

Theoretische Physik II **Inhalt** 03.04.—12.07.2012

Die Homepage des Kurses ist <http://www.physik.uni-bielefeld.de/~yorks/qm12>

0.	Orga / Motivation	1
1.	Wellenmechanik	2
1.1	Einführung	2
1.2	Freie Teilchen	6
1.3	Schrödinger Gleichung	8
1.4	Wahrscheinlichkeitsinterpretation	9
1.5	Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung	12
1.6	Heisenberg'sche Unschärferelation	14
2.	1D Probleme	17
2.1	Teilchen im Potentialtopf	17
2.2	1D periodisches Potential	20
2.3	Streuung am Potentialtopf	22
2.4	Tunneleffekt	24
3.	Allgemeiner Formalismus der QM	27
3.1	Zustände / Observablen / Erwartungswerte	27
3.2	Kommutatoren und Quantisierung	30
3.3	Zeitentwicklung	33
3.4	Statistischer Operator	35
3.5	Messprozess in der QM	38
3.6	Harmonischer Oszillator	41
4.	Symmetrien in der QM: Kugelsymmetrie, Drehimpuls	43
4.1	Gruppen und Generatoren	44
4.2	Drehimpuls / Eigenwerte	46
4.3	Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses \vec{L}	49
4.4	Spin	52
4.5	Addition von Drehimpulsen	55
5.	Wasserstoffatom	58
5.1	Zweikörperproblem; Radialgleichung	58
5.2	Energiespektrum	61
6.	Näherungsmethoden	64
6.1	Rayleigh-Ritz Variationsprinzip	64
6.2	Zeitunabhängige Störungstheorie	66
6.3	Anwendungen, anharmonischer Oszillator	68
6.4	Störungstheorie für entartete Zustände	72
6.5	Anwendungen; H-Feinstruktur	75
7.	Identische Teilchen; Pauliprinzip	79
8.	Ausblick / "Märchen"	86

Theoretische Physik II → Quantenmechanik I → QT

4S, E6-118, Di 16-18

www.physik.uni-bielefeld.de/~yorks/qm12

Termin
Skript
Übungen

Orga Vorl Di, Do 10.15 - 12 (H6)

Ü Ü Fr 8-10, (10-12)³, (12-14)², 14/16
 Do1-249 Do1-12A Co1-252 26-134
 Do2-240 Do3-203

→ Listen: heute

→ erste Ü: Fr 13.4.

KL 28.8. 9.30 (H4)

Nachholtermin 12.1.13 9.30 (H4)

Lit s.o. website

Sem-Apparat; QD 820 → 3m!

↳ z.B. manchmal zum Lösen der Ü wichtig

Warum QT?

Elektrodynamik + relativistische Mechanik = klassische Physik

→ eine vollständige Theorie

→ aber falsch

→ viele Phänomene, für die die klass. Physik

nicht einen Schimmer der Erklärung zu bieten hat

(z.B.: Atome-Existenz; Spektrallinien; chemische Bindung;

radioaktiver Kern-Zerfall; Compton-Effekt; Katalyse;

Ferro-magnet; Supraleiter; Superenergy; Kernplasma-Strahlung;...)

⇒ Suchen bessere Theorie; für das, was man nicht messen kann

→ gesamte Natur; alle Experimente; alle Konstellationen

→ klass. Physik muss als Grenzfall anfallen sein

1. Wellenmechanik

1.1 Einführung

Feynman: "I think it is safe to say that nobody understands quantum mechanics"

Problem: Messprozess; nur statistische Aussagen; Korrelationen; fehlende Alltagserfahrung; kein intuitives Verständnis; Quantensysteme haben Teilchen- und Welleneigenschaften

klassische Physik: 2 fundamentale Konzepte

- Teilchen, mit Koord. x und Impuls p , bewegt sich via Newton
- Welle, füllt Raum, gegeben durch \vec{E}, \vec{B} -Felder, ändert sich via Max.

→ schön und aufregend: materielle Welt + Bodenständigkeit
→ einfach, intuitiv, deterministisch, reversible Dynamik

↳ Zustand: Punkt (x, p) im Phasenraum

• Observablen, Funktionen $O(x, p)$ auf Phasenraum
z.B. $x^2 + y^2 + z^2$; $\frac{p_x^2}{2m}, \dots$

• Dynamik: via Hamiltonian $H(x, p)$

$\dot{q} = \{q, H\}$ für $q = x, p, \dots$

↳ Poisson-Klammer $\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial x_i} \right)$

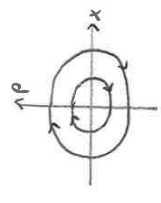


• Bsp: klass. harm. Oszillator

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

$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{1}{m} p$

$\dot{p} = \{p, H\} = -kx$



Quantenphysik: fundamentale Konzepte

• Zustand: (komplexer) Vektor $|\psi\rangle$ im Vektorraum \mathcal{H} (Hilbertraum)

• Observable: hermitesche Operatoren $O^\dagger = O$

• Dynamik: $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi(0)\rangle$, H hermitesch, \hbar konstant

• Messprozess: "Kollaps-Postulat"

(einfache Messung; schwacher bei Entartung)

wenn $|\phi\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$

mit $A|\lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle$, $\lambda_i \neq \lambda_j$

dann misst man $A = \lambda_i$ mit Wahrscheinlichkeit $|\alpha_i|^2$

und $|\phi\rangle = |\lambda_i\rangle$ nach der Messung

→ beschreibt alle Quantenzustände, und alle Experimente (z.B. Grav.)
(nach evtl. Vorkorrekturen, z.B. Feldtheorie)

z.B. Atomspektren (→ Quant. d. Energie)

Halbleiter, Transistoren (→ Quanten-Tunneln)

→ nicht intuitiv, nicht deterministisch, Dynamik nicht reversibel

Bem. • beide Beschreibungen (klass. + gm.) sind für gewisse

Gültigkeitsbereiche nützlich

• das klass. Bild ist nicht fundamental

→ wird durch QM ersetzt

• ist QM fundamental?

vielleicht nicht

aber beschreibt alle zur Zeit für Technologie und Gesellschaft relevante Physik

• (viel) mehr über die obigen Konzepte → diese Vorl.

Historisches (kurz; mehr: z.B. arXiv:physics/0512034)

Klass. Bild bröckelt ~ 1900

ca 25 Jahre intensive Debatte (Einstein!) → QM

1900, Planck: Hohlraumstrahlung (Spektrum exp. bekannt) kann erklärt werden, falls Strahlung (Licht!) nur quantisiert absorbiert wird
 → $E = h \nu$ ← Frequenz
 Einsteig ← Plancksche Konstante

1905, Einstein: photoelektrischer Effekt (exp. bekannt) kann erklärt werden, falls Licht selbst quantisiert ist
 → Licht-Teilchen = Photonen

1912, Bohr: Wasserstoff-Spektrum (exp. bekannt) kann durch Quantisierung erklärt werden

1924, de Broglie: Teilchen haben Welleneigenschaften (theor. Vorhersage)

→ $E = h \nu = \hbar \omega$ ← Kreisfrequenz
 $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 10^{-34} \text{ Js} \approx 6.58 \cdot 10^{-22} \text{ MeVs}$
 Impuls
 $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ ← Wellenzahl
 Wellenlänge

1926, Schrödinger: Wellengleichung für Wellenfunktion Ψ

1926, Born: Wahrscheinlichkeitsinterpretation von Ψ

1927, Heisenberg: Unschärferelation für Teilchen mit Welleneigenschaften
 Jordan, Pauli, Dirac, ...

Bem. • wichtige Experimente

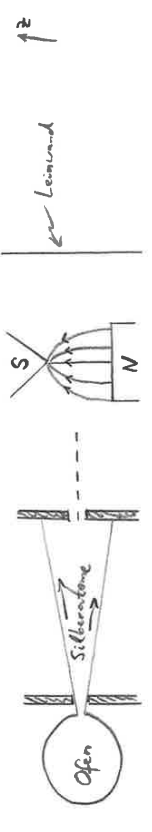
Doppelspalt → Photonen sind Wellen

Compton-Effekt → Photonen sind Teilchen

Beugung von Teilchen-Strahlen am Kristallgitter (Su.)

• Atome sind klassisch stabil (!)

ein faches QM-Bsp: 2-Zustands-System (Spin 1/2 Teilchen)



Stern + Gerlach, 1922

Ag: 47 Elektronen, Ges.-Drehimpuls von Spin des 47ten e-

→ magnet. Dipolmoment μ

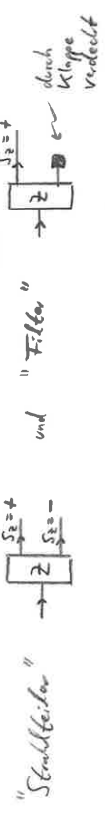
→ Kraft im inhomog. Magnetfeld $F_z = -\partial_z V = \mu_z \partial_z B_z$



→ $\mu_z \approx \pm \frac{e \hbar}{2mc} \equiv \pm \frac{e}{2mc} S_z$ mit $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ ist quantisiert!

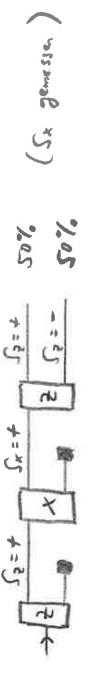
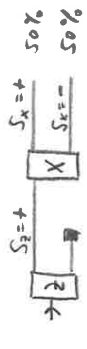
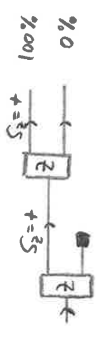
Zum Messprozess

benutze Stern-Gerlach-Experimente als "Bausteine":



habe elementare Bausteine für z.B. X-Richtung ("gedrehtes SG-E")

Experimente mit Teilchenstrahlen (oder einzelnen T.):



⇒ kann S_z, S_x nicht gleichzeitig messen ($S_z S_x \neq S_x S_z$, sp. tr. ...)

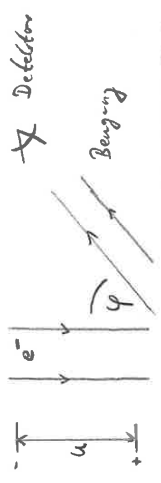
Wellennatur von Teilchen: Bsp

Elektronen durch Spannung U beschleunigen

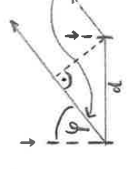
$$\rightarrow E = \frac{p^2}{2m_e} = eU \Rightarrow \lambda_{de\ Breaglye} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} \approx \frac{1.2 \text{ nm}}{\sqrt{U \text{ (in Volt)}}}$$

((Typ. Wellenlängen: Gamma ($\leq 1 \text{ pm}$), Röntgen (nm), UV (100 nm), sichtbar (400-700 nm), IR (μm), Radio (cm), Radio ($\text{m}-\text{km}$), ...))

Experiment (Davidson, Germer 1927)



• • • • • ← Kristallebenenfläche (N: 1-1, $d \approx 0.2 \text{ nm}$)



Unterschied der Wege: $\Delta L = d \cdot \cos(90 - \varphi) = d \cdot \sin(\varphi)$

→ Intensitätsmaximum bei konstruktiver Interferenz
 annahel, also für $d \cdot \sin(\varphi) = n \cdot \lambda$ ($n = 1, 2, \dots$)

→ dies wurde auch beobachtet! → Nobelpreis 1929 für de Broglie

1.2 Freie Teilchen

Beschreibung
 QM verwendet Wellen: $\left\{ \begin{array}{l} \text{an einem Ort} \\ \text{zu einem Zeitpunkt} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \phi(t) = \phi_0 \sin(\omega t + \alpha) \\ \phi(x) = \phi_0 \sin(kx + \beta) \end{array} \right.$

aber $\left\{ \begin{array}{l} \text{Kreisfrequenz } \omega \\ \text{Wellenzahl } k \end{array} \right\}$ können auch als $\left\{ \begin{array}{l} \text{Energie } E = \hbar \omega \\ \text{Impuls } p = \hbar k \end{array} \right.$ eines Teilchens interpretiert werden ("Wellen-Teilchen-Dualismus")

- Bem: • ebene Welle:
 Wellenpaket:
 • ally. Welle ist LK ebener Welle.
 → hat also kein bestimmtes k bzw. p
 → könnte einen Mittelwert $\langle P \rangle(t)$ besitzen

• für eine ebene Welle nennt man den Zusammenhang

$\omega = f(k)$ Dispersionsrelation

dem entspricht die Energie-Impuls-Beziehung für Teilchen

$$E = \varrho(p) \quad (\text{z.B. } E_m = \frac{p^2}{2m}, \text{ oder } E_{rel} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4})$$

• physikalisch relevant (und messbar!) ist aber

Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$ (nicht-rel: $v_g = \frac{p}{m} = v_{klassisch}$
 rel: $v_g = \frac{pc^2}{E}$)

Die Wellenfunktion der QM ist eine komplexe Fkt.: $\psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$
 → zum Formulieren eine Wellenglg- für ψ ist Fourier nützlich:

Fourier-Analyse (Erinnerung)

(1 Dim.) $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx}$

→ $\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iqx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{f}(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{i(k-q)x}$

Dirac'sche Delta fkt.

→ $\tilde{f}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-iqx}$

(3 D) $f(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

$\tilde{f}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r f(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

Konvention

(3+1 D) $\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\psi}(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t}$

Raumzeit

fast - aber $\omega(\vec{k})$ wegen Dispersionsrelation, s.o.

→ $\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k}) t}$

Physik kommt also durch Dispersionsrel. ins Spiel

welche laut de Broglie zur E-p-Beziehung äquivalent ist.

Hilft dies beim Formulieren einer Gg für ψ ?

- für jede Fourier-Komp. (= ebene Welle) gilt: $\left\{ \begin{array}{l} E \\ p \end{array} \right\} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k}) t} = \left\{ \begin{array}{l} \hbar \omega(\vec{k}) \\ \hbar \vec{k} \end{array} \right\} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k}) t} = \left\{ \begin{array}{l} \hbar \omega(\vec{k}) \\ \hbar \vec{k} \end{array} \right\} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{k}) t}$
- laut Disp-Rel ist $E = \frac{p^2}{2m}$ bzw. $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ für jedes \vec{p} bzw. \vec{k}

- die Ersetzung $E \hat{=} i\hbar \partial_t$ und $\vec{p} \hat{=} -i\hbar \vec{\nabla}$ sind aber unabhängig von \vec{r}, \vec{k} , falls sie auf die Fourier-Darst. der Wellenfkt. operieren.

⇒ Beziehung für die ganze Wellenfkt

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\vec{r}, t)$$

("Schrödinger-GG. für ein freies Teilchen")

1.3 Schrödinger-Gleichung

folgt aus einer Verallgemeinerung der obigen Wellengl.

i.A. hängt Teilchen-Energie (außer im Impuls) auch von Ort ab,

$$E = H(\vec{p}, \vec{r}) \quad (\hat{=} \text{Hamiltonfkt. in klass. Mechanik})$$

z.B.: $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ Potential

Schrödinger (1926): Form dieser Gl. in QM übernehmen

$E \rightarrow i\hbar \partial_t$ und $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ einsetzen
 auf Wellenfkt. operieren
 aber S.u. (Cave)

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}, t) = H(-i\hbar \vec{\nabla}, \vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

(Schrödinger-Gl.)

- Bem.: beschreibt Zitterbewegung oder Wellenfkt
- partielle Dgl. erster Ordnung in t
 - linear: ψ_1, ψ_2 Lösungen $\Rightarrow \psi_1 + \psi_2$ Lösung
 - ψ_1 Lösung $\Rightarrow N \cdot \psi_1$ Lösung, $N \in \mathbb{C}$
 - braucht also Randbedingung und Normierung für eindeutige Lsg.

Cave: z.B. $H_1 = p_x^2, H_2 = r^2 p_x^2$ ($i, j \in \{1, 2, 3\}$) klass. äquivalent!

QM: $(H_1 - H_2) \psi(\vec{r}, t) \Rightarrow [-i\hbar \partial_{r_j} \vec{r}_j + r_j i\hbar \partial_{r_j}] \psi(\vec{r}, t)$

$[a, b] \hat{=} ab - ba$
 Kommutator
 $\Rightarrow [r_j, -i\hbar \partial_{r_j}] = i\hbar \delta_{ij}$

"Vertauschungsrel."; zentral in QM

- Bem.: • die Ersetzung $E \rightarrow \partial_t, \vec{p} \rightarrow \vec{\nabla}$ ist als nicht ganz unproblematisch \rightarrow wir werden sich die Vertauschungsrelationen wie oben nach öfter besprechen, sie sind zentrale Bestandteile der QM.

Wdh. nun einige erste Folgerungen aus Schrödinger-Gl. ziehen:

1.4 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

für $S(\vec{r}, t) \hat{=} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$

gibt $\partial_t S(\vec{r}, t) = (\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* \partial_t \psi$
 (hier $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi$ geschrieben)

$$= \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi^* \psi + \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi \psi^*$$

nach Schrödinger-Gl. nach (Schrödinger-Gl.)*

$$= \frac{1}{i\hbar} \left\{ \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi^* \right) \psi - V^* \psi^* \psi - \psi^* \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi \right) + V \psi^* \psi \right\}$$

Annahme: $V(\vec{r})$ reell

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

! denn die Terme $(\vec{\nabla} \psi^*) \psi - (\psi^* \vec{\nabla} \psi)$
 formen sich!

$$\Rightarrow \partial_t S(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{mit } \vec{j} \in \mathbb{R}^3$$

"kontinuitäts-Gleichung" "Conti"

woher $\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ (\vec{\nabla} \psi^*) \psi - \psi^* \vec{\nabla} \psi \right\}$

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

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

$$\{ (\psi^* \vec{\nabla} \psi)^* - (\psi^* \vec{\nabla} \psi) \} = -2i \text{Im}$$

← funktionierte als nur für $\psi \in \mathbb{C}$!

Conti \rightarrow Erhaltungssatz (von Gesamt G)

definiere $N(t) \hat{=} \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t^2 S(\vec{r}, t)$ Gesamt G

werden gerne $G \rightarrow \mathbb{R}^3$ wählen.

\rightarrow dies ist möglich, falls $\psi(\vec{r}, t)$ quadratintegrabel ist,

also $|\psi(\vec{r}, t)|^2 \rightarrow 0$ schneller als $\frac{1}{|\vec{r}|^3}$ für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$

für die neue Größe $N(t)$ gilt also

$$\frac{d}{dt} N(t) = \int_G d^3\vec{r} \operatorname{div} \vec{S}(\vec{r}, t) - \int_G d^3\vec{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$$

Gesamt $= - \int_G d^3\vec{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$



$dS = |\vec{n}|^2 d\Omega$
 ↑
 Oberfläche von G

falls aber $|\vec{j}(\vec{r}, t)|^2 \rightarrow 0$ an der Oberfläche ∂G ,
 dann verschwindet dort auch \vec{j} !

\rightarrow für $G \rightarrow \mathbb{R}^3$ haben wir also $\frac{d}{dt} N(t) = 0$

$\rightarrow N$ ist eine Erhaltungsgröße

aber was ist hier erhalten? physikalische Interpretation?

• Teilchenzahl?

haben Freiheit, $\psi(\vec{r}, t)$ zu normieren (vgl. oben, S. 8)

für ein Teilchen bekommen wir dann die

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

• $S(\vec{r}, t)$ ist dann die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen an Punkt \vec{r} zu finden.

aufgrund dieser Wahrsch.-Interpretation können wir nun physikal. Einspar. abf.:

Erwartungswerte in der QM

• wo findet man ein Teilchen am wahrscheinlichsten?

$$\langle \vec{r} \rangle(t) = \int d^3\vec{r} \vec{r} S(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t)$$

• was ist die Varianz (= Schwankungsquadrat) bei Ortsmessungen?

$$(\Delta \vec{r})^2 = \langle (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \rangle = \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \psi(\vec{r}, t)$$

• was ist der Mittelwert des Impulses?

laut $\langle \vec{p} \rangle(t)$ ist $\int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{p}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{r}}{(2\pi)^3} \psi^*(\vec{k}, t) \psi(\vec{k}, t) \psi(\vec{k}, t)$

(wobei $\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ ist)

\rightarrow also ist $\frac{|\tilde{\psi}(\vec{k}, t)|^2}{(2\pi)^3}$ die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum,

$$\Rightarrow \langle \vec{p} \rangle(t) = \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \hbar \vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}, t)$$

(Ü 3.16) $\int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}, t)$

• Varianz der Impulsmessung?

$$|\Delta \vec{p}|^2 = \langle (\vec{p} - \langle \vec{p} \rangle)^2 \rangle$$

$$= \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \psi^*(\vec{k}, t) (\hbar \vec{k} - \langle \vec{p} \rangle)^2 \psi(\vec{k}, t)$$

$$= \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar \vec{\nabla} - \langle \vec{p} \rangle)^2 \psi(\vec{r}, t)$$

Bem.: • ψ s können linear superponiert werden (vgl. oben, S. 8)

\rightarrow für $\psi = \psi_1 + \psi_2$

$$\text{ist } |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1$$

"klassisch" $\hat{=}$ qm. Interferenz
 $\hat{=}$ Erhaltungsevidenz

• die Wahrsch.-Interpretation ist von Max Born (1926)

$\psi(\vec{r}, t)$ beschreibt eine Wahrscheinlichkeitswelle (zeigt Interferenz + Beugung)
 keine "reale" Welle (wie z.B. Schallwellen)

$|\psi|^2$ gibt Wahrscheinlichkeitsdichte an

• "Philosophie" der QM?

- kann man mit einer Theorie zufrieden sein, die nur Wahrscheinlichkeiten liefert, und nichts "Genaueres"?
- Theorie ist auf jeden Fall "kausal", denn die Schrödinger-Gl. beschreibt $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi(\vec{r}, t)$ eindeutig.
- bei mikroskopischen Prozessen müssen alle klassischen "Vorurteile" überprüft werden \rightarrow mehr später.

• die $\psi_E(\vec{r})$ bilden eine orthogonale Menge
 (wie die eben bilden: $\int d^3\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')$)

denn: $E' \int d^3\vec{r} \psi_E^*(\vec{r}) \psi_{E'}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \psi_E^* \hat{H} \psi_{E'}$
 $= \int d^3\vec{r} \psi_E^* \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi_{E'}$
 Zuerst partiell integrieren
 verschiedene Randterme
 $= E \int d^3\vec{r} \psi_E^* \psi_{E'}$

$\Leftrightarrow (E'-E) \int d^3\vec{r} \psi_E^*(\vec{r}) \psi_{E'}(\vec{r}) = 0$
 $\Rightarrow \int d^3\vec{r} \psi_E^*(\vec{r}) \psi_{E'}(\vec{r}) = 0$ für $E \neq E'$

"Skalarprodukt" für Funktionen

• die Art des "Spektrums" von \hat{H} (d.h. ob EW diskret oder kontinuierlich) hängt von $V(\vec{r})$ ab (Bsp später; oft hat Spektrum diskret und kont. Anteile)

- diskrete Energie-Eigenwerte = "gebundene Zustände"

$\psi_E(\vec{r})$ ist quadratisch integrierbar, und sogar lokalisiert;

das Potential bindet ein einziges Teilchen an eine bestimmte Gegen-

Konstant: $\int d^3\vec{r} |\psi_E(\vec{r})|^2 = 1 \quad \forall E$

dann sind die N_E die "Amplituden", mit denen die jeweiligen E-Eigenzustände in $\psi(\vec{r},t)$ vorkommen.

- kontinuierliche Energie-Eigenwerte = "Streuzustände"

analog zu ebenen Wellen: \vec{r} verschwindet an der

Oberfläche nicht, sondern Teilchen laufen ein/aus.

\Rightarrow Lösungen von $\hat{H} \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r})$, $\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right]$

normiert durch $\int d^3\vec{r} \psi_E^*(\vec{r}) \psi_{E'}(\vec{r}) = \begin{cases} \delta(E-E') & (\text{für } E \text{ diskret}) \\ \delta(E-E') & (\text{für } E \text{ kontinuierlich}) \end{cases}$

bilden eine angemessene Basis, die "Energiebasis".

Die allg. Lsg. der Schröding. Glg: $\psi(\vec{r},t) = \int dE N_E \psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

mit den Amplituden N_E (\vec{r},t -unabhängige komplexe Konstanten)

Zur-Faz.

1.5 zeitunabhängige Schröding.-Glg.

Schröding.-Glg. (s.o.) beschreibt die Zeitentwicklung der Wellenfkt

ihd $\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r},t) = \hat{H} \psi(\vec{r},t)$

(hier ist der "Hamilton-Operator" \hat{H} def.)

Können Raum- und Zeitabhängigkeit durch Four.-u. -Dunst. ausdrücken (s.o.), für freie Teilchen (s.s.7) was es bereits bestimmt (Dispersions-Rel.).

Was ändert sich für $V(\vec{r}) \neq 0$, wenn die T. also nicht mehr frei sind?

\rightarrow Separationsansatz für Wellenfkt. (da $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ ist)

$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}) \cdot f(t)$

wobei $f(t) \sim e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ wie gehabt

und $\psi(\vec{r})$ LK sein kann

$= \sum \int dE N_E \psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ (sucht also gleich die allgemeine Lsg.)
 ↳ Normierungskonstante

(diskrete Summe bzw kontinuierliches Integral (je nach E))

\rightarrow frucht in Schröding.-Glg. einsetzen

$\sum \int dE N_E \psi_E(\vec{r}) E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \sum \int dE N_E \hat{H} \psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

\rightarrow mit $\int dt e^{+\frac{i}{\hbar}Et}$ auf beid. Seiten operieren; $\int dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-E)t} = 2\pi\hbar \delta(E-E)$

$N_E \psi_E(\vec{r}) E = N_E \hat{H} \psi_E(\vec{r})$

$\Rightarrow \boxed{\hat{H} \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r})}$

"Stationäre" bzw. zeitunabhängige Schröding.-Gleichung

\rightarrow die erlaubten Energien sind also Eigenwerte von \hat{H} !

Eigenfunktionen der E, ψ_E

• falls $V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$, sind auch alle E reell

denn: $\psi_E^* \cdot [\text{st. Sch.}] - [\text{st. Sch.}]^* \cdot \psi_E$ bilden

$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi_E^* \nabla^2 \psi_E - (\nabla^2 \psi_E^*) \psi_E \right\} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E = (E-E^*) \psi_E^* \psi_E$

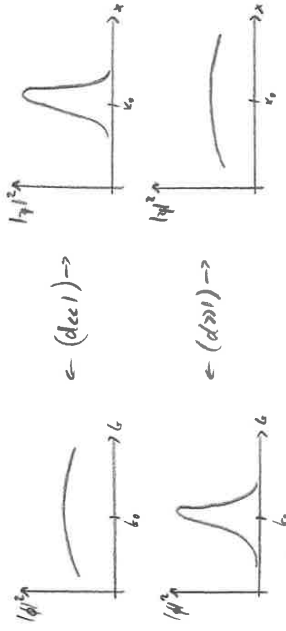
bleibt $\int d^3\vec{r}$, $G \rightarrow \mathbb{R}^3$, $|\psi_E(\vec{r})|^2 \stackrel{\text{positiv}}{=} 0 = (E-E^*) \cdot \text{const} \Rightarrow E = E^*$

1.6 Heisenbergsche Unschärferelation

em Bsp von: 1D Gauß'sches Wellenpaket (s. Ü4)

$$\phi(t) = N e^{-d^2(t-t_0)^2} - i \hbar x$$

$$\rightarrow |\phi(t)|^2 = |N|^2 e^{-2d^2(t-t_0)^2}, \quad |\psi(x,0)|^2 = \frac{|N|^2}{\sqrt{\pi} d} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}}$$



→ die Erwartungswerte ergeben sich bei $t=0$ zu

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \langle dx \rangle^2 = \langle (x-x_0)^2 \rangle = d^2$$

$$\langle p \rangle = \hbar k_0, \quad \langle dp \rangle^2 = \langle (p-\langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4d^2}$$

$$\Rightarrow dx \cdot dp = \frac{\hbar}{2}$$

und für $t > 0$ gilt dann $dx \cdot dp > \frac{\hbar}{2}$ (s. Ü4e)

dies war ein Spezialfall aber Heisenbergsche Unschärferelation:

$$\boxed{dx \cdot dp \geq \frac{\hbar}{2}}$$

brauchen zum allg. Beweis diese Relation aber

Schwarz'sche Ungleichung

$$\left| \int dx u^*(x) v(x) \right|^2 \leq \left(\int dx |u(x)|^2 \right) \left(\int dx |v(x)|^2 \right)$$

Beweis: def. $\equiv M \equiv U \equiv V$

falls u, v lin. abhängig (also $v(x) = \lambda u(x)$) → Gleichheit werden gilt \forall

falls u, v lin. unabhängig → mindestens u oder $v \neq 0$. Wähle u .

$$\text{Zerlege } v(x) = \frac{M}{U} u(x) + \left(v(x) - \frac{M}{U} u(x) \right) \equiv \frac{M}{U} u(x) + v_\perp(x)$$

$$\text{es ist } v_\perp(x) \neq 0 \text{ und } \int dx u^*(x) v_\perp(x) = M - \frac{M}{U} \cdot U = 0$$

$$\text{also } V = \frac{|M|^2}{U^2} U + \int dx v_\perp^*(x) v_\perp(x) > \frac{|M|^2}{U} \quad \text{qed}$$

Beweis der Unschärferelation

für $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ gilt $[x, p] = xp - px = i\hbar$ (vgl. S. 8)

für $\bar{x} = x - \langle x \rangle$ und $\bar{p} = p - \langle p \rangle$ gilt

$$[\bar{x}, \bar{p}] = [x, p] - \langle x \rangle p - x \langle p \rangle + \langle x \rangle \langle p \rangle + \langle p \rangle x - \langle p \rangle \langle x \rangle - \langle p \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle \langle p \rangle = i\hbar$$

(weil $\langle x \rangle \langle p \rangle$ Zahlen und keine Operatoren)

Sei $\psi(x)$ eine normierte Wellenfkt. (z.B. $\psi_E(x)$ oder $\psi(x, t)$), $1 = \int dx \psi^* \psi(x)$

dann $i\hbar = \int dx \psi^* i\hbar \psi$

$$\int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi - \int dx \psi^* (-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle p \rangle) \bar{x} \psi$$

$$\int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi - \int dx \psi^* (i\hbar \frac{d}{dx} - \langle p \rangle) \bar{x} \psi$$

$$= 2i \operatorname{Im} \left\{ \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi \right\}$$

partielle Int. im 2. Term

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 = \left(\operatorname{Im} \left\{ \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi \right\} \right)^2 \leq \operatorname{Re} \left\{ \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi \right\}^2 + \operatorname{Im} \left\{ \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi \right\}^2$$

$$\leq \left(\int dx \psi^* \bar{x} \psi \right) \left(\int dx \psi^* (i\hbar \frac{d}{dx} - \langle p \rangle) \psi \right) = \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi = \int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi$$

← hier partiell integrieren

Bem.: • Beweis geht noch allgemeiner: für zwei (Hermitesche)

Operatoren A, B ist $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$,

und oben haben wir den Spezialfall $A=x, B=p$ genommen.

minimales Wellenpaket

erfüllt die Glg $dx \cdot dp = \frac{\hbar}{2}$,

sollte also die "beste Näherung" an ein klassisches Teilchen sein.

wie könnte es aussehen?

(a) $\int dx \psi^* \bar{x} \bar{p} \psi$ muss rein imaginär sein (s.o., bei $\frac{\hbar}{2}$)

(b) u, v müssen linear abhängig sein, (s.o., bei $\frac{\hbar}{2}$, und S. 16 unten)

$$u(x) = \lambda v(x) \text{ mit } \lambda \in \mathbb{C} \Leftrightarrow \bar{x} \psi = \lambda \bar{p} \psi$$

(a) $\int dx \psi^* \psi = \int dx \frac{d\psi}{dx}^2$ muss sein integriert sein
 schreiben also $\lambda = \frac{2d^2}{dt^2}$ mit $d \in \mathbb{R}$

(b) mit den Ableitungen $\langle p \rangle = \hbar k_0$, $\langle x \rangle = x_0$ folgt

$$(x-x_0) \psi = \frac{2d^2}{dt^2} (-ik_0(x-x_0) + ik_0) \psi$$

$$\Leftrightarrow \partial_x \psi = \left[-\frac{2d^2}{\hbar^2} (x-x_0) + ik_0 \right] \psi = \left(\partial_x \left[-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2} + ik_0 x + c \right] \right) \psi$$

$$\Rightarrow \psi(x) = D \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2} + ik_0 x \right]$$

$$\text{also } |\psi(x)|^2 = |D|^2 \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2} \right], = \text{Bsp von S. 14!}$$

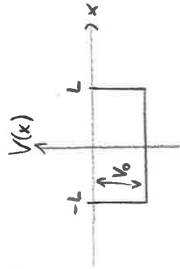
Diskussion

- ein Teilchen $\hat{=}$ ein minimales (Gaußsches) Wellpaket
- eine ebene Welle $\hat{=}$ ein monochromatisches Teilchenstrahl
- in 3D: 3 Unschärfe-Rel's, $\Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}$
- zum Begriff "Unschärfe":
 $\hat{=}$ Breiten von Unschärferelativitätsverteilungen
 sondern unsere Kenntnis seiner Ort/Impulsverteilung
 \rightarrow besser (?) Begriff: "Unbestimmtheits"-Relation
- Q7 gibt prinzipielle Grenze für Bestimmung von Ort/Impuls.
- Konsequenz: Begriff der "Teilchenbahn" verliert Sinn
 \rightarrow aber: für Größenordnungen von Unschärfen, s. Ü4 (d)
- $\Delta x|_{t=t_1} \cdot \Delta p|_{t=t_2} < \frac{\hbar}{2}$ möglich
 (weil bei t_1, t_2 verschiedene Zustände vorliegen)

2. 1D-Probleme

\rightarrow wollen zeitunabhängige Schrödinger-Gl. in einer Dimension (1D) lösen
 dafür die Potentiale: \square , \square , \square , \square , \square , \square als "Physik"?

2.1 Teilchen am Potentialtopf



Schrödinger-Gl: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x)$

Potential: $V(x) = -V_0 \theta(L^2 - x^2) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| \leq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

- klassische Rechnung: alle Energien $E > -V_0$ erlaubt falls $E < 0$, muss das Teilchen in $|x| < L$ sein!
- hier: Lösungen $\psi_E(x)$ über S.G. berechnen!

\rightarrow Normierung $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_E(x)|^2 = 1$

\rightarrow Annahme, dass $E \leq 0$ (E > 0: siehe § 2.3)

bezeichne $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, mit $k > 0$

\rightarrow Strategie: Lastminute Lsg n oben drei Gebieten $\begin{matrix} \textcircled{1} & \textcircled{2} & \textcircled{3} \\ \leftarrow & \leftarrow & \leftarrow \\ & -L & L \end{matrix}$

Setze diese mit bestimmten Anschlussbedingungen zusammen

① $\psi_E''(x) = k^2 \psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = A e^{kx} + B e^{-kx}$

normierbar für $\psi_E(x \rightarrow \infty) = 0 \Rightarrow B = 0$

③ $\psi_E''(x) = -k^2 \psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$

normierbar für $\psi_E(x \rightarrow \infty) = 0 \Rightarrow C = 0$

② $\psi_E''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi_E(x)$, Lsg $\psi_E(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$

normierbar \checkmark

\rightarrow ist positiv für $E > -V_0$

also: $A e^{kx} + F e^{ikx} + G e^{-ikx} + D e^{-kx}$

Anschlussbedingungen bei $x = \pm L$?

- $\psi_E(x)$ muss stetig sein!
 ((denn wenn nicht, also $\psi_E(x) = \varphi(x) + c\theta(x-x_0)$,
 $\Rightarrow \psi_E'(x) = \varphi'(x) + c\delta(x-x_0)$, $\psi_E''(x) = \varphi''(x) + c\delta'(x-x_0)$,
 aber $V(x)$ hat kein δ')
 - $\psi_E'(x)$ muss stetig sein!
 ((denn wenn nicht, also $\psi_E'(x) = \varphi'(x) + c\theta(x-x_0)$,
 $\Rightarrow \psi_E''(x) = \varphi''(x) + c\delta(x-x_0)$, aber $V(x)$ hat kein δ)
- \Rightarrow haben also vier vier Bedingungen:
- $$\psi_E(-L) \stackrel{!}{=} \psi_E(-L^+) \Leftrightarrow Ae^{-kL} \stackrel{!}{=} Fe^{-ikL} + Ge^{ikL}$$
- $$\psi_E(L^+) \stackrel{!}{=} \psi_E(L^-) \Leftrightarrow De^{-kL} \stackrel{!}{=} Fe^{ikL} + Ge^{-ikL}$$
- $$\psi_E'(-L) \stackrel{!}{=} \psi_E'(-L^+) \Leftrightarrow kAe^{-kL} \stackrel{!}{=} ik(Fe^{-ikL} - Ge^{ikL})$$
- $$\psi_E'(L^+) \stackrel{!}{=} \psi_E'(L^-) \Leftrightarrow -kDe^{-kL} \stackrel{!}{=} ik(Fe^{ikL} - Ge^{-ikL})$$

\rightarrow 4 Gh. für 4 Var lösen ...

Vereinfachung: da das Polynom eine Symmetrie hat, $V(-x) = V(x)$,
 ist mit $\psi_E(x)$ auch $\psi_E(-x)$ Lösung zur gleichen Energie.
 ((denn: $S.G. |_{x \rightarrow -x} : [-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(-x) + V(-x)]\psi(-x) = E\psi(-x)$))
 $= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^2 + V(x)$

\Rightarrow trennen $\psi_E(x) = \psi_E(-x)$ (symm.) wählen.
 $\psi_E(x) = \psi_E(-x)$ (antisymm.)

\rightarrow Symm. ψ_E : $A=D, F=G$

$$\frac{Ae^{kx}}{-L} + \frac{Ae^{-kx}}{L} = \frac{Ae^{ikx}}{-L} + \frac{Ae^{-ikx}}{L}$$

Anschluss: $Ae^{-kL} = 2F \cos(kL)$
 $kAe^{-kL} = 2kF \sin(kL)$
 $\left. \begin{matrix} Ae^{-kL} = 2F \cos(kL) \\ kAe^{-kL} = 2kF \sin(kL) \end{matrix} \right\} k \stackrel{!}{=} k \tan(kL) \quad (4)$

\rightarrow antisymm. ψ_E : $A=-D, F=-G$

$$\frac{Ae^{kx}}{-L} + \frac{Ae^{-kx}}{L} = \frac{Ae^{ikx}}{-L} + \frac{Ae^{-ikx}}{L}$$

Anschluss: $Ae^{-kL} = -2iF \sin(kL)$
 $kAe^{-kL} = 2ikF \cos(kL)$
 $\left. \begin{matrix} Ae^{-kL} = -2iF \sin(kL) \\ kAe^{-kL} = 2ikF \cos(kL) \end{matrix} \right\} k \stackrel{!}{=} -k \cot(kL) \quad (4)$

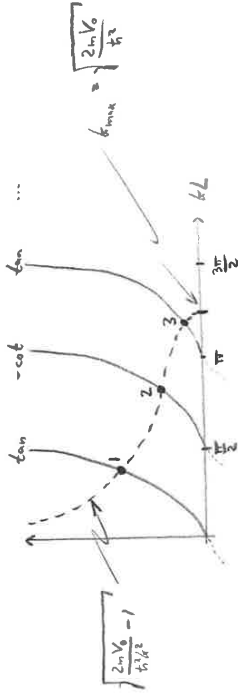
Erinnerung (aus S.17): k, k_0 wenn beliebig übertragen $\sim E$,
 $(E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}, E + V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m})$

als sind die oben erhaltenen Bedingungen (transzendente) Gh. für E .
 \rightarrow lösen?! schwierig - aber numerisch / graphisch möglich!

$$E \text{ ist } \cot \frac{kL}{k_0} = \frac{-\frac{2mE/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2}}{\frac{2mV_0/\hbar^2 - 2m(E+V_0)/\hbar^2}{2m(E+V_0)/\hbar^2}} = \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - 1}{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - 1}$$

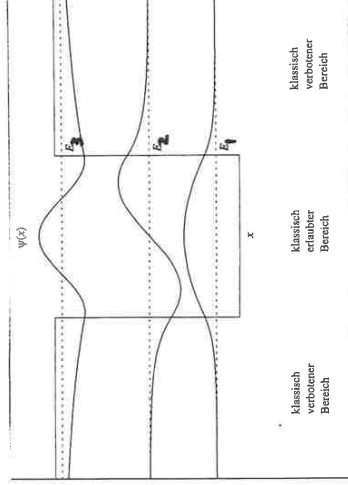
$$\text{so dass } \cot \frac{kL}{k_0} - 1 = \begin{cases} \tan(kL) & (\text{symm.}) \\ -\cot(kL) & (\text{antisymm.}) \end{cases}$$

Zu lösen ist (und dann $k \rightarrow E$), z.B. graphisch:



\Rightarrow Energiespektrum ist diskret!

- es gibt eine endliche Anzahl n von Lsn.
 n hängt von V_0, L ab: $(n-1)\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} L < n\frac{\pi}{2}$
- es gibt mindestens eine Lösung (1), mit symmetrischer Wellenfunktion
- in der Barriere $D, \textcircled{2}$ (also für $|x| > L$) verschwindet die Wellenfkt. nicht (ist aber exponentiell klein)
- die Wellenfkt. des Grundzustandes $\psi_{E_1}(x) = 2F \cos(k_0 x)$ ($|x| < L$) hat keine Nullstellen (Knoten), weil $k_0 L < \frac{\pi}{2}$
 ((allg.: $\psi_{E_n}(x)$ hat $n-1$ Knoten))



[aus: G. Münster,
 Quantentheorie,
 § 3.2.1]

2.2 1D periodisches Potential [Cohn-Tannoudji, § 3.19; Griffiths § 5.3.2]

phys. Potentiale: Kraft auf e^- im Kristallgitter, z.B. $V(x)$, also heißt "Gitterkonstante" a

es gibt gitterperiodische $|q_E(x+n)|^2 = |q_E(x)|^2$ aber für q_E selbst gilt $q_E(x+n) = e^{ikn} q_E(x)$ "Bloch'scher Satz"

Beweis: Ansatz $q_E(x+n) = e^{ikn} q_E(x) \Rightarrow f \in \mathbb{R}$

$q_E(x+2n) = e^{i(2n)} q_E(x)$ aber auch $= e^{i(f(n)-f^*(n))} q_E(x) = 2i f(n) q_E(x)$ $\leftarrow \mathbb{R}$
 $\Rightarrow f(2n) = 2f(n), f(na) = n f(a), f$ ist linear, $f(a) = ka$

einfachster (?) Bsp: "Dimer-Kristall"
 $V(x) = -\Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x+na), \Omega > 0$

(nicht sehr realistisch für e^- im Kristall; besser $\square \square \square \square$)
 wollen hier Auswertungen der periodischen Struktur untersuchen

Schröd.-Gly lösen! Strategie wie gewohnt: Steck + Anschluss
 wir sind hier an Lin. mit $E > 0$ inbrunst, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ("lokalisierbare e^- ")

$0 < x < a$ $q_E'' = -k^2 q_E$, $\text{Lsg } q_E(x) = A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x}$
 $-a < x < 0$ $q_E(x) = e^{-ik_0 a} [A e^{ik_0(x+a)} + B e^{-ik_0(x+a)}]$ (vgl. Bloch rechtswärts)

Anschluss (vgl. § 2.1, S. 18)
 • kein δ' in $V \Rightarrow q_E$ ist stetig!
 • hier gilt es aber δ in $V \Rightarrow q_E'$ ist nicht stetig ($\Rightarrow q_E$ darf Knick haben)

\rightarrow also z.B. bei $x=0: q_E(0^-) = q_E(0^+)$ (*)

• Größe der Unstetigkeit in q_E' ?

\rightarrow SG: Übertragungsfunktion! (vgl. Dehm...) z.B. ($\epsilon \rightarrow 0^+$)
 $\int_{-a}^a dx \cdot \begin{cases} q_E''(x) = -k^2 q_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2} V(x) q_E(x) \\ \leftarrow \text{nur } -\Omega \delta(x) \text{ trägt in } [-a, a] \text{ bei} \end{cases}$
 $\Rightarrow q_E'(\epsilon) - q_E'(-\epsilon) = -k^2 \cdot 0 - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} q(0)$ (*)

wir bekommen also die Anschlussbedingungen (bei $x=0$)

(*) $\Rightarrow e^{-ik_0 a} [A e^{ik_0 a} + B e^{-ik_0 a}] = A + B$
 (**) $\Rightarrow ik_0 [A - B] - e^{-ik_0 a} ik_0 [A e^{ik_0 a} - B e^{-ik_0 a}] = -\frac{2m\Omega}{\hbar^2} q(0) = -\frac{2m\Omega}{\hbar^2} (A+B)$

$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} e^{-i(k-k_0)a} - 1 & e^{-i(k+k_0)a} - 1 \\ \frac{2k}{\epsilon} + 1 - e^{-i(k-k_0)a} & \frac{2k}{\epsilon} - 1 + e^{-i(k+k_0)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
 $= 2k_0 \epsilon$

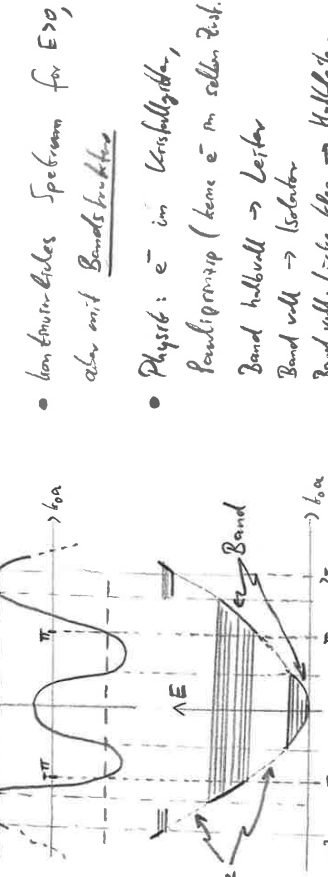
es gilt also eine nicht-triviale Lsg $\Leftrightarrow \text{Det}(\cdot) = 0$ ist,

$0 = \text{Det} \begin{pmatrix} X & Y \\ \frac{2k}{\epsilon} - X & \frac{2k}{\epsilon} + Y \end{pmatrix} = X(\frac{2k}{\epsilon} + Y) - Y(\frac{2k}{\epsilon} - X) = \frac{2k}{\epsilon}(X-Y) + 2XY$

$X-Y = e^{-i(k-k_0)a} - e^{-i(k+k_0)a} = e^{-ik_0 a} (e^{ik_0 a} - e^{-ik_0 a}) = e^{-ik_0 a} 2i \sin(k_0 a)$
 $XY = e^{-2ik_0 a} - e^{-ik_0 a} e^{ik_0 a} - e^{-ik_0 a} e^{-ik_0 a} + 1 = e^{-ik_0 a} [e^{-ik_0 a} - e^{ik_0 a} - e^{-ik_0 a} + 1]$

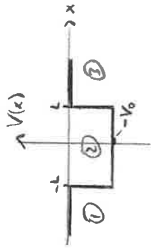
$= e^{-ik_0 a} 4 [\cos(k_0 a) + \cos(k_0 a) - \cos(k_0 a) - \cos(k_0 a)]$
 \rightarrow fixiert also $k(\epsilon)$ in $q_E: \cos(k_0 a) = \cos(ka) - \frac{m\Omega a}{\hbar^2} \frac{\sin(k_0 a)}{k_0 a}$

hat nicht immer eine Lsg; $k_0 \in [-1, 1]$



- kontinuierliches Spektrum für $E > 0$, aber mit Bandstruktur
- Physik: e^- im Kristallgitter, Pauliprinzip (keine e^- in selben Zust.)
- Band voll \rightarrow Leiter
- Band voll, Lücke oben \rightarrow Halbleiter

2.3 Streuung am Potentialtopf



Potential wieder wie in § 2.1 (S. 17 ff)

Wollen nun $E > 0$ betrachten

Annahme: $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$, $E + V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Löse stat. S-Gly $[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V(x)] \psi_E(x) = E \psi_E(x)$

① $\psi_E'' = -k_0^2 \psi_E$, Lsg $\psi_E(x) = A e^{i k_0 x} + B e^{-i k_0 x}$

• diese WF ist nicht im gemeinsamen Sinne (Soll $|\psi_E|^2 = 1$)

normierbar, man spricht von einem Streuzustand.

• der Wahrscheinlichkeitsstrom \vec{j} (vgl. § 1.4, S. 9) hat also

folgende eine physikalisch sinnvolle Form:

$$j_x = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \psi_E^* \partial_x \psi_E \} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ (A^* e^{-i k_0 x} + B^* e^{i k_0 x}) i k (A e^{i k_0 x} - B e^{-i k_0 x}) \} = \frac{\hbar k_0}{m} \text{Im} \{ i (|A|^2 - |B|^2 + A B^* e^{2i k_0 x} - A^* B e^{-2i k_0 x}) \} = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 - \frac{\hbar k_0}{m} |B|^2$$

→ Strahl nach rechts
← Strahl nach links
→ Geschwindigkeit

normierbare Zustände → Wellenfunktion
diese sind nicht stationär!
Stromstärke sind dann konstante

② $\psi_E'' = -k^2 \psi_E$, Lsg $\psi_E(x) = C e^{i k x} + D e^{-i k x}$

• wollen hier das folgende Exponential betrachten:



d.h. wir verlangen als Randbedingung, dass es in ③ keine

linkslaufenden Strahl gibt $\Rightarrow D = 0$.

② $\psi_E'' = -k^2 \psi_E$, Lsg $\psi_E(x) = F e^{i k x} + G e^{-i k x}$

Anschlussbedingungen

ψ_E und ψ_E' stetig bei $x = \pm L$

$x = -L$: $A e^{-i k_0 L} + B e^{i k_0 L} = F e^{-i k L} + G e^{i k L}$ (1)

$i k_0 (A e^{-i k_0 L} - B e^{i k_0 L}) = i k (F e^{-i k L} - G e^{i k L})$ (2)

$x = +L$: $C e^{i k_0 L} = F e^{i k L} + G e^{-i k L}$ (3)

$i k_0 C e^{i k_0 L} = i k (F e^{i k L} - G e^{-i k L})$ (4)

• haben oberhalb 4 Gl. für 5 Koeffizienten

\Rightarrow es gibt Lösungen für alle k_0 , also keine Resonanz!

• können zunächst F, G eliminieren.

$i k (3) + (4) \Rightarrow i (k_0 + k) C e^{i k_0 L} = 2 i k F e^{i k L}$

$\Leftrightarrow F = \frac{1}{2} (1 + \frac{k_0}{k}) C e^{i (k_0 - k) L}$

$-i k (3) + (4) \Rightarrow i (-k_0 + k) C e^{i k_0 L} = -2 i k G e^{-i k L}$

$\Leftrightarrow G = \frac{1}{2} (1 - \frac{k_0}{k}) C e^{i (k_0 + k) L}$

• dies in (1), (2) einsetzen und A, B bestimmen:

$k (1) \Rightarrow k (A e^{-i k_0 L} + B e^{i k_0 L}) = \frac{k}{2} [(k + k_0) e^{i (k_0 - 2k) L} + (k - k_0) e^{i (k_0 + 2k) L}]$ (5)

$\frac{1}{2} (2) \Rightarrow k_0 (A e^{-i k_0 L} - B e^{i k_0 L}) = \frac{k}{2} [(k + k_0) e^{i (k_0 - 2k) L} - (k - k_0) e^{i (k_0 + 2k) L}]$ (6)

$\frac{1}{2} (5) + \frac{1}{k_0} (6) \Rightarrow 2 A e^{-i k_0 L} = \frac{k}{2} [(2 + \frac{k_0}{k_0}) e^{i (k_0 - 2k) L} + (2 - \frac{k_0}{k_0}) e^{i (k_0 + 2k) L}]$

$\Leftrightarrow A = C e^{2i k L} \left[\frac{1}{2} (e^{2i k L} + e^{-2i k L}) - \frac{1}{2} (\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0}) \right] \frac{1}{\cos(2kL)}$

Definitionen

Transmissionskoeffizient

$T = \frac{|\vec{j}(x=L; \text{rechts})|}{|\vec{j}(x=-L; \text{rechts})|} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$

Reflexionskoeffizient

$R = \frac{|\vec{j}(x=-L; \text{links})|}{|\vec{j}(x=-L; \text{rechts})|} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$

$\Rightarrow T^{-1} = \cos^2(2kL) + \frac{1}{4} (\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0})^2 \sin^2(2kL) = 1 + \frac{(k_0^2 - k^2)^2}{4 k^2 k_0^2} \sin^2(2kL)$

$\Leftrightarrow T = \left\{ 1 + \left[\left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \frac{\sin(2kL)}{2} \right]^2 \right\}^{-1}$ mit (s.o.) $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

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

Übung, Aufg. 11: $R = T \cdot \left[\left(\frac{v_0}{v} - \frac{v}{v_0} \right)^2 \sin^2(2kL) \right]^2$

- damit gilt insgesamt $0 \leq T \leq 1$, $0 \leq R \leq 1$, $T + R = 1$
d.h. die Gesamtwahrscheinlichkeit bleibt erhalten!

Resonanz betrachten wir die Energieabhängigkeit von T genauer:

$$\left(\frac{v_0}{v} - \frac{v}{v_0} \right)^2 = \left(\frac{E}{1E_0} - \frac{1E_0}{E} \right)^2 = \frac{v_0^2}{E(E+v_0)}$$

$$\Rightarrow T(E) = \frac{1}{1 + \frac{v_0^2}{4E(E+v_0)} \sin^2(2kL)}$$

mit $k = \sqrt{\frac{2m(E+v_0)}{\hbar^2}}$

- abt. ist $T(E)$ i.A. eine unendliche Fkt der Energie, und $\lim_{E \rightarrow \infty} T(E) = 1$. D.h. ein Teilchen mit großer Energie ($E \gg v_0$) läuft einfach durch den Barrier, ohne ihn zu durchdringen.
- falls aber $2kL = n\pi$ ($n \in \mathbb{N}$), ist $T(E) = 1$ schon bei nullter Energie! Man spricht von einer Resonanz.

\Rightarrow die Resonanzenergien erfüllen $\sqrt{\frac{2m(E_0/v_0)}{\hbar^2}} 2L = n\pi \Leftrightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8mL^2} - v_0$

- physikalische Interpretation: die bei $x=L$ und bei $x=-L$ reflektierten Wellen interferieren destruktiv, so dass alles transmittiert wird.
(es gilt aber doch noch "Quantisierung" bei der Streuung)



2.4 Tunnel effekt



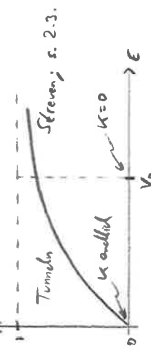
klassisch: erwarten für $E < v_0$: $R=1$, $T=0$
 $E > v_0$: $R=0$, $T=1$

QD: löse $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x)$, benutze R, T die Barriere $\textcircled{1}, \textcircled{2}$ \Rightarrow § 2.3

$\textcircled{3}$ jetzt aber: $\psi_E'' = k^2 \psi_E$, $k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$ (für $0 < E < V_0$)
(in § 2.3 war $\psi_E'' = -k^2 \psi_E$, also $k \rightarrow ik$!)
(im S. 23: $\frac{C}{A} = e^{-2ik_0 L} \left[\frac{1}{2}(e^{2ikL} + e^{-2ikL}) - \frac{1}{2} \left(\frac{v_0}{v} + \frac{v}{v_0} \right) \frac{1}{2} (e^{2ikL} - e^{-2ikL}) \right]^{-1}$)
 $\xrightarrow{b \rightarrow ik} \frac{C}{A} = e^{-2ik_0 L} \left[\frac{1}{2}(e^{2kL} + e^{-2kL}) + \frac{1}{2} \left(\frac{v_0}{v} - \frac{v}{v_0} \right) \frac{1}{2} (e^{2kL} - e^{-2kL}) \right]^{-1}$
 $= \frac{1}{\cosh(2kL) + \frac{\sinh(2kL)}{\sinh(2kL)}}$

$\Rightarrow T(E) = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left\{ \cosh^2(2kL) + \left[\left(\frac{v_0}{v} - \frac{v}{v_0} \right) \frac{\sinh(2kL)}{2} \right]^2 \right\}^{-1}$
 $= \left\{ 1 + \left[\left(\frac{v_0}{v} + \frac{v}{v_0} \right) \frac{\sinh(2kL)}{2} \right]^2 \right\}^{-1}$

Tunnelwahrscheinlichkeit



ist mit $\left(\frac{v_0}{v} + \frac{v}{v_0} \right)^2 = \frac{v_0^2}{E(v_0 - E)}$
 $= \frac{1}{4E^2} \left(\frac{v_0}{v} + \frac{v}{v_0} \right)^2 = \frac{v_0^2}{E(v_0 - E)}$

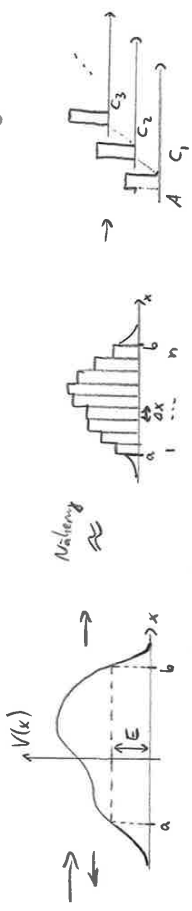
- also ist quantenmechanisch $T > 0$ auch für $E < v_0$!
man nennt dies Tunneleffekt, und $T(E)$ heißt Tunnelwahrscheinlichkeit.

• Verhalten für $E \ll v_0$: $\left(\frac{v_0}{v} + \frac{v}{v_0} \right)^2 \approx \frac{v_0}{E} \gg 1$
 $\Rightarrow T(E) \approx \frac{4E}{v_0} \sinh^2(2kL)$

falls weiterhin $kL \gg 1$ gilt, ist $\sinh(2kL) \approx \frac{1}{2} e^{2kL}$, und
 $T(E) \approx \frac{16E}{v_0} e^{-4 \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} L}$

im klassischen Limit $\hbar \rightarrow 0$ ist also faktuell $T(E) = 0$!

Wellenfunktion: Tunnel effekt für allgemeinen Potentiellberg



$T(E) = \frac{|C|^2}{|A|^2} \approx \frac{|C_1|^2}{|A|^2} \cdot \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} \cdot \dots \cdot \frac{|C_n|^2}{|C_{n-1}|^2} = T_1(E) \cdot T_2(E) \cdot \dots \cdot T_n(E)$

3. Allgemeiner Formelismus der QT

Schrödinger-Gleichung hat bisher gut funktioniert.

→ kann jedoch nicht die ganze Realität darstellen

(z.B. ist kein Platz für Information über Teilchen-Form)

Strategie: im Vollgammereigenen zu erörtern, wobei wir die wesentlichen Strukturen in komplexer Form ableiten können.

3.1 Zustände / Observablen / Erwartungswerte

Physikalische Objekte (Teilchen, Vektoren, ...) mehr als Zustände betrachtet.

Direkt-Notation: $| \psi \rangle$ ("Ket-Vektor").

Die Zustände bilden einen komplexen Vektorraum V (Superposition):

$$| \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle \in V \Rightarrow \alpha | \psi_1 \rangle + \beta | \psi_2 \rangle \in V \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Zu jedem $| \psi \rangle$ gibt es einen "komplexen" Vektor $\langle \psi |$ ("bra-Vektor"); diese bilden einen "dualen" Vektorraum V^* .

Es sei: ein komplexwertiges Skalarprodukt definiert, $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \in \mathbb{C}$ ("broadet") mit den folgenden Eigenschaften:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$$

$$\langle \psi_1 | \alpha \psi_2 + \beta \psi_3 \rangle = \alpha \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \beta \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \alpha \psi_2 + \beta \psi_3 | \psi_1 \rangle = [\alpha \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \beta \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle]^* = \alpha^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \beta^* \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \| \psi \|^2 \geq 0, \text{ mit Norm } \| \psi \| \text{ oder Norm von } \psi$$

$$\| \psi \|^2 = 0 \Leftrightarrow | \psi \rangle = | 0 \rangle, \text{ "Nullvektor"; } | 0 \rangle = 0 \cdot | \psi \rangle = | \psi \rangle - | \psi \rangle$$

Falls $\| \psi \| < \infty \quad \forall | \psi \rangle \in V$ ist V ein Hilbertraum.

→ dies sind an Folgende angeschlossen.

→ Streuzustände müssen dann reguliert werden,

z.B. durch ein endliches Volumen (vgl. Ü 17)

für eine Barriere der Breite $2L$ hatten wir $T(E) \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{-L}^{+L} \sqrt{2m(V(x)-E)} dx}$

$$\Rightarrow T(E) \approx \prod_{i=1}^n T_i(E) \approx \exp \left\{ -\sum_{i=1}^n \frac{2}{\hbar} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{2m(V(x)-E)} dx \right\}$$

für $n \rightarrow \infty$ und $dx = \frac{b-a}{n} \rightarrow 0$ und aus der Summe ein Integral:

$$T(E) \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x)-E)} \right\} \quad \text{"Gamow-Faktor"}$$

L, a, b sind die klassischen Umkehrpunkte, s. Skizze

Bem.: exakte Herleitung des Gamow-Faktors in QT Z

im Phasenraumformalismus der QT.

dort's obige Formel im Basal $T(E) \ll 1$ gute Näherung

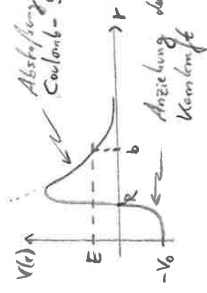
(also Potentials "groß" gegen Energie)

• sehr viele wichtige Annahmen des Tunnelkoeffizienten

(z.B. Resonanzmikroskopie; Josephson-Effekt in Supraleitern; Dopp.; ...)

Wir betrachten jetzt ein Beispiel aus der Komplexität:

Bsp.: α -Zerfall



$V = \frac{Ze^2}{r}, \quad r = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E}$ • Modell für Bewegung des α -Teilchens (ψ_1, ψ_2, ψ_3) im Potential (Ladungszustand Z)

• klassisch Umkehrpunkte: $a = R \sim Z^2, \quad b = \frac{2E}{E}$

$$G \equiv \frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m(V(x)-E)} \stackrel{r=bx}{=} \frac{2}{\hbar} \int_{R/b}^{2E/b} \sqrt{2mE} b \frac{dx}{\sqrt{x-1}} = \int_{R/b}^{2E/b} \sqrt{\frac{2mE}{x}} dx = \frac{2}{\hbar} \left[\sqrt{\frac{2mE}{x}} \right]_{R/b}^{2E/b} = \frac{2}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{2mE}{2E/b}} - \sqrt{\frac{2mE}{R/b}} \right) = \frac{2}{\hbar} \left(\sqrt{mE} - \sqrt{\frac{2mE^2}{R}} \right)$$

• man findet also eine Beziehung zwischen

der exponentiellen $T(E) \sim T(E) \sim \exp\{-G(E)\}$

der Energie E des auslaufenden α -Teilchens

und der Ladungszahl Z des Restkerns

• sehr gute Übereinstimmung dieser Beziehung mit Experimenten!

→ ein (früher) großer Erfolg der QT.

Es wird postuliert, dass $|q\rangle$ und $\langle q|$ ($\alpha \in \mathbb{C}$) die selbe physikalische Information enthalten.

→ können uns auf normierte Zustände beschränken, $\|q\rangle = 1$

Sei A nun ein linearer Operator bzw. Abbildung $A: V \rightarrow V$:

$$A[\alpha|q_1\rangle + \beta|q_2\rangle] = \alpha A|q_1\rangle + \beta A|q_2\rangle.$$

Die Eigenzustände von A sind $|a\rangle$, also $A|a\rangle = a|a\rangle$, $a \in \mathbb{C}$.

Physikalische Größen (Energie, Impuls, Drehimpuls, Ort, ...) werden durch solche Operatoren dargestellt; insbesondere sollen dann alle möglichen Messwerte a reell sein; ein solcher Operator nennt man Observable.

- Volltheit in a -Darstellung: $\psi(a) \equiv \langle a|q\rangle$
- z.B. $\hat{A} = x \Rightarrow \psi(x) \equiv \langle x|q\rangle$
- Wahrscheinlichkeit für den Eigenwert a im Zustand $|q\rangle$: $P_q(a) \equiv |\langle a|q\rangle|^2$

Orthogonalität:

$$\langle a'|a\rangle = \delta_{aa'}$$

Vollständigkeit:

$$1 = \sum_a P_q(a) = \sum_a \langle q|a\rangle \langle a|q\rangle = \langle q | \sum_a |a\rangle \langle a| |q\rangle = \langle q | q \rangle = 1$$

Erwartungswerte:

$$\langle A \rangle = \sum_a a P_q(a) = \sum_a a \langle q|a\rangle \langle a|q\rangle = \langle q | \sum_a a |a\rangle \langle a| |q\rangle = \langle q | A |q\rangle$$

haben also eine Spektralzerlegung für A : $A = \sum_a |a\rangle a \langle a|$

(oder so: $A = \hat{A} \hat{A} = \hat{A} \sum_a |a\rangle \langle a| = \sum_a \hat{A} |a\rangle \langle a| = \sum_a |a\rangle a \langle a|$)

wann ist der Operator A eine Observable?

Def der A aufzugeben Operator \hat{A}^\dagger : $\langle q_1 | \hat{A} |q_2\rangle = \langle \hat{A}^\dagger q_1 | q_2 \rangle \quad \forall |q_1\rangle, |q_2\rangle$

\hat{A}^\dagger in Spektralzerlegung?

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger \hat{A} = \sum_{a, a'} |a'\rangle \langle a| \hat{A}^\dagger |a\rangle \langle a| = \sum_{a, a'} |a'\rangle a \langle a| = \sum_{a'} |a'\rangle a \langle a|$$

physikalische Observablen haben reelle EW a

$$\Rightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (\text{"selbstadjungiert"})$$

$$\Rightarrow \langle q_1 | \hat{A} |q_2\rangle = \langle \hat{A} q_1 | q_2 \rangle = \langle q_1 | \hat{A}^\dagger |q_2\rangle \quad (\text{"hermitesch"})$$

(Physiker nennt meist $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ schon "hermitesch")

Basiswechsel:

Sei B eine weitere Orthonormalbasis:

$$\psi(b) = \sum_a \langle a|q\rangle \langle a|b\rangle = \sum_a \langle a|b\rangle \langle a|q\rangle = \sum_a \langle a|b\rangle \langle a|q\rangle$$

$$\psi(b) = \sum_a \langle a|q\rangle \langle a|b\rangle$$

$$\hat{A} = \sum_{a, a'} |a'\rangle \langle a| \hat{A} |a\rangle \langle a| = \sum_{a, a'} |a'\rangle \langle a| \hat{A} |a\rangle \langle a|$$

$\hat{A}_{a'b}$; Matrixelemente von \hat{A} in Eigenbasis von B

für ein kontinuierliches Spektrum gelten die Vollständigungen:

$$\hat{1} = \sum_a |a\rangle \langle a| + \int da |a\rangle \langle a|$$

$$\hat{A} = \sum_a |a\rangle a \langle a| + \int da |a\rangle a \langle a|$$

$$\langle a|a'\rangle = \begin{cases} \delta_{aa'} & (\text{diskret}) \\ \delta(a-a') & (\text{kontinuierlich}) \quad (\text{falls nicht regulärisiert}) \end{cases}$$

→ Postulate der QM (mehr Postulate später)

(I) Reine Zustände werden durch normierte Vektoren eines komplexen Hilbert-Raumes repräsentiert.

(II) Die Observablen eines Systems entsprechen selbstadjungierten Operatoren.

(III) Die möglichen Messwerte sind die Eigenwerte des Operators.

Die Erwartungswerte der Observablen A im Zustand $|q\rangle$ ist durch $\langle \hat{A} \rangle = \langle q | \hat{A} |q\rangle$ gegeben.

Wir haben in diesem Abschnitt eigentlich nur eine neue Notation für bekannte mathematische Strukturen der Linearen Algebra eingeführt (Tabelle: s. nächste Seite).

Wichtig Unterscheid: Vektoren in der QM können auch unendlichdimensional (d.h. Funktionen) sein!

Lineare Algebra

Zustände: bet.-Vektoren $|\psi\rangle$
 km.-Vektoren $\langle\psi|$
 Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle$

Operatoren \hat{A}
 "hermitisch" $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

Eigenzustände $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, a \in \mathbb{R}$
 Vollheit in a-Dim. $\mathcal{P}(a) = \langle a|\psi\rangle$

Matrixelemente in b-Dim. $A_{ij} = \langle b|\hat{A}|i\rangle$

Vektoren $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$
 konjugierte Vektoren $v^\dagger = (v_1^*, v_2^*, \dots)$
 Skalarprodukt $v^\dagger v = v_1^* v_1 + v_2^* v_2 + \dots$

Matrix M
 hermitisch $M^\dagger = M$
 $Mv = \lambda v, \lambda \in \mathbb{R}$

Elemente von v in einer Basis, in der M diagonal ist, $M = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$; $v = (0, 1, \dots)$

Matrixelemente in b-Dim. $A_{ij} = \langle b|\hat{A}|i\rangle$ Elemente von M in einer anderen Basis

3.2 Kommutatoren und Quantisierung

wollen jetzt Physik mit dieser neuen Notation betreiben!

betrachte 3 Observablen: Ortoperatoren \hat{r}_i
 Impulsoperatoren \hat{p}_j
 Hamilton-Op. $\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$

die korrekte Physik folgt aus einer Verallgemeinerung der

Verknüpfungsrelation im S.B.: $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ "Quantisierung"

Zunächst überzeuge wir uns, dass dieser Formalismus zueinander
 Wellenfunktion $\psi(x)$, falls wir die Wahrheit in Ortsdarstellung betrachten.
 hier: Gleich. in 1D , $\hat{r}_i \rightarrow \hat{x}$, $\hat{p}_j \rightarrow \hat{p}$

\rightarrow Eigenzustand des Ortoperators: $\hat{x}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$
 Normierung: $\langle\alpha|\alpha\rangle = \int |\alpha(x)|^2 dx$ (bzw. $\delta_{\alpha\alpha}$, falls regulär)
 Erzeugendepol: $\hat{A} = \int dx |x\rangle\langle x|$ (bzw. $\sum |x\rangle\langle x|$, \dots)
 Wellenfunktion: $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

Ausgangspunkt ist die Eigenwert-Gleichung für den Hamilton-Op. (vgl. S. 12):

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$; von links mit $\langle x|$ multiplizieren
 $\hat{H} = \text{Soln. } |\alpha\rangle\langle\alpha|$ einsetzen

$\Rightarrow \int dx' \langle x|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x')|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = E \langle x|\psi\rangle$

auf der LHS ist $\langle x|V(x')|x'\rangle = \langle x|\sum_n c_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| x'\rangle = \langle x|\sum_n c_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| x'\rangle$

sonst: $\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle = \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \langle x|V(x')|x'\rangle = V(x)\langle x|x'\rangle = V(x)\delta(x-x')$

\rightarrow brauchen hier für Partialdifferentialgleichung $\langle x|\hat{p}|y\rangle$.

\rightarrow benutze Vertauschungsrelationen

$\langle x|[\hat{x}, \hat{p}]|y\rangle = \langle x|\hat{x}\hat{p}|y\rangle - \langle x|\hat{p}\hat{x}|y\rangle = \langle x|\hat{x}|y\rangle - \langle x|\hat{p}|y\rangle$
 $= \int dx' \langle x|\hat{x}|x'\rangle\langle x'|y\rangle - \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle = \int dx' x \delta(x-x')\langle x'|y\rangle - \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle = i\hbar \delta(x-y)$

$= \langle x|\hat{x}|y\rangle - \langle x|\hat{p}|y\rangle = \langle x^2|x|y\rangle - \langle x|\hat{p}|y\rangle = [x^2|x\rangle]^\dagger = x \langle x|\hat{p}|y\rangle$
 $\Rightarrow (x-y) \langle x|\hat{p}|y\rangle = i\hbar \delta(x-y)$

brauchen zur Lsg diesen GG. Eigenfunktion der δ -Fkt:

$\int dx' f(x') \delta(x-x') = 0, f(0) = 0 \Rightarrow "x \delta(x) = 0"$

$\int dx' f(x') x' \delta(x-x') = \int dx' f(x') x' \delta(x-x')$

$\int dx' f(x') x' \delta(x-x') = \int dx' f(x') x' \delta(x-x')$
 $\int dx' f(x') x' \delta(x-x') = \int dx' f(x') x' \delta(x-x')$
 $\int dx' f(x') x' \delta(x-x') = \int dx' f(x') x' \delta(x-x')$

\rightarrow also (LHS): $\int dx' \langle x|\hat{p}^2|x'\rangle\langle x'|y\rangle = \int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle = \int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle$

$\int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle = \int dx' \int dx'' \langle x|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|y\rangle$
 $= -i\hbar^2 \int dx' \int dx'' \delta(x-x'') \delta(x''-x') \langle x'|y\rangle = -i\hbar^2 \int dx' \delta(x-x') \langle x'|y\rangle = -i\hbar^2 \delta(x-y) \langle x|y\rangle$

insgesamt also $\langle x|\hat{H}|y\rangle = [-\frac{\hbar^2}{2m} \delta(x-y) + V(x)] \psi(y) = E \psi(x)$

Bem.: - der neue Formalismus enthält also die alte (zustandsfreie) aber sogar die zeitabhängige, S. 3.3) Schreibungs-Phys.

- neuer Formalismus ist aber allgemeiner: Ortsdarstellung ist nur ein Spezialfall.

Roll der Heisenbergschen Unschärferelation an allg. Formulierungen?

Satz: Seien A, B zwei Observablen mit $[A, B] = 0$

$\Leftrightarrow A, B$ haben gemeinsame Eigenzustände

und können daher beliebig genau gemessen werden.

Beweis: " \Leftarrow " $[A, B] |a, b\rangle = (a-b) |a, b\rangle = 0$ für jeden Zustand $|a, b\rangle$

wegen Vollständigkeit kann er allg. Zustand als

$$| \psi \rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i, b_j\rangle, \text{ mit } c_{ij} = \langle a_i, b_j | \psi \rangle \text{ geschrieben werden}$$

$$\Rightarrow [A, B] | \psi \rangle = 0 \quad \forall | \psi \rangle \Rightarrow [A, B] = 0$$

" \Rightarrow " Seien $|a_i, i\rangle$ die Eigenzustände von A .

$$\Rightarrow A B |a_i, i\rangle = B A |a_i, i\rangle = a B |a_i, i\rangle$$

$$\Rightarrow B |a_i, i\rangle \text{ sind EZ von } A \text{ mit demselben EW}$$

$$\Rightarrow B |a_i, i\rangle = \sum_j b_j |a_i, j\rangle, \text{ mit } b_j = \langle a_i, j | B |a_i, i\rangle$$

also operiert B wie eine Matrix auf die $|a_i, i\rangle$,

diese Matrix kann diagonalisiert werden;

damit bekommen wir Kombinationen, die auch EZ von B sind: $|a, b\rangle$

Falls andererseits $[A, B] = iC + 0$:

\rightarrow gleichzeitige Bestimmung ist nicht möglich.

\rightarrow für gegebenem Zustand $|\psi\rangle$ optimieren wir die Varianzen

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle$$

\rightarrow es gilt $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle \psi | C | \psi \rangle |$ (Beweis: Ü 16)

Bem.: • Kommutatoren zwischen Observablen

(Vorsicht, s.o., oder nicht, s. 5.30)

spielen eine zentrale Rolle in der QT

3.3 Zeitentwicklung

zeitunabhängige Schrödingergl.: $\hat{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle$ (vgl. S. 12, 31)

zeitabhängige Schrödingergl.: $i \hbar \partial_t | \psi \rangle = \hat{H} | \psi \rangle$ (vgl. S. 8, 12)

(! in Schrödingergl. Bild; s.u.)

die Glg. nennen wir $|\psi(t)\rangle$

auf Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ durch $|\psi(t)\rangle \equiv \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$

dieser erfüllt also die Glg. $i \hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$ } ("EER"!)

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

und $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1}$, d.h. \hat{U} ist unitär

denn: schreibe Schrödingergl. für konjugierten Vektor auf

$$\langle i \hbar \partial_t \psi | = -i \hbar \langle \psi | \Rightarrow \langle \dot{\psi} | = \langle \psi | \dot{H}^\dagger = \langle \psi | \dot{H}$$

$$\Rightarrow i \hbar \partial_t \langle \psi | \psi \rangle = - \langle \psi | \dot{H} | \psi \rangle + \langle \dot{\psi} | \psi \rangle = 0$$

$$\text{also ist } \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

$$\text{zeitunabhängig} \Rightarrow \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

das "EER" oben können wir sehr formal lösen:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0) \right\}$$

(! wobei (vgl. S. 31, und Ü 14) Funktion (Operator) = Taylorreihe)

denn: $\hat{U}(t_0, t_0) = e^{-i \hat{H} \cdot 0} = \mathbb{1}$ ✓

$$i \hbar \partial_t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n (t-t_0)^n \hat{H}^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1} (t-t_0)^{n-1} \hat{H}^{n-1} \hat{H}$$

$$= \sum_{m=0}^{n-1} \frac{1}{m!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m (t-t_0)^m \hat{H} \hat{H}^m = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{H}$$

Können damit zwei nacheinander folgenden machen

Zeitentwicklung im Energieeigenbasis

schreibe Anfangszustand als $|\psi(t_0)\rangle = \sum_E |E\rangle \langle E|\psi(t_0)\rangle = \sum_E c_E e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |E\rangle$ (vgl. 5.12)

die Unlöslichkeit für den Energie-Eigenwert E' ist dann $P_E(E') = |\langle E'|\psi(t)\rangle|^2 = |c_{E'} e^{-\frac{i}{\hbar} E'(t-t_0)}|^2 = |c_{E'}|^2$ zeitunabhängig! (obwohl $|\psi(t)\rangle \neq |\psi(t_0)\rangle$)

Zeitentwicklung der Erwartungswerte

$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t)|A|\psi(t)\rangle = -\langle \psi(t)|\dot{A}|\psi(t)\rangle + \langle \psi(t)|A\dot{\psi}(t)\rangle$
 "Ehrenfest-Theorem"

also: Erwartungswert zeitunabhängig \Leftrightarrow Operator vertauscht mit Hamilton-Op.
 eine solche Observable A nennt man Erhaltungsgroße: $[A, H] = 0$

Bilder: wir wollen Zeitabhängigkeit aus einem etwas anderen Winkel betrachten.

Schrödinger-Bild: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ Zustand sind zeitabhängig
 $(\frac{d}{dt} A) = 0$ Operatoren zeitunabhängig
 $\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t)|A|\psi(t)\rangle$ Erwartungswerte

Heisenberg-Bild: def $|\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$ Zustand_H sind zeitunabhängig
 $= U^\dagger(t,0) |\psi(t)\rangle$

def $A_H(t) = U^\dagger(t,0) A U(t,0)$ Operatoren zeitabhängig
 $= e^{\frac{i}{\hbar} Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}$

$\Rightarrow \langle \psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|U^\dagger(t,0) A U(t,0) |\psi(0)\rangle$
 $= \langle \psi_H|A_H(t)|\psi_H\rangle$

Physik (wie z.B. Erwartungswerte) bleibt unbeeinträchtigt.
 Die zeitabhängige Schrödinger-Gly und aber ersetzt
 durch $i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{A}_H(t) = -\tilde{H} \tilde{A}_H(t) + \tilde{A}_H(t) \tilde{H} = [\tilde{A}_H(t), \tilde{H}]$

$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{U} = \tilde{H} \tilde{U} = \tilde{U} \tilde{H}$
 $\Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{U}^\dagger = \tilde{H}^\dagger \tilde{U}^\dagger = \tilde{H} \tilde{U}^\dagger$

Postulate der QM (IV) (vgl. 5.29)

(IV) Die zeitliche Entwicklung von Zuständen im Schrödinger-Bild wird durch die Schrödinger-Gly. $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$ bestimmt, wobei \hat{H} der Hamilton-Operator ist.

Vergleich mit klass. Physik (vgl. 5.2)

klass. Bewegungsgltn. können auch in verschiedenen "Bildern" dargestellt werden.

Newton: $\dot{p} = m\dot{x} = -\partial_x V$

Hamilton: $H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$; x, p formell unabhängige "verdinglichte" Mand.
 mit Poisson-Klammer $\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x}$ gilt:

$\{x, x\} = 0$; $\{p, p\} = 0$; $\{x, p\} = 1$ (kanonische Normierung)

$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{p}{m}$; $\dot{p} = \{p, H\} = -\partial_x V$ (Dynamik)

Quantisierung: $x \rightarrow \hat{x}$, $p \rightarrow \hat{p}$, $\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]$

$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{x}] = 0$; $[\hat{p}, \hat{p}] = 0$; $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ (gleichzeitige Vertauschungsrelationen)
 $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = [\hat{x}, \hat{H}]$; $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}, \hat{H}]$ (Dynamik im Heisenberg-Bild)

3.4 Statistische Operatoren vgl. z.B. [Niebur §20], [Schubel §20]

Lesbar haben wir mit "reinen" Zuständen $|\psi\rangle$ gearbeitet; für eine Observable \hat{A} haben wir dann physikalische Vorhersagen:

- Erwartungswerte: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$
- Wahrsch., dass Messung den bestimmten Resultat a gibt ($A|a\rangle = a|a\rangle$): $P_a(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle$

können diese Größen auch etwas anders aufschreiben, mit Hilfe des statistischen Operators $\hat{\rho}(\psi) \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$

damit können wir schreiben:

$$\begin{aligned} \bullet \langle A \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{Sp}(\hat{A} \rho) \\ \bullet \rho_{ij}(a) &= \langle \psi | \hat{a}_i | \psi \rangle \langle \psi | \hat{a}_j | \psi \rangle = \text{Sp}(\hat{a}_i \rho \hat{a}_j) \end{aligned}$$

→ es können also alle physikalischen Erwartungswerte mit $\hat{\rho}(\psi)$ ausgedrückt werden!

$$\hat{\rho}(\psi) = \text{Eigenschaft: } \begin{cases} \bullet \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} & (\text{folgt aus Spektralzerlegung}) \\ \bullet \text{Sp}(\hat{\rho}) = 1 & (\text{vgl. Ü21}) \\ \bullet \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} & (\text{also ist } \hat{\rho} \text{ "Projektor" }) \end{cases}$$

Man kann allerdings nicht alle Systeme als reine Zustände beschreiben.
 (z.B. Vielteilchensysteme bei denen Teilchen auf sich selbst wechselwirken.)
 → solche Zustände werden gemischte Zustände genannt.

def: wir finden einen reinen Zustand $|\psi_n\rangle$ nur mit der Wahrscheinlichkeit p_n , wobei $0 \leq p_n \leq 1$ und $\sum_n p_n = 1$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{\rho} &= \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ \langle A \rangle &= \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) = \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \\ &= \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle \quad (*) \end{aligned}$$

→ wenn man \hat{A} -Eigenzustände für die Konstruktion von $\hat{\rho}$ benutzt, d.h. $\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$, gilt weiterhin:

$$\rho_{ij}(a) = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{a}_i \hat{a}_j) = \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{a}_i \hat{a}_j | \psi_n \rangle = p_n \delta_{ij}(a)$$

$$\hat{\rho} = \text{Eigenschaft: } \begin{cases} \bullet \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} & (\text{Spektralzerl.}) \\ \bullet \text{Sp}[\hat{\rho}] = 1 & (\text{vgl. } \sum_n p_n = 1) \end{cases} \quad \left. \begin{matrix} \text{Beweis} \\ \text{in Ü21} \end{matrix} \right\}$$

$$\begin{aligned} \bullet \hat{\rho}^2 &= \sum_{n,m} p_n p_m |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi_m\rangle \langle \psi_m| \\ &= \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \end{aligned}$$

aus der letzten Eigenschaft folgt also:

$$\Rightarrow \text{Sp}(\hat{\rho}^2) = \sum_{n,m} \langle \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n p_n^2 \leq \sum_n p_n = 1$$

also: $\text{Sp}(\hat{\rho}^2) = 1 \Leftrightarrow$ es gibt nur eine Energie mit verschwindender Wahrscheinlichkeit, z.B. $p_1 = 1, p_{n \neq 1} = 0$, d.h. nur für einen reinen Zustand!

falls $\text{Sp}(\hat{\rho}^2) < 1$, ist der Zustand also Entmischel gemischt.

Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} &= [\hat{H}, \hat{\rho}] \\ &= i\hbar \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{H} - \hat{H} \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ &= i\hbar \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{H} - \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{H} \\ &= [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned}$$

- wird auch von Neumann-Gleichung genannt; Lsg: s. Ü20a
- gilt auch wenn $\hat{H} = \hat{H}(t)$ zeitabhängig
- beschreibt Zeitentwicklung des statist. Op's im Schrödinger-Bild

es folgt damit auch:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) = \text{Sp}([\hat{H}, \hat{\rho}] \hat{A}) \\ &= \text{Sp}(\hat{H} \hat{\rho} \hat{A} - \hat{\rho} \hat{H} \hat{A}) = \text{Sp}(\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \\ &= \text{Sp}(\hat{A} [\hat{H}, \hat{\rho}]) = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \end{aligned}$$

Sp zyklisch (s. Ü21a)

genau wie für reine Zustände: vgl. S.34, Erwartung-Wert

wennlicher Unterschied zwischen reinen und gemischten Zuständen:

rei: $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ ein reiner Zustand

$$\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n c_n^* c_n = 1$$

$$\Rightarrow \hat{\rho}(\psi) = \sum_{n,m} c_n^* c_m |\psi_n\rangle \langle \psi_m|$$

reelle Koeffizienten, wie die p_n "Diagonalelemente"

+ $\sum_{n \neq m} c_n^* c_m |\psi_n\rangle \langle \psi_m|$ — komplexe Koeffizienten "Interferenzterme"

Sei $c_n^* c_n = |c_n|^2 e^{i\varphi}$
 falls fehlt über den Phasenfaktor gemittelt wird, verschwindet
 die Informationsrate: $e^{i\varphi} \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi} = 0$

→ Dieses Phänomen nennt man Dekohärenz (Information geht verloren).

- Bem.: • Dekohärenz bringt uns von der QT zu einer "klassischen" statistischen Beschreibung, bei der komplexe Phasenfaktoren keine Rolle mehr spielen.
- man erhält am Ende einen gemischten Zustand, mit $p_n \equiv |c_n|^2$ und $\sum p_n = \sum |c_n|^2 > p_n < |c_n|^2$

3.5. Messprozess in der QT vgl. z.B. [Dücker §21] [Schulth §20]

Messung spielen eine spezielle Rolle in der QT; führen zu vielen "philosophischen" Problemen

Postulate der QT (V) (vgl. S. 29, 35)

- (V) Wird ein System in Zustand $|\varphi\rangle$ die Observable \hat{A} gemessen, und wird der Messwert a gefunden, so geht das System bei der Messung in den zugehörigen Eigenzustand $|a\rangle$ über (Zustandsreduktion).

warum ist das problematisch?

- der Beobachter beeinflusst das System!
- was ist das? Messung? Messgerät? empfindlicher Atom? Strahlung?
- man benötigt zwei verschiedene Arten von Zeitentwicklung:
 - messbar (deterministisch!) Schrödinger-Gl.,
 - nicht-messbar aber (nicht-deterministisch!) Messprozess.

Vollständiger Messprozess ergibt zu zwei Schritten weiterzuführen:

	vor der Messung	nach der Messung aber ohne Ablese	Ableseung
Zustand	$ \varphi\rangle = \sum c_n q_n\rangle$		$ q_n\rangle$
statistischer Operator	$\hat{\rho}(\varphi\rangle) = \sum_n c_n ^2 q_n\rangle\langle q_n + \sum_{n \neq m} c_n^* c_m q_n\rangle\langle q_m $	$\hat{\rho} = \sum_n c_n ^2 q_n\rangle\langle q_n $	$\hat{\rho} = q_n\rangle\langle q_n $
Art des Zustandes	rein	"gemischt" "Schritt-Kette"	rein
Prozess	Zustandsreduktion	Kontinuitätsannahme	

Postulat II

→ der erste Schritt ist "nichts anderes" als Dekohärenz durch Ableitung über Messfunktionen (vgl. S. 38)

→ der zweite Schritt ist nur in der klassischen Sichtweise, d.h. ohne Phasenfaktoren

⇒ der Prozess insgesamt bleibt nicht-deterministisch!

(vgl. U202: rein-gemischt kann nicht durch Schrod-Gl. beschreiben werden!)

EPR-Paradoxon (Einstein-Podolsky-Rosen, 1935)

Unzufriedenheit mit Messprozess → Auffassung dass QT zwar nicht falsch, aber "unvollständig" ist; QT als Notwendigkeit einer "besseren" Theorie.

EPR fordern: Localität: falls $|x_1 - x_2| > |t_1 - t_2|$, hängen die Messergebnisse am System A nur von den Parametern des Systems A ab, und die am System B nur von den Parametern

Realität: kann man den Wert einer physikalischen Größe mit Sicherheit vorhersagen, ohne ein System zu stören, dann gilt es am Eckpunkt der physikalischen Realität, das dessen Größe entspricht.

3.6 Harmonischer Oszillator

als Bsp als allg. Formalismus (→ s. auch 4.2.3)

- eines der wenigen Systeme der QM, die wir exakt lösen können
- hat sehr viele Anwendungen - sogar in der relativistischen Quantenfeldtheorie

Klassisch: $\vec{p} = m\vec{v}$

Lineare Physik, $F = -kx$, Newton $k \equiv m\omega^2$
 quantisiertes System, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$
 Madon-Lag: $x(t) = x(0) \cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega} \sin(\omega t)$

QM: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

def. $\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p}$
 $\hat{a}^\dagger \equiv \hat{x} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}$

im Gegensatz zu \hat{x}, \hat{p} sind \hat{a}, \hat{a}^\dagger nicht hermitisch → keine Observable

⇒ $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, $\hat{p} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i}$

es folgt: $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$

• $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{1}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = 1$

• $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$
 $= \frac{\hbar\omega}{4} (-\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)$
 $= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$

def $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$

es folgt: $\hat{H} = \hbar\omega (\hat{N} + \frac{1}{2})$

Eigenzustand von \hat{N} sind also auch EZ von \hat{H}

• $[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a}$

(Kommutator $[\hat{A}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$)

• $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] \hat{a} = \hat{a}^\dagger$

→ aus den EPR-Hypothesen folgt z.B. für den Zufall eines räumlich getrennten Teilchens:



- messe Impuls an System A → \vec{p}_A
 ⇒ kennen \vec{p}_B ohne Messung, wegen $\vec{p}_A + \vec{p}_B = 0$!
- Ortmessung an System B → \vec{x}_B
 ⇒ kennen \vec{x}_A, \vec{p}_B gleichzeitig!

→ QM enthält diese Information nicht, wegen $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, und sei damit laut EPR unvollständig.

Bell'sche Ungleichungen (J.S. Bell, 1964)

Bell findet Beispiel, bei dem die EPR-Hypothesen nicht nur eine "bessere" Beschreibung der Natur verschaffen, sondern sogar zu anderen Vorhersagen als die QM führen!
 ((Diese Beispiele sind als Bell'sche Ungleichungen bekannt)) (brauchen "Spin" zum Verständnis → bis Kap. 4 weiter)
 → jetzt kann die Frage also experimentell beantwortet werden.

Resultat: • QM ist mit dem Experiment verträglich [A. Aspect, 1981, ...]

• keine lokale realistische Theorie ist mit dem Expt. vert.

→ wir müssen also - bis zu dem Zeitpunkt, an dem etwas Besseres vorhanden ist - das Postulat II akzeptieren.

↳ (1) "nichtlokale verborgene Variablen" [Lokalität?]

(2) kein fair-Game: Experimente bei A, B können nicht unabhängig gemacht werden;

(3) akzeptiere den willkürlichen "Kollaps der Wellenfunktion", II; "Kopenhagener Deutung"

(4) "Viel-Welten-Interpretation": das Universum teilt sich bei jeder Messung - alle Möglichkeiten realisiert - Multiversum (Everett)

(5) lokale "Hidden-Variables"; nur Korrelationen sind relevant, keine realst. Interpretation

(6) QM ist nur eine Näherung einer unbekannt fundamentalen Theorie))

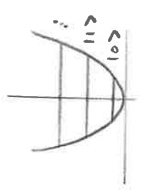
→ siehe auch Artikel von Mermin + GHZ auf homepage

Seien nun $|\lambda\rangle$ die EZ von \hat{N} (und \hat{H}): $\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

- dann gilt:
- $\lambda = \langle \lambda | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda \rangle = \langle \lambda | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda \rangle = \|\hat{a}|\lambda\rangle\|^2 \geq 0$
 - $\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}^\dagger \hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger])|\lambda\rangle = (\lambda-1)\hat{a}|\lambda\rangle$
 $\rightarrow \hat{a}|\lambda\rangle$ ist auch ein EZ von \hat{N} (und \hat{H}),
 aber mit EW $\lambda-1$
 \rightarrow man nennt \hat{a} "Vernichtungs-" oder "Absteigeoperator"
 - $\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = (\hat{a}^\dagger \hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger])|\lambda\rangle = (\lambda+1)\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$
 $\rightarrow \hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ ist auch ein EZ von \hat{N} (und \hat{H}),
 aber mit EW $\lambda+1$
 \rightarrow man nennt \hat{a}^\dagger "Erzeugnis-" oder "Aufsteigeoperator"

\rightarrow also hat $\hat{a}|\lambda\rangle$ die EW $\lambda-1$; ...; $\hat{a}^n|\lambda\rangle$ die EW $\lambda-n$
 aber alle $\lambda \geq 0 \Rightarrow \lambda \in \{0, 1, 2, \dots\}$ und $\hat{a}|0\rangle = 0$

haben also mit Ableiten $\lambda \rightarrow \lambda-1$: $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$
 $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle$



der Zustand $|0\rangle$ heißt Grundzustand
 der entsprechende Energie-EW ist $\frac{\hbar\omega}{2}$ (Nullpunktsenergie)
 die anderen Zustände sind $|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$

Bestimmung der Normierungskonstanten c_n ($c_0 = 1$ Grund)

$$|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = c_n \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle$$

$$1 = |c_n|^2 = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 \langle n-1 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n-1 \rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} \langle n-1 | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n-1 \rangle \rightarrow n+1$$

$$\Rightarrow |c_n| = |c_{n-1}| \frac{1}{\sqrt{n}}$$

$$\Rightarrow |c_1| = 1, |c_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}, |c_3| = \frac{1}{\sqrt{3!}}, \dots, |c_n| = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

falls nur die c_n reell und positiv wählen, gilt also

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

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

(als Üb: $n|n\rangle = \hat{N}|n\rangle = (n+\frac{1}{2})|n\rangle = \dots$)

\rightarrow haben also alle Erzeugnisse rechnerisch bestimmt!
 (eine Ableitung, ...)

Wellenfkt. in Ortsdarstellung

- $\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$
- Grundzustand: $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ | $\langle x |$ beide Seiten v.li. mult.
 $\hat{a} = \int dx' |x'\rangle \langle x'|$ einsetzen
- $\rightarrow \int dx' \langle x | \hat{a} | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle = 0$
 $= \int dx' \frac{m\omega}{2\hbar} \langle x | x' \rangle x' + \frac{c}{2\hbar m \omega} \langle x | \hat{p} | x' \rangle$
 $= \int dx' \delta(x-x') x' + \frac{c}{2\hbar m \omega} (-i\hbar) \delta(x-x')$ (s.S.31 (norm. Form. \rightarrow Schritt 6))
 $= x \delta(x-x')$ vgl. Normierung, s.S.30

$\Rightarrow \int dx' x \delta(x-x') \psi_0(x) = 0$ (in $\partial_x \delta$ -Integral PZ)

Lsg: $\psi_0(x) = C \cdot \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)$

Norm: $\frac{1}{|C|^2} = \int dx e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} = \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}}$ $\rightarrow |C| = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$

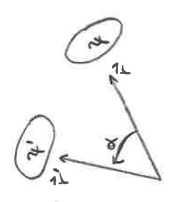
die restlichen Zustände folgen aus dem Grundzustand:

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle = \langle x | \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \hat{a}^n x | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \partial_x \right)^n \psi_0(x)$$

4. Symmetrien in der QM: Kugelsymmetrie, Drehimpuls

- bisher: nur 1D-Systeme betrachtet.
- Physik: 3D!
- falls es nur Zentralkräfte gibt, ist das System kugelsymmetrisch.
- \rightarrow weitreichende Konsequenzen!
- ursprünglich gilt $\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \hbar l |m\rangle$
- nach Drehung bzw Rotation R des Systems: $|\psi'\rangle = U(R) |\psi\rangle$
- wegen $\langle \psi' | \hat{L} | \psi' \rangle = 1 = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle$ muss $U(R)$ unitär sein: $U^\dagger U = \mathbb{1}$



das System ist Symmetrisch, falls $|\psi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ dieselbe Bz. aufwählen: $\langle \psi | \varphi \rangle \stackrel{?}{=} \langle \varphi | \psi \rangle$

$\Rightarrow \langle \psi | \varphi \rangle \stackrel{?}{=} \langle \hat{U}^{-1}(R) \hat{U}(\psi) | \hat{U}(\varphi) \rangle$
 $\Rightarrow \hat{H} \stackrel{?}{=} \hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R)$

für "kleine" Drehungen $\hat{U}(R) \approx \mathbb{1} + i \sum_{\alpha} \hat{G}_{\alpha} \epsilon_{\alpha}$ Generator $|\epsilon_{\alpha}| \ll 1$

ist $\hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \approx \hat{H} - i \sum_{\alpha} [\hat{G}_{\alpha}, \hat{H}] \epsilon_{\alpha}$

und $\hat{U}^{\dagger}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \approx \hat{H} - i \sum_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}^{\dagger} \epsilon_{\alpha}$ $\Rightarrow \hat{G}$ hermitisch ($\hat{G}^{\dagger} = \hat{G}$),
 damit $\hat{U}^{\dagger} \hat{U} = \mathbb{1}$

$\rightarrow \hat{H} \stackrel{?}{=} \hat{U}^{-1}(R) \hat{H} \hat{U}(R) \approx \hat{H} - i \sum_{\alpha} [\hat{G}_{\alpha}, \hat{H}] \epsilon_{\alpha}$
 $\Rightarrow [\hat{G}_{\alpha}, \hat{H}] \stackrel{?}{=} 0$

falls ja $\Rightarrow \hat{G}$ und \hat{H} haben gleichzeitige Eigenzustände (vgl. Satz auf S.32)

\rightarrow es ist also wichtig, \hat{G} und seine EZ zu bestimmen.

4.1 Gruppen und Generatoren

allg. Sprache zur Beschreibung von Symmetrien: Gruppentheorie

Def Gruppe $G \equiv$ Menge im Euklid. \mathbb{R}^3 , \mathbb{R}^2, \dots

mit einer Verknüpfung " \cdot ", so dass gilt:

- (i) $g_1, g_2 \in G \Rightarrow g_1 \cdot g_2 \in G$
- (ii) $g \cdot (g_1 \cdot g_2) = (g \cdot g_1) \cdot g_2$ (Assoziativität)
- (iii) $e \cdot g = g \cdot e = g$ (Neutralität E)
- (iv) $g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e$ (Inverses Element)

eine allg. Drehung kann durch Achse \vec{n} ($|\vec{n}|=1$) und Winkel α ($\begin{matrix} c = \cos(\alpha) \\ s = \sin(\alpha) \end{matrix}$)

parametrisiert werden: $\hat{P} = R(\vec{n}, \alpha) \hat{P} = c \hat{P} + (1-c)(\vec{n} \cdot \hat{P}) \vec{n} + s \vec{n} \times \hat{P}$

\rightarrow Drehungen bilden eine Gruppe, denn: (s. Übung, Aufgabe 26)

- (i) $R(\vec{n}_2, \alpha_2) R(\vec{n}_1, \alpha_1)$ ist auch Drehung
- (ii) "triviale"
- (iii) $e \equiv R(\vec{n}, 0)$
- (iv) $R^{-1}(\vec{n}, \alpha) = R(\vec{n}, -\alpha)$

- Bem:
- die $R(\vec{n}, \alpha)$ können als 3×3 -Matrizen dargestellt werden
 - wegen $|R\vec{r}|^2 = |\vec{r}|^2$ sind die R orthogonal: $R^T R = \mathbb{1}$
 - es gilt $\det R = 1$ (als Übung) speziell, wenn $\det R = 1$
 - diese Gruppe heißt SO(3) orthogonal, wenn $R^T R = \mathbb{1}$

für infinitesimal kleine Drehungen, $|\alpha| \ll 1$, gilt:

$\hat{P} = \vec{r} + \alpha \vec{n} \times \vec{r} + O(\alpha^2)$ Levi-Civita-Tensor

bzw. $r_i' = r_i + \alpha \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} n_j r_k + O(\alpha^2)$

$= \sum_{i,j,k} \left\{ \delta_{ik} - i \alpha \sum_j n_j \epsilon_{ijk} \right\} r_k + O(\alpha^2)$
 def. $\equiv (\Sigma_j)_{ik}$

also $\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Bem: $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ sind hermitisch: $\Sigma_j^{\dagger} = \Sigma_j$

• die Σ_j genügen der "Lie-Algebra" der SO(3) (s. Übg., Ab. 28a)

$[\Sigma_1, \Sigma_2] = i \Sigma_3$, $[\Sigma_2, \Sigma_3] = i \Sigma_1$, $[\Sigma_3, \Sigma_1] = i \Sigma_2$

bzw. $[\Sigma_j, \Sigma_k] = i \sum_{m=1}^3 \epsilon_{jkm} \Sigma_m$

• die Drehmatrix ist

$R(\vec{n}, \alpha) = \mathbb{1} - i \alpha \sum_j n_j \Sigma_j + O(\alpha^2) = \mathbb{1} - i \alpha \vec{n} \cdot \vec{\Sigma} + O(\alpha^2)$

• man kann sogar zeigen (s. Übung, Aufgabe 28b),

dass $R(\vec{n}, \alpha) = \exp(-i \alpha \vec{n} \cdot \vec{\Sigma})$ gilt, d.h. die Generatoren Σ_j

spannen nicht nur die "kleine", sondern auch die "große" Drehungen.

(dies gilt für viele Gruppen; nicht nur für die SO(3)!)

wie transformiert sich ein der Zustand $|\psi\rangle$ bzw. Wellenfkt $\psi(\vec{r})$?

Annahme: $\psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$ (also "skalare" Fkt., wie Lichte)

$\Rightarrow \psi'(\vec{r}') \stackrel{!}{=} \psi(\vec{r})$

$\psi(R(\vec{n}, \alpha)\vec{r}') = \psi(\vec{r}' - \alpha \vec{n} \times \vec{r}') + O(\alpha^2)$

$\psi(\vec{r}') - \alpha (\vec{n} \times \vec{r}') \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \psi(\vec{r}') + O(\alpha^2)$

$\equiv \hat{U}(\vec{n}, \alpha) \psi(\vec{r}')$

Notation für Ez : $\vec{j}^2 | \lambda, m \rangle = \hbar^2 \lambda | \lambda, m \rangle$
 $\vec{j}_3 | \lambda, m \rangle = \hbar m | \lambda, m \rangle$
 $\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{m m'}$

es gilt: $\lambda \hbar^2 = \langle \lambda, m | \vec{j}^2 | \lambda, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle \lambda, m | \vec{j}_i^2 | \lambda, m \rangle$
 ("j_i hermitisch") $\Rightarrow \sum_{i=1}^3 \|\vec{j}_i | \lambda, m \rangle\|^2 \geq 0$

def $\vec{j}_+ = \vec{j}_1 + i \vec{j}_2, \vec{j}_- = \vec{j}_1 - i \vec{j}_2 \Rightarrow \vec{j}_+^\dagger = \vec{j}_-$

Varianzgleichungen über \vec{j}_\pm :

- (1) $[\vec{j}_+, \vec{j}_+] = 0 = [\vec{j}_-, \vec{j}_-]$
- (2) $[\vec{j}_3, \vec{j}_\pm] = \pm i [\vec{j}_1, \vec{j}_2] = \pm i \hbar \vec{j}_\pm = \pm \hbar \vec{j}_\pm$
- (3) $[\vec{j}_+, \vec{j}_-] = i [\vec{j}_1, \vec{j}_2] - i [\vec{j}_2, \vec{j}_1] = 2 \hbar \vec{j}_3$

außerdem: (4) $\vec{j}_+^2 \vec{j}_+ + \vec{j}_+ \vec{j}_+^2 = (\vec{j}_+ + i \vec{j}_2)(\vec{j}_+ - i \vec{j}_2) + \vec{j}_+^2 + i [\vec{j}_1, \vec{j}_2]$
 $= \vec{j}_+ \vec{j}_+ + \vec{j}_+^2 - \hbar \vec{j}_3 = \vec{j}_+ \vec{j}_+ + \vec{j}_+^2 + \hbar \vec{j}_3$

daraus folgt: $\vec{j}_+^2 | \lambda, m \rangle \stackrel{!}{=} \hbar^2 \lambda | \vec{j}_+ | \lambda, m \rangle$
 $\Rightarrow \vec{j}_+^2 - E \cdot \text{Id}$ wird von \vec{j}_+ null annulliert

- $\vec{j}_3 (\vec{j}_+ | \lambda, m \rangle) = \{ \vec{j}_+ \vec{j}_3 + [\vec{j}_3, \vec{j}_+] \} | \lambda, m \rangle \stackrel{!}{=} \hbar(m \pm 1) (\vec{j}_+ | \lambda, m \rangle)$
 $\Rightarrow \vec{j}_\pm$ sind Auf/Absteigeop.: $\vec{j}_+ | \lambda, m \rangle \rightarrow \vec{j}_+ | \lambda, m+1 \rangle$

• $0 \leq \| \vec{j}_+ | \lambda, m \rangle \|^2 = \langle \lambda, m | \vec{j}_+^\dagger \vec{j}_+ | \lambda, m \rangle$

(4) $\langle \lambda, m | \vec{j}_+^2 - \vec{j}_+^2 + \hbar \vec{j}_3 | \lambda, m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m \pm 1)$
 $\Rightarrow m \pm 1 \leq \lambda$

\rightarrow für gegebenes λ muss es also ein $m_{\max} = j$ geben,

so dass $\vec{j}_+ | \lambda, j \rangle = 0$

$\Rightarrow \| \vec{j}_+ | \lambda, j \rangle \|^2 = 0 \Rightarrow \lambda = j^2 + j = j(j+1)$

\rightarrow wegen $\vec{j}_j, m \rightarrow -m$ ist $m_{\min} = -j$, so dass $\vec{j}_- | \lambda, -j \rangle = 0$

(Erinnerung: Zeitableitungsgeneratoren "Parameter" "Generatoren")
 $\vec{U}(t_0) = \exp(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}(t-t_0)H + O(\hbar^{-2})$

analog: $\vec{U}(R) = 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{r} \times \vec{p} + O(\alpha^2)$
 $= 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \alpha n_j [\vec{r} \times (-i \hbar \vec{p}_j)]_j + O(\alpha^2)$

Frage \Rightarrow Drehungen um Bohrersche Impulsoperator $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

generiert. Die Komponenten L_i gehören der $SO(3)$ Lie-Algebra
 $[L_i, L_j] = \sum_{k=1}^3 i \hbar \epsilon_{ijk} L_k$ (vgl. Aufgabe 27a)

Eine große Drehung: $\vec{U}(R) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{L})$

4.2 Drehimpuls-Eigenwerte

Lie-Algebra für Bohrersche Impuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} : [L_i, L_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} L_k$
 Erweitern-Kommutator: Summen über doppelte Indizes

\rightarrow das ist dieselbe Algebra wie für die Rotationsgeneratoren der $SO(3)$,

vgl. S. 45: $[\sum_{j=1}^3 \Sigma_j, \Sigma_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} \Sigma_m \Leftrightarrow [L_j, L_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} L_m$

Deshalb nennt man diese Algebra ist die Drehimpulsalgebra.

Wir nennen die Generatoren nun $\vec{j}_i : [j_i, j_k] = i \hbar \epsilon_{ijk} j_k$

EW und EZ über \vec{j}_i ?

kommen (analog zur LQ des ham. Os.) rein abgeleitet Leitformel werden!

Lemma: Kugelsymmetrie $\Leftrightarrow [H, j_i] = 0$

$\Rightarrow j_i$ -Eigenzustände sind auch H -EZ. (vgl. Satz auf S. 32)

• $[j_1, j_2] = i \hbar j_3, [j_2, j_3] = i \hbar j_1, [j_3, j_1] = i \hbar j_2$

\Rightarrow es gibt keine gleichzeitigen EZ der j_i .

Wir wählen unten diejenigen von j_3 .

• $[\vec{j}_+, j_3] = 0 = [\vec{j}_+^2, H]$ (siehe Übung, Aufgabe 27a)

$\Rightarrow \vec{j}_+^2$ hat gleichzeitige EZ mit j_3 (und H).

→ die möglichen Werte sind also $-j, -j+1, \dots, j-1, j$
 es gibt $2j+1$ solche Werte $\Rightarrow 2j+1 \in \mathbb{N} \Rightarrow j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$

Schreibe nun statt $|\lambda, m\rangle = |j(j+1), m\rangle$ einfach nur $|j, m\rangle$

Zusammenfassung:
 $\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$

$$\hat{J}_3 |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$ Drehimpuls ist quantisiert

$m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ $2j+1$ Stufen

Normierung der EZ

$$\langle j, m | j, m \rangle = C_+(j, m) \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle \stackrel{(1)^\dagger}{\Rightarrow} \langle j, m | j, m \rangle = C_+^*(j, m) \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle j, m | \hat{J}_+ \hat{J}_+ |j, m \rangle = |C_+(j, m)|^2 \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle \stackrel{(14)}{=} \hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 = \hbar^2 (j(j+1) - m^2) = 1$$

$$\Rightarrow |C_+(j, m)|^2 = \hbar^2 (j(j+1) - m^2)$$

Wähle z.B. die Condon-Shortley-Phasenkonvention $C_+(j, m) = \hbar^{-1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$
 genauso: $\langle j, m | j, m \rangle = C_-(j, m) \langle j, m-1 | j, m-1 \rangle \Rightarrow C_-(j, m) = \hbar^{-1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$
 damit kann man nun alle Phasenkonvention berechnen:

$$\begin{aligned} \langle j, m+1 | \hat{J}_3 |j, m \rangle &= \hbar m \delta_{j, m+1} \\ \langle j, m+1 | \hat{J}_+ |j, m \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle j, m+1 | \hat{J}_+ + \hat{J}_- |j, m \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} (C_+(j, m) \delta_{j, m+1} \delta_{m+1, m} + C_-(j, m) \delta_{j, m} \delta_{m, m+1}) \\ \langle j, m+1 | \hat{J}_- |j, m \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle j, m+1 | \hat{J}_- - \hat{J}_+ |j, m \rangle \\ &= \frac{i\hbar}{2} (C_-(j, m) \delta_{j, m+1} \delta_{m+1, m} - C_+(j, m) \delta_{j, m} \delta_{m, m+1}) \end{aligned}$$

4.3 Ortsdarstellung des Drehimpulses \hat{L}

die Komponenten des Drehimpulses $\hat{L} = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$ erfüllen die Drehimpulsgleichungen \rightarrow können also über die möglichen EW von \hat{L}^2, \hat{L}_3 .

\rightarrow aber \hat{L} hat zusätzliche Eigenschaften, die im allgemeinen \hat{J} nicht hat, so gilt z.B. $\hat{L} \cdot \hat{L} = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = 0$; gilt unter Spalten-Einschubung symm. in i, j, k antisymm. in j, k, i

\rightarrow wolle hier die folgenden \hat{L} -Eigenfunktionen zeigen:

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

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$l \in \{0, 1, 2, \dots\}$ ganzzahlig!

$m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$



(klass. Bild: \hat{L} ist Vektor der Länge $\hbar \sqrt{l(l+1)}$ mit Projektion auf z-Achse $\hbar m$)

(2) Der Teil $\frac{\hbar^2}{2m}$ des Hamilton-Operators kann in Ortsdarstellung

mit Kugelkoordinaten wie folgt geschrieben werden:

$$\langle r | \frac{\hat{L}^2}{2m} | r' \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_\theta^2 + \frac{2}{\tan \theta} \partial_\theta \right) + \frac{\hbar^2}{2m r^2} \hat{L}^2 \right\} \delta^{(3)}(r-r')$$

(3) \hat{L}^2 und \hat{L}_3 operieren nur auf die Winkelkoordinaten.

Die entsprechenden Wellenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \equiv \langle r, \vartheta, \varphi | l, m \rangle$ sind orthogonal, bilden eine vollständige Menge, und können explizit konstruiert werden. Sie heißen Kugelflächenfunktionen.

(zu 1):

Erweitbarkeit von l ist nicht trivial; viele Wege; hier [Münster 9.3.2]

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \frac{\hbar^2}{2} (\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)(\hat{L}_1 - i\hat{L}_2) = \frac{\hbar^2}{2} (\hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2)$$

$$\Rightarrow \hat{L}_+^+ \hat{L}_+ = \frac{\hbar^2}{2} (\hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2), \quad \hat{L}_-^+ \hat{L}_- = \frac{\hbar^2}{2} (\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2)$$

ausgehend von $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = 0 = [\hat{L}_j, \hat{L}_k^+], \quad [\hat{L}_j, \hat{L}_k^+] = i\hbar \delta_{jk}$

findet man $[\hat{L}_1, \hat{L}_1^+] = 1 = [\hat{L}_2, \hat{L}_2^+], \quad \text{Rest} = 0$

und daraus $[\hat{L}_j, \hat{L}_j^+] = 1 = [\hat{L}_j, \hat{L}_j^+], \quad \text{Rest} = 0$

\rightarrow Algebren aus zwei unabhängige harmon. Oszillatoren!

damit wird $\vec{L}_3 = \vec{r}_1 \vec{p}_2 - \vec{r}_2 \vec{p}_1$

$$= \frac{\hbar}{2c} \begin{pmatrix} a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \end{pmatrix} - (2 \cos \varphi)$$

$$= \frac{\hbar}{2c} \begin{pmatrix} a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 + a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 + a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 + a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1 \\ a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 + a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \end{pmatrix}$$

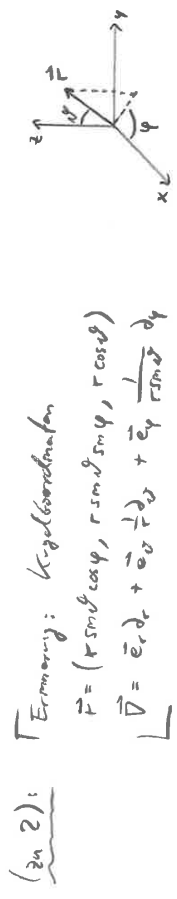
andernseits gilt $\vec{A} \vec{A} = \frac{1}{2} (a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 + i a_1^+ a_2 - i a_2^+ a_1)$

$$\vec{B} \vec{B} = \frac{1}{2} (a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 - i a_1^+ a_2 + i a_2^+ a_1)$$

$$\Rightarrow \hbar (\vec{B} \vec{B} - \vec{A} \vec{A}) = -i \hbar (a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1) = \vec{L}_3$$

\vec{L} EW geradzahlig ($\equiv \vec{N}$ Lem. h.o., S.5. 42)

$\Rightarrow \vec{L}_3 - \text{EW}$ mit geradzahlig!



in Ortsdarstellung: $\langle \vec{r} | \vec{p} | \vec{r} \rangle = -i \hbar \vec{\nabla} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$

und $\vec{L} = -i \hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$, mit (konventionellen) Komponenten (s. Aufgabe 29)

$$\vec{L}_1 = -i \hbar (-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta})$$

$$\vec{L}_2 = -i \hbar (\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta})$$

$$\vec{L}_3 = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

daraus folgt für

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

und wegen (als Übung, oder z.B. EDP) $\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$

gilt $\frac{\Delta^2}{2m}$ $\Rightarrow \frac{\Delta^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2$

- zu (3):
- Orthogonalisierung der Eigenzustände: $\int d\varphi \int d\theta \int d\varphi Y_{lm}^*(\varphi, \theta) Y_{l'm'}(\varphi, \theta) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
 - Vollständigkeit: kann jede Fkt $f(\varphi, \theta)$ darstellen als \sum coeff. Basis $f(\varphi, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\varphi, \theta)$
 - mit $a_{lm} = \int d\varphi \int d\theta \sin \theta \int d\varphi Y_{lm}^*(\varphi, \theta) f(\varphi, \theta)$

• Konstruktion: Konstruiere die Leiharmoniken

$$\vec{L}_{\pm} = \vec{L}_1 \pm i \vec{L}_2 = \hbar \left\{ (\pm \sin \theta \mp i \cos \theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} + i (\cos \theta \pm i \sin \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

$$= \hbar e^{\pm i \varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}$$

$\vec{L}_3 = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

damit bekommt man also

- $\vec{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\varphi, \theta) = i m Y_{lm}(\varphi, \theta)$
- $\Rightarrow Y_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{e^{i m \varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{lm}(\theta)$
- $\vec{L}_{\pm} |l, m\rangle = 0 \Rightarrow \hbar e^{\pm i \varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} \frac{e^{i m \varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{lm}(\theta) = 0$
- $\Leftrightarrow \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right\} F_{lm}(\theta) = 0$
- $\Rightarrow F_{lm}(\theta) = K_l \cdot (\sin \theta)^k$
- (Bestimmung der Konstanten K_l durch $\int d\varphi \int d\theta \sin \theta |F_{lm}(\theta)|^2 = 1$)
- $\langle l, m | l, m \rangle = \frac{1}{c(l, m)} \int c(l, m) |l, m\rangle$ $\Rightarrow c(l, m) = \frac{1}{\sqrt{c(l, m)}}$ $\Rightarrow c(l, m) = 1$

(S. 5. 48) \Rightarrow Übung, A 27.6

4.4 Spin

zu Beginn der Behandlung von Drehungen:
 Transformieren $|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \vec{J}} |\psi\rangle$

(4.5.45) für "schöne" Fkt'n $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \in \mathbb{C}$
 wurde \vec{J} durch den Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ realisiert.

(4.5.46) wir hatten gesehen, dass die Drehimpulsalgebra auch durch alle $SO(3)$ -Rotationen \vec{E}_j realisiert werden kann, $[\frac{\hbar}{i} \vec{E}_j, \frac{\hbar}{i} \vec{E}_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} \frac{\hbar}{i} \vec{E}_m$

→ Universalisierungsprinzip

Seien \vec{S}_j ($j \in \{1, 2, 3\}$) konstante $(2s+1) \times (2s+1)$ -Matrizen mit der Eigenschaft $[\vec{S}_j, \vec{S}_k] = i \hbar \epsilon_{jkm} S_m$.

Dann genügen die Operatoren $\vec{J}_k \equiv \vec{L}_k + \vec{S}_k$ der Drehimpulsalgebra (weil die gemischten Terme verschwinden).

Der Zustand $|\psi\rangle$ hat insgesamt $(2s+1)$ Freiheitsgrade,

$$\langle \vec{r}, m | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}, s | \psi \rangle \\ \langle \vec{r}, s-1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \vec{r}, -s | \psi \rangle \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2s+1}$$

"Spinor-167"

und wir sprechen von einem Torleben mit Spin s

- die "alte" (schöne) Wellenfkt: Spezialfall $s=0$
- die 3x3-Rotationen \vec{E}_j : Spezialfall $s=1$
- fortst: $s=\frac{1}{2}$

Generatoren für $s=\frac{1}{2}$

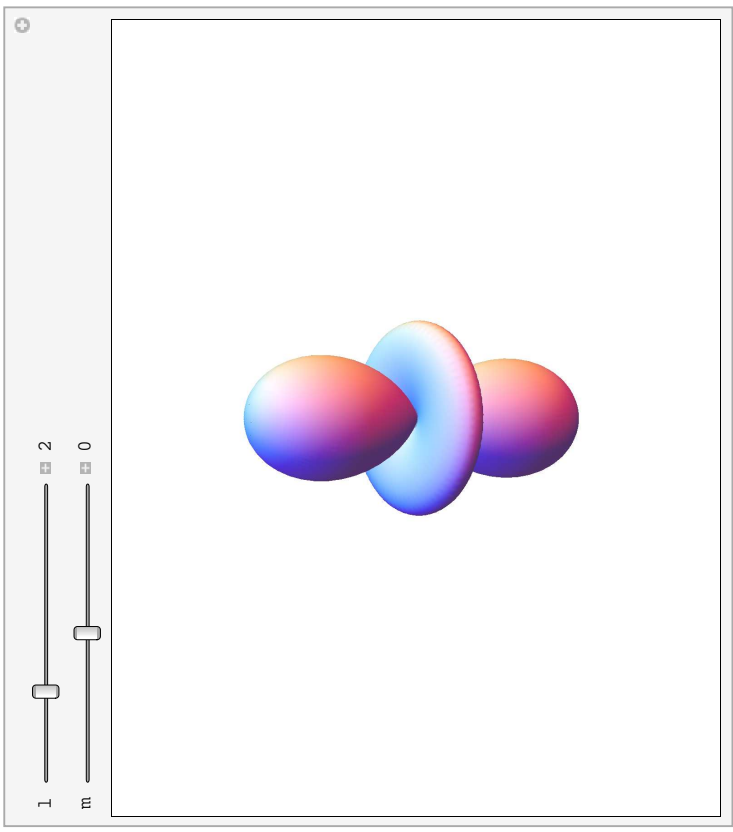
können Generatoren für beliebige Spinganzahl s mit Hilfe der allgemeinen Ergebnisse auf S.48 (← normale EZ $|j, m\rangle$ von \vec{J}^2, J_3) konstruieren:

$$C_{\pm}(j, m) = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$$

■ Kugelflächenfunktionen – Visualisierung

```

In[1]:= Manipulate[ParametricPlot3D[Evaluate[{Sin[theta] Cos[phi], Sin[theta] Sin[phi], Cos[theta]}]
Abs[SphericalHarmonicsY[1, m, theta, phi]]], {phi, -Pi, Pi},
{theta, 0, Pi}, PlotRange -> {{-5, 5}, {-5, 5}, {-1.1, 1.1}}, Mesh -> False,
PlotPoints -> {36, 18}, MaxRecursion -> ControlActive[0, 2], ViewAngle -> .246,
ImageSize -> {500, 377}, Axes -> False, SphericalRegion -> True, Boxed -> False],
{{1, 2, "1"}, 0, 7, 1, Appearance -> "Labeled"}, {{m, 0, "m"}, -1, 1, 1, Appearance -> "Labeled"}]
    
```



Out[1]=

$\bullet \langle \frac{1}{2}, s_3 | \hat{S}_z | \frac{1}{2}, s_3 \rangle = \hbar s_3 \delta_{s_3 s_3}$
 $\Rightarrow \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$\bullet \langle \frac{1}{2}, s_3 | \hat{S}_z | \frac{1}{2}, s_3 \rangle = \frac{\hbar}{2} [\sqrt{(\frac{1}{2}-s_3)(\frac{1}{2}+s_3)} \delta_{(s_3+1)s_3} + \sqrt{(\frac{1}{2}+s_3)(\frac{1}{2}-s_3)} \delta_{(s_3-1)s_3}]$
 $\Rightarrow \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$\bullet \langle \frac{1}{2}, s_3 | \hat{S}_z | \frac{1}{2}, s_3 \rangle = \frac{\hbar}{2} [\sqrt{(\frac{1}{2}+s_3)(\frac{1}{2}-s_3)} \delta_{(s_3+1)s_3} - \sqrt{(\frac{1}{2}-s_3)(\frac{1}{2}+s_3)} \delta_{(s_3-1)s_3}]$
 $\Rightarrow \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

\Rightarrow aktuelle Pauli-Matrizen σ_j , mit $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j$
 $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

\rightarrow es gilt: $\sigma_j^2 = \sigma_j$, $\sigma_j \sigma_j = 0$
 $\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{1}_{2 \times 2} + i \epsilon_{jkm} \sigma_m$ ($\Rightarrow \begin{cases} [\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3 \text{ etc} \\ \sigma_j^2 = \mathbb{1}_{2 \times 2} \\ \{\sigma_1, \sigma_2\} = 2\delta_{12} \end{cases}$)

\rightarrow also faktoriell $[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = \frac{\hbar^2}{4} [\sigma_j, \sigma_k] = \frac{\hbar^2}{4} 2i \epsilon_{jkm} \sigma_m = i \hbar \epsilon_{jkm} \hat{S}_m$

\rightarrow eine mikroskopische Drehung um \hat{S}_m -VR ist also $\exp(-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{n} \cdot \hat{S}) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{n} \cdot \hat{\sigma}) = \mathbb{1}_{2 \times 2} \cos(\frac{\alpha}{2}) - i \hat{n} \cdot \hat{\sigma} \sin(\frac{\alpha}{2})$
 ((diese Matrix ist unitär und hat $\det = 1$, gehört also zur $SU(2)$)
 ((Drehung um $\alpha = 2\pi$: $-\mathbb{1}_{2 \times 2}$! Drehung um 4π : $\mathbb{1}_{2 \times 2}$)

Erwartungswerte

mit der vektorwertigen Spinor-WF $\langle \frac{1}{2}, s_3 | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \psi \rangle \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\frac{1}{2}) \\ \psi_-(\frac{1}{2}) \end{pmatrix}$

kann man jetzt Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten berechnen:

Skalarprodukt $\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r \sum_{s_3=\pm \frac{1}{2}} \langle \psi | \hat{r}_s | \psi \rangle < \psi | \hat{r}_s | \psi \rangle$
 $= \int d^3r [\psi_+^*(\frac{1}{2}) \psi_+(\frac{1}{2}) + \psi_-^*(\frac{1}{2}) \psi_-(\frac{1}{2})]$

konjugierter Spinor $\langle \psi | \hat{r}_s \rangle = (\psi_+^*(\frac{1}{2}), \psi_-^*(\frac{1}{2}))$
Norm $\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r [|\psi_+(\frac{1}{2})|^2 + |\psi_-(\frac{1}{2})|^2]$

Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort \vec{r} : \hat{S}_z -Erwartungswert $= \int d^3r \psi_+^* \psi_+ - \psi_-^* \psi_-$
 $= \int d^3r [\psi_+^*(\frac{1}{2}) \psi_+(\frac{1}{2}) - \psi_-^*(\frac{1}{2}) \psi_-(\frac{1}{2})]$

Erwartungswert $\langle \psi | \hat{S}_j | \psi \rangle = \int d^3r \sum_{s_3=\pm \frac{1}{2}} \psi_{s_3}^* \hat{S}_j \psi_{s_3}$
 $= \int d^3r \begin{pmatrix} \psi_+^*(\frac{1}{2}) & \psi_-^*(\frac{1}{2}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{S}_j^{(+)} \\ \hat{S}_j^{(-)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\frac{1}{2}) \\ \psi_-(\frac{1}{2}) \end{pmatrix}$

Hamilton-Operatoren

\hat{H} muss auch als Matrix betrachtet werden.
 Seine Form bestimmt, welche Op's glattezeitige EZ mit \hat{H} haben.

Bsp: $\hat{H} = \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \mathbb{1}_{(2s+1) \times (2s+1)}$ (meistens nicht explizit geschrieben)
 ist \hat{S} -unabhängig
 $\Rightarrow [\hat{S}_z, \hat{H}] = [\hat{S}_z, \hat{H}] = 0 = [\hat{L}_z, \hat{H}] = [\hat{L}_3, \hat{H}]$
 \rightarrow können also s_3 und l_3 gleichzeitig bestimmen.

Bsp: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \kappa \hat{L} \cdot \hat{S}$
 jetzt gilt $[\hat{L}_i, \hat{H}] = \kappa [\hat{L}_i, \hat{L}_j \cdot \hat{S}_j] = \kappa i \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \hat{S}_j \neq 0$
 $[\hat{S}_i, \hat{H}] = \kappa [\hat{S}_i, \hat{L}_j \cdot \hat{S}_j] = \kappa \hat{L}_j i \epsilon_{ijk} \hat{S}_m \neq 0$

aber der Gesamt Drehimpuls ist immer noch erhalten:

$[\hat{J}_i, \hat{H}] = [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{H}]$
 $= i \hbar \kappa (\epsilon_{ijk} \hat{L}_m \hat{S}_j + \epsilon_{ijk} \hat{L}_j \hat{S}_m)$
 $= i \hbar \kappa \epsilon_{ijk} (\hat{L}_m \hat{S}_j - \hat{L}_m \hat{S}_j) = 0$

umbezeichnen
 $i \rightarrow j, j \rightarrow k, k \rightarrow i$

4.5 Addition von Drehimpulsen

bei vielen Systemen kommen mehrere unabhängige Drehimpulse vor (s. Bsp 2 auf S. 54, oder Übz Aufgabe 32), z.B.:

- Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S} $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
- zwei Teilchen mit jeweils $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}^{(2)}$ $\rightarrow \vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$

brauche hier die J_x, J_y, J_z -Relationen

\rightarrow zwei Regelketteln für J_x und J_y um vertauschte Operatoren:

(1) $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] = 0$ (denn: $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] = 0$)

ERz: $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] = 0$ (denn: $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] = 0 = [\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}]$)

(2) $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] \neq 0$ (denn: $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] \neq 0$)

\Rightarrow $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] \neq 0$ können nicht kommutieren

ERz: $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] \neq 0$, mit $[\vec{J}^{(1)}, \vec{J}^{(2)}] = \hbar^2 \vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)}$

\rightarrow können einen Basiswechsel zwischen diesen beiden Regelketten

durchführen: $|\vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)} \vec{M}\rangle = \sum_{m_1, m_2} |\vec{J}^{(1)} m_1 \vec{J}^{(2)} m_2 | \vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)} \vec{M}\rangle$

\rightarrow wir müssen also diese Übergangsmatrix (CG-Koeffiz.) bestimmen.

$\vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)}$ gegeben \rightarrow mögliche Werte von $\vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)}$

- in der Basis $|\vec{J}^{(1)} m_1 \vec{J}^{(2)} m_2 \rangle$ gilt es $(2j_1+1)(2j_2+1)$ Zustände, also auch sinnvoll in der Basis $|\vec{J}^{(1)} \vec{J}^{(2)} \vec{M}\rangle$.

$\vec{J}_3 = \vec{J}_3^{(1)} + \vec{J}_3^{(2)} \Rightarrow M = m_1 + m_2$

- $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ und $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$
- $-j_1 \leq M - m_2 \leq j_1$ und $-j_2 \leq M - m_1 \leq j_2$
- $-j_1 \leq j_2 - j_2 \leq j_1$ und $-j_2 \leq j_1 - j_1 \leq j_2$
- $j_2 - j_1 \leq j \leq j_1 + j_2$ und $j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$

$\Rightarrow |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$, oder äquivalent:

- die Quantenzahlen m_1 wachsen in Einheiten von 1 ($m_1 \in \{j_1, j_1-1, \dots, -j_1\}$)

\Rightarrow die QZ-Zahl $M = m_1 + m_2$ wächst in Einheiten von 1

\Rightarrow alle j müssen zwischen ganz- oder halbzahlige sein

$j \in \{ |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \}$

• Test: Gesamtzahl der Zustände (sei o.B.d.A. $j_1 \geq j_2$)

$\sum_{j_1 - j_2}^{j_1 + j_2} (2j+1) = \sum_{j=1}^{j_1 + j_2} (2j+1) - \sum_{j=1}^{j_1 - j_2} (2j+1)$

benutze: $\sum_{i=1}^n i = n \cdot \frac{n+1}{2}$

$(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) + (j_1 - j_2) - (j_1 - j_2 - 1) - (j_1 - j_2 - 1)$

$\dots = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$

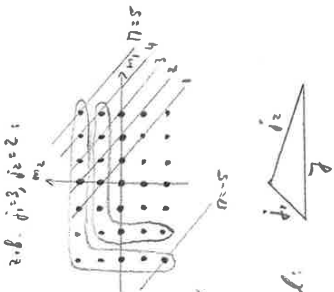
\Rightarrow die verschiedenen j -Werte sind also nicht "entartet"

Bestimmung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

können wieder die Kommutatoren sowie die allg. Ergebnisse

von S. 48 benutzen: $\vec{J}^2 |j, m\rangle = C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle$

mit $C_{\pm}(j, m) = \hbar \sqrt{j(j \pm 1) \mp m(m \pm 1)}$ (*)



Strategie

(a) bestimmte "Hauptnormen" Zustand $|j_1 j_2 j_3 \rangle$;

wegen $m_1, m_2 = M$ ist $|j_1 j_2 j_3 \rangle = \sum_{m_1, m_2} a_{m_1, m_2} |j_1 m_1 \rangle |j_2 m_2 \rangle$

wobei $m \in \{0, 1, \dots\}$ alle Werte mit $\begin{cases} -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{cases}$ annehmen

(b) operiere mit $J_+ = J_+^{(1)} + J_+^{(2)}$ auf diese bzgl.

$L_{j_1, 0} = 0$, auf der rhs (*) bauen;

\rightarrow erhalte lineare Gleichungen für die a_{m_1, m_2}

(c) Normierungslösung $\sum |a_{m_1, m_2}|^2 = 1$

(d) wähle eine Phasekonvention, z.B. Condon-Shortley: $a_0 \in \mathbb{R}^+$

(e) $|j_1 j_2 j_3 \rangle$ durch Operation mit $J_- = J_-^{(1)} + J_-^{(2)}$ erhalten.

Bsp: $j_1 = 2, j_2 = 3, j_3 = 3 \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$

(a) $|2333\rangle = a_0 |2321\rangle + a_1 |2312\rangle + a_2 |2303\rangle$

(b) $0 = a_0 J_+^{(1)} |2331\rangle + a_1 (J_+^{(1)} + J_+^{(2)}) |2312\rangle + a_2 J_+^{(1)} |2303\rangle$

(c) $0 = \sqrt{10} a_0 + 2a_1, \quad 0 = a_1 + 2a_2$

(d) $1 = |a_0|^2 (1 + \frac{5}{2} + \frac{5}{2}) \Rightarrow |a_0| = \frac{1}{\sqrt{6}}$

(e) $a_0 = +\frac{1}{\sqrt{6}}, \quad a_1 = -\sqrt{\frac{5}{2}}, \quad a_2 = \sqrt{\frac{5}{12}}$

J_- auf $6j_3$

$$C_{(3,3)} |2332\rangle = a_0 \{ C_{-(2,2)} |2311\rangle + C_{-(3,1)} |2320\rangle \} + a_1 \{ C_{(2,1)} |2302\rangle + C_{(3,2)} |2311\rangle \} + a_2 \{ C_{-(2,0)} |23-13\rangle + C_{-(3,3)} |2302\rangle \}$$

\rightarrow man findet die Clebsch-Gordan-Koeffiz. in Tabellen (z.B. Kompa)

manchmal werden sie auch als $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv \frac{(-1)^{j_1 - m_1}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_3, m_3 \rangle$

\rightarrow für Näherungen - Formeln: Clebsch-Gordan $\{ \{ j_1, m_1 \}, \{ j_2, m_2 \} \} \{ j_3, m_3 \}$

\rightarrow Anwendungen: Übungen

35. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/\sqrt{15}$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation: $\begin{matrix} J & J & \dots \\ M & M & \dots \\ m_1 & m_2 & \dots \\ m_1 & m_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{matrix}$ Coefficients

$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
 $Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
 $Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} (\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2})$
 $Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
 $Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$

$3/2 \times 1/2$
 $3/2 \times 3/2$
 $2 \times 3/2$
 2×2
 2×1
 1×1
 1×2
 1×3
 1×4
 1×5
 1×6
 1×7
 1×8
 1×9
 1×10
 1×11
 1×12
 1×13
 1×14
 1×15
 1×16
 1×17
 1×18
 1×19
 1×20
 1×21
 1×22
 1×23
 1×24
 1×25
 1×26
 1×27
 1×28
 1×29
 1×30
 1×31
 1×32
 1×33
 1×34
 1×35
 1×36
 1×37
 1×38
 1×39
 1×40
 1×41
 1×42
 1×43
 1×44
 1×45
 1×46
 1×47
 1×48
 1×49
 1×50
 1×51
 1×52
 1×53
 1×54
 1×55
 1×56
 1×57
 1×58
 1×59
 1×60
 1×61
 1×62
 1×63
 1×64
 1×65
 1×66
 1×67
 1×68
 1×69
 1×70
 1×71
 1×72
 1×73
 1×74
 1×75
 1×76
 1×77
 1×78
 1×79
 1×80
 1×81
 1×82
 1×83
 1×84
 1×85
 1×86
 1×87
 1×88
 1×89
 1×90
 1×91
 1×92
 1×93
 1×94
 1×95
 1×96
 1×97
 1×98
 1×99
 1×100

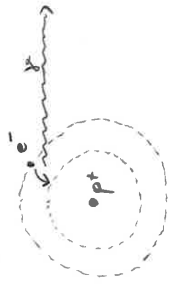
$d_{l,m}^l = (-1)^{m-l} d_{l,m}^{l,m} = d^{l,-m,-m}$
 $d_{l,m}^l = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \ell^m e^{-im\phi}$
 $d_{1,1}^1 = \frac{1+\cos \theta}{2}$
 $d_{1,0}^1 = \cos \theta$
 $d_{1,-1}^1 = \frac{1-\cos \theta}{2}$
 $d_{2,2}^2 = \frac{3}{2} \frac{1+\cos \theta}{2} \frac{1+\cos \theta}{2}$
 $d_{2,1}^2 = \frac{3}{2} \frac{1+\cos \theta}{2} \cos \theta$
 $d_{2,0}^2 = \frac{3}{2} \frac{1+\cos \theta}{2} \sin^2 \theta$
 $d_{2,-1}^2 = \frac{3}{2} \cos \theta \frac{1-\cos \theta}{2}$
 $d_{2,-2}^2 = \frac{3}{2} \frac{1-\cos \theta}{2} \frac{1-\cos \theta}{2}$

Figure 35.1: The sign convention is that of Wigner (Group Theory, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, New York, 1957), and Cohen (Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.

5. Wasserstoffatom

- H-Atom: häufigstes Element im Universum!
 ↳ Erdkruste: kommt fast nicht vor.
 (→ gebunden (H₂O, H₂, ...)
 (ca. 10% z.B. Fe, 28% O, 15% Si, ...))

• theoretisch ein simples System



Spektrallinien experimentell sehr genau
 vermessen, auch in Abhängigkeit
 von extrem abstr. oder mag. Feldern
 ⇒ Energie-EW aber gebundenen Zustände
 experimentell bekannt!

- gleiche Betrachtung dieses Systems hat wiederholt zur
 Entdeckung völlig neuer "Welten" geführt:

- Rydberg-Formel → 1912 Bohrsches Atommodell ⇒ QM
- Fernstruktur ⇒ 1928 Dirac-Glg. ⇒ relativistische QM
- Lamb-Shift ⇒ 1947 Bethe ⇒ Quantenelektrodynamik
 (→ Quantenfeldtheorie)

• heute spielen ähnliche Systeme, z.B. Positronium (e⁺e⁻)
 und Quarkonium (c \bar{c} , b \bar{b} , ...) sowie Antiprotonen (p \bar{p})
 eine wichtige Rolle in der Elementarteilchenphysik

5.1 Zweikörperproblem; Rückführgleichung

$$\hat{H} = \left\{ \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m_1} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m_2} + V(\vec{r}^{(1)}, \vec{r}^{(2)}) \right\} \mathbb{1} + \hat{H}_S(\vec{S}^{(1)}, \vec{S}^{(2)})$$

$$[\hat{r}_k^{(1)}, \hat{p}_k^{(1)}] = i\hbar \delta_{kk} = [\hat{r}_k^{(2)}, \hat{p}_k^{(2)}], \quad \text{Rest} = 0$$

↖ zwickelt umwandlungen

führe nun (wie in der Mechanik) Relativ- und Schwerpunktkoord. ein:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}^{(1)} + m_2 \vec{r}^{(2)}}{m_1 + m_2}; \quad \vec{r} = \vec{r}^{(1)} - \vec{r}^{(2)}$$

$$\vec{P} = \frac{m_1 \vec{p}^{(1)} + m_2 \vec{p}^{(2)}}{m_1 + m_2}; \quad \vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}^{(1)} - m_1 \vec{p}^{(2)}}{m_1 + m_2}$$

daraus folgt $[\hat{r}_k, \hat{p}_k] = i\hbar (\delta_{kk} - \delta_{kk}) = 0$
 $[\hat{R}_k, \hat{p}_k] = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} i\hbar (\delta_{kk} - \delta_{kk}) = 0$
 $[\hat{r}_k, \hat{p}_k] = \frac{m_2 m_1}{m_1 + m_2} i\hbar \delta_{kk} = i\hbar \delta_{kk} = [\hat{R}_k, \hat{P}_k]$

und $\hat{p}^{(1)} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{P} + \vec{p}$; $\hat{p}^{(2)} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{P} - \vec{p}$
 $\frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m_1} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m_2} = \dots = \frac{1}{2M} \vec{P}^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2$

wobei $M \equiv m_1 + m_2$ die Gesamtmasse ist,
 und μ als "reduzierte" Masse bezeichnet wird:
 $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \Leftrightarrow \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

für $m_2 \ll m_1$ (z.B. m Elektron, M Atom) gilt $M \approx m_1$, $\mu \approx m_2$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{R}, \vec{r})$$

→ falls nun $V(\vec{R}, \vec{r}) \rightarrow V(\vec{r})$ nur von der Relativkoordinate abhängt,
 bleibt der Gesamtimpuls des Zweikörpersystems erhalten ($[\hat{H}, \vec{P}] = 0$).
 Der entsprechende Beitrag zur Gesamtenergie ist "triviale",
 und interessiert uns kaum.

→ zeitunabh. Schrödinger-Gl.: $\left[\frac{\Delta^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right] \psi = E \psi$

oder $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi = E \psi$

Zentrenkraft: in den meisten Fällen (z.B. $V_{Coul} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}^{(1)} - \vec{r}^{(2)}|}$, V_{grav} , ...)

hängt V nur von $|\vec{r}|$ ab → Kugelkoord. (s.z.B. §43, 5.5.1)
 $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right] + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) \right\} \psi = E \psi$

5.2 Energie-spectrum [vgl. z.B. Newton, § 3.1.]

Wir betrachten nun konkret das Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} ; Z=1 \text{ für Wasserstoff}$$

$$\Rightarrow \text{Radialgl. } \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} u(r) = E u(r),$$

$u(0) = 0 = u(\infty)$ Randbedingungen

Lsg $u(r) = ? \rightarrow$ gute Schreibweise vor:

(1) was passiert für sehr große r ?
 $V_{eff}(r) \rightarrow 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' = E u \rightarrow$ falls $E > 0$: Oszillation. falls $u(r) = 0 \Rightarrow E < 0$!

(2) Notation: $E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} \Rightarrow u(r) \sim e^{-\kappa r}$ für $r \rightarrow \infty$

(3) dimensionslose Variable $\rho = \kappa r \Rightarrow \partial_r = \kappa \partial_\rho ; \rho_0 = \frac{Ze^2 \mu}{\hbar^2 \kappa} |E|$

$$\Rightarrow \left\{ \partial_\rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right\} u(\rho) = 0$$

(4) asymptotisches Verhalten

$$\bullet \rho \rightarrow \infty \Rightarrow u(\rho) \sim e^{-\rho} \quad (\text{vgl. (2)})$$

$$\bullet \rho \rightarrow 0 \Rightarrow u'' \approx \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho)$$

$$\text{Ansatz } u(\rho) \sim \rho^\alpha \Rightarrow \alpha(\alpha-1)\rho^{\alpha-2} = l(l+1)\rho^{\alpha-2}$$

$$\Leftrightarrow \alpha = l+1 \text{ oder } \alpha = -l \Rightarrow u(0) = 0$$

(5) dies motiviert den Ansatz $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho)$

$$\rightarrow u'(\rho) = (l+1)\rho^l e^{-\rho} w - \rho^{l+1} e^{-\rho} w' + \rho^{l+1} e^{-\rho} w'$$

$$\rightarrow u''(\rho) = l(l+1)\rho^{l-1} e^{-\rho} w - (l+1)\rho^l e^{-\rho} w' + (l+1)\rho^l e^{-\rho} w'$$

$$- (l+1)\rho^l e^{-\rho} w' + \rho^{l+1} e^{-\rho} w'' - \rho^{l+1} e^{-\rho} w''$$

$$+ (l+1)\rho^l e^{-\rho} w' - \rho^{l+1} e^{-\rho} w' + \rho^{l+1} e^{-\rho} w''$$

$$= \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[\frac{l(l+1)}{\rho} - 2(l+1) + 5 \right] w + 2[l(l+1)-5] w' + 5w'' \right\}$$

$$\Rightarrow [-2(l+1) + 5_0] w + 2[l(l+1)-5] w' + 5w'' = 0$$

wissen (Üb, Aufg. 31): $[u', \hat{L}] = 0$

$\Rightarrow \psi(r)$ kann als Eigenzustand von \hat{L}^2 und \hat{L}_z gewählt werden

$\rightarrow \psi(r) = R(r) Y_{lm}(r, \varphi)$ "Separationsansatz"

((oder abstrakt $|\psi\rangle = |R\rangle |l, m\rangle$))

damit erhalten wir die Radialgleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R(r) = E R(r)$$

mit Normierung $\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 \stackrel{!}{=} 1$ (denn $\int_0^\infty dr \sin^2(\varphi) \int d\varphi |Y_{lm}|^2 = 1$)

und Randbedingungen:
 • Normierung möglich $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0$
 • $|Y_{lm}|^2$ endlich $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0} R(r) < \infty$

\rightarrow die Energie-Eigen sind entartet: E unabhängig von m

(da m in der Radialgl. nicht vorkommt)

\Rightarrow die Energien sind $(2l+1)$ -fach "entartet"

\rightarrow aus historischen Gründen wählt man die folgende Notation:

$$l = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \dots \Rightarrow S \ P \ D \ F \ G \ H \dots$$

\rightarrow kleine Vereinfachung der obigen Radialgl. durch Ansatz $R(r) = \frac{u(r)}{r}$

$$\Rightarrow \partial_r R = -\frac{u}{r^2} + \frac{u'}{r}, \quad \partial_r^2 R = 2\frac{u}{r^3} - 2\frac{u'}{r^2} + \frac{u''}{r}$$

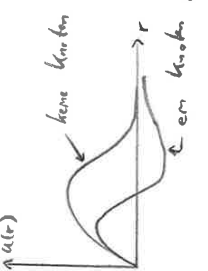
$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[2\frac{u}{r^3} - 2\frac{u'}{r^2} + \frac{u''}{r} - \frac{2u}{r^3} + \frac{2u'}{r^2} \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \frac{u}{r} + V(r) \frac{u}{r} = E \frac{u}{r}$$

$$\Leftrightarrow \text{Radialgleichung } \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2 + V_{eff}(r) \right\} u(r) = E u(r)$$

mit effektivem Potential $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad (r > 0)$

Normierung $\int_0^\infty dr |u(r)|^2 = 1$, \hookrightarrow Radialnormierung

Randbedingungen $u(0) = 0 = u(\infty)$



(6) Ansatz für $w(s)$: Potenzreihe!

$$w(s) = \sum_k a_k s^k ; w' = \sum_k a_k k s^{k-1} ; w'' = \sum_k a_k k(k-1) s^{k-2}$$

$$\Rightarrow \sum_k \left\{ \left[-2(k+1) + s_0 \right] a_k s^k + 2(k+1) a_k k s^{k-1} - 2 a_k k s^k + a_k k(k-1) s^{k-1} \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_k \left\{ \left[s_0 - 2(k+1) + k \right] a_k + (k+1) [2(k+1) + k] a_{k+1} \right\} s^k = 0$$

mus a_k gelten $\Rightarrow \{ \} = 0$: Rekursion für Koeff. a_k .

(7) wähle $k = -1 \Rightarrow a_{-1} = 0$

und wegen $a_k = \frac{2(k+1)+k}{2(k+1)-s_0} a_{k+1}$ mit $a_{-2} = 0 = a_{-3} = a_{-4} = \dots$

$\Rightarrow k \geq 0$ damit $a_k \neq 0$

(8) für $k \in \{0, 1, 2, \dots\}$ gilt also $\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2(k+1) - s_0}{(k+1)(2k+k+2)}$

(9) betrachte $k \gg 1$: $\frac{a_{k+1}}{a_k} \approx \frac{2}{k} \Rightarrow a_k \sim \frac{2^k}{(k+1)!}$

dann ist $w(s) \sim \sum_k \frac{2^k s^k}{(k+1)!} = 2s \sum_k \frac{(2s)^{k-1}}{(k+1)!} \sim 2s e^{2s}$
Exponentialfunktion!

(10) also muss die Reihe abbrechen!

$\rightarrow \exists n \in \{1, 2, \dots\}$ so dass $s_0 = 2n$

\Rightarrow Energie ist wieder quantisiert!

$\rightarrow w(s)$ ist ein Polynom ("zugeordnetes Laguerre-Polynom")

\rightarrow für eine gegebene "Hauptquantenzahl" n gilt:

$k+l = n, k \in \{0, 1, \dots\}$

$\Rightarrow l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$

Zusammenfassung

• die Energie-Eigenzustände werden durch drei Quantenzahlen

spezifiziert: $n = 1, 2, 3, \dots$

$l = 0, 1, \dots, n-1$

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

(dazu kommen noch die Spinzustände s, \bar{s})

• die Energie-Eigenwerte sind also

$$s_0 = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\int \frac{2\pi|E|^2}{4\pi r^2} d\Omega}{|E|} = 2n$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 h} \right)^2 \frac{2\pi}{|E|} = 4n^2$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 Z^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 h c} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

↳ Linienspektrum

• Entartung: $2^2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 4n^2$

↳ von Spins (e^-, p^+)

• Defizit Feinstrukturkorrektur $\equiv \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 h c} \approx \frac{1}{137,04}$

Rydberg-Konstante $\equiv \frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \approx 13,605 \text{ eV}$

Bohr-Radius $\equiv a_0 \equiv \frac{h c}{\alpha \mu c^2} \approx 0,53 \text{ \AA} \leftarrow 10^{-10} \text{ m}$

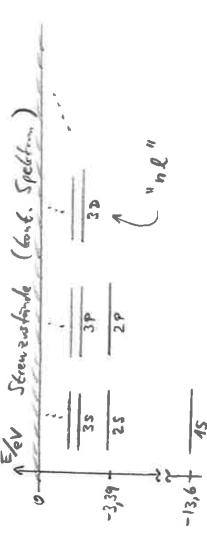
$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p} + \dots \right) \approx m_e \left(1 - \frac{1}{2000} + \dots \right) \text{ und } Z=1$$

$$\Rightarrow E_n \approx -\frac{1}{2} \mu c^2 \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \approx -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} \frac{1}{n^2}$$

$$\approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$$\approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$$\approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$



Bem. • eine genauere Betrachtung hebt die Entartung auf

\rightarrow Spin spielt dann auch eine Rolle

Notation: n, l, j_e mit $j_e = l \pm \frac{1}{2}$ (\equiv Gesamt-Drehimpuls des e^-)

• z.B. Feinstruktur (relativistisch Korrektur aus Dirac-GG.)

$\rightarrow E_n$ hängt von j_e ab: $|E_{2s_{\frac{1}{2}}} - E_{2p_{\frac{3}{2}}}| = |E_{2p_{\frac{1}{2}}} - E_{2p_{\frac{3}{2}}}| \equiv \mathcal{O}(\alpha^4) \sim 10^{-5} \text{ eV}$

• z.B. Lamb Shift (relativistische Korrektur aus QED)

$\rightarrow E_n$ hängt von l ab: $|E_{2s_{\frac{1}{2}}} - E_{2p_{\frac{1}{2}}}| = \mathcal{O}(\alpha^5 \ln \frac{1}{\alpha}) \sim 10^{-6} \text{ eV}$

• z.B. Hyperfeinstruktur Korrekturen wegen \bar{u} mit Proton-Spin

$\rightarrow E_n$ hängt von Eigenwert $\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ ab: $|E_{1s_{\frac{1}{2}}}^{(1)} - E_{1s_{\frac{3}{2}}}^{(1)}| = \mathcal{O}(\alpha^4 \frac{m_e}{m_p}) \sim 10^{-6} \text{ eV}$

(\equiv Wellenlänge 21cm; große Bedeutung in Astronomie))

6. Näherungsmethoden

- für herm. Op. und N -Atom könnten wir St.-Gg. exakt lösen
 → dies waren eher Ausnahmefälle (z.B. exakter Ray.-Gut.-Vektor)
 (solche Systeme haben meist eine zusätzliche Symmetrie, die zur Lösbarkeit führt, und werden "integrierbar" genannt)
- für andere Systeme kann eine angewandte analytische Lsg
 aber nicht möglich sein (neben einer "exakten" numerischen Lsg)

6.1 Rayleigh-Ritz Variationsprinzip

Sei \hat{H} ein Hamilton-Op., und $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $E_0 \leq E_1 \leq E_2, \dots$
 wobei die $\{|n\rangle\}$ und $\{E_n\}$ nicht bekannt sind.

Uns interessiert der Grundzustand: $|0\rangle$ und E_0 .

Sei $|\varphi\rangle$ ein physikalisch sinnvoller Ansatz für $|0\rangle$ ($\langle\varphi|\varphi\rangle=1$)
 ⇒ dann ist $E_\varphi = \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$ möglicherweise eine
 gute Näherung für E_0 .

Behauptung: $E_\varphi \geq E_0$

Beweis: $\{|n\rangle\}$ ist eine vollständige Orthonormalbasis (Basis)

$$\Rightarrow |\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

$$\rightarrow E_\varphi = \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

$$= E_0 + \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (E_n - E_0) \geq E_0$$

alle Terme ≥ 0 ■

(und Gleichheit $E_\varphi = E_0$ gilt genau dann wenn $|\varphi\rangle = |0\rangle$)

das Variationsprinzip folgt, wenn wir den Ansatz $|\varphi\rangle$ als
 Funktion von Parametern $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ schreiben, und E_φ in
 diesem Parameterraum minimieren: $\partial_{\alpha_i} E_\varphi \stackrel{!}{=} 0$, $\partial_{\alpha_i}^2 E_\varphi > 0$
 Das Minimum ist eine Näherung (obere Grenze) für E_0 .

6. Näherungsmethoden

- für herm. Op. und N -Atom könnten wir St.-Gg. exakt lösen
 → dies waren eher Ausnahmefälle (z.B. exakter Ray.-Gut.-Vektor)
 (solche Systeme haben meist eine zusätzliche Symmetrie, die zur Lösbarkeit führt, und werden "integrierbar" genannt)
- für andere Systeme kann eine angewandte analytische Lsg
 aber nicht möglich sein (neben einer "exakten" numerischen Lsg)

6.1 Rayleigh-Ritz Variationsprinzip

Sei \hat{H} ein Hamilton-Op., und $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $E_0 \leq E_1 \leq E_2, \dots$
 wobei die $\{|n\rangle\}$ und $\{E_n\}$ nicht bekannt sind.

Uns interessiert der Grundzustand: $|0\rangle$ und E_0 .

Sei $|\varphi\rangle$ ein physikalisch sinnvoller Ansatz für $|0\rangle$ ($\langle\varphi|\varphi\rangle=1$)
 ⇒ dann ist $E_\varphi = \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$ möglicherweise eine
 gute Näherung für E_0 .

Behauptung: $E_\varphi \geq E_0$

Beweis: $\{|n\rangle\}$ ist eine vollständige Orthonormalbasis (Basis)

$$\Rightarrow |\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

$$\rightarrow E_\varphi = \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

$$= E_0 + \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 (E_n - E_0) \geq E_0$$

alle Terme ≥ 0 ■

(und Gleichheit $E_\varphi = E_0$ gilt genau dann wenn $|\varphi\rangle = |0\rangle$)

das Variationsprinzip folgt, wenn wir den Ansatz $|\varphi\rangle$ als
 Funktion von Parametern $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ schreiben, und E_φ in
 diesem Parameterraum minimieren: $\partial_{\alpha_i} E_\varphi \stackrel{!}{=} 0$, $\partial_{\alpha_i}^2 E_\varphi > 0$
 Das Minimum ist eine Näherung (obere Grenze) für E_0 .

$R_{00}(r) = C(r_1, r_2) e^{-\alpha_1 r - \alpha_2 r^2 - \dots}$
 Normierungsfaktor: $C = \left\{ \int_0^\infty dr r^2 [e^{-\alpha_1 r - \alpha_2 r^2 - \dots}]^2 \right\}^{-1/2}$

$\Rightarrow E_\psi(r_1, r_2, \dots) = \int_0^\infty dr r^2 R_{00}(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha_1^2 + \frac{2}{r} \alpha_1) + V(r) \right] R_{00}(r)$

\rightarrow find Dim von $E_\psi(r_1, \dots)$

Bem: • Näherung ist i.d.R. besser für E_0 als für $l > 0$:

$|\psi\rangle = |l\rangle + \epsilon |\psi\rangle, \langle 0|\psi\rangle = 0$ (d.h. Fehlerr. sei Ordnung ϵ)
 $\Rightarrow E_\psi = E_0 + \epsilon^2 \langle \psi | H | \psi \rangle$ (d.h. Fehlerr. ist $O(\epsilon^2)$)

• können im Prinzip auch $E_n, |n\rangle$ für $n > 0$ bestimmen:

seien $|l\rangle, \dots, |l-1\rangle$ bekannt; dann verlangt man vom Ansatz $|\psi\rangle$ neben Normierung ($\langle \psi | \psi \rangle = 1$) auch noch

Orthogonalität: $\langle \psi | k \rangle = 0, k = 1, \dots, l-1$

\rightarrow also $|\psi\rangle = \sum_{n=N}^{\infty} c_n |n\rangle, \sum_{n=N}^{\infty} |c_n|^2 = 1$

und $E_\psi = E_N + \sum_{n=N}^{\infty} |c_n|^2 (E_n - E_N) \geq E_N$

He -Atom ($2e^-$ in Feld im $2p^1$)

$\psi_{i_1, i_2} = \psi_{i_1, i_2}(r_1, r_2)$ (i.e.: Spin \uparrow, \downarrow)

$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2e^2}{|r_1|} - \frac{2e^2}{|r_2|} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \right) \psi_{i_1, i_2}$

Variationsansatz $\psi_{i_1, i_2}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \epsilon_{i_1, i_2} f(r_1) f(r_2)$

mit $f(r) = \sqrt{\frac{3}{\pi}} e^{-br}$, b : Variationsparameter; $\epsilon_{ij} = \delta_{ji}, \epsilon_{12} = 1$

Normierung: $1 = \int_{i_1, i_2} \int_{r_1, r_2} d^3r_1 d^3r_2 |\psi_{i_1, i_2}(r_1, r_2)|^2$
 $= \int d^3r_1 \int d^3r_2 |\psi_{i_1, i_2}(r_1)|^2 + \int d^3r_1 \int d^3r_2 |\psi_{i_1, i_2}(r_2)|^2$
 $= (4\pi)^2 \frac{b^6}{2a^2} \left(\int_0^\infty dr r^2 e^{-2br} \right)^2 \frac{1}{4b^3} = \frac{1}{2}$

$E_\psi = \langle \psi | H | \psi \rangle = \dots = \frac{27}{16} \frac{1}{a} = \frac{27}{16} \left(\frac{\hbar^2}{2m a^2} \right) \left(\frac{6}{a} - \frac{27}{a} \right) b$ (\Leftarrow s.Ü. 37c)

hat Dim bei $b = \frac{27}{16} \frac{1}{a}$: "beste Grundzustands-WF" in diesem Ansatz

$\Rightarrow E_\psi^{(min)} = -\frac{23}{2a} \left(\frac{23}{16} \right)^2 \approx -5.7 Ry > E_0$

(E-Parameter: E für doppelte Ionisation von $He \approx 5.8 Ry \Rightarrow 2 \cdot 2.91 \text{ Ry} \approx 5.82 \text{ Ry}$)

6.2 zeitunabhängige Störungstheorie
 (Rayleigh-Ritz - Störungstheorie)

Sei $H = H_0 + \lambda H_1$, mit $|\lambda| \ll 1$
 ("Störung"
 "ungestörter Teil")

Annahme: $E \pm EW$ von H_0 sind bekannt: $H_0 |\psi_n\rangle = E_{0n} |\psi_n\rangle$

Aufgabe: bestimme $E \pm EW$ von H : $H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$

weitere Annahmen:

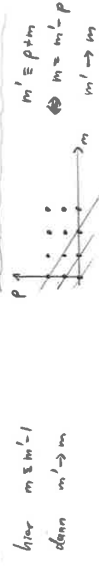
- Spektrum lückt auf für $\lambda \neq 0$ absteigend
- die ungestörten $E \pm EW$ sind nicht entartet (\Leftarrow sonst s. § 6.4)
- $|\psi_n\rangle$ und E_n können als Potenzreihen in λ dargestellt werden (\Leftarrow Konvergenz s. § 6.3)

also: $|\psi_n\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m |\psi_n^{(m)}\rangle, |\psi_n^{(0)}\rangle = |\psi_n\rangle$

$E_n = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E_n^{(m)}, E_n^{(0)} = E_{0n}$

Schrödinger-Gleichung:

$\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m H_0 |\psi_n^{(m)}\rangle + \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^{m+1} H_1 |\psi_n^{(m)}\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E_n^{(p)} |\psi_n^{(m)}\rangle$



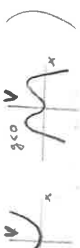
$\Rightarrow \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m H_0 |\psi_n^{(m)}\rangle + \sum_{m=1}^{\infty} \lambda^m H_1 |\psi_n^{(m-1)}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \sum_{p=0}^{\infty} E_n^{(p)} |\psi_n^{(m)}\rangle$

Koeff.-Vergl.: $\Rightarrow H_0 |\psi_n^{(m)}\rangle + H_1 |\psi_n^{(m-1)}\rangle = \sum_{p=0}^m E_n^{(p)} |\psi_n^{(m)}\rangle, m \geq 0$

Normierung: $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \sum_{p=0}^m \langle \psi_n^{(p)} | \psi_n^{(m)} \rangle = 1$

Koeff.-V.: $\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(m)} \rangle = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ und $\sum_{p=0}^m \langle \psi_n^{(p)} | \psi_n^{(m)} \rangle = 0, m \geq 1$

6.3 Anwendungen; anharmonischer Oszillator (+ Konvergenz der Stör-Reihe)

Sei der 1d anharmonische Oszillator definiert durch $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + g \frac{m^2 \omega^3}{4 \hbar} x^4$ (330) 

uns interessieren dessen Eigenzustände und Energien, was $\langle H | \psi_n \rangle = E_n | \psi_n \rangle$, $E_n = ?$ ($| \psi_n \rangle = ?$)

Benutzen wir zunächst das (Rayleigh-Ritz) Variationsprinzip (\leftarrow Kap. 6.1) \rightarrow obere Schranke für E_0

Vari.: $E_0 \leq \langle \varphi | H | \varphi \rangle$ für beliebiges $|\varphi\rangle$ ($\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$)
 Ansatz für $|\varphi\rangle$: Grundzustand $|\psi_0\rangle$ des harmonischen Oszillators $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ (\leftarrow Kap. 3.6) mit Variationsparameter α

$$E_0 \leq \langle 0 | \hat{H}_0 | 0 \rangle + \frac{1}{2} m (\omega^2 - \omega_0^2) \langle 0 | x^2 | 0 \rangle + g \frac{m^2 \omega^3}{4 \hbar} \langle 0 | x^4 | 0 \rangle$$

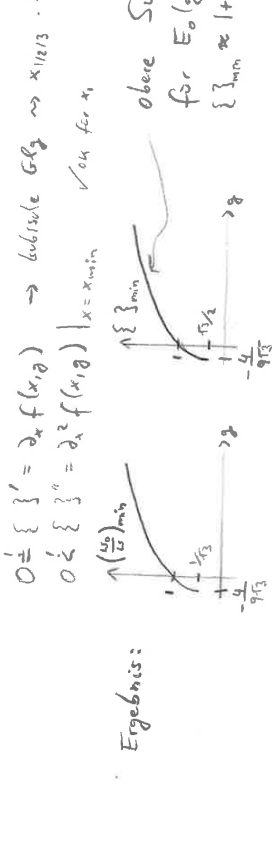
$$\text{benutze } \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$= \frac{\hbar \omega_0}{2} + \frac{1}{2} m (\omega^2 - \omega_0^2) \frac{\hbar}{2m\omega_0} \langle 0 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | 0 \rangle + g \frac{m^2 \omega^3}{4 \hbar} \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega_0^2} \langle 0 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^4 | 0 \rangle$$

$$= \frac{\hbar \omega_0}{2} + \frac{\hbar (\omega^2 - \omega_0^2)}{4 \omega_0} \cdot 1 + g \frac{\hbar \omega^3}{16 \omega_0^2} (2 \cdot 1 + 1 \cdot 1)$$

$$= \frac{\hbar \omega}{2} \left\{ \frac{\omega_0}{\omega} + \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2 \omega \omega_0} + \frac{3g}{8} \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \right\}$$

minimiere diesen Ausdruck in ω_0
 Strategie: $\{ \} \equiv f(\frac{\omega_0}{\omega}, g) = f(x, g)$



haben also ein hierarchisches System von Schrödinger-Gl.

Lösung: bei $m=0$ anfangen, dann $m=1$, etc...
 $m=0$: $\hat{H}_0 | \psi_n \rangle^{(0)} = E_n^{(0)} | \psi_n \rangle^{(0)}$ (ex. (nach Voraussetzung))
 $m=1$: $\begin{cases} \hat{H}_0 | \psi_n \rangle^{(1)} + \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)} = E_n^{(1)} | \psi_n \rangle^{(1)} + E_n^{(1)} | \psi_n \rangle^{(0)} \\ \langle 0 | \psi_n | \psi_n \rangle^{(1)} + \langle 0 | \psi_n | \psi_n \rangle^{(0)} = 0 \end{cases}$
 2. Gbg $\Rightarrow \langle \varphi_n | \psi_n \rangle^{(1)}$ ist verschwindend.

1. Gbg. im Ansatz mit $\langle \varphi_p |$ multiplizieren:
 $\Rightarrow (E_{0p} - E_{0n}) \langle \varphi_p | \psi_n \rangle^{(1)} + \langle \varphi_p | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)} = E_n^{(1)} \langle \varphi_p | \psi_n \rangle^{(1)}$

$p=n \Rightarrow E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)}$, also $E_n \approx E_{0n} + \lambda \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)} + \dots$
 $p \neq n \Rightarrow \langle \varphi_p | \psi_n \rangle^{(1)} = \frac{\langle \varphi_p | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)}}{E_{0n} - E_{0p}} \equiv c_{np}^{(1)}$ ($p \neq n$)

\rightarrow dies sind die Entwicklungskoeffizienten von $|\psi_n\rangle^{(1)}$
 in der Basis der ungestörten EZ:
 $|\psi_n\rangle^{(1)} = \sum_{p=0}^{\infty} c_{np}^{(1)} |\varphi_p\rangle^{(0)} \equiv \sum_{p=0}^{\infty} c_{np}^{(1)} |\varphi_p\rangle$

es folgt aber nach $c_{nn}^{(1)}$: Normierungsbed. $\Rightarrow \text{Re}[c_{nn}^{(1)}] = 0$
 also ist die Wellenfkt zu dieser Ordnung

$$|\psi_n\rangle \approx (1 + i \lambda \text{Im}[c_{nn}^{(1)}]) |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle^{(0)}}{E_{0n} - E_{0p}} |\varphi_p\rangle + O(\lambda^2)$$

(noch frei wählbar, z.B. = 0.)

$m=2$: ... $E_n^{(2)} = \dots$, $|\psi_n\rangle^{(2)} = \dots$
 usw.

Bem. kann im Prinzip zu beliebig hohen Ordnungen fortgesetzt werden.
 • Bsp: s. S. 6.3

damit ist (analog zu oben, $a(n) = \sqrt{n(n-1)}$ etc)

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$$

$$= \frac{\hbar \omega}{16} [(n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n-1) + n^2 + n(n-1) + 0]$$

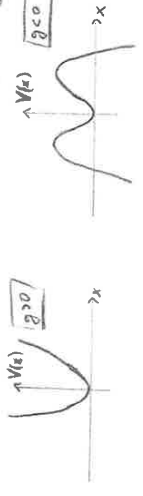
$$= \frac{3}{8} \hbar \omega [n^2 + n + \frac{1}{2}]$$

$$\Rightarrow E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) (1 + \frac{3g}{8}) + \frac{3g}{8} \hbar \omega n^2 + O(g^2)$$

(wir könnten nun auch höhere Korrekturen, g^2, g^3, \dots berechnen)

Bemerkungen:

- Konvergenz? Stö. scheint nur für tiefe E_n -Zustände zu funktionieren, für $|n| \ll 1$
- für $g < 0$, kann die Ordnung der E-Zustände ($E_0 \in E_1, \dots$) zerstört werden? $E_{n+1} \leq E_n$ für $g \leq -\frac{4}{3(n+1)}$



phys. Bild $\rightarrow g > 0$: es existieren Bindungszustände
 $g < 0$: kein Grundzustand anderer Energie!
 Wellenpaket bei $x=0$ würde tunneln

- für E_0 , alles klar: z.B. $|g| = 0.1 \Rightarrow 3\%$ Korrektur
- Für präzisere Aussagen über Konvergenz brauchen wir sicherlich eine Berechnung der höheren Korrekturen.
 (siehe z.B. Bender, Wu, Phys. Rev. D **7** (1973) S. 1620, 586)

man kann das asymptotische Verhalten bestimmen.
 Ergebnis (Zitiert): für große n gilt

$$E_0^{(n)} = -\hbar \omega \left(\frac{g}{m\omega}\right)^{1/2} \left(\frac{2}{g}\right)^m \frac{\Gamma(m+1/2)}{\Gamma(m)} \left[1 - \frac{95}{72} \frac{1}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right)\right]$$

((Gammafunktion: $\Gamma(n+1) = n!$ für $n \in \mathbb{N}$.
 $\frac{\Gamma(x+1) = x \cdot \Gamma(x)}{\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}}$; $\Gamma(x) = \int_0^\infty dt t^{x-1} e^{-t}$ für $x \in \mathbb{R}$))

Zwei Anwendungen der (Rayleigh-Schrödinger) Störungstheorie: (\leftarrow Kap. 6.2)

Zum Aufwärmen: Stö. funktioniert.

Sei $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + g \frac{1}{2} m \omega^2 x^4$

$$= \hat{H}_0 + g \hat{H}_1, \quad |g| \ll 1, \quad E_n = ?$$

\hookrightarrow bekannt: harm. osz. (Kapitel 3)

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_{0n} |n\rangle, \quad E_{0n} = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$

(sehr dummes Bsp., denn wir kennen die exakte Lsg wegen $\hat{H} = \hat{H}_0 |_{\omega \rightarrow \sqrt{1+g}}$)

Kapitel 6.2: $E_n = E_{0n} + \langle n | g \hat{H}_1 | n \rangle + O(g^2)$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \Rightarrow \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) + g \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (a + a^\dagger)^2 | n \rangle + O(g^2)$$

$$\langle n | n \rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

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

$$\langle n | m \rangle = \delta_{n,m}$$

$$\Rightarrow \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) + \frac{g}{4} \hbar \omega (0 + (n+1) + n + 0) + O(g^2)$$

$$= \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) [1 + \frac{g}{2} + O(g^2)]$$

(check: $\sqrt{1+g} \approx 1 + \frac{g}{2} + O(g^2)$)

Nun wollen wir dieselbe Störung für ein nicht exakt lösbares

Problem anwenden: der anharmonische Oszillator

Sei $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + g \frac{m^2 \omega^3}{4\hbar} x^4$

$$= \hat{H}_0 + g \hat{H}_1, \quad \text{mit } |g| \ll 1.$$

Problem: $\hat{H} | \psi_n \rangle = E_n | \psi_n \rangle, \quad E_n = ? \quad (| \psi_n \rangle = ?)$

Ansatz: $| \psi_n \rangle = | n \rangle + \sum_{m=1}^{\infty} g^m | \psi_n^{(m)} \rangle$

$$E_n = E_{0n} + \sum_{m=1}^{\infty} g^m E_n^{(m)}$$

Wie oben schreiben wir $x^4 \sim (a + a^\dagger)^4$

$$\hat{H}_1 = \frac{m^2 \omega^3}{4\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (a + a^\dagger)^4$$

$$= \frac{\hbar \omega}{16} [a a a a + a a^\dagger a a + a^\dagger a a a + a^\dagger a^\dagger a a + a^\dagger a a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a^\dagger a + \text{weitere Terme}]$$

- unsere E_0 -Reihe ist "Borel - summierbar":
wenn $f_k \sim c(-a)^k k!$ ($a > 0$)
definiere Borel-Transformierte von $f(z)$
 $B_f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_k}{k!} z^k$, konvergiert für $|a \cdot z| < 1$
im Sinne einer Potenzreihe ist dann
 $f(z) = \int_0^{\infty} dt e^{-zt} B_f(zt)$
die "Borel - summierte" asymptotische Reihe.

6.4 Störungs Theorie für instabile Zustände
(die in § 6.2 versprochene Kontrollgewinnung)

Kerngedanke: innerhalb instabiler (aber fast instabiler) E_n 's ist der Effekt der Störung λH_1 nicht mehr "klein".
Nehme also die wichtigsten H_1 -Anteile mit zu H_0 .

Ausgangspunkt wie in § 6.2:

$\vec{H} = \vec{H}_0 + \lambda \vec{H}_1, |\lambda| \ll 1$

ungestörte Zustände: $\vec{H}_0 | \varphi_{nk} \rangle = E_{0n} | \varphi_{nk} \rangle$
 \vec{H}_0 Hauptgummatrix ($n=1, \dots, M(n)$)

ungestörte $E \pm$ orthonormal gewählt: $\langle \varphi_{nj} | \varphi_{nk} \rangle = \delta_{jk}$

Ansatz für das volle System

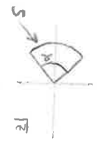
$\vec{H} | \varphi_{na} \rangle = E_{na} | \varphi_{na} \rangle, a = 1, \dots, M(n)$

mit $E_{na} = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E_{na}^{(m)}, E_{na}^{(0)} = E_{0n}$ (wie vorher)

und $|\varphi_{na}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m |\varphi_{na}\rangle^{(m)}, |\varphi_{na}\rangle^{(0)} = \sum_{k=1}^{M(n)} b_{nk} | \varphi_{nk} \rangle$
(weil die Wahl der $|\varphi_{nk}\rangle$ nicht unbedingt optimal für Stör. war)

Bemerkungen:

- Konvergenz der E_0 -Reihe?
 $\left| \frac{g^{m+1} E_0^{(m+1)}}{g^m E_0^{(m)}} \right| \sim \left| -\frac{3m}{4} g \right| \Rightarrow$ konvergiert für $\text{Re } m > 0$!
denn: für $g < 0$ gibt es keinen Grundzustand (s.o.)
dies wird im analytischen Verhalten der Fkt $E_0(g)$ reflektiert
(vgl. $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$; links: analytische Fkt in $\mathbb{C} \setminus \{1\}$
rechts: konvergiert nur für $|x| < 1$)
- aus physikalischen Gründen (s.o.) können wir annehmen,
daß die Entwicklung für $g > 0$ sinnvoll sein sollte.
 \Rightarrow "asymptotische" Reihe: gut nur bis zu einem m_{max}
- Sei $f(z)$ analytisch (in einem Sektor $S \subset \mathbb{C}$)
($E_0(g)$ ist analytisch in $g \in \mathbb{C} \setminus \{ \text{negative reelle Achse} \}$,
nichttriviale Fortsetzung; s. z.B. Bandw./Lewy))
Sei $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k z^k$ die asymptotische Entwicklung für f (in S)
d.h. sie divergiert für alle $z \neq 0$
und hat eine Schranke
 $|f(z) - \sum_{k=0}^N f_k z^k| \leq c_{N+1} |z|^{N+1}$ für alle N
wobei $c_{N+1} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty$ für alle $z \neq 0$



- die Partialsummen liefern also einen Wert "nahe" der Antwort:
bei fixiertem z können wir die Schranke über N minimieren,
und bekommen eine Abschätzung für f mit beliebigem Fehler $\min_{N \geq 0} c_{N+1} |z|^{N+1}$
- in unserem Fall definiert die E_0 -Reihe sogar eine
eindeutige Fkt $E_0(g)$. Grund: $E_0^{(n)} \sim (n!)^{\alpha}$ und $\alpha > \pi$,
dann kann man keine in S beschriebene analytische Fkt addieren (ist Null!)
(Theorem der Funktionentheorie)
- dieses Verhalten ist typisch für Störungstheorie. Man erhält
Sehr selten konvergente Reihen, meist asymptotische.

diesem Ansatz in die zeitunabh. Schröd-Gly einsetzen, λ -Koeff-Vergleich
(Vollständig analog zu § 6.2, vgl. S. 66)

$$\Rightarrow \vec{H}_0 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(m)} + \vec{H}_1 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(m-1)} = \sum_{p=0}^m E_{n\alpha}^{(p)} | \psi_{n\alpha} \rangle^{(m-p)}, \quad m \geq 0$$

m=0: ist wieder trivial

$$\vec{H}_0 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)} = E_{0n} | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)}$$

$$\underline{m=1}$$
: $\vec{H}_0 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(1)} + \vec{H}_1 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)} = E_{0n} | \psi_{n\alpha} \rangle^{(1)} + E_{n\alpha}^{(1)} | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)}$

von links mit $\langle \psi_{nj} |$ multiplizieren

$$\Rightarrow \langle \psi_{nj} | \vec{H}_1 | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)} = E_{n\alpha}^{(1)} \langle \psi_{nj} | \psi_{n\alpha} \rangle^{(0)}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{\beta=1}^{M(n)} \langle \psi_{nj} | \vec{H}_1 | \psi_{n\beta} \rangle - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{j\alpha} \langle \psi_{n\beta} | \psi_{n\alpha} \rangle = 0 \quad \forall j \in \{1, \dots, M(n)\}$$

das sind also lineare Gleichungen für die Koeff's $b_{j\alpha}^{(1)}$.
es gibt eine nichttriviale Lösung, falls

$$\det_{j\alpha} \left\{ \langle \psi_{nj} | \vec{H}_1 | \psi_{n\alpha} \rangle - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{j\alpha} \right\} = 0$$

"Stabilitätsbedingung"
oder "charakterist. Polynom"

\Rightarrow alle Eigenym $E_{n\alpha}^{(1)}$ sind genau die (reellen) Eigenwerte
der (symmetrischen) $M(n) \times M(n)$ -Matrix $\langle \psi_{nj} | \vec{H}_1 | \psi_{n\alpha} \rangle$

\rightarrow nachdem die $E_{n\alpha}^{(1)}$ bekannt sind, können auch die $b_{j\alpha}^{(1)}$
bestimmt werden, was die $|\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)}$ festlegt.

- Bem.:
- die Eigenym $E_{n\alpha}^{(1)}$, $\alpha=1, \dots, M(n)$, sind i.A. nicht mehr entartet: \vec{H}_1 hat weniger Symmetrien als \vec{H}_0 und löst die Entartung auf
 - mit bekannten $E_{n\alpha}^{(1)} \rightarrow$ best $\rightarrow |\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)}$ können wir wie in § 6.2 dann $|\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)}$ bestimmen, und auch höhere Ordnungen ($m > 1$) bestimmen...

Bsp.: Stark-Effekt (H-Atom im \vec{E} -Feld)

$$\vec{E} \text{ of } \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \text{of} \\ \circlearrowright \end{array} \begin{array}{l} \text{wie z-Achse entlang } \vec{E}\text{-Richtung} \\ \Rightarrow \vec{H} = -\frac{e^2}{2a_0} \vec{E} \cdot \vec{r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + e|\vec{E}|z \\ = \vec{H}_0 + \lambda \vec{H}_1 \quad (|\vec{E}| \text{ "klein"}) \end{array}$$

ungerstete Zustände: $\psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ (vgl. § 5.5)

$n=1, 2, 3, \dots$; $l=0, 1, \dots, n-1$; $m=-l, \dots, +l$
 $\rightarrow E_n$ ist $(l+1)^2$ -fach entartet

Korrekturen zum Grundzustand E_1 ? (nicht entartet \rightarrow "normale" Stör.)

$$n=1 \Rightarrow l=0, m=0; \quad Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \langle \psi_{10} | \vec{H}_1 | \psi_{10} \rangle = \int_0^\infty dr r^2 |R_{10}(r)|^2 \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r \cos(\theta) = \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{=2\pi} \underbrace{\int_0^\pi r \cos(\theta) d\theta}_{=0} = 0 \quad (\text{nach } \int d\theta) \Rightarrow \text{keine Korrektur}$$

Korrekturen zu E_2 ?

$$\left(\text{s. A27b} \right) \rightarrow \text{kennen } Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta); \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$$\left(\text{s. A36} \right) \rightarrow \text{und } R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 \left(1 - \frac{2r}{3a_0} \right) e^{-\frac{2r}{3a_0}}; \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 r e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

Sei nun $V_{jk} = \langle \psi_{2j} | \lambda \vec{H}_1 | \psi_{2k} \rangle$ mit $k=1, 2, 3, 4$
 $\Rightarrow \begin{cases} l=0, 1, 1, 1 \\ m=0, 0, 1, -1 \end{cases}$

müssen die Vkt nun berechnen.

$$\text{z.B. } V_{12} = e|\vec{E}| \int_0^\infty dr r^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 \left(1 - \frac{2r}{3a_0} \right) e^{-\frac{2r}{3a_0}} \cdot r \cdot \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 r e^{-\frac{2r}{3a_0}} \\ * \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sin(\theta) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \cos(\theta) \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \phi$$

$$\text{Subst } \left. \begin{array}{l} \frac{2r}{3a_0} = \rho \\ \cos(\theta) = u \end{array} \right\} \rightarrow e|\vec{E}| \frac{2^4}{2^{12} \sqrt{6}} \frac{2a_0}{2} \int_0^1 d\rho \int_{-1}^1 du \rho^4 (1-\rho) e^{-2\rho} * \underbrace{2 \int_{-1}^1 du u^2}_{= \frac{4}{3}} \int_0^{2\pi} d\phi \cos(\theta) \phi = e|\vec{E}| \frac{2^4}{2^8} 4 \left(-\frac{8}{3} \right) \frac{1}{3} = -3e|\vec{E}| \frac{8}{3}$$

die hier zu betrachtenden Korrekturen:

(a) relativistische kinetische Energie

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \approx m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^3 c^2} + \dots$$
Ruheenergie
Schon in H_0

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu^2} (H_0 + \frac{p^2}{2})^2$$

(b) Spin-Bahn-Kopplung, aus Dirac-Gly

(in e^- -Ruhesystem erzeugt \vec{p} ein \vec{B} -Feld; koppelt per $\vec{S} \cdot \vec{B}$ an den Spin des e^-)

$$H_1 = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} V(r) = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{dV}{dr}$$

(c) Darwin-Term, aus Dirac-Gly

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{8\mu^2 c^2} \nabla^2 V(r) = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu^2 c^2} \delta^{(3)}(r)$$

$$\Delta \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) = \delta^{(3)}(r)$$

Notation: H_0 hat Spin-Anteil \rightarrow müssen um Wellenfunktion mit Spin kümmern! e^- hat $|s, m_s\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle$ \rightarrow ad jetzt ungelöstes Problem H_0 hat die Lsg (vgl. §5)

$$E_{0n} = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (\text{Hydrog}), \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$|n, l, m_l, m_s\rangle \hat{=} R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$$

\rightarrow addiere $\vec{L} + \vec{S} \hat{=} \vec{J}$ zum Gesamt Drehimpuls, kann also auch Zustände $|n, j, M, l\rangle$ mit $j = l \pm 1/2$ verwenden.
 ((Erinnerung §4.5: $|l, s, j, m_j\rangle \leftrightarrow |l, s, j, M\rangle$)
 \downarrow $m_j = m_l + m_s$
 \downarrow $l = 1, 2, \dots, l+1/2$

Nun Stö. 1. Ordnung:

(a) $H_0 = -\frac{1}{2\mu^2} (H_0 + \frac{p^2}{2})^2$ ist bereits diagonal in der gemeinsamen Basis.

$$\langle n, j, M, l | H_0^2 + 2V H_0 + \frac{p^2}{2} | n, j, M, l \rangle = E_{0n}^2 + 2V E_{0n} \langle \frac{1}{r} \rangle_{nl} + \langle \frac{p^2}{2} \rangle_{nl}$$

\rightarrow die komplexe Matrix V_{jk} :

$$V_{jk} = i \downarrow \begin{pmatrix} 0 & -3e|\vec{E}|a & 0 & 0 \\ -3e|\vec{E}|a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{für } Z=1)$$

missen also die folgende Satzungsgleichung lösen:

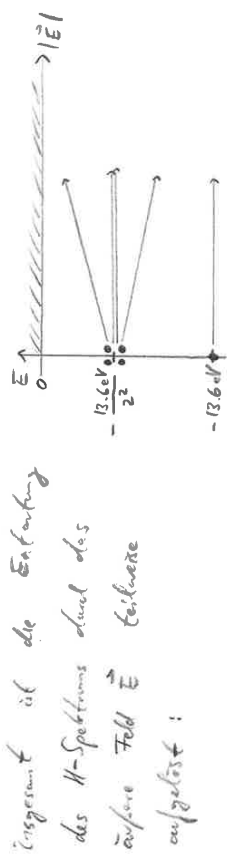
$$\det \begin{pmatrix} -\eta & -3e|\vec{E}|a & 0 & 0 \\ -3e|\vec{E}|a & -\eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\eta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\eta \end{pmatrix} = \eta^2 [\eta^2 - (3e|\vec{E}|a)^2] = 0$$

$\Leftrightarrow E_{jk}$ für E_2 -Korrektur $\eta \in \{0, 0, +3e|\vec{E}|a, -3e|\vec{E}|a\}$

\Rightarrow Eigenzustände: $\eta=0$: $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow |211\rangle$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow |21-1\rangle$
("gute Basis")

$\eta = +3e|\vec{E}|a$: $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle)$

$\eta = -3e|\vec{E}|a$: $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle)$



6.5 Anwendungen; H-Feststruktur

E_n -Niveaus des Wasserstoffatoms sind n^2 -fach entartet, wollen an die "Feststruktur" des Spektrums bestimmen (vgl. Bam. auf S.63; hier $Z=1$), per Stö.

Bsp. Feststruktur des H-Spektrums [vgl. Richter, §17.3]

((relativistische Korrekturen aus "Dirac-Gly" \rightarrow QM II))

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_a + \hat{H}_b + \hat{H}_c$$
kleine Störung

$$\hat{L} \frac{p^2}{2\mu} + V(r), \quad \text{vgl. §5}, \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{r}$$

Wir erhalten also insgesamt für die Korrektur in 1. O. Stg

$$E_n^{(1)} = E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} \left\{ \frac{1}{4} - 1 + \frac{n}{l+1/2} - n \frac{\partial^2 \langle r^{-1} \rangle - l(l+1) - 2\gamma}{l(l+1)(2l+1)} (1-\delta_0) - n \delta_0 \right\}$$

für $l=0$: benutze $\gamma = l \pm \frac{1}{2}$ zur Vereinfachung

$$\gamma = l + \frac{1}{2} : \left\{ \dots \right\} = -\frac{3}{4} + \frac{n}{l+1} = -\frac{3}{4} + \frac{n}{\frac{3}{2}} = -\frac{3}{4} + \frac{2n}{3}$$

$$\gamma = l - \frac{1}{2} : \left\{ \dots \right\} = -\frac{3}{4} + \frac{n}{l} = -\frac{3}{4} + \frac{n}{\frac{1}{2}} = -\frac{3}{4} + \frac{2n}{1}$$

$$\text{für } l=0 : \gamma = \frac{1}{2} : \left\{ \dots \right\} = -\frac{3}{4} + 2n - n = -\frac{3}{4} + \frac{n}{2}$$

$$= E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} \left(-\frac{3}{4} + \frac{n}{\gamma \pm \frac{1}{2}} \right)$$

$$\text{also } (\gamma \rightarrow j) \quad E_{nj} = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{\alpha^2}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{\gamma \pm \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right\}$$

Bem! • haben "normale" Störungs-Korrektur berechnet, trotz Entartung!

Grund: Keine Vertauschen mit L^2, L_3 , und diese

haben verschwindende Erwartungswerte (wobei E_n n-fach

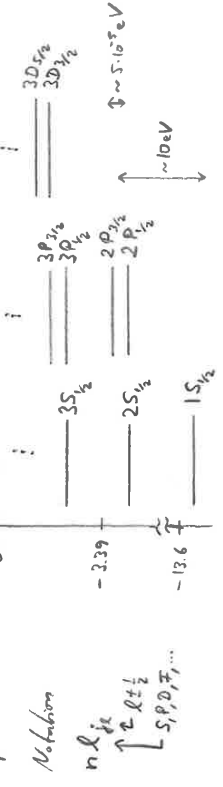
entartet ist). Also sind γ immer "gute" E^2, E_z , auch

mit Störung - Gleich gehalten.

• E-Korrekturen sind gegenüber den ungestörten E_n

um Faktor $\alpha^2 \sim \frac{1}{137^2} \sim 5 \cdot 10^{-5}$ kleiner

• Spektrum:



• die Dirac-GG (vgl. 01 II) liefert exakt

$$E_{nj} = \mu c^2 \left\{ 1 + \alpha^2 \left[n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right]^{-2} \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad \text{denn } (1 \pm \alpha)^{\pm 1} \approx 1 \pm \alpha \pm \frac{\alpha^2}{2} \pm \dots$$

• weitere Korrekturen (vgl. S. 63: Lamb-Stift, Hyperfine-Struktur)

sorgen für weitere Aufhebung der Entartung

Benötigen also zur Bestimmung der Diagonalmatrixelemente

beide radialen Erwartungswerte.

$$\langle r^{-1} \rangle_{nl} = \int_0^\infty \frac{1}{r} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r dr$$

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{2n}{a_0} \right)^{n-l} e^{-kr} \sum_{p=0}^{n-l-1} a_p (kr)^p, \quad k = \frac{1}{a_0}$$

↳ mit versch. Laguerre-Polynomen

$L_n^m(x)$ (= Laguerre $L_{n-m, m, x}$) in Notation

diese lösen $x^2 y'' + (m+1-x)y' + ny = 0$

benutze [Bethe, Salpeter: Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms,

$\langle r^{-1} \rangle_{nl}$ aus Plummer, New York, 1977; S. 17]

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{nl} = \frac{1}{a_0 n^2}, \quad \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+1/2)}, \quad \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nl} = \frac{1}{a_0^3 n^3 l(l+1)(2l+1)}$$

(Erwartung: Bohr-Radius $a = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{e^2 \mu}$)

$$\Rightarrow E_n^{(1)(nl)} = -\frac{1}{2} \mu c^2 \left(E_{n0} + 2\gamma E_{n0} \frac{1}{a n^2} + \gamma^2 \frac{1}{a^2 n^3 (l+1/2)} \right)$$

$$= E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{1}{4} - 1 + \frac{n}{l+1/2} \right)$$

$$(b) \quad H_b = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{d^2}{dr^2}$$

ist auch schon diagonal, denn:

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} [\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2]$$

$$\Rightarrow \vec{S} \cdot \vec{L} |n, j, l, m\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}] |n, j, l, m\rangle$$

$[\dots] = 0$ für $l=0$, da dann $\gamma = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow E_n^{(1)(l)} = \begin{cases} l=0: & 0 \\ \text{sonst:} & \frac{1}{2\mu^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} [\dots] \gamma \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{nl} = E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} \left(-n \frac{[\dots]}{2l(l+1)(2l+1)} \right) \end{cases}$$

$$(c) \quad H_c = \frac{\hbar^2 \gamma}{2\mu^2 c^2} \delta^{(1)}(r)$$

$$\Rightarrow E_n^{(1)(l)} = \frac{\hbar^2 \gamma}{2\mu^2 c^2} |R_{nl}(0)|^2 = \frac{\hbar^2 \gamma}{\pi} E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} (-n \delta_0)$$

$$= E_{n0} \frac{\alpha^2}{n^2} (-n \delta_0)$$

oder? a.b. von Virialtheorem Ü 35

Näherungsmethoden - Fazit

- Stö. anwendbar, wenn Problem sich nur wenig von einem exakt lösbar unterscheiden
- Vari. gut für Berechnung der Grundzustands-Energie, wenn man eine qualitative Vorstellung von der Form der Wellenfkt. hat

7. Identische Teilchen; Pauliprinzip

- ↳ bzw. unterscheidbare T.
- wir betrachten nun Systeme mit mehreren identischen Teilchen (d.h. T. mit derselben Masse, Ladung usw.);
- z.B.: Atome mit vielen e⁻
- klassische Teilchen sind unterscheidbar, weil jedes seine eigene Bahn hat
- QM ist fundamental vertauscht: Ort und Impuls können nicht gleichzeitig genau best. werden!
- diese Tatsache hat wichtige physikalische Konsequenzen

multivar. Beschreibung: $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}_1, \hat{r}_1, \hat{S}_1; \dots; \hat{p}_N, \hat{r}_N, \hat{S}_N)$

$|4\rangle = |1; \dots; N\rangle$

Paarvertauschungs-Operatoren: $\hat{P}_{ij} | \dots; i; j; \dots \rangle = | \dots; j; i; \dots \rangle$

es gilt $\hat{P}_{ij}^2 = 1$, also $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$

ein System ist symmetrisch, falls $|4\rangle$ und $|4'\rangle = \hat{P}_{ij} |4\rangle$ dieselbe Gleichung erfüllen (vgl. §5):

ich z. $\hat{P}_{ij} |4\rangle = \hat{H} \hat{P}_{ij} |4\rangle$ und $i \hat{H} |4\rangle = \hat{H} |4\rangle$

$\Rightarrow \hat{P}_{ij}^{-1} \hat{H} \hat{P}_{ij} = \hat{H}$

$\Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0$

unter welchen Voraussetzungen ist dies der Fall?

$0 = [\hat{H}(i,j) \hat{P}_{ij} - \hat{P}_{ij} \hat{H}(i,j)] |i,j\rangle = [\hat{H}(i,j) - \hat{H}(j,i)] |i,j\rangle$

$\Leftrightarrow \hat{H}(i,j) = \hat{H}(j,i)$

also z.B. für $\hat{H} = \dots + \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\hat{p}_j^2}{2m_j} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{r}_i - \hat{r}_j|} + \dots$

oder für $\hat{H} = T(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N) + V(\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_N)$
 $= \sum_i T(\hat{p}_i) + \sum_{i,j} V(\hat{r}_i - \hat{r}_j)$

- Bem.: $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$ Energie-Eigenzustände können als EE von \hat{P}_{ij} gewählt werden.
 → der EW von \hat{P}_{ij} ist eine Erhaltungsgröße.
- mögliche Eigenwerte: $\hat{P}_{ij} |4\rangle = \lambda |4\rangle$
- es gilt $|4\rangle = \hat{P}_{ij}^2 |4\rangle = \hat{P}_{ij}^2 |4\rangle = \lambda^2 |4\rangle \Rightarrow \lambda = \pm 1$
- $\lambda = 1$: symmetrische Zustände $| \dots; i; \dots; j; \dots \rangle = | \dots; j; \dots; i; \dots \rangle$
- $\lambda = -1$: antisym. Zustände $| \dots; i; \dots; j; \dots \rangle = - | \dots; j; \dots; i; \dots \rangle$

• kann man jeweils sym/antisym. Zustand wählen?

→ in der Natur gibt es keine Möglichkeit für eine Wahl; es gibt einfach zwei Arten von Teilchen,

Bosonen (z.B. Photonen): $\lambda = +1$

Fermionen (z.B. Elektronen): $\lambda = -1$

- es gibt ein tiefes Naturgesetz, das "Spin-Statistik-Theorem", dessen Beweis allerdings erst mit Hilfe relativistischer Quantenfeldtheorie gegeben werden kann [W. Pauli, 1940]:

Spin geradzahlig \Leftrightarrow Boson

Spin halbzahlig \Leftrightarrow Fermion

Bsp: N unabhängige Fermionen

($\approx e$ an Atom oder Nucleon?)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i) \quad \text{mit} \quad \hat{H}_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = \frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i)$$

\rightarrow also keine direkten Wechselwirkungen wie $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$, bzw. sollte U_{ij} als Störung behandelt

Einteilchen-Wellenfkt: $\hat{H}_i \psi_i(\vec{r}_i, s_i) = E_{n_i} \psi_i(\vec{r}_i, s_i)$

\rightarrow eine mögliche N-Teilchen-Lösung wäre dann

$$\psi(1, \dots, N) = \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) \dots \psi_{n_N}(N)$$

$$\hat{H} \psi = (E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N}) \psi$$

diese Lsg ist aber nicht antisymmetrisch!

\rightarrow die antisymmetrische Lsg: "Slater-Determinante"

$$\psi(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(1) & \psi_{n_1}(2) & \dots & \psi_{n_1}(N) \\ \psi_{n_2}(1) & \psi_{n_2}(2) & & \psi_{n_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(1) & \psi_{n_N}(2) & & \psi_{n_N}(N) \end{pmatrix}$$

(Nominierung)

Bem: falls ein Zustand zweimal auftritt ($n_i = n_j$), ist $\psi = 0$.

d.h. es gilt das Pauli-Verbot [1925]:

alle Fermionen sind in verschiedenen Zuständen

\Rightarrow Periodizität der Elemente

- es gibt $\psi = 0$ nur wenn "1=2", d.h. wenn $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ und $s_1(1) = s_1(2)$ ist. Also vermeiden zwei Fermionen einander, als gäbe es eine abstoßende Kr!

Anwendung: Heliumgrundzustand in dieser Näherung für ^4He ?

\rightarrow hier muss auch der Spinzustand betrachtet werden (obwohl es ^4He keine Spins aufweisen).

\rightarrow Addition von zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen (vgl. 4.33a):

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle |2-\rangle - |2+\rangle |1-\rangle) \quad \text{antisym.}$$

$$|11\rangle = |1+\rangle |2+\rangle$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle |2-\rangle + |2+\rangle |1-\rangle)$$

$$|1-1\rangle = |1-\rangle |2-\rangle$$

es gibt also zwei Projektorkonten eine antisym. Wellenfkt.

$$\psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) |00\rangle$$

"Parahelium"

und z.B. $\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{200}(\vec{r}_2) - \psi_{200}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2)] |10\rangle$ "Orthohelium"

\rightarrow die GE-Energie von Parahelium ergibt sich als [z.B. Florschütz 18.4.2]

$$E \approx -2Z^2 + 13,6 \text{ eV} + \langle \psi_0 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \psi_0 \rangle + \dots$$

$$E_0 \approx -108,8 \text{ eV}$$

$$E \approx -78,975 \text{ eV} \quad (\text{experimentell})$$

$$\rightarrow -74,8 \text{ eV}$$

Bem: höhere Ordnung der Stör. geben systematisch bessere Ergebnisse, z.B. (2.13.14.) ord. $\rightarrow (-79,1 / -78,97 / -78,9263) \text{ eV}$

alternativ: Variationsansatz

Erinnerung 5.65: ψ suchen mit $\psi \sim e^{-b r_1} e^{-b r_2}$

mittels 6-Optimierung $E \approx -77,5 \text{ eV}$

als obere Schranke $b_{opt} = \frac{27}{32} \frac{Z}{a_0}$

$$[\psi_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi)] \approx 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-2Zr/a_0}$$

$$\Rightarrow \text{Parahelium: } \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2Z(r_1 + r_2)/a_0}$$



zwei nicht-wechselwirkende Teilchen im 1D-Atom-Potential $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$

→ trennen die 1-Teilchen (im der Schrödinger-Gl. (vgl. ÜB))

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad \text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2ma^2}$$

• ununterscheidbare Teilchen: (Vollst. d. 2-Teilchen-Systems ist das Produkt

$$\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2)$$

$$E_{n_1, n_2} = (n_1^2 + n_2^2) \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

→ Grundzustand: $\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right)$, $E_{11} = 2E_1$

→ der nächsthöhere Zustand ist zweifach entartet:

$$\psi_{12} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right), \quad E_{12} = 5E_1$$

$$\psi_{21} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right), \quad E_{21} = 5E_1$$

→ also:

• zwei identische Bosonen:

→ Grundzustand wie oben

→ erster angeregter Zustand ist nicht entartet:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{12} + \psi_{21} \right) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \right)$$

mit $E = 5E_1$

• zwei identische Fermionen:

→ es gilt kein Zustand mit $E = 2E_1$!

→ Grundzustand ist also paar

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{12} - \psi_{21}) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \right)$$

mit $E = 5E_1$

(haben hier einen Symm. Spinzustand angenommen)

(als Übung: wie lautet jeweils der nächsthöhere Zustand (4 und 5) in den drei Fällen?)

Austauschwechselwirkung

wollen uns verschaulichen, was die (Anti-)Symmetrisierung bewirkt.

→ 1D; ein Teilchen im Zustand ψ_a , eine im ψ_b ; ψ_a ist orthogon. haben wieder drei Fälle:

(a) ununterscheidbare Teilchen: $\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2)$

(b) Bosonen: $\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_b(x_1) \psi_a(x_2))$

(c) Fermionen: $\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_b(x_1) \psi_a(x_2))$

wie groß ist das mittlere Abstandsquadrat

$$d^2 = \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2 \langle x_1 x_2 \rangle$$

der selben Teilchen?

$$(a) \langle x_1^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 x_1^2 |\psi_a(x_1) \psi_b(x_2)|^2 = \int dx_1 x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 \underbrace{\int dx_2 |\psi_b(x_2)|^2}_{=1}$$

$$= \langle a | x^2 | a \rangle$$

$$\text{genauso } \langle x_2^2 \rangle = \langle b | x^2 | b \rangle$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int dx_1 \int dx_2 x_1 x_2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 = \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle$$

$$\Rightarrow d_{(a)}^2 = \langle a | x^2 | a \rangle + \langle b | x^2 | b \rangle - 2 \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle < \langle a | x | a \rangle < \langle b | x | b \rangle < \langle a | x | a \rangle < \langle b | x | b \rangle$$

$$(b, c) \langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 + |\psi_b(x_1)|^2 |\psi_a(x_2)|^2$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \langle a | x^2 | a \rangle + \langle b | x^2 | b \rangle \pm \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle \right\}$$

$$\text{genauso } \langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \langle a | x^2 | a \rangle + \langle b | x^2 | b \rangle \pm \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle \right\}$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle + \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle \right\}$$

(! antisymmetrisch ist $\langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle$, wird Teilchen unterscheidbar!)

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 x_1 x_2 \dots$$

$$\Rightarrow d_{(b,c)}^2 = \langle a | x^2 | a \rangle + \langle b | x^2 | b \rangle - 2 \langle a | x | a \rangle \langle b | x | b \rangle \pm 2 \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle$$

$$\pm 2 \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle$$

$$\pm 2 \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle$$

$$\pm 2 \langle a | x | b \rangle \langle b | x | a \rangle$$

8. Ausblick / "Näheren"

weitere Themen in der nichtrelativistischen QM [→ QM II: §5.5. Sm.]
(modul. Ergänzung)

- zeitabhängige Störungstheorie ($\vec{H} = H_0 + \lambda H_1(t)$)
 Hamilton-Op. H_0 und ungestörte Zustände $| \psi_0 \rangle$ sind wie gewohnt, vgl. § 6.2; die Frage lautet jetzt:
 → mit welcher Wahrscheinlichkeit verursacht $H_1(t)$ einen Übergang vom Zustand $| \psi_0 \rangle$ in den Zustand $| \psi_f \rangle$?
 → Antwort: die W.-Amplitude dafür lautet (und $W = |c_f|^2$)

$$c_f = \langle \psi_f(t=T) | \psi_0(t=0) \rangle$$

$$= \delta_{f0} - \frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \langle \psi_f | \lambda H_1(t) | \psi_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_f - \epsilon_0)t} + O(\lambda^2)$$

→ wichtig z.B. für Strahlungsübergänge in Atomen:
 induzierte Emission / Absorption

• Streutheorie

Streuexperimente → Information über Aufbau der Materie, Kristallstruktur; Teilchenwechselwirkungen; Kernkräfte; Nu.-Potentiale; usw.

(haben bisher meist getrennte/diskrete Zustände betrachtet, hier Streu-Zust.)

Streu-Zustände $\rightarrow | \psi_i \rangle \rightarrow t \rightarrow T$
 \downarrow
 $\lambda H_1(\vec{r})$
 \downarrow
 $| \psi_f \rangle$

Coulomb-potential → Rutherford
 $|c_f|^2 \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Ze^2}{16\epsilon_0 E_{kin}^2(\frac{\theta}{2})} \right]^2$
 ↗ "Streuschnitt"

• Teilchen in elektromagnetischen Feldern

E-Dynamik: $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \dot{\vec{A}}$, $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$
 $\phi =$ Skalarpotential, $\vec{A} =$ Vektorpotential

QM $\Rightarrow \vec{H} = \frac{1}{2m} [\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r},t)]^2 + e\phi(\vec{r},t)$

↑ Potentiale, wie gewohnt
 ↑ neue Effekte

→ Resultat:

$\left. \begin{array}{l} \text{Bosonen (obers Vor.)} \\ \text{Fermionen (unters Vor.)} \end{array} \right\}$ sind etwas nicht zusammen
 sind etwas nicht auseinander
 als unterschiedbare Teilchen zu beschreiben zwei Zuständen ψ_1, ψ_2 .

→ dem Effekt nennt man "Austauschkraft" / "Austauschenergie"

- keine Kraft im üblichen Sinne; rein geom. Effekt aufgrund der Symmetrie der Wellenfkt., geometrische Konsequenz
- $\langle n_1 | n_2 \rangle > 0$ nur wenn Wellenfkt. "überlappen"

→ $\psi_1, \psi_2 \in \vec{c}$ eines Atoms in Anion / Biebfeld
 → kein Unterschied, ob wir WF antisymmetrisieren oder nicht!
 → in der Praxis können wir also diese \vec{c} mit nicht-überlappenden WFⁿ als unterschiedbare betrachten.

⇒ nur deshalb können wir überhaupt Physik (+ Chemie) betreiben: im Prinzip sind alle \vec{c} des Universums \rightarrow ein antisymm. WF!

• wichtige Konsequenz: chemische Bindung

z.B. H_2 -Molekül: $2e^-$ im Coulombfeld zweier p^+

→ Grundzustand des $2e^-$ -Systems?

heuristisch: jedes $e^- \approx$ in EZ eines Atomborns

Gesamt-WF: $\psi_{0e} \cdot \chi_{Spin} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}, \text{ vgl. S.82, antisym. } (1x) \uparrow \uparrow \right)$
 $\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \text{ symm. } (3x) \uparrow \uparrow \right)$

• $\psi_{0e, symm} \cdot \chi_{antisym.}$ $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$, Ges.-Spin = 0

↑ Elektronen bevorzugt zwischen den Atombornen

- p^+ werden nach innen gedrückt
- Abstand gering
- ⇒ kovariante chemische Bindung

• $\psi_{0e, antisym.} \cdot \chi_{symm.}$

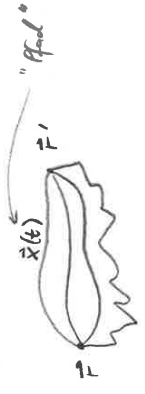
- ↑ neg. e^- -Ladung bevorzugt außen
- Abschattung der Kerne
- keine chemische Bindung

W [Chemiker: Singulett-Spin 0]



Zentrale Formel

$$\vec{x}(t) = \vec{r} = \int \vec{D} \vec{x}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H(\vec{x}, \vec{p})} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} |$$



alles ist "klassisch", d.h. keine Operatoren, aber man muss über alle möglichen Bahnen summieren.

→ Pfadintegrale sind formell eine Umformulierung der QM; sehr elegant + intuitiv; erlaubt Lösung einiger Probleme, die mit herkömmlichen Methoden extrem schwierig sind.

Anwendungsgebiete

- Atom- und Molekülphysik
 - typische Massen: $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$
 - typische Energien: $E \lesssim \frac{1}{2} m_e c^2 \approx 13,6 \text{ eV}$
 - typische Abstände: $a_0 \gtrsim \frac{\hbar c}{m_e c} \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
- Kernphysik
 - typische Massen: $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$ (hier gibt es jedoch keine kleine Feinstrukturkonstante wie α)
 - typische Energien $\sim (m_p - m_n) c^2 \approx 1,3 \text{ MeV}$
 - typische Abstände \gg Proton-Radius $\sim \frac{\hbar c}{m_p c} \approx 0,2 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
- Elementarteilchenphysik
 - typische Energien $\geq m_p c^2 \sim 1 \text{ GeV}$
 - typische Abstände \ll Proton-Radius
- etc...

Vollgemeinerung der nichtrel. QM

Form der Schrödinger-Gl. ist $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ bleibt bestehen, aber \hat{H} kann anders aussehen.

- ein relativistisches Teilchen $[\rightarrow \text{QM II}]$

(vgl. § 6.5, H-Fermionen)

eine relativistische Gl. muss Lorentz-kovariant sein! die Gl. der SG ist linear in $\partial_\mu \Rightarrow$ die Gl. muss linear in \vec{p} bzw. \vec{p} sein!

Dinge $\Rightarrow \hat{H}$ muss eine Matrix sein!

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i + \beta m$$

α_i, β Matrizen
 \Rightarrow d.h. in der nichtrel. Theorie gibt es die Physikalität für Spin; in der relativistischen Theorie ist Spin eine Nahungsbegriff

- sehr viele (bzw. unbestimmte Anzahl von) Teilchen

→ Statistische Physik: oft sehr viele Teilchen (N $\gg 10^{23}$); in unidentifizierbaren Ensembles ist T-Zahl keine gute Variable, sondern stattdessen das chemische Potential μ . [\rightarrow Theorie III: S. 5.]

→ für relativistische Systeme: kann T-Zahl nicht festlegen, z.B.: $\sum_{i=1}^N \epsilon_i^{\pm}$ "virtuelles Teilchen/Antiteilchen-Paar" [\rightarrow Elementarteilchenphysik: S. 5.]

solche Systeme werden mit Quantenfeldtheorie [\rightarrow QFT: § 6.] beschrieben: $\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 + \dots \rightarrow \int d^3x \left\{ \frac{1}{2m} [\partial_\mu \phi(\vec{x}, t)]^2 + \dots \right\}$

Pfadintegralformalismus [\rightarrow QM II; QFT] [s. Neuberger, § 24]

es gibt (genau wie in der klass. Mechanik) auch in QM verschiedene Formulierungen:

- klassisch
- Hamilton: $H(p, x), H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \Leftrightarrow$ kanonisch: $i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$
- Lagrange: $L(x, \dot{x}), L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \Leftrightarrow$ Pfadintegrale: Feynman (1948)

Quantenmechanik