons.

Flußquantisierung

Man hat einen Supraleitenden Torus in einem konstanten Magnetfeld $\vec{B} = \vec{B}_0$
Meissner-Effekt: \Rightarrow der Torus ist feldfrei $\vec{B} = 0$.
Beschreibe die Ladungsträger im Metall durch eine Wellenfunktion ψ für $\vec{A} = 0$. \rightarrow Beschreibung mit anderer Eichwellenfunktion

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{\nabla}\lambda \quad \text{keine Zeitabhängigkeit} \\ \psi' &= e^{i\frac{q}{\hbar c}\lambda}\psi \\ \lambda(\vec{x}) &= \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} d\vec{x}' \cdot \vec{A} \quad \text{für bel. } \vec{x}_0 \text{ im Torus}\end{aligned}$$

Also ist

$$\psi'(\vec{x}) = e^{i\frac{q}{\hbar c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} d\vec{x}' \cdot \vec{A}'} \psi(\vec{x})$$

abhängig vom Weg $C : \vec{x}_0 \rightarrow \vec{x}$. Da wir aber \vec{x}_0 beliebig wählen können, nehmen wir \vec{x}_0 so, dass $\vec{x}_0 = \vec{x}$, also der Weg geschlossen ist.

$$\Rightarrow \psi' = e^{i\frac{q}{\hbar c} \oint_C d\vec{x}' \cdot \vec{A}'} \psi(\vec{x})$$

ψ' muss eindeutig sein $\leftrightarrow \psi'$ hängt nicht von C ab. Daraus folgt dann aber:

$$\begin{aligned}\psi'_{c_1} - \psi'_{c_2} &= e^{i \int_{c_1} \psi(\vec{x})} - e^{i \int_{c_2} \psi(\vec{x})} \\ &= e^{i \int_{c_1}} \left(1 - e^{i \int_{c_1 - c_2}} \right) \psi(\vec{x}) \\ &\stackrel{!}{=} 0\end{aligned}$$

Damit folgt dann, dass die Phase ein Vielfaches von 2π sein muss. Die Wege C_1, C_2 kann man beliebig wählen, also auch so, dass C_1 von A nach B und C_2 von B nach A (jeweils im Torus) geht. Damit ist der Weg $C = C_1 - C_2$ ein geschlossener Weg im Torus.

$$\begin{aligned}2\pi n &= \frac{|q|}{\hbar c} \oint_C d\vec{x}' \cdot \vec{A}' \\ &= \frac{|q|}{\hbar c} \iint_{F(C)} \vec{\nabla} \times \vec{A}' d\vec{F}' \\ &= \frac{|q|}{\hbar c} \int_F d\vec{F} \cdot \vec{B}\end{aligned}$$

Der magnetische Fluß durch den Torus ist

$$\int_F d\vec{F} \cdot \vec{B} = \frac{2\pi\hbar c}{|q|} n \quad n \in \mathbb{Z}$$

Im Experiment findet man

$$|q| = 2e$$

Die Elektronen ordnen sich zu Cooper-Paaren

10 Abstrakte Formulierung der Quantenmechanik

$\psi_n(\vec{x})$ sei ein vollständiges orthonormalsystem, d.h. jeder Zustand Ψ des Systems kann in der Form

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n$$

dargestellt werden. Die Koeffizienten der Entwicklung erhält man über:

$$\langle \psi_m | \Psi \rangle = \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

Man kann dann $\psi_n(\vec{x})$ als eine Basis im Hilbertraum auffassen und die c_n als Koeffizienten. Das ist ganz analog zum \mathbb{R}^3 :

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \sum_i c_i \vec{e}_i \quad , \quad \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} \\ c_j &= \vec{e}_j \cdot \vec{v} \end{aligned}$$

10.1 Basiswechsel im Hilbertraum

$$\begin{aligned} & \psi_n \rightarrow \phi_n \\ \text{mit: } \phi_n &= \sum_l \psi_l U_{ln} \end{aligned}$$

Die U_{ln} sind konstante Koeffizienten einer Matrix. auch gilt:

$$\phi_n^* = \sum_k \psi_k^* U_{kn}^*$$

Es bietet sich die Forderung an, dass ϕ_n auch ein Orthonormalsystem bildet. Das entspräche dann beispielsweise einer Drehung im \mathbb{R}^3

Forderung:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | \phi_n \rangle &= \delta_{nm} \\ \langle \phi_n | \phi_m \rangle &= \sum_{k,l} U_{kn}^* U_{lm} \underbrace{\langle \psi_k | \psi_l \rangle}_{\delta_{kl}} = \sum_l U_{ln}^* U_{lm} \\ &= \sum_l (U^*)_{nl}^T U_{lm} = \sum_l U_{nl}^\dagger U_{lm} \\ &\stackrel{!}{=} \delta_{mn} \end{aligned}$$

In Matrix-Form lautet die Gleichung dann:

$$U^\dagger U = 1 \leftrightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

U heißt unitäre Matrix. Die Zustände bleiben bei solchen Transformationen allerdings unverändert. Daraus folgt dann die Transformation der Entwicklungskoeffizienten c_n :

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_n c'_n \phi_n = \sum_n \sum_l c'_n \psi_l U_{ln} \\ &\stackrel{!}{=} \sum_l c_l \psi_l \\ \Rightarrow c_l &= \sum_n c'_n U_{ln} \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

10.2 Matrixdarstellung von Operatoren

Operatoren auf einem Hilbertraum haben eine Matrixdarstellung:

$$\hat{A} \rightarrow A_{mn} := \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle$$

Satz

Satz 4. Falls \hat{A} hermitesch ist, dann ist auch die Matrix A , die \hat{A} darstellt hermitesch:

$$\begin{aligned} A_{mn}^* &= A_{nm} \\ A^\dagger &= A \end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} A_{mn}^* &= \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle^* = \langle \hat{A}^\dagger | \psi_m \rangle \\ &= \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_m \rangle = A_{nm} \end{aligned}$$

q.e.d.

Satz 5. Falls die ψ_n Eigenfunktionen von \hat{A} sind, gilt:

$$A_{mn} = a_n \delta_{mn}$$

Wobei a_n ein Eigenwert von \hat{A} ist.

Beweis:

$$\begin{aligned} A_{mn} &= \langle \psi_m | \underbrace{\hat{A} |\psi_n\rangle}_{a_n |\psi_n\rangle} \rangle = a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= a_n \delta_{mn} \end{aligned}$$

Wie transformiert sich A_{mn} unter Basiswechsel. Die Basis, bezüglich derer die Matrixdarstellung gegeben ist, wird nun immer als oberer Index dazugeschrieben.

$$\begin{aligned} A_{mn}^{(\varphi)} &= \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_m \rangle \\ &= \sum_{k,l} U_{kn}^* U_{lm} \underbrace{\langle \psi_k | \hat{A} | \psi_l \rangle}_{A_{kl}^{(\psi)}} \\ &= \sum_k \sum_l (U^\dagger)_{nk} A_{kl}^{(\psi)} U_{lm} \\ A^{(\varphi)} &= U^\dagger A^{(\psi)} U \end{aligned}$$

Satz 6. Jede hermitesche Matrix kann durch eine unitäre Transformation auf diagonalgestallt gebracht werden, d.h.:

$$A_{mn} = a_m \delta_{mn}$$

Die Diagonalelemente sind die Eigenwerte.

Analogie: Jede symmetrische Matrix kann durch eine Transformation mit orthogonalen Matrizen diagonalisiert werden.

Die Matrix, die A diagonalisiert besteht aus den Eigenvektoren von A.

$$\begin{aligned} \underbrace{\varphi_n}_{\text{EF von } \hat{A}} &= \sum_l \psi_l U_{ln} \\ \langle \psi_m | \varphi_n \rangle &= \sum_l U_{ln} \langle \psi_m | \psi_l \rangle = U_{mn} \end{aligned}$$

U_{mn} ist die Matrix, die A diagonalisiert.

Bsp.: harmonischer Oszillator

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{n}\psi_{n-1} \\ \hat{a} \rightarrow a_{mn} &= \langle \psi_m | \hat{a} | \psi_n \rangle \\ &= \sqrt{n} \langle \psi_m | \psi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \\ (a_{mn}) &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & \end{pmatrix} \\ \hat{a}^\dagger \psi_n &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \\ \hat{a}^\dagger \rightarrow a_{mn}^\dagger &= \langle \psi_m | \hat{a}^\dagger | \psi_n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \\ (a_{mn}^\dagger) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & \end{pmatrix} \end{aligned}$$

10.3 Dirac-Notation

Bisher hatten wir eine Zustand notiert als:

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n(\vec{x})$$

Die Dirac-Notation charakterisiert einen Zustand durch abstrakte Vektoren in $L^2(\mathbb{R}^3)$

$$\Psi(\vec{x}) \rightarrow |\cdot\rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

Dieser Ket-Vektor erfüllt die Axiome des Vektorraumes. Die Basis des Hilbertraumes ist dann:

$$\psi_n(\vec{x}) \rightarrow |n\rangle$$

Beispiele:

System	Basis	Zustand
H-Atom	$\psi_{nlm}(\vec{x}) = nlm\rangle$	$ \Psi\rangle = \sum_{nlm} c_{nlm} nlm\rangle$ Wenn
harmon Oszillator	$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \varphi_0 = n\rangle$	$ \Psi\rangle = \sum_n c_n n\rangle$

man nun eine Basis gewählt hat, dann kann man die Eins, so wie jeden Operator in dieser Basis ausdrücken:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle c_n = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \underbrace{\sum_n |n\rangle \langle n |}_1 |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$$

Diese Darstellung ist aber nur gültig, wenn die $|n\rangle$ eine vollständige Basis des Hilbertraumes bilden.

Die Schrödinger-Gleichung Ein Zustand in einer Basis wird beschrieben durch:

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

In dieser Basis hat dann die SGL die Form:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n}{\partial t} |n\rangle &= \sum_n c_n \hat{H} |n\rangle \\ i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n}{\partial t} \langle m|n\rangle &= \sum_n c_n \langle m| \hat{H} |n\rangle \\ \hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} &= \sum_n c_n H_{mn} \end{aligned}$$

Orstdarstellung Orsteigenfunktion: $|x\rangle$, mit $\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$

$$\Psi(x, t) = \langle x|\Psi, t\rangle$$

Impulsdarstellung Impulseigenfunktion: $|p\rangle$, mit $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$

$$\Phi(p, t) = \langle p|\Phi, t\rangle$$

11 Gesamtdrehimpuls

Autor: Thomas Pöhlson

Der Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} := \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S} \quad (11.1)$$

wirkt auf $X_{\vec{L}} \otimes X_{\vec{S}}$. Für den Kommutator gilt

$$[J_i, J_j] = [L_i + S_i, L_j + S_j] = i\hbar ([L_i, L_j] + [S_i, S_j]) = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} J_k \quad (11.2)$$

$$\vec{J}^2 = \sum_i J_i J_i = (\vec{S} + \vec{L})^2 = \vec{S}^2 + \vec{L}^2 + 2\vec{L}\vec{S} \quad (11.3)$$

Die Eigenzustände $|l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle$ von $\{\vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ sind demnach keine Eigenzustände von \vec{J}^2 , da \vec{J}^2 den Term $\vec{L}\vec{S}$ enthält, der nicht mit L_z und nicht mit S_z vertauscht.

Fragen:

- 1) Was sind die Eigenzustände von \vec{J}^2
- 2) Welche Operatoren vertauschen mit \vec{J}^2 und untereinander?

Antwort zu Frage 2: Da $\{\vec{S}^2, \vec{L}^2\}$ mit allen Komponenten von \vec{S} und \vec{L} vertauschen, vertauschen sie auch mit \vec{J}^2 und mit J_z . Somit ist $\{\vec{J}^2, J_z, \vec{L}^2, \vec{S}^2\}$ ein vollständiges Funktionensystem.

Sei $|j, m_j, l, s\rangle$ die zugehörige Basis aus Eigenzuständen mit

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |j, m_j, l, s\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m_j, l, s\rangle \\ J_z |j, m_j, l, s\rangle &= \hbar m_j |j, m_j, l, s\rangle \\ \vec{L}^2 |j, m_j, l, s\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |j, m_j, l, s\rangle \\ \vec{S}^2 |j, m_j, l, s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |j, m_j, l, s\rangle \end{aligned}$$

11.1 Zusammenhang der Basen

$$|j, m_j, l, s\rangle = \sum_{m, s_z} c_{ms_z} |l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle \quad (11.4)$$

mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten c_{ms_z}

11.2 Welche Werte können j, m_j annehmen?

Für feste l, s gilt:

$$\begin{aligned} |l - s| &\leq j \leq l + s \\ -j &\leq m_j \leq j \\ m_j &= m + s_z \end{aligned}$$

Beweis und Rechnung hier für l beliebig und $s = \frac{1}{2} \Rightarrow j = l \pm \frac{1}{2}$

Methode:

$$J_{\pm} = L_{\pm} + S_{\pm} \quad (11.5)$$

Startpunkt:

$$|l, m = l\rangle \otimes \left| s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.6)$$

$$\begin{aligned} J_z |l, l\rangle \otimes \left| s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar(L_z + S_z) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \hbar\left(l + \frac{1}{2}\right) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \hbar m_j |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Somit gilt $m_j = l + \frac{1}{2}$

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + \vec{L}\vec{S} \quad (11.7)$$

Benutze

$$\begin{aligned} \vec{L}\vec{S} &= L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z \\ &= \frac{1}{4}(L_+ + L_-)(S_+ + S_-) - \frac{1}{4}(L_+ - L_-)(S_+ - S_-) + L_z S_z \\ &= \frac{1}{2}L_+ S_- + \frac{1}{2}L_- S_+ + L_z S_z \\ \Rightarrow \vec{J}^2 &= \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \vec{J}^2 |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \hbar^2 \left(l(l+1) + s(s+1) + 2l \frac{1}{2} + 0 + 0 \right) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \hbar^2 \left(l^2 + 2l + \frac{3}{4} \right) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&\Rightarrow j = l + \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Also gilt $|j = l + \frac{1}{2}, m_j = l + \frac{1}{2}, l, s = \frac{1}{2}\rangle = |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$.

Wegen $J_+ |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0$ ist $|l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ der oberste Zustand.

$$J_- |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = (L_- + S_-) |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (11.8)$$

Benutze

$$\begin{aligned}
L_{\pm} |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle \\
&= \hbar \sqrt{(l \pm m + 1)(l \mp 1)} |l, m \pm 1\rangle \\
S_+ | \downarrow \rangle &= \hbar | \uparrow \rangle \\
S_- | \uparrow \rangle &= \hbar | \downarrow \rangle \\
S_+ | \uparrow \rangle &= 0 = S_- | \downarrow \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_- |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{2l} |l, l-1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \hbar |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= c \left| j = l + \frac{1}{2}, m_j = l - \frac{1}{2}, l, s = \frac{1}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

Bestimme c:

$$1 \stackrel{!}{=} \langle j, m_j, l, s | j, m_j, l, s \rangle = \frac{\hbar^2}{|c|^2} (2l+1) \Rightarrow c = \hbar \sqrt{2l+1} \quad (11.9)$$

Nun gilt also:

$$\begin{aligned}
\left| j = l + \frac{1}{2}, m_j = l - \frac{1}{2}, l, s = \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, l-1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{2l+1}} |l, l\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

Allgemein gilt:

$$\begin{aligned} \left| j = l + \frac{1}{2}, m_j, l, s = \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| j = l - \frac{1}{2}, m_j, l, s = \frac{1}{2} \right\rangle &= -\sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Beweis. (Für $j = l + \frac{1}{2}$ durch vollständige Induktion)

Gilt also die Formel für ein festes m_j (Verankerung siehe oben), so folgt

$$\begin{aligned} J_- \left| j = l + \frac{1}{2}, m_j, l, s = \frac{1}{2} \right\rangle &= (L_- + S_-) \left(\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m = m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m = m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ &= \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left(\hbar \sqrt{(l - m_j + \frac{1}{2})(l + m_j + \frac{1}{2})} \left| l, m = m_j - \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \hbar \left| l, m = m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ &\quad + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \hbar \sqrt{(l - (m_j + \frac{1}{2}) + 1)(l + m_j + \frac{1}{2})} \left| l, m = m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \hbar \sqrt{\frac{(l + m_j + \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{3}{2})(l + m_j - \frac{1}{2})}{2l + 1}} \left| l, m = m_j - \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad + \hbar \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left(1 + l - m_j + \frac{1}{2} \right) \left| l, m = m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\stackrel{!}{=} c \left| j = l + \frac{1}{2}, m = m_j - 1, l, s \right\rangle \end{aligned}$$

Normierung:

$$\begin{aligned}
1 &\stackrel{!}{=} \left\langle j = l + \frac{1}{2}, m = m_j - 1, l, s \left| j = l + \frac{1}{2}, m = m_j - 1, l, s \right. \right\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{|c|^2(2l+1)} \left((l + m_j + \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{3}{2})(l + m_j - \frac{1}{2}) + (l + m_j + \frac{1}{2})(l - m_j + \frac{3}{2})^2 \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{|c|^2} \left(l + m_j + \frac{1}{2} \right) \left(l - m_j + \frac{3}{2} \right) \\
\Rightarrow c &= \hbar \sqrt{\left(l + m_j + \frac{1}{2} \right) \left(l - m_j + \frac{3}{2} \right)} \\
\Rightarrow \left| j = l + \frac{1}{2}, m = m_j - 1, l, s \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m_j - \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j - \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\
&\quad + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{3}{2}}{2l + 1}} \left| l, m + m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle
\end{aligned}$$

□

12 Spin

Autor: Thomas Pöhlens

12.1 Motivation

Aus

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k \quad (12.1)$$

erhält man die Bedingung, dass \vec{L}^2 die Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ mit l halbzahlig hat.

Mit dem Drehimpuls $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$ folgt, dass l ganzzahlig ist. Ein weiterer Operator mit selbem Kommutator ist also denkbar.

Experimentelle Motivation durch den Zeeman-Effekt: Bei dem Wasserstoff-Atom im B-Feld ist die m-Entartung aufgehoben. insbesondere: Aufspaltung des Grundzustandes $|n=0, l=0, m=0\rangle$

Somit ist $\{H, \vec{L}, L_z\}$ kein vollständiges System von Operatoren.

Neuer Operator \vec{S} wird postuliert (Spin oder „innerer Drehimpuls“)

12.2 Formale Einführung des Spins

damals: $|\psi\rangle = |n, l, m\rangle$

jetzt: $|\psi\rangle = |n, l, m\rangle \otimes |x_s\rangle \in X_{nlm} \otimes X_s$

neue Operatoren:

$H \rightarrow H \otimes \mathbb{1}$

$\vec{L} \rightarrow \vec{L} \otimes \mathbb{1}$

Spin: $\vec{S} \rightarrow \mathbb{1} \otimes \vec{S}$

\vec{S} operiert also nur auf X_s und es gilt: $[H, \vec{S}] = 0 = [\vec{L}, \vec{S}]$

$$\vec{S} := \sum_{i=1}^3 S_i \vec{e}_i \quad (12.2)$$

Forderung:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} S_k \quad (12.3)$$

Somit gilt

$$[S^2, S_z] = 0 \quad (12.4)$$

Jetzt haben wir einen vollständigen Satz von Operatoren $\{H, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$

Zusätzliche Forderung:

$$\vec{S}^2|x_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|x_s\rangle, \quad s \text{ halbzahlig} \quad (12.5)$$

$$\stackrel{s=\frac{1}{2}}{=} \hbar^2 \frac{3}{4}|x_s\rangle \quad (12.6)$$

$$S_z|x_s\rangle = \hbar s_z|x_s\rangle, \quad s_z = -s, \dots, s \stackrel{s=\frac{1}{2}}{=} \pm \frac{1}{2} \quad (12.7)$$

Mit $s = \frac{1}{2}$ gilt jetzt also: X_s ist somit zweidimensional

$$\left|s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\uparrow\rangle, \quad \left|s = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \quad (12.8)$$

12.3 Auf- und Absteige-Operator

Wir definieren $S_{\pm} := S_x \pm iS_y$

Somit gilt

$$S_+^\dagger = S_- \quad [S_z, S_{\pm}] = \pm \hbar s_{\pm} \quad [S_+, S_-] = 2\hbar s_z \quad (12.9)$$

Daraus folgt

$$S_z S_{\pm} |s, s_z\rangle = [S_z, S_{\pm}] |s, s_z\rangle + S_{\pm} S_z |s, s_z\rangle = \hbar(s_z \pm 1) S_{\pm} |s, s_z\rangle \quad (12.10)$$

Also gilt nun

$$S_{\pm} |s, s_z\rangle = c_{\pm} |s, s_z \pm 1\rangle \quad (12.11)$$

und somit für $s = \frac{1}{2}$

$$S_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \quad (12.12)$$

$$S_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = c_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (12.13)$$

$$S_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = c_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (12.14)$$

$$S_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0 \quad (12.15)$$

Bestimme c_+

$$\begin{aligned}
|c_+|^2 &= |c_+|^2 \langle \uparrow | \uparrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | S_- S_+ | \downarrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | (S_x - iS_y)(S_x + iS_y) | \downarrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | S_x^2 S_y^2 + i[S_x, S_y] | \downarrow \rangle \\
&= \langle \downarrow | S^2 - S_z^2 - \hbar S_z | \downarrow \rangle \\
&= \left\langle \downarrow \left| \frac{3}{4}\hbar^2 - \left(-\frac{1}{2}\hbar\right)^2 - \hbar\left(-\frac{1}{2}\hbar\right) \right| \downarrow \right\rangle \\
&= \hbar^2 \\
\Rightarrow c_+ &= \hbar
\end{aligned}$$

Analog folgt für c_- : $c_- = -\hbar$

12.4 Der Spin-Operator in Matrix-Darstellung

Zusammenfassung:

$$\begin{aligned}
S_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle, & S_+ |\uparrow\rangle &= 0 \\
S_- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle, & S_- |\downarrow\rangle &= 0 \\
S_z |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, & S_z |\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

$$S_z \rightarrow \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S_z | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S_z | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S_z | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S_z | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_+ \rightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- \rightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Mit den Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

lässt sich \vec{S} schreiben durch $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$

12.5 Teilchen und ihr Spin

$s = \frac{1}{2}$: alle Materieteilchen (Elektronen, Quarks und Leptonen)

$s = 1$: Photon, w^\pm und z^0 Bosonen

(Kraftteilchen der schwachen Wechselwirkung)

$s = 2$: Graviton (Kraftteilchen der Gravitation, noch nicht gefunden)

$s = 0$: Higgs-Bosonen (noch nicht gefunden)

$s = \frac{3}{2}$: Gravitino, Das Gravitino wird in supersymmetrischen

Theorien hervorgesagt (J. Wess, B. Zurino)

$s > 2$: gibt es wahrscheinlich nicht

sectionZeitunabhängige Störungstheorie VON M. MEYER
Wir betrachten nun den Hamilton-Operator

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{R}$$

wobei H_0 der Hamilton-Operator des ungestörten Problems ist, somit also die Eigenwerte und Eigenfunktionen bekannt sind. λH_1 ist der Störterm, welcher klein gegen H_0 ist.

Beispiel:¹

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad H_1 = \alpha x^3$$

Löse $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ durch Potenzreihenansatz:

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad \text{und} \quad |n\rangle = |n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots$$

Annahme: $|n^0\rangle$ nicht entartet:

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= (H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots) \\ &= (E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots) \end{aligned}$$

Vergleiche gleiche Ordnungen in λ :

$$\lambda^0 : H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \quad (12.16)$$

$$\lambda^1 : H_1|n^0\rangle + H_0|n^1\rangle = E_n^1|n^0\rangle + E_n^0|n^1\rangle \quad (12.17)$$

$$\lambda^2 : H_1|n^1\rangle + H_0|n^2\rangle = E_n^0|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^0\rangle \quad (12.18)$$

Die Basis des Hilbertraums \mathcal{H} wird so gewählt, dass sich folgende Normierung ergibt:

$$\langle n^0|n\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle n^0|n^1\rangle = 0 = \langle n^0|n^2\rangle = \dots$$

Nun wendet man $\langle n_0|$ als Bra-Vektor auf Gleichung 12.17 an:

$$\langle n^0|(12.17) : \langle n^0|H_1|n^0\rangle + \underbrace{\langle n^0|H_0|n^1\rangle}_{=1} = E_n^1 \underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{=1} + E_n^0 \underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{=0}$$

¹Beachte, dass die hochgestellten Zahlen Ordnungen angeben, nicht Potenzen!

$$\Leftrightarrow \boxed{E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle}$$

Dies ist der Erwartungswert des Störoperators im Zustand $|n^0\rangle$, also die **Energiekorrektur 1. Ordnung**, die im Experiment sichtbar wird.

Nun müssen noch die Eigenzustände in 1. Ordnung korrigiert werden. Dies wird dadurch erreicht, dass man wiederum die Gleichung 12.17 mit dem Zustand $\langle m^0 |$ skalar multipliziert, wobei $m \neq n$ ist:

$$\begin{aligned} \langle m^0 | (12.17) & : \quad \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle + \underbrace{\langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle}_{= \langle H_0 m^0 | n^1 \rangle = E_m^0 \langle m^0 | n^0 \rangle} \\ & = \underbrace{E_n^1 \langle m^0 | n^0 \rangle}_{=0} + E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle \\ \Rightarrow \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle & = \underbrace{(E_n^0 - E_m^0)}_{\neq 0 \text{ da Eigenwerte nicht entartet}} \langle m^0 | n^1 \rangle \\ \Leftrightarrow \langle m^0 | n^1 \rangle & = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned}$$

Also ergeben sich die korrigierten Zustände erster Ordnung zu:

$$\boxed{|n^1\rangle = \sum_l c_l |l^0\rangle = \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}}$$

Mit $\langle m^0 | n^1 \rangle = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} = c_m$, wobei $c_m \ll 1$ ist.

Nun zur Störungstheorie **2. Ordnung** (siehe Gleichung 12.18).

Analog zur 1. Ordnung wird (12.18) mit $|n^0\rangle$ skalar multipliziert:

$$\begin{aligned} \langle n^0 | (12.18) & : \quad \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle + \underbrace{\langle n^0 | H_1 | n^2 \rangle}_{=0} \\ & = \underbrace{E_n^1 \langle n^0 | n^1 \rangle}_{=0} + \underbrace{E_n^0 \langle n^0 | n^2 \rangle}_{=0} + \underbrace{E_n^2 \langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1} \\ \Rightarrow E_n^2 & = \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle c_m = \sum_{m \neq n} \langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned}$$

Also ist:

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}}$$

Nun zur 2. Korrektur der Zustände:

$$\begin{aligned}
 \langle m^0 | (12.18) & : \langle m^0 | H_1 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H_1 | n^2 \rangle \\
 & = \underbrace{E_n^1 \langle m^0 | n^1 \rangle}_{=c_m} + E_n^0 \langle m^0 | n^2 \rangle + \underbrace{E_n^2 \langle m^0 | n^0 \rangle}_{=0} \\
 \Rightarrow (E_m^0 - E_n^0) \langle m^0 | n^2 \rangle & = c_m E_n^1 - \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle \\
 \text{mit } |n^2\rangle & = \sum_l |l^0\rangle \hat{c}_l \text{ folgt weiter:} \\
 (E_m^0 - E_n^0) \hat{c}_m & = c_m E_n^1 - \sum_r \langle m^0 | H_1 | r^0 \rangle c_r \\
 \Rightarrow \hat{c}_m & = \frac{c_m E_n^1}{E_m^0 - E_n^0} + \sum_r c_r \frac{\langle m^0 | H_1 | r^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}
 \end{aligned}$$

Zusammengefasst:

$$\boxed{\hat{c}_m = -E_n^1 \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} + \sum_r \frac{\langle r^0 | H_1 | n^0 \rangle \langle m^0 | H_1 | r^0 \rangle}{(E_n^0 - E_r^0)(E_n^0 - E_m^0)}}$$

und

$$\boxed{|n^2\rangle = \sum_l \hat{c}_l |l^0\rangle}$$

12.6 Beispiel: harmonischer Oszillator mit kubischer Störung

$$\begin{aligned}
 H & = H_0 + H_1, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 = \hbar \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \\
 H_1 & = \alpha X^3, \quad \alpha > 0
 \end{aligned}$$

Energiekorrektur 1. Ordnung

$$E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle = \alpha \langle n^0 | X^3 | n^0 \rangle \quad \text{und mit } X = \frac{X_0}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger), \quad X_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

ist

$$\begin{aligned}
 X^3 & = \frac{X_0^3}{2\sqrt{2}} (a^3 + a^{\dagger 3} + a a^{\dagger 2} + a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a^2 + a a^\dagger a + a^2 a^\dagger) \\
 & = \frac{X_0^3}{2\sqrt{2}} (a + a^\dagger) (a + a^\dagger) (a + a^\dagger)
 \end{aligned}$$

mit $a|n^0\rangle = \sqrt{n}|n^0 - 1\rangle$ und $a^\dagger|n^0\rangle = \sqrt{n+1}|n^0\rangle$

$$\Rightarrow E_n^1 = 0$$

Korrektur zu Zuständen 1. Ordnung

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0|H_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}, \quad E_n^0 - E_m^0 = \hbar\omega(n - m)$$

$$\begin{aligned} \langle m^0|H_1|n^0\rangle &= \underbrace{\frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}}}_{\text{dimensionslos}} \left(\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{n-3,m} \right) \\ &+ \frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}} \left(\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{n+3,m} \right) \\ &+ \frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}} \left(3(n+1)^{\frac{3}{2}}\delta_{n+1,m} + 3n^{\frac{3}{2}}\delta_{n-1,m} \right) \end{aligned}$$

Somit ist die 1. Korrektur des Zustands gegeben durch:

$$\begin{aligned} |n^1\rangle &= \frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n^0 - 3\rangle \right) \\ &- \frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{3} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} |n^0 + 3\rangle \right) \\ &+ \frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\hbar\omega} \left(-3(n+1)^{\frac{3}{2}} |n^0 + 1\rangle + 3n^{\frac{3}{2}} |n^0 - 1\rangle \right) \end{aligned}$$

Hier ist die kleine Störung $\frac{\alpha X_0^3}{2\sqrt{2}}$, welche $\ll 1$ ist.

Energiekorrektur 2. Ordnung

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \langle n_0|H_1|n_1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n_0|H_1|m_0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= \frac{\alpha X_0^6}{8\hbar\omega} \left(\frac{1}{3}n(n-1)(n-2) - \frac{1}{3}(n+1)(n+2)(n+3) - 9(n+1)^3 + 9n^3 \right) \\ &= \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m^3\omega^3} (-30n^2 - 30n - 1) \\ \Rightarrow E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m^3\omega^3} (-30n^2 - 30n - 1) \end{aligned}$$

12.7 Entartete Störungstheorie und Stark-Effekt

Ungestörte Zustände können entartet sein, d.h.

$$H_0|n_i^0\rangle = E_n|n_i^0\rangle \quad i = 1, \dots, k$$

Wahl einer Basis $|n_r^0\rangle$, so dass

$$\langle n_r^0|H_1|n_l^0\rangle = E_n^1\delta_{rl}$$

d.h. diagonalisiere H_1 auf entartetem Unterraum. Dies ist fast immer möglich! Weil $[H_0, H_1] = 0$ auf entartetem Unterraum \rightarrow siehe Übungen.

Beispiel: Stark-Effekt

H-Atom in homogenen elektrischen Feld \vec{E} :

$$H = H_0 + H_1 \quad H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad H_1 = -e\vec{E}\vec{x} = -eE_0z$$

und

$$H_0|nlm\rangle = E_n|nlm\rangle$$

Korrektur zum Grundzustand $|1, 0, 0\rangle$

$$\begin{aligned} E_{n=1}^1 &= \langle 1, 0, 0|H_1|1, 0, 0\rangle = -eE_0\langle 1, 0, 0|z|1, 0, 0\rangle \\ &= -eE_0 \int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega R_{10}Y_{00}^* \underbrace{z}_{r \cos \vartheta} R_{10}Y_{00} \\ &= -eE_0 \int_0^\infty dr r^3 \int_{-1}^{+1} d \cos \vartheta \cos \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{00}|^2 \\ &\quad d\Omega = r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = r^2 d \cos \vartheta \end{aligned}$$

Hier ist H_1 bereits diagonalisiert und wirkt deshalb nicht auf \mathcal{H}_s .

Energiekorrektur zum 1. angeregten Zustand

1. angeregter Zustand ist 4-fach entartet:

$$|2, 0, 0\rangle \quad |2, 1, 0\rangle \quad |2, 1, \pm 1\rangle \quad (12.19)$$

Also muss die 4×4 Matrix $\langle n'l'm'|H_1|nlm\rangle = -eE_0\langle n'l'm'|z|nlm\rangle$ für die Zustände (12.19) berechnet werden. Dazu betrachtet man zunächst die

Herleitung von Auswahlregeln

a) Betrachte: $[z, L_z] = [z, X P_y - Y P_x] = 0$

$$0 = \langle nl'm' | [z, L_z] | nlm \rangle = \hbar(m - m') \langle nl'm' | z | nlm \rangle$$

$$\Rightarrow \langle nl'm' | z | nlm \rangle = \begin{cases} \neq 0 & \text{nur möglich für } m = m' \\ 0 & \text{falls } m \neq m' \end{cases}$$

b) Benutze Rekursionsrelation (Beweis im Schwabl)

$$(l - m + 1)P_{l+1}^m = (2l + 1)\xi P_l^m - (l + m)P_{l-1}^m$$

Dies kann man nun bei den Matrixeinträgen von E_2^1 verwenden:

$$\langle nl'm' | r \cos \vartheta | nlm \rangle = \int dr r^2 \cos \vartheta R_{nl'} R_{nl} \int d\Omega Y_{l'm}^* Y_{lm}$$

Nun lässt sich die Rekursionsformel verwenden unter der Berücksichtigung, dass $Y_{lm} \sim P_l^m e^{im\varphi}$ und $\xi = \cos \vartheta$ ist:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int d\Omega \xi Y_{l'm}^* Y_{lm} &\sim \int d\Omega Y_{l'm}^* (\# P_{l+1}^m e^{im\varphi} + \# P_{l+1}^m e^{im\varphi}) \quad \text{wobei } \# \text{ Konstanten bezeichnen} \\ &\sim \int d\Omega (\# \underbrace{Y_{l'm}^* Y_{l+1,m}}_{\sim \delta_{l'l+1}} + \# \underbrace{Y_{l'm}^* Y_{l-1,m}}_{\sim \delta_{l'l-1}}) \end{aligned}$$

$$\text{Merke: } \boxed{z Y_{lm} \sim Y_{l+1,m} + Y_{l-1,m}}$$

$\Rightarrow \langle nl' | z | nlm \rangle \neq 0$ nur möglich für $l' = l \pm 1$. Die 4×4 Matrix vereinfacht sich also zu:

$$\begin{pmatrix} \langle 200 | H_1 | 200 \rangle & \langle 200 | H_1 | 210 \rangle & \cdots \\ \vdots & \ddots & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & x_1 & 0 & 0 \\ x_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Somit ist:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \langle 200|H_1|210\rangle \quad \text{und} \quad x_2 = \langle 210|H_1|200\rangle \\
 \Rightarrow x_1 &= \int_0^\infty dr r^3 R_{20} R_{21} \int d\Omega \cos\vartheta Y_{10}^* Y_{10} \\
 \text{mit } R_{20} &= 2 \left(\frac{Z}{2a}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right) \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right), \quad Y_{00} = \frac{1}{4\pi} \\
 \text{und } R_{21} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a} \exp\left(-\frac{Zr}{a}\right), \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta \\
 \Rightarrow x_1 &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^3 \frac{Z}{a} \int_0^\infty dr r^4 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{a}\right) \frac{2\pi\sqrt{3}}{4\pi} \underbrace{\int_{-1}^{+1} d\xi \xi^2}_{\left[\frac{1}{3}\xi^3\right]_{-1}^{+1} = \frac{2}{3}} \\
 &= \frac{21}{38} \left(\frac{Z}{a}\right)^4 \int_0^\infty dr r^4 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{a}\right)
 \end{aligned}$$

Benutze Gamma-Funktion $\Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n e^{-x} = n!$ und $Z = 1$:

$$x_1 = \underbrace{\dots}_{\text{zur Übung}} = -3a = x_2$$

$$\langle nl'm|H_1|nlm\rangle = -eE_0 \begin{pmatrix} 0 & -3a & 0 & 0 \\ -3a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte sind $3a, -3a, 0, 0$ und die Eigenvektoren:

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Zu beachten ist, dass die Eigenvektoren in der Basis $|200\rangle$ und $|210\rangle$ geschrieben sind.

Somit spalten die Energieniveaus auf, nur der $|21 \pm 1\rangle$ Zustand bleibt 2-fach entartet. Für die anderen beiden Niveaus ist die Energie also:

$$E_2 = -\frac{R_y}{2^2} - eE_0(\pm 3a)$$

13 Mehrteilchensysteme

Bisher: Quantenmechanik eines Teilchens im Potential V .

Jetzt: Quantenmechanik vieler identischer Teilchen im Potential V .

Zum Beispiel: He-Atom, also 2 nicht wechselwirkende Elektronen im Potential eines Kerns.

Identische Teilchen: Teilchen mit gleichen Quantenzahlen (nicht notwendigerweise im gleichem Zustand), wie z.B. gleiche Masse m , gleichen Spin s oder gleiche Ladung e .

N-freie Teilchen:

$$\begin{aligned} \mathfrak{H} &= \otimes \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathfrak{H}_n \\ | \rangle &= |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \dots \otimes |n_N\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \in \mathfrak{H} \\ |n_i\rangle &\stackrel{z.B.}{=} |n, l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle \end{aligned}$$

Hamilton Operator auf \mathfrak{H} :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i}{2m} + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$$

Klassische Physik: identische Teilchen sind unterscheidbar, z.B. durch Angabe von Ort und Impuls (\vec{X}_i, \vec{P}_i)

Quantenmechanik: identische Teilchen sind ununterscheidbar, z.B. bei der Streuung.

Mathematisch:

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_N\rangle = e^{i\alpha} |n_1, \dots, n_j, \dots, n_i, \dots, n_N\rangle$$

Definition: Permutationsoperator P_{ij} ;

$$\begin{aligned} P_{ij} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_N\rangle &= e^{i\alpha} |n_1, \dots, n_j, \dots, n_i, \dots, n_N\rangle \\ P_{ij}^2 &= \mathbf{1} \quad \Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1 \quad \Rightarrow P = P^{-1} = P^\dagger \end{aligned}$$

ununterscheidbare Teilchen: $\langle A \rangle$ soll invariant unter einer Permutation sein, wenn A eine physikalische Observable ist.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \langle \Psi | P^\dagger A P | \Psi \rangle, P | \Psi \rangle = | \Psi' \rangle \\ \Rightarrow [A, P] &= 0 \\ \Rightarrow [H, P] &= 0 \end{aligned}$$

Spin-Statistik-Theorem (folgt aus der relativistischen Quantenmechanik):

$e^{i\alpha} = +1$: Zustände sind total symmetrisch unter $P \rightarrow$ Bosonen \Rightarrow ganzzahligen Spin $s = 0, 1, \dots$ Zum Beispiel: Photonen, W^\pm, Z^0 , Gluonen.

$e^{i\alpha} = -1$: Zustände sind total antisymmetrisch unter $P \rightarrow$ Fermionen \Rightarrow halbzahligem Spin $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ Zum Beispiel: Quarks, Leptonen.

Pauliprinzip(1925, Hamburg, 1945 Nobelpreis):

Die Wellenfunktion eines Systems von Elektronen ist total antisymmetrisch.
 \Rightarrow Jeder 1-Teilchen-Zustand kann höchstens von einem Elektron besetzt sein.
 \Rightarrow 2 Fermionen mit gleichem Spin (s_z) können nicht an dem selben Ort sein.
 \Rightarrow 2 Fermionen am selben Ort müssen verschiedenen Spins s_z haben.
 \Rightarrow Erklärung des Periodensystems.

N nicht wechselwirkende Teilchen:

$$H = \sum_{i=1}^N H_i, \quad H_i = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{x}_i)$$

$$\Rightarrow [H_i, H_j] = 0, \quad \text{da } [\vec{p}_i, \vec{p}_j] = 0 = [\vec{x}_i, \vec{x}_j], [\vec{p}_i, \vec{x}_j] = 0$$

Eigenfunktionen: $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle$, mit den Einteilchenzuständen $H_i |n_i\rangle = E_i |n_i\rangle$

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathfrak{H}_N$$

$$H = H_1 \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \dots \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{1} + \dots$$

$$H |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle, \quad \text{mit } E = \sum_{i=1}^N E_i$$

Berücksichtigung des Spin-Statistik-Theorems:

Zunächst für 2 Bosonen:

$$|n_1, n_2\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{|n_1\rangle}_{\in \mathfrak{H}_1} \otimes \underbrace{|n_2\rangle}_{\in \mathfrak{H}_2} + \underbrace{|n_2\rangle}_{\in \mathfrak{H}_1} \otimes \underbrace{|n_1\rangle}_{\in \mathfrak{H}_2} \right)$$

für den Permutationsoperator gilt: $[P, H] = 0$

$$P_{12} |n_1, n_2\rangle_B = (H_1 + H_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (E_1 |n_1\rangle |n_2\rangle + E_2 |n_2\rangle |n_1\rangle + E_2 |n_1\rangle |n_2\rangle + E_1 |n_2\rangle |n_1\rangle)$$

$$= E_1 \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle) + E_2 \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle)$$

$$= (E_1 + E_2) |n_1, n_2\rangle_B = E |n_1, n_2\rangle_B, \quad E = E_1 + E_2$$

2 Fermionen:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle - |n_2\rangle |n_1\rangle)$$

$$P_{12} |n_1, n_2\rangle = -|n_1, n_2\rangle = |n_2, n_1\rangle$$

N-Teilchen:

Bosonen:

$$|n_1, \dots, n_N\rangle = c_B \sum_{\text{alle Permutationen}} P(|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle)$$

Fermionen:

$$|n_1, \dots, n_N\rangle = c_F \sum_{\text{alle Permutationen}} (-1)^P P(|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle)$$

Normierung:

$$\langle \quad | \quad \rangle = 1 \Rightarrow |c|^2 \times \text{Anzahl der Terme in der Summe} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\Rightarrow c_f = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

$$c_B = \frac{\sqrt{N_1! N_2! \cdot \dots \cdot N_N!}}{\sqrt{N!}}, \quad N_i = \text{Anzahl, wie oft der Zustand } |n_i\rangle \text{ in der Summe auftritt.}$$

14 Heliumatom

He: 2fach positiv geladener Kern (=2 Protonen) + 2 Elektronen

$$H = H_1 + H_2 + V$$

$$H_1 = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{x}_1|} \quad H_2 = \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{x}_2|}$$

$$V = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

”Lösung” in 3 Schritten:

1. $V=0$ und kein Spin
2. $V=0$ und Spin
3. $V \neq 0$, Störungstheorie

Schritt 1: $V=0$, kein Spin.

1-Teilchenzustände: $|n, l, m\rangle$, $E_n = -\frac{Z^2 R_y}{n^2}$

Produktzustand:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1, l_1, m_1\rangle \otimes |n_2, l_2, m_2\rangle - |n_2, l_2, m_2\rangle \otimes |n_1, l_1, m_1\rangle)$$

$$H|\Psi\rangle = (H_1 + H_2)|\Psi\rangle = (E_{n_1} + E_{n_2})|\Psi\rangle$$

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} = -4R_y \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right)$$

(n_1, n_2)	E/R_y
(1,1)	-8
(1,2)	-5
.	.
(1,∞)	-4
.	.
(2,2)	-2

Energie-Spektrum:

Schritt 2: Pauli-Prinzip

$$|s, s_{1,z}\rangle \otimes |s, s_{2,z}\rangle = \begin{cases} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{cases}, \quad |\uparrow\rangle \equiv \left| s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\downarrow\rangle \equiv \left| s = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Vollständiges System von Operatoren:

$$\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_{1,z}, \vec{S}_1^2, \vec{S}_{2,z}\} \\ \{\vec{S}^2, \vec{S}_z, \vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2\} \quad \vec{S} := \vec{S}_1 + \vec{S}_2 : \quad \text{Der Gesamtspin}$$

Eigenzustände: $|s, s_z, s_1, s_2\rangle$, mit $|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2 \Rightarrow s = 0, 1$

$$|s, s_z, s_1, s_2\rangle, \quad \text{mit } |s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2 \Rightarrow s = 0, 1$$

(Bisher: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$)

$$\text{Singulett } \left\{ \left| s = 0, s_z = 0, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \right. \\ \text{Triplet } \left\{ \begin{aligned} \left| s = 1, s_z = 0, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \\ \left| s = 1, s_z = 1, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \right\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ \left| s = 1, s_z = -1, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \right\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{aligned} \right.$$

Triplet: Symmetrische

Singulett: Antisymmetrisch

⇒ 2 Verschiedene Formen des Heliums

Parahelium:

Ortswellenfunktion symmetrisch, Spinwellenfunktion antisymmetrisch

$$|\Psi_{para}\rangle = c_p (|n_1, l_1, m_1\rangle \otimes |n_2, l_2, m_2\rangle + |n_2, l_2, m_2\rangle \otimes |n_1, l_1, m_1\rangle) \otimes |0, 0\rangle$$

Mit $|0, 0\rangle \equiv |s = 0, s_z = 0, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2}\rangle$

Grundzustand:

$$|\Psi\rangle = |1, 0, 0\rangle |1, 0, 0\rangle \otimes |0, 0\rangle$$

1. angeregter Zustand: ($n_1 = 1, n_2 = 1$) 4-fach entartet

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0, 0\rangle \otimes |2, l, m\rangle + |2, l, m\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle) \otimes |0, 0\rangle$$

Orthohelium:

Ortswellenfunktion antisymmetrisch, Spinwellenfunktion symmetrisch

niedrigster Energiezustand: $n_1 = 1, n_2 = 2$, Entartung = $(1+3)3 = 12$ fach.

$$|\Psi_{ort}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0, 0\rangle \otimes |2, l, m\rangle - |2, l, m\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle) \otimes |1, (\pm 1, 0)\rangle$$

3. Schritt $V \neq 0$, aber klein.

1. Ordnung Energiekorrektur im Parahelium Grundzustand:

$$E_{11}^{(1)} = \langle 1, 00 | \langle 1, 00 | \langle 0, 0 | V | 1, 00 \rangle | 1, 00 \rangle | 0, 0 \rangle$$

$$V = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

$$\hookrightarrow e^2 \int d^3\vec{x}_1 \int d^3\vec{x}_2 \frac{|\Psi_{100}(\vec{x}_1)|^2 |\Psi_{100}(\vec{x}_2)|^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

$$\text{Mit } \Psi_{100} = R_{10} Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad a \equiv \frac{\hbar}{me^2}$$

$$E_{11}^{(1)} = \frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2Zr_1}{a}} \int_0^\infty dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2Zr_2}{a}} \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

$$= \dots = \frac{5}{8} e^2 \frac{Z}{a} \stackrel{z=2}{\approx} 2,5 R_y$$

$$E_{11} = -8R_y + 2,5R_y = -5,5R_y \quad (\text{experimentell: } E_{11} = -5,8R_y)$$

15 Heisenberg- und Dirac-Bild

In der bisherigen Betrachtung lautete das Problem die Schrödinger-Gleichung (SGL) zu lösen. Bisher konnte man die Zeitanhängigkeit immer einfach abspazieren. Wir betrachten nun Herangehensweisen für Fälle, in denen das nicht so einfach geht. Der Hamilton-Operator ist also nun zeitabhängig.

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle$$

Die Frage lautet nun: Unter welchen (unitären) Transformationen ist der Erwartungswert des Hamilton-Operators invariant:

$$\begin{aligned} \langle\Psi|H|\Psi\rangle & \quad \text{invariant} \\ |\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi'(t)\rangle & = U(t)|\Psi(t)\rangle \\ UU^\dagger = \mathbf{1} & \Rightarrow \langle\Psi'|\Psi'\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Damit ist dann:

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle \text{ invariant wenn } H \rightarrow H' = U(t)H(t)U^\dagger(t)$$

15.1 Heisenberg-Bild

Definition

Definition 2. Heisenberg-Bild: Wähle $|\Psi'\rangle$ so, dass diese zeitunabhängig sind.

$$|\Psi_s(t)\rangle = U^\dagger(t)H(t_0)|\Psi_H(t_0)\rangle$$

Die SGL im Heisenberg-Bild ist:

$$\begin{aligned} i\hbar(\partial_t U^\dagger(t))|\Psi_H\rangle & = H_S U^\dagger|\Psi_H\rangle \\ i\hbar\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} & = H_S U^\dagger \end{aligned}$$

Die Lösung für zeitunabhängige H_S lautet:

$$\begin{aligned} U^\dagger & = c \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}H_S \cdot t} \\ U(t = t_0) = 1 & \Rightarrow U^\dagger = e^{-\frac{i}{\hbar}H_S \cdot (t-t_0)} \end{aligned}$$

$$|\Psi_H\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_S \cdot (t-t_0)}|\Psi_S\rangle$$

Neben dem Hamilton-Operator muss man nun auch die Zeitabhängigkeit der Operatoren betrachten. Um die Rechnungen etwas zu vereinfachen, wählen wir $t_0 = 0$:

$$\begin{aligned}
 H_H &= e^{\frac{i}{\hbar}Hst} H_S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} = e^{\frac{i}{\hbar}Hst} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} H_S = H_S = H \\
 O_H(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}Hst} O_S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \\
 \frac{dO_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar} H_S e^{\frac{i}{\hbar}Hst} O_S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}Hst} O_S H_S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} + e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \frac{dO_S}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \\
 &= \frac{i}{\hbar} [H_S \underbrace{U O_S U^\dagger}_{O_H} - \underbrace{U O_S U^\dagger}_{O_H} H_S] + U \frac{dO_S}{dt} U^\dagger \\
 &= \frac{i}{\hbar} [H, O_H] + \frac{\partial O_H}{\partial t}
 \end{aligned}$$

Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild

$$\boxed{\frac{dO_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, O_H] + \frac{\partial O_H}{\partial t}}$$

Im **Heisenberg-Bild** gilt:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial |\Psi_H\rangle}{\partial t} &= 0 \text{ Die Zustände sind zeitunabhängig} \\ \frac{\partial O_H}{\partial t} &\neq 0 \text{ Die Operatoren aber nicht} \end{aligned}}$$

Erhaltungssätze

•

$$\frac{dH}{dt} = 0 \leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

Aus der Invarianz unter Zeittranslationen folgt die Erhaltung der Energie.

•

$$\frac{d\vec{p}_H}{dt} = 0 \leftrightarrow [H, \vec{p}_H] = 0, \frac{\partial \vec{p}_H}{\partial t} = 0$$

Aus der Translationsinvarianz folgt die Erhaltung des Impulses.

•

$$\frac{\partial \vec{L}_H}{\partial t} = 0 \leftrightarrow [H, \vec{L}_H] = 0, \frac{\vec{L}_H}{\partial t} = 0$$

Aus der Invarianz unter Rotationen folgt die Erhaltung des Drehimpulses.

15.2 Dirac-Bild

Das Dirac-Bild wird auch häufig Wechselwirkungs-Bild genannt. Im Dirac-Bild kann man die Zeitabhängigkeit abspalten:

$$H = H_0 + V(t)$$

Hier sind die Zustände nun nicht mehr zeitunabhängig. Die Zustände und Operatoren im Dirac-Bild erhalten einen Index I (wie "Interaction")

$$\begin{aligned} |\Psi_I\rangle &:= U|\Psi_S\rangle \\ O_I &= UO_SU^\dagger \\ U &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \end{aligned}$$

Die SGL lautet dann im Dirac-Bild:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi_I\rangle &= i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}|\Psi_S\rangle + i\hbar\frac{\partial|\Psi_S\rangle}{\partial t} \\ &= -H_0|\Psi_I\rangle + UH|\Psi_S\rangle \\ &= -H_0|\Psi_I\rangle + UHU^\dagger U|\Psi_S\rangle \\ &= (-H_0 + U(H_0 + V)U^\dagger)|\Psi_I\rangle \\ &= UVU^\dagger|\Psi_I\rangle \end{aligned}$$

Damit hat man dann im Ww-Bild:

$$\boxed{i\hbar\partial_t|\Psi_I\rangle = H_I|\Psi_I\rangle}$$

$$\frac{dO_I}{dt} = \frac{i}{\hbar}H_0O_I - \frac{i}{\hbar}O_IH_0 + U\underbrace{\frac{dO_S}{dt}}_{:=\frac{\partial O_I}{\partial t}}U^\dagger$$

$$\boxed{\frac{dO_I}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H_0, O_I] + \frac{\partial O_I}{\partial t}}$$

16 Zeitabhängige Störungstheorie

Der Ausgangspunkt ist:

$$H = H_0 + V(t)$$

- Das Problem für H_0 ist bereits gelöst:

$$i\hbar\partial_t|\Psi_0\rangle = H_0|\Psi_0\rangle$$

$|\Psi_0\rangle$ bekannt

- $V(t)$ klein gegen H_0

-

$$V = \begin{cases} 0 & t \leq t_0 \\ V(t) & t > t_0 \end{cases}$$

Die Eigenzustände $|\Psi\rangle$ zu H sind allerdings unbekannt. Idee: zur näherungsweisen Lösung:

1. Abseparation der Zeitentwicklung von H_0 durch Übergang ins Dirac-Bild
2. Iterative Lösung für kleine V

zu 1 Dirac-Bild:

$$\begin{aligned} |\Psi_I\rangle &= U|\Psi_S\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\Psi_S\rangle \\ U &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \\ i\hbar\partial_t|\Psi_I\rangle &= V_I|\Psi_I\rangle \\ V_I &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}V(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \end{aligned}$$

Eine erste "Lösung" ist:

$$|\Psi_I\rangle = |\Psi_I(t=t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\Psi_I(t')\rangle$$

Das ist allerdings noch keine echte Lösung, da man das unbekannte $|\Psi_I\rangle$ durch das immer noch unbekannte $|\Psi_i\rangle$ ausgedrückt hat.

Zu 2 Lösung durch Iteration: Wir nehmen das Ergebnis aus 1 und entwickeln

in der Zeit:

$$\begin{aligned}
|\Psi_I(t)\rangle &= |\Psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \left[|\Psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t'') |\Psi_I(t'')\rangle \right] \\
&= |\Psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\Psi_I(t_0)\rangle \\
&\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') |\Psi_I(t_0)\rangle \\
&\quad + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt''' V_I(t') V_I(t'') V_I(t''') |\Psi_I(t_0)\rangle \\
&\quad + \dots
\end{aligned}$$

Um zu einem Ergebnis zu kommen, muss man diese Reihenentwicklung irgendwann abbrechen. Wir berechnen nur bis zur ersten Ordnung. Die Zustände waren bisher:

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_n c_n(t) |n\rangle \\
\langle\Psi|\Psi\rangle &= 1 \rightarrow \sum_n |c_n(t)|^2 = 1
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit das System im Zustand $|m\rangle$ zu finden ist:

$$P_m = |c_m|^2 = |\langle m|\Psi\rangle|^2$$

Nun diskutieren wir die Zeitentwicklung über die oben angegebene Näherung gegeben haben und fragen nach der Wahrscheinlichkeit das System in einem bestimmten Schrödinger-Zustand zu finden:

$$\begin{aligned}
t < t_0 : & \text{ System im Eigenzustand von } H_0 \\
|m_s(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} |m_s\rangle \\
t > t_0 : |\Psi_i(t)\rangle &= \underbrace{|m_I(t_0)\rangle}_{|m_s\rangle} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |m_I(t_0)\rangle + \dots
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit das System zur Zeit $t > t_0$ im Zustand $|n_S(t)\rangle$ zu finden ist dann:

$$\begin{aligned}
|n_S(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} |n(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} |n(t_0)\rangle \\
P_n &= |\langle n_S(t) | \Psi_S(t) \rangle|^2 \\
&= |\langle n_I(t_0) | \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} | \Psi_S(t) \rangle}_{| \Psi_I(t) \rangle} |^2
\end{aligned}$$

Wir nehmen an, dass der Startzustand $|n\rangle$ und der Endzustand $|m\rangle$ verschieden sind:

$$\begin{aligned}\langle n(t_0)|\Psi_I(t)\rangle &= \underbrace{\langle n(t_0)|m_S(t_0)\rangle}_{=0} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n_S(t_0)|V_I(t')|m(t_0)\rangle + \dots \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n_S|e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} V_S(t') e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t'}|m\rangle + \dots \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n^0 - E_m^0)t'} \langle n_S|V(t')|m_S\rangle + \dots\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit P_{nm} das System zur Zeit t im Zustand $|n\rangle$ zu finden, wenn das System zum Zeitpunkt $t = t_0$ im Zustand $|m\rangle$ gewesen ist, ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}P_{nm} &= \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \langle n|V(t')|m\rangle \right|^2 \\ \omega_{nm} &= \frac{E_n^0 - E_m^0}{\hbar}\end{aligned}$$

Die verweilwahrscheinlichkeit im Zustand $|m\rangle$ ist dann:

$$P_n := 1 - \sum_{n \neq m} P_{nm}$$

Als Beispiel nun der Spezialfall einer konstanten Störung, die zum Zeitpunkt $t = t_0$ eingeschaltet wird.

$$\begin{aligned}V(t) &= V_0 \Theta(t - t_0) \\ P_{nm} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \left(\int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \right) \langle n|V|m\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{nm}t} - 1}{i\omega_{nm}} \langle n|V_0|m\rangle \right|^2\end{aligned}$$

mit der Identität: $|e^{ix} - 1| = 4 \sin^2 \frac{x}{2}$ folgt dann:

$$P_{nm} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\sin \frac{\omega_{nm}t}{2}}{\frac{\omega_{nm}}{2}} \right)^2 |\langle n|V_0|m\rangle|^2$$

Es sei hier bemerkt, dass V_0 ein beliebig komplizierter Operator sein kann, der nicht von der Zeit abhängt (Bsp.: das \vec{E} -Feld). Der bisherige Ausdruck

lässt sich weiter "vereinfachen". Wir schauen zunächst Darstellungen der Dirac'schen Delta-Distribution an:

$$\delta_t(\alpha) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = \begin{cases} \leq \frac{1}{\pi \alpha^2 t} & \alpha \neq 0 \\ = \frac{t}{\pi} & \alpha = 0 \end{cases}$$

Im Grenzwert $t \rightarrow \infty$ geht die Funktion $\delta_t(\alpha)$ in die Delta-Distribution über:

$$t \rightarrow \infty : \quad \delta_t(\alpha) \rightarrow \delta(\alpha)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \delta(\alpha) = 1 \quad \delta(c \cdot \alpha) = \frac{1}{|c|} \delta(\alpha)$$

Damit kann man dann den Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit umschreiben in:

$$P_{nm} = \frac{\pi t}{\hbar^2} \delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right) |\langle n|V|m\rangle|^2$$

Damit erhält man einen sehr berühmten Ausdruck: **Fermi's goldene Regel:**

$$\boxed{P_{nm} = \frac{2\pi t}{\hbar^2} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m\rangle|^2}$$

17 Streutheorie

Von Ole Niekerken

Anfangszustand:

$$\Psi_0(\vec{x}, t_0) = (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\vec{k}\vec{x}} a(\vec{k}) \stackrel{\text{max}(a(\vec{k})=k_0)}{\approx} e^{i\vec{k}_0\vec{x}}$$

o.B.d.A sei $\vec{k}_0 = k_0\vec{e}_z$ dann ist:

$$\Psi_0(\vec{x}, t_0) \approx e^{ik_0z} \quad (a)$$

$\Psi_0(\vec{x}, t_0)$ erfüllt die freie Schrödingergleichung.

Gesucht: Endzustand, weit weg vom Streuzentrum.

Annahmen:

- i) $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$
- ii) $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$
- iii) $V(r) < r^{-1}$ ab einem $r > R_0 \in \mathbb{R}$

Lösung der freien Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten:

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}}_{\frac{\vec{p}^2}{2m} \text{ in Kugelkoordinaten}} + V(r) - E \right] \Psi = 0$$

Lösung für $r \rightarrow \infty$. Also $V(r) = 0, \frac{1}{r^2} = 0$ ist:

$$\Psi_S = \frac{e^{-ik_0r}}{r} f(\Theta, \varphi) \text{ für } E = \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2.$$

$$\text{Da } V = V(r) \Rightarrow f(\Theta, \varphi) = f(\theta)$$

Um die ein- und auslaufende Welle in gleicher Basis zu beschreiben, schreiben auch die einlaufende Welle in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= e^{ik_0z} = e^{ikz} = e^{ikr\cos(\Theta)} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(k, r) Y_{l,m}(\Theta, \varphi) \\ &\stackrel{\text{keine } \varphi \text{ Abhängigkeit}}{=} \sum_{l=0}^{\infty} c_l(k, r) Y_{l,0}(\Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l(k, r) P_l(\cos(\Theta)) \quad (*) \end{aligned}$$

Orthogonalität: $\int_{-1}^1 d\zeta P_l(\zeta)P_{l'}(\zeta) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \Rightarrow$

$$\int_{-1}^1 d\zeta P_{l'}(*) = \int_{-1}^1 d\zeta P_{l'}e^{ikr\zeta} = \sum_l c_l \int_{-1}^1 P_{l'}P_l = \sum_l c_l \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

$$c_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 d\zeta P_l e^{ikr\zeta} = (2l+1)i^l j_l(kr)$$

Mit den sphärischen Besselfunktionen:

$$j_l(x) = (-i)^l \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\zeta P_l(\zeta) e^{ix\zeta} = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin(x)}{x}$$

Welche wie sich nachrechnen lässt Lösungen folgender DGL sind:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2} + 1 \right) j_l(x) = 0$$

Die zweiten Lösungen der DGL(homogene DGL 2.Ordnung) sind die Neumannfunktionen:

$$\eta_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos(x)}{x}$$

Verhalten für $x \rightarrow \infty$:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} j_l(x) \rightarrow (-x)^l x^{-l} \frac{d^l \sin(x)}{dx^l} \frac{1}{x} + O(x^{-2}) = \frac{(-1)^l}{x} \begin{cases} \sin(x), & l=0 \\ \cos(x) = -\sin(x - \frac{\pi}{2}) & l=1 \\ -\sin(x) = \sin(x - \pi) & l=2 \\ -\cos(x) = -\sin(x - \frac{3\pi}{2}) & l=3 \end{cases}$$

$$= \frac{1}{x} \sin(x - \frac{l\pi}{2})$$

$$\Rightarrow e^{ikz} = \sum_l i^l j_l(kr) P_l(\cos\Theta) (2l+1)$$

$$\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos\Theta) \frac{1}{2ikr} \left(\underbrace{e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})}}_{\text{auslaufende Welle}} - \underbrace{e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})}}_{\text{einlaufende Welle}} \right) \quad (IV)$$

Gesamtwellenfunktion:

$$e^{ikr} + f(\Theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l i^l (2l+1) \frac{P_l}{2ikr} \left(S_l(k) e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \quad (III)$$

$S_l = 1 + \text{Betrag der gestreuten Welle}$, die Eigenwerte der S-Matrix.

elastische Streuung: Also $j_r = j_r^{ein} + j_r^{aus}$, mit $j_r = \Psi^* \partial_r \Psi - \Psi \partial_r \Psi^*$

$$\begin{aligned}
 j_r &= \left| S_l e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right|^2, \text{ da} \\
 \Psi^* \partial_r \Psi &\sim \left(S_l e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} + e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \left(S_l^* e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \\
 &= |S_l|^2 + S_l e^{2i(kr - \frac{l\pi}{2})} + S_l^* e^{-2i(kr - \frac{l\pi}{2})} - \Psi \partial_r \Psi^* \\
 &\sim \left(-S_l^* e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \left(S_l e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \\
 &= |S_l|^2 + S_l e^{2i(kr - \frac{l\pi}{2})} - S_l^* e^{-2i(kr - \frac{l\pi}{2})} - 1 \\
 &\Rightarrow \\
 j_r &= 2(|S_l|^2 - 1) \Rightarrow |S_l|^2 = 1 \\
 &\Rightarrow S_l = e^{2i\delta_l} \equiv \text{reiner Phasenfaktor} \quad (I) \\
 f(\Theta) &= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\Theta) \quad (II)
 \end{aligned}$$

Einsetzen von (IV), (II) und (III) ergibt die Partialwellen Amplitude:

$$e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) = f_l$$

Gemessen werden der differentielle und der totale Wirkungsquerschnitt, diese sind wie folgt definiert:

differentieller Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN(\Omega)}{N_{ein} d\Omega}$$

Wobei: N_{ein} = Anzahl der einfallenden Teilchen und $dN(\Omega)$ = Zahl der ins Winkelelement $d\Omega$ um Ω gestreuten Teilchen.
totaler Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma := \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

$$\begin{aligned}
 N_{ein} &= \int dt |\vec{j}_{ein}| \\
 \vec{j}_{ein} &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi_{ein}^* \vec{\nabla} \Psi_{ein} - \Psi_{ein} \vec{\nabla} \Psi_{ein}^* \right)
 \end{aligned}$$

Durch einsetzen von Gleichung (a) ($\Psi_{ein} = e^{ikz}$) ergibt:

$$\begin{aligned}
 \vec{j}_{ein} &= \frac{\hbar}{m} k \vec{e}_z \Rightarrow \\
 N_{ein} &= \int_0^T dt \frac{\hbar}{m} k = \frac{\hbar k T}{m}
 \end{aligned}$$

Mit $\Psi_{aus} = f(\Theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$ folgt

$$\vec{j}_{aus} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi_{aus}^* \vec{\nabla} \Psi_{aus} - \Psi_{aus} \vec{\nabla} \Psi_{aus}^* \right)$$

$$\partial_r \Psi_{aus} = (ik - r^{-1}) \Psi_{aus} \Rightarrow$$

$$j_{r,aus} = \frac{\hbar}{2mi} |\Psi_{aus}|^2 ((ik - r^{-1}) - (-ik - r^{-1})) = \frac{\hbar}{2m} |\Psi_{aus}|^2 2k = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2} \Rightarrow$$

$$dN(\Omega) = \int_0^T dt \frac{\hbar k}{m} |f|^2 d\Omega = \frac{\hbar k T}{m} |f|^2 d\Omega \Rightarrow$$

$$\frac{dN(\Omega)}{N_{ein} d\Omega} = \frac{\hbar k T}{m} |f|^2 \frac{d\Omega}{d\Omega} \frac{m}{\hbar k T} = |f|^2 \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2, \quad \sigma = \int |f|^2 d\Omega}$$

Für $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ war:

$$f(\Theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(\delta_l) e^{i\delta_l(k)} P_l(\cos(\Theta))$$

$$|f|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \sin(\delta_l) \sin(\delta_{l'}) e^{i\delta_l(k)} e^{i\delta_{l'}(k)} P_l(\cos(\Theta)) P_{l'}(\cos(\Theta))$$

$$\boxed{\sigma = \int |f|^2 d\Omega = \frac{1}{k^2} 4\pi \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l)}$$

Wobei die Orthogonalität der Legendre-Polynome benutzt wurde: $\int d\Omega P_l P_{l'} = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$

Optisches Theorem:

$$Im(f) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l) P_l(\cos(\Theta))$$

$$P_l(\cos(0)) = 1 \Rightarrow$$

$$Im(f(\Theta=0)) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \Rightarrow$$

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi}{k} Im(f(\Theta))}$$

Zusammenhang von f und dem Potential V:

$$SG: \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi = E \Psi \Leftrightarrow \underbrace{(\Delta + k^2)}_{\text{Helmholtzoperator}} \Psi = \frac{2mV}{\hbar^2} \Psi, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Green'sche Funktion:

$$(\Delta_{\vec{x}} + k^2) G(\vec{x} - \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi = \Psi_{hom} + \int d\vec{x}' G(\vec{x} - \vec{x}') \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}') \Psi(\vec{x}')}$$

Mit: $(\Delta_{\vec{x}} + k^2) \Psi_{hom} = 0$ ist der Beweis leicht einzusehen:

$$(\Delta_{\vec{x}} + k^2) \Psi = \underbrace{(\Delta_{\vec{x}} + k^2) \Psi_{hom}}_{=0} + \int d^3 \vec{x}' \underbrace{[(\Delta_{\vec{x}} + k^2) G(\vec{x} - \vec{x}')]_{\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}') \Psi(\vec{x}')$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} V \vec{x} \Psi \vec{x}$$

Man findet (hier ohne Rechnung): $G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$
einsetzen liefert:

$$\Psi = \Psi_{hom} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \vec{x}' \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \Psi(\vec{x}')$$

Annahme: $V \neq 0$ nur nahe am Streuzentrum

Berechne dann $\Psi(\vec{x})$ für $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \sqrt{(\vec{x} - \vec{x}')^2} = \sqrt{\vec{x}^2 + \vec{x}'^2 - 2\vec{x}\vec{x}'} = |\vec{x}| \sqrt{1 + \frac{\vec{x}'^2}{\vec{x}^2} - \frac{2\vec{x}\vec{x}'}{\vec{x}^2}}$$

$$|\vec{x}| \left(1 - \frac{\vec{x}\vec{x}'}{\vec{x}^2} + \dots \right)$$

$$\hookrightarrow \Psi = \Psi_{hom} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3 \vec{x}' \frac{e^{ik|\vec{x}|} e^{-ik\frac{\vec{x}\vec{x}'}{|\vec{x}|}}}{|\vec{x}|} V(\vec{x}') \Psi(\vec{x}')$$

$$(\Delta_{\vec{x}} + k^2) \Psi_{hom} = 0 \Rightarrow \Psi_{hom} = e^{ikz} \Rightarrow$$

$$\Psi = e^{ikz} + \frac{e^{ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} f(\Theta, \phi), f = -\frac{m}{2\pi\hbar} \int d^3 \vec{x}' e^{ik\frac{\vec{x}\vec{x}'}{|\vec{x}|}} V(\vec{x}') \Psi(\vec{x}')$$

Born'sche Reihe: Durch iteratives Einsetzen von $\Psi \Rightarrow$ folgt f als Potenzreihe in $V(\vec{x})$:

$$f = \sum_n \left(\int d^3 \vec{x}' V(\vec{x}') g(\vec{x}') \right)$$

Born'sche Näherung: Abbrechen nach der 1. Ordnung:

$$f \approx \frac{m}{2\pi\hbar} \int d^3 \vec{x}' e^{-ik\frac{\vec{x}\vec{x}'}{|\vec{x}|}} V(\vec{x}') e^{ikz'}$$