

MITSCHRIEB ZU THEORETISCHE PHYSIK IV: QUANTENMECHANIK

Prof. Dr. Ralph von Baltz und Dr. Werner

Vorlesung Sommersemester 2003

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 26. April 2008

Mitschrieb der Vorlesung THEORETISCHE PHYSIK IV
von Herrn Prof. Dr. RALPH VON BALTZ und Herrn Dr. WERNER im Sommersemester 2003
von MARCO SCHRECK.

Dieser Mitschrieb erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Korrektheit.
Kommentare, Fehler und Vorschläge und konstruktive Kritik bitte an Marco.Schreck@gmx.de.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
1.1	Lehrbücher	5
1.2	Warum Quantenmechanik?	5
2	Grundbegriffe der theoretischen Physik	7
2.1	Zustand – Größe – Wert	7
2.2	Messung und Zustandspräparation	7
2.3	Kurzer Abriss über klassische Mechanik (Blick auf Quantenmechanik)	9
2.3.1	Lagrange-Formulierung	10
2.3.2	Hamilton-Formulierung	10
2.4	Klassische Wellen (Felder, mit Blick auf Quantenmechanik)	11
2.4.1	Wellengleichung	11
2.4.2	Wellenpakete	12
2.4.3	Beweis der Unschärfe-Relation (Pauli)	14
3	Wellenmechanik	17
3.1	Schrödinger-Gleichung	17
3.2	Regeln der Wellenmechanik	18
3.2.1	Physikalisch relevante Zustände	18
3.3	Freies Teilchen	20
3.4	Teilchen im „Kasten“	21
3.4.1	Orts-Wahrscheinlichkeitsdichte	23
3.4.2	Impuls-Wahrscheinlichkeitsdichte	24
3.4.3	Überlagerung zweier stationärer Zustände	25
3.4.4	Ortseigenzustände	26
3.5	Linearer harmonischer Oszillator	27
3.5.1	Einschub: Parität und Paritätsoperator	32
3.5.2	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	33
3.6	Ein eindimensionales Streuproblem	33
3.7	Virtuelle Energieniveaus bzw. quasi-gebundene Zustände	35
3.8	Drehimpulseigenzustände	36
3.8.1	Entartung	43
3.9	Aufhebung der m-Entartung durch ein \vec{B} -Feld (Zeeman-Effekt)	44
3.10	Ausstrahlung elektromagnetischer Wellen durch angeregten Zustand	45
3.11	Wasserstoff-Atom (Zweikörperproblem mit Zentralkraft-Wechselwirkung)	46
3.11.1	Entartung	51
3.11.2	Entartung bei einer Dimension	52
4	Formalismus der Quantenmechanik	55
4.1	Vektor-Raumstruktur, lineare Operatoren	55
4.1.1	Lineare Unabhängigkeit	56
4.1.2	Basis	56
4.1.3	Lineare Operatoren auf Z	58
4.1.4	Zeitentwicklung	59
4.1.5	Impulsdarstellung	60
4.2	Matrixformulierung der Quantenmechanik	60
4.3	Dirac'sche Schreibweise	61
4.4	Die Unschärferelation	63
4.5	Harmonischer Oszillator in algebraischer Behandlung	64

4.6	Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators(Glauber-Zustände, α -Zustände)	67
4.7	Drehimpuls-Eigenzustände	67
4.8	Spin 1/2	68
4.9	Beispiele zu Spin-1/2-Systemen	69
4.9.1	Stern-Gerlach-Experiment	69
4.10	Spin-Resonanz im zeitlich konstanten Magnetfeld \vec{B}_0	71
4.11	g-2-Experiment	73
4.12	Spin-Resonanz	74
4.13	Störungsrechnung und Anwendungen	76
4.13.1	Stark-Effekt beim Wasserstoff-Atom	77
4.13.2	Frequenzabhängige Polarisierbarkeit eines Atoms	78

Kapitel 1

Einführung

„Quantenmechanik wird ein Weg zu neuen Ufern sein.“

1.1 Lehrbücher

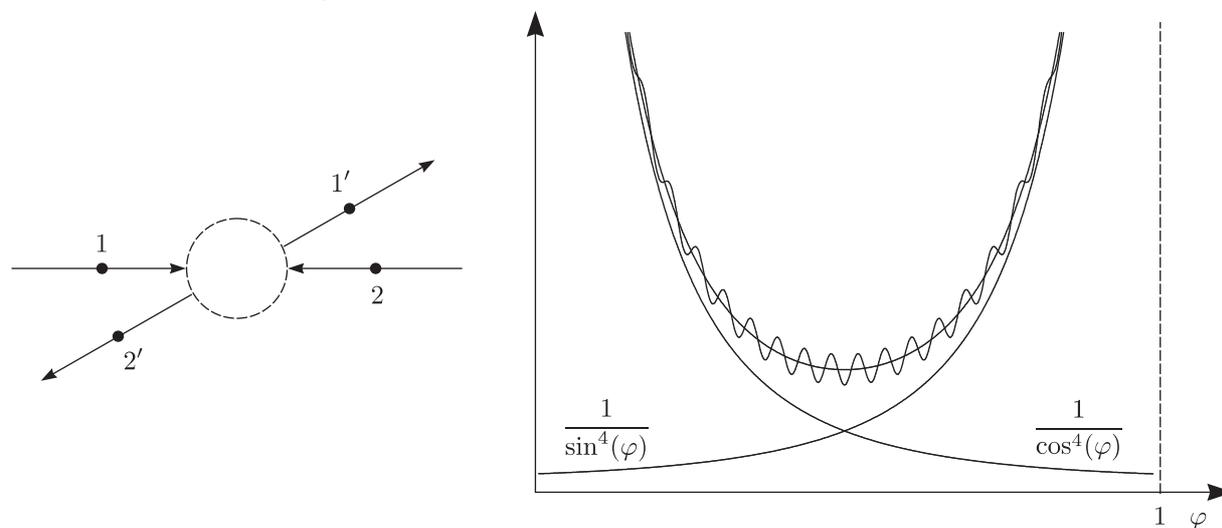
Nummer	Name des Autors	Sprache	vorhanden	(vorrätig)
1.)	Cohen-Tannoudji Band I	deutsch	41	(von 75)
2.)	Schwabl	deutsch	33	(38)
3.)	Merzbacher	englisch	12	(49)
4.)	Schiff	englisch	17	(18)
5.)	Park	englisch	3	(4)
6.)	Jasiorowics	englisch	71	(71)
7.)	Griffith	englisch	-	(12)
8.)	Fließbach	deutsch		
9.)	Feynman III	englisch	?	(3)
10.)	Dirac	deutsch	38	(44)

1.2 Warum Quantenmechanik?

* Stabilität der Materie:

Keine Anordnung von Ladungen ist in der Elektrodynamik bzw. der klassischen Physik stabil.

* Klassische Teilchen sind eigentlich Körper, Individuen



* In der klassischen Physik nicht unterscheidbar.

* In der Quantenmechanik (Natur) unterscheidbar.

- * Elektrische (Teilchen) haben Welleneigenschaften (de Broglie (1924), Davisson+Germer (1927)).

$$\lambda = \frac{h}{p} \Leftrightarrow k = \frac{p}{\hbar}$$

Beziehungsweise gilt:

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

- * Erklärung dafür, daß ...

- a.) Silizium (Si) ein Halbleiter ist
- b.) Eisen (Fe) ein Ferromagnet ist
- c.) Aluminium (Al) supraleitende Eigenschaften hat.

Historisch haben die Spektrallinien und der Intensität beispielsweise beim Wasserstoffatom eine große Rolle gespielt. Bei Materie gibt es außerdem einen Dualismus Welle-Teilchen (Körper). Diese Phänomene sind in der klassischen Physik unverständlich.

Kapitel 2

Grundbegriffe der theoretischen Physik

2.1 Zustand – Größe – Wert

- * Die Vorgänge in der Natur werden als Übergänge zwischen Zuständen aufgefaßt. In der Mechanik ist der Zustand eines Teilchens durch Angabe von \vec{r} , \vec{v} festgelegt.
- * Es gibt eine Größe G , die als Observable bezeichnet wird. Größen sind Relationen zwischen verschiedenen physikalischen Systemen (Länge: Vergleich mit Urmeter) wie beispielsweise von \vec{r} , \vec{v} und t : $G(\vec{r}, \vec{v}, t)$. Als Beispiel einer Größe haben wir die kinetische Energie:

$$E_{kin} = \frac{m}{2} \vec{v}^2$$

Es gibt ein „Glaubensbekenntnis“: In einem G hat jede G einen WAW.

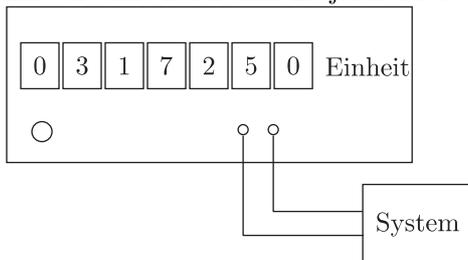
- * Die Dynamik wird durch eine Bewegungsgleichung $\vec{r}, \vec{v}(t = t_0) \mapsto \vec{r}(t), \vec{v}(t)$ beschrieben.
- * Zustände können sich ändern:
 - a.) Eingriff von außen
 - b.) Eigen-Dynamik (Bewegungsgleichung)

2.2 Messung und Zustandspräparation

Im allgemeinen ist die Zustandspräparation eine Vorschrift, die reproduzierbar ist. Hier sei in einer Theorievorlesung allergrößte Vorsicht geboten. Es gilt in der Quantenmechanik, wie wir später herleiten werden, folgende Ungleichung:

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

Kann es sein, daß das Teilchen im Prinzip einen bestimmten Ort bzw. Impuls besitzt, aber dessen Kenntnis mir verwehrt ist? Nein!! Zu jeder Größe G gibt es einen Meßapparat:



- * Die Messung ist beliebig genau.
- * Es gibt relativ kurze Meßzeiten ($\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}??$)

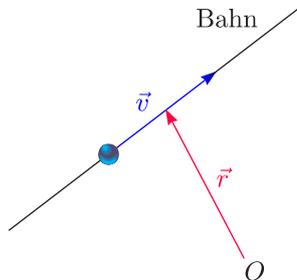
Durch eine Einzelmessung erhält man als Resultat mögliche Werte von G . Später wird sich herausstellen, daß diese die Eigenwerte eines Operators darstellen.

* Drehimpuls

Für den Drehimpuls gilt beispielsweise in der Quantenmechanik:

$$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$$

Der Drehimpuls ist also in Einheiten von \hbar quantisiert. Gibt das Meßgerät andere Werte aus, so ist es kaputt! Nach der klassischen Vorstellung gilt:



$$\vec{L} = \vec{r} \times (m\vec{v})$$

\vec{L} ändert sich konstant bei Verschiebung vom Ursprung O .

* Ort, Impuls

Diese nehmen kontinuierliche Werte von $-\infty$ bis $+\infty$ an.

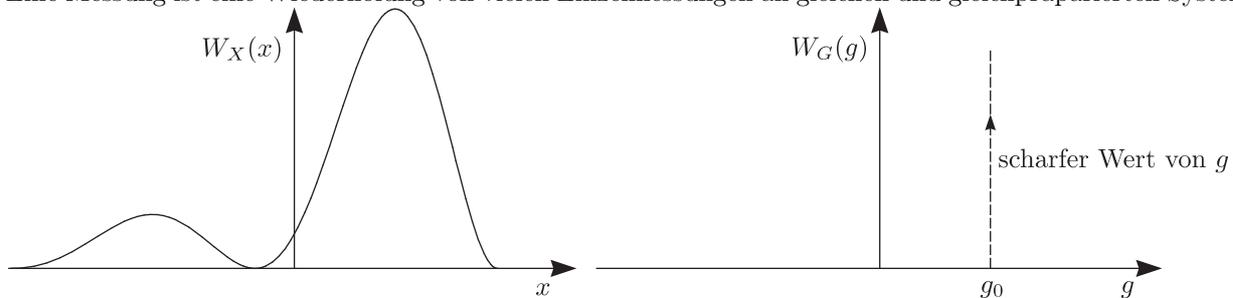
* Energie

Für einen Oszillator gilt:

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega, \frac{3}{2}\hbar\omega, \dots \text{ und potentielle Energie}$$

Ein freies Teilchen nimmt Energien größer Null an ($E \geq 0 = \text{const.}$)

Eine Messung ist eine Wiederholung von vielen Einzelmessungen an gleichen und gleichpräparierten Systemen.



An jedem System wird nur einmal gemessen.

* Wahrscheinlichkeitsverteilung für G :

$$W_G(g) \geq 0, \sum_g W_G(g) = 1$$

* Erwartungswert:

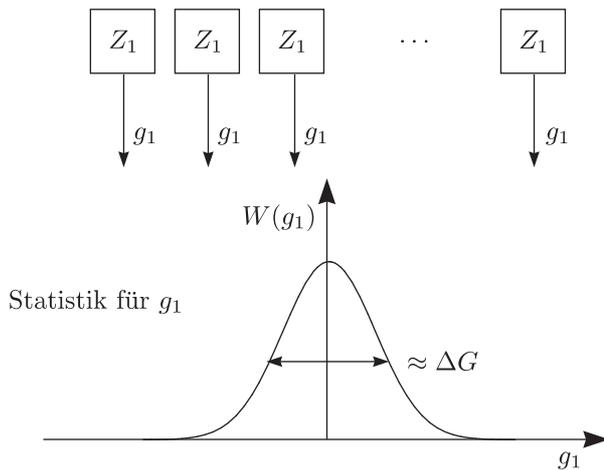
$$\langle g \rangle = W(G, Z) = \sum_g W_G(g) \cdot g$$

* Streuung ΔG :

$$(\Delta G)^2 = \langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2$$

Streuungen entstehen in der klassischen Physik durch Fehler bei der Zustandspräparation oder Messung. Durch die Summe über die Zufallsgrößen ergibt sich dann eine Gauß-Verteilung.

2.3. KURZER ABRISS ÜBER KLASSISCHE MECHANIK (BLICK AUF QUANTENMECHANIK)



Wir definieren, daß G einen scharfen Wert besitzt, falls $\Delta G = 0$ ist.
Es gibt zwei extreme Arten von Zuständen:

* Ideale Zustände („Reine Zustände“)

- Mechanik: \vec{x}, \vec{v} für jedes Teilchen
- Elektrodynamik: \vec{E}, \vec{B}

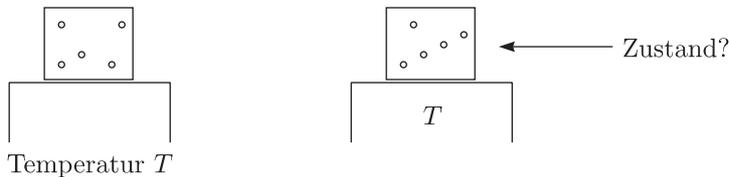
Die Streuung ΔG von allen physikalischen Größen in der klassischen Physik ist gleich Null. In der Quantenmechanik gibt es jedoch keinen Zustand, in denen für alle Größen $\Delta G = 0$ gilt und einen scharfen Wert besitzen. $\Delta G \neq 0$ ist nicht unbedingt ein Fehler.

* Realer Zustand („Gemisch“, fehlerbehaftet)

$$\Delta G > \min$$

Betrachten wir folgendes Beispiel:

N Teilchen
Volumen V

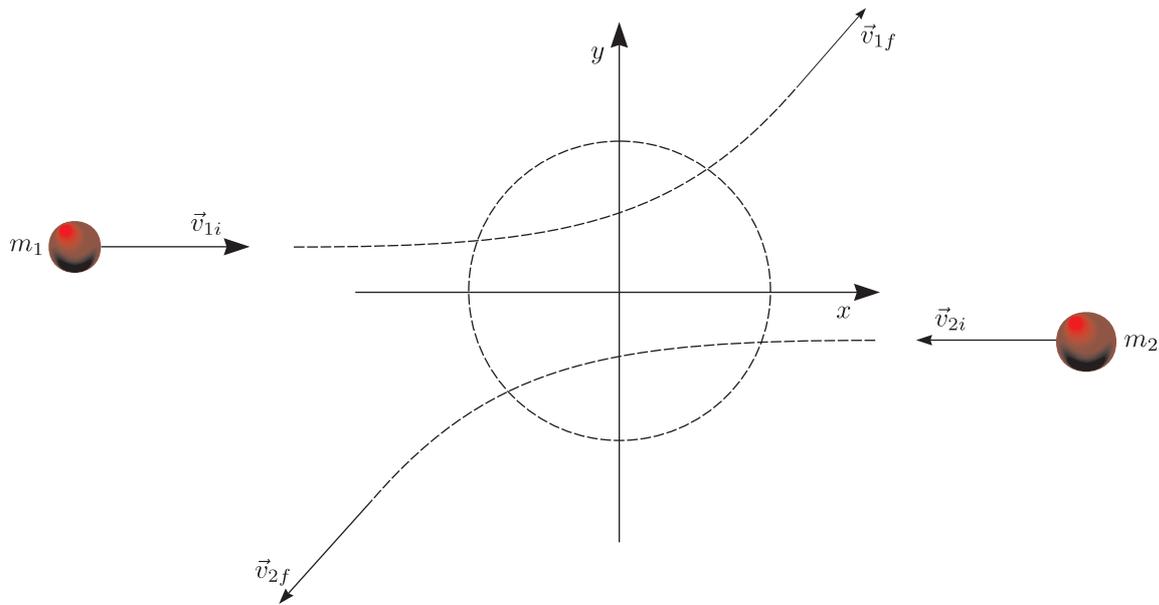


Wir bringen zwei Systeme auf dieselbe Temperatur T . Die Statistik wird als Hilfsmittel der Unkenntnis der existierenden \vec{x} und \vec{v} verwendet.

$$W(p, x) \sim \exp\left(-\frac{\text{Energie}}{k_B T}\right)$$

2.3 Kurzer Abriss über klassische Mechanik (Blick auf Quantenmechanik)

Die Mechanik beschreibt Erscheinungen in der Natur, die sich als Bewegungen (individueller) Körper zeigen.



Es gibt einen (reinen) Zustand für jedes t , der durch \vec{x} und \vec{v} festgelegt ist. Es handelt sich also um Größen $G = G(x, v, t)$. In der Dynamik lassen sich diese Größen durch die Newtonschen Gleichungen berechnen:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}$$

2.3.1 Lagrange-Formulierung

Anstelle von Beschreibung des Systems durch m, \vec{F} haben wir als Alternative die Lagrange-Funktion kennengelernt:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(x, v, t)$$

Meist lautet diese:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} v^2 - U(x)$$

Die Bahnen (Dynamik) $x = x(t), v = v(t)$ folgen aus $\delta S = 0$. Die Lagrange-Formulierung führt auf die Newtonsche Bewegungsgleichung, wenn man keine Zwangsgröße hat:

$$\frac{d}{dt} p = F \text{ mit } p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v}, F = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \left(= - \frac{\partial U}{\partial x} \right)$$

Die Vorteile ergeben sich durch Verwendung von generalisierten Koordinaten, Zwangsbedingungen.

2.3.2 Hamilton-Formulierung

Das System wird durch $\mathcal{H} = pv - \mathcal{L} = \mathcal{H}(p, x, t)$ charakterisiert. Ein Zustand wird durch p und x festgelegt; p ist der kanonische (generalisierte) Impuls und x der kanonische (generalisierte) Ort. Die Bewegungsgleichung ergibt sich aus:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}(p, x, t)}{\partial p} \text{ und } \frac{dp(t)}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{H}(p, x, t)}{\partial x}$$

Man kann sich nun fragen, wie sich die zeitliche Ableitung einer Größe auf der Bahn verhält:

$$\frac{d}{dt} G(p(t), x(t), t) = \frac{\partial G(p, x, t)}{\partial t} + \{ \mathcal{H}, G \}$$

$\{ \mathcal{H}, G$ nennt man Poisson-Klammer. Diese definieren wir (nach Landau-Lifschitz) folgendermaßen:

$$\{ A, B \} = \frac{\partial A(p, x, t)}{\partial p} \frac{\partial B(p, x, t)}{\partial x} - \frac{\partial A(p, x, t)}{\partial x} \frac{\partial B(p, x, t)}{\partial p}$$

2.4. KLASSISCHE WELLEN (FELDER, MIT BLICK AUF QUANTENMECHANIK)

Eine Erhaltungsgröße nennt man eine Größe, die sich längs der Bahn nicht ändert, also keine explizite Zeitabhängigkeit enthält:

$$\frac{dG}{dt} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial t} = 0$$

Eine Erhaltungsgröße ist dadurch feststellbar, daß die Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion \mathcal{H} gleich Null ist.

$$\{\mathcal{H}, G\} = 0$$

Für kanonische Variablen p, x gilt außerdem:

$$\{p_j, x_k\} = \delta_{jk}$$

Die Vorteile der Poisson-Klammern liegt darin, daß sich viele Relationen in der Quantenmechanik wiederfinden. Sie „kupfert“ viele Sachen von der klassischen Physik ab.

2.4 Klassische Wellen (Felder, mit Blick auf Quantenmechanik)

Ein Feld ist ein physikalisches System mit räumlich verteilten Größen. Man unterscheidet:

* Mengentartige Größen: Dichten und Stromdichte $\varrho(\vec{r}, t), \vec{j}(\vec{r}, t)$

> Massendichte

> Energiedichte

* Erhaltungsgrößen:

$$\frac{\partial \varrho_g(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_g = \begin{cases} 0 & \text{„streng erhalten“} \\ \Pi(\vec{r}, t) & \text{produktive Dichte} \end{cases}$$

Der Energiesatz in der Elektrodynamik lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varepsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \right) + \operatorname{div} \left(\frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} \right) = -\vec{j} \cdot \vec{E}$$

$\vec{j} \cdot \vec{E}$ ist die Menge an Arbeit, die mit bewegten Ladungen zusammenhängt. Selbst wenn ein Magnetfeld im Spiel ist, steht auf der rechten Seite der Gleichung kein B , da die Lorentzkraft ja keine Arbeit leistet.

2.4.1 Wellengleichung

Diese lautet für eine erregende (äußere) Kraft $f(\vec{r}, t)$:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Delta \Psi(\vec{r}, t) = f(\vec{r}, t)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ beschreibt eine Komponente von \vec{E} und \vec{B} . Die Diffusionsgleichung hat beispielsweise auch Ähnlichkeit mit der Wellengleichung, allerdings enthält sie nur eine erste zeitliche Ableitung:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = D \Delta \Psi$$

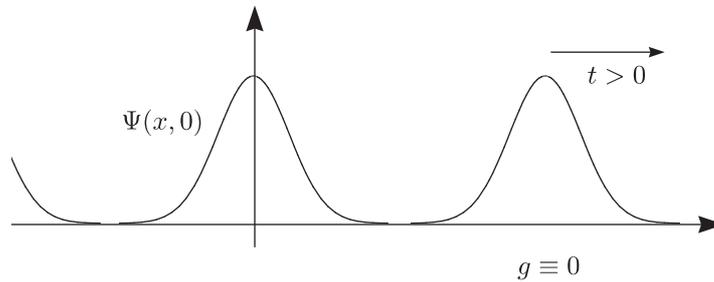
Auch die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen ist eine Wellengleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$$

Der Zustand der Wellengleichung ist durch Kenntnis von $\Psi(x, t)$ bei $t = t_0$ und $\left. \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right|_{t=t_0}$ festgelegt. Dies entspricht Ort und Geschwindigkeit aus der Mechanik. Wenn man die Größen kennt, die den Zustand festlegen, kennt man somit alle Größen des Systems. Die allgemeine Lösung der Wellengleichung enthält zwei freie

Konstanten a, b , also zwei freie Funktionen $f(x), g(x)$, die an jedem x verschieden sein können! Die allgemeinste Lösung in einer Dimension ist von folgender Form:

$$\Psi(x, t) = f(x - ct) + g(x + ct)$$



2.4.2 Wellenpakete

Für eine monochrom (ebene) Welle erhalten wir folgende Beschreibung:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp\left(i \underbrace{(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}_{\text{Phase}}\right)$$

Ebenen sind in diesem Falle Ort konstanter Phasen. Ein Wellenpaket erhält man nun durch Superposition von ebenen Wellen:

$$\Psi(x, t) = \int A(k) \exp(i(kx - \omega_k t)) \frac{dk}{2\pi}$$

$$A(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t=0) \exp(-ikx) dx$$

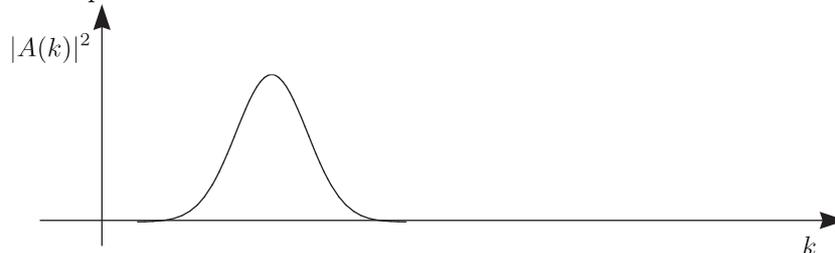
Das Charakteristikum von Wellen ist, daß sie durch eine Beziehung zwischen ω und k , nämlich der sogenannten Dispersionsrelation, beschrieben werden:

$$\omega_k = \omega(k)$$

Für elektromagnetische Wellen im Vakuum gilt beispielsweise:

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

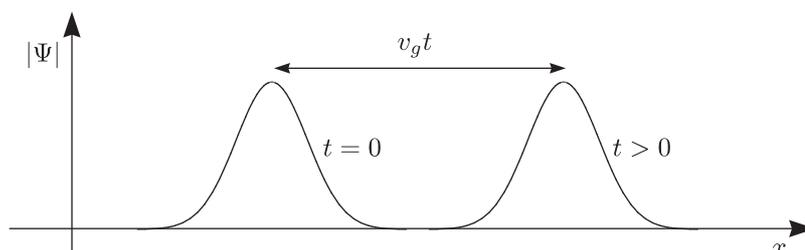
Wenn man Wellenphänomene hat, welche durch eine lineare Gleichung beschrieben werden, bereitet sich das Wellenpaket formstabil aus:



Man unterscheidet nun:

- * Gruppengeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} \quad (= c \text{ für elektromagnetische Wellen im Vakuum})$$



2.4. KLASSISCHE WELLEN (FELDER, MIT BLICK AUF QUANTENMECHANIK)

* Phasengeschwindigkeit:

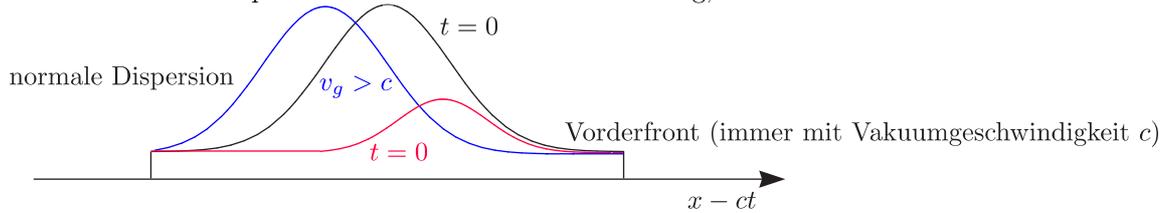
$$v_p = \frac{\omega(k)}{k} \quad (= c \text{ für elektromagnetische Wellen im Vakuum})$$

Bei elektromagnetischen Wellen in Materie haben wir folgenden Brechungsindex $n(\omega)$:

$$c \mapsto \frac{c_{\text{vak}}}{n(\omega)}$$

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

Die Form des Wellenpakets ändert sich bei der Ausbreitung;



Man unterscheidet außerdem zwischen:

* Normale Dispersion:

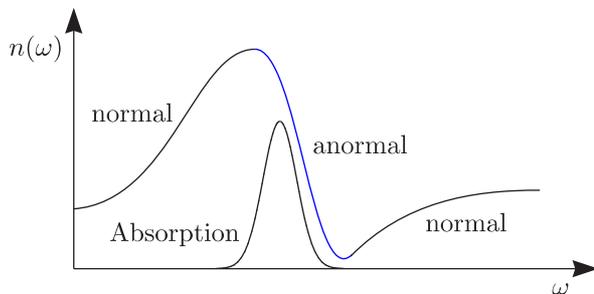
Dies bedeutet, daß der Brechungsindex mit der Frequenz zunimmt.

$$n'(\omega) > 0$$

* Anormale Dispersion:

Der Brechungsindex nimmt mit der Frequenz ab.

$$n'(\omega) < 0$$



Des weiteren gilt die „Unschärfe-Relation“ für x und k :

$$\Delta x \cdot \delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta t \cdot \Delta \omega \geq \frac{1}{2}$$

Die Zahlen auf der rechten Seite der Ungleichungen hängt von der Definition der Δ 's ab. Wir definieren das Betragsquadrat als „Intensität“:

$$W(x) = |\Psi(x)|^2$$

$$W(k) = |A(k)|^2$$

Auch hier können wir die Erwartungswerte bilden:

$$\langle x \rangle = \int |\Psi(x)|^2 \cdot x \, dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \int |\Psi(x)|^2 \cdot x^2 \, dx$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Die folgende Relation nennt man Parsevalsche Gleichung:

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = 1 = \int |A(k)|^2 \frac{dk}{2\pi}$$

Wir wollen diese kurz beweisen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)|^2 \frac{dk}{2\pi} = \int \frac{dk}{2\pi} \int \Psi^*(x) \exp(+ikx) dx \cdot \int \Psi(x') \exp(-ikx') dx'$$

Außerdem gilt:

$$\int \frac{dk}{2\pi} \exp(ik(x - x')) = \delta(x - x')$$

Womit wir dann erhalten:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)|^2 \frac{dk}{2\pi} &= \int dx \Psi^*(x) \Psi(x) \\ \int |A(k)|^2 \cdot k \frac{dk}{2\pi} &= \int \frac{dk}{2\pi} k \int \Psi^*(x) \exp(ikx) dx \int \Psi(x') \exp(-ikx') dx' = \\ &= \int dx \int dx' \left[\int k \exp(ikx) \cdot \exp(-ikx') dk \right] \Psi^*(x) \Psi(x) \end{aligned}$$

Für den Ausdruck in der Klammer gilt:

$$\int k \exp(ikx) \cdot \exp(-ikx') dk = i \frac{\partial}{\partial x'} \left[\int \exp(ikx) \cdot \exp(-ikx') dk \right]$$

Somit erhalten wir wieder die δ -Funktion:

$$\int \Psi^*(x) dx \int i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x') dx' \cdot \delta(x - x') = \boxed{\int \Psi^*(x) (-i) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) dx}$$

Man erhält den Impuls, indem man die Wellenfunktion fouriertransformiert. Nach de Broglie gilt:

$$p = \hbar k$$

$$\langle p \rangle = \hbar \int |A(k)|^2 \cdot k \frac{dk}{2\pi} = \int \Psi^*(x) \left(-i \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) dx$$

Folgenden Ausdruck bezeichnet man nun als Impulsoperator:

$$\boxed{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$$

2.4.3 Beweis der Unschärfe-Relation (Pauli)

Wir werden nun einen Beweis kennenlernen, der etwas undurchsichtig sein mag. Wir notieren uns hierzu als allererstes eine Relation, die auf jeden Fall gilt, da der Betrag einer komplexen Funktion immer positiv ist:

$$\boxed{D(x) = \left| \frac{x}{2(\Delta x)^2} \Psi(x) + \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \right| \geq 0}$$

Dies ist nichts anderes als die Schwarzsche Ungleichung für Vektoren. Durch Quadrieren und integrieren folgt:

$$\begin{aligned} \int D^2(x) dx &= \int \left[\frac{x^2}{4(\Delta x)^4} \Psi^* \Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{x}{2(\Delta x)^2} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \right] dx = \\ &= \frac{1}{4(\Delta x)^4} \int x^2 |\Psi|^2 dx + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + \frac{1}{2(\Delta x)^2} \int x \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) \right] dx \geq 0 \end{aligned}$$

O.B.d.A. gilt:

$$\langle x \rangle = 0, \text{ sonst } x \mapsto x - \langle x \rangle$$

$$\langle k \rangle = 0, \text{ sonst } k \mapsto k - \langle k \rangle$$

Damit gilt also nach der Fouriertransformation:

$$\Psi(x) \mapsto \Psi(x) \exp(ikx)$$

* Erster Term:

Mit $\langle x \rangle = 0$ resultiert dann:

$$\int x^2 |\Psi|^2 dx = (\Delta x)^2$$

* Zweiter Term:

$$\int \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \int -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \int A(k) k^2 \frac{dk}{2\pi} = (\Delta k)^2$$

* Dritter Term

Mit dem letzten Term führen wir eine partielle Integration durch:

$$\int x \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) \right] dx = x [\Psi^* \Psi]_{-\infty}^{\infty} - \int 1 \cdot |\Psi|^2 dx = -1$$

Dadurch, daß die Wellenfunktionen im Unendlichen verschwinden müssen und daß diese außerdem normiert sind, folgt dieses Resultat.

Damit erhalten wir also, um den letzten Term nochmals zu rezitieren:

$$\frac{1}{4(\Delta x)^4} \int x^2 |\Psi|^2 dx + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + \frac{1}{2(\Delta x)^2} \int x \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) \right] dx \geq 0$$

$$\frac{1}{4(\Delta x)^4} \cdot (\Delta x)^2 + (\Delta k)^2 - 1 \cdot \frac{1}{2(\Delta x)^2} \geq 0$$

Wir multiplizieren mit $(\Delta x)^2$ durch und erhalten:

$$\frac{1}{4} + (\Delta x)^2 (\Delta k)^2 - \frac{1}{2} \geq 0$$

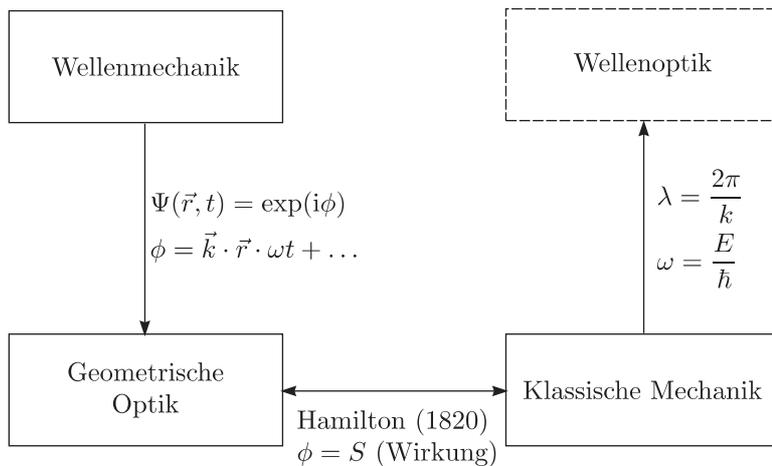
$$(\Delta x)^2 (\Delta k)^2 \geq \frac{1}{4}$$

Damit erhalten wir schließlich:

$$\boxed{\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}}$$

Kapitel 3

Wellenmechanik



3.1 Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Für ein freies Teilchen in einer Dimension gilt $V = 0$ und somit:

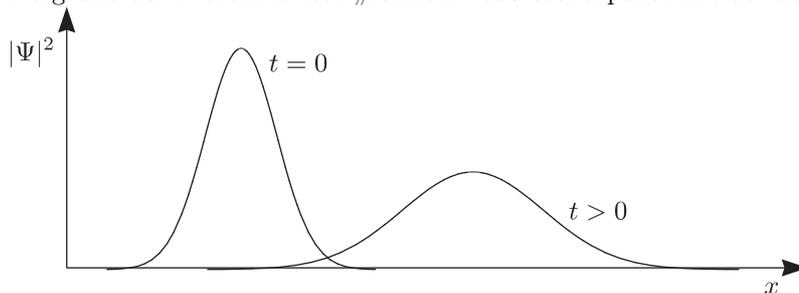
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

Wir setzen als Ansatz die ebene Welle $\Psi = \exp(i(kx - \omega t))$ ein und erhalten:

$$i\hbar(-i\omega)\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2\Psi$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Aufgrund der Nichtlinearität „zerfließt“ das Wellenpaket mit der Zeit:



Gruppen- und Phasengeschwindigkeit sind nicht gleich.

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

$$v_p = \frac{1}{2}v_g$$

Mit der Kenntnis der Gleichung und deren Lösung ist die Quantenmechanik nur zu einem kleinen Teil abgedeckt.

3.2 Regeln der Wellenmechanik

* Erste Regel

$\Psi(x)$ sei eine komplexe Funktion, die folgendermaßen normiert ist:

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

* Zweite Regel

Einer physikalischen Größe (Observable) G wird ein lineare (hermitescher) Operator zugeordnet:

$$G \mapsto \hat{G}: \Psi(x) \mapsto \tilde{\Psi}(x) = \hat{G}\Psi(x)$$

In der Mathematik nennt man dies eine Abbildung.

Hierbei gelten die Übersetzungsregeln:

$$x \mapsto \hat{x} = x$$

$$p \mapsto \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$G \mapsto \hat{G} = G_{klass}(\hat{x}, \hat{p})$$

* Dritte Regel

Man erhält den Wert einer Größe G folgendermaßen:

$$W(Z; G) = \int \Psi^*(x) (\hat{G}\Psi(x)) dx = \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle = (\Psi, \hat{G}\Psi)$$

Mathematisch handelt es sich hier um das Skalarprodukt. Ein Operator ist nun immer so zu verstehen, daß dieser nach rechts wirkt.

* Vierte Regel

Dynamik: Es sei $\Psi(x)$ zur Zeit $t = t_0$ **gegeben**, dann gelte also $\Psi \mapsto \Psi(x, t)$. Dann gilt:

1.) Schrödinger-Gleichung:

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

2.) Hamilton-Operator:

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

3.2.1 Physikalisch relevante Zustände

* Stationäre Zustände:

Stationäre Zustände sind Zustände der Ruhe! **Alle** physikalischen Größen haben zeitlich konstante Werte.

$$\int \Psi^*(x, t) G(\hat{p}, \hat{x}) \Psi(x, t) dx$$

$$\Psi(x, t) = \exp(-i\omega t) \cdot \Psi(x)$$

Durch Einsetzen fällt die t -Abhängigkeit heraus:

$$i\hbar(-i\omega)\Psi(x) \exp(-i\omega t) = [\hat{H}\Psi(x)] \exp(-i\omega t)$$

Dann erhält man schließlich:

$$\boxed{\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)} \text{ mit } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Es handelt sich um ein Eigenwertproblem für die Energie. Man nennt diese auch im Fachjargon „Stationäre Schrödinger-Gleichung“. Es gibt mehrere Zustände, die stationäres Verhalten zeigen. Diese bezeichnen wir dann mit dem Index n :

$$\boxed{\hat{H}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)}$$

- > Es gibt unendlich viele $\Psi_n(x)$, E_n
- > Beliebige $\Psi(x)$ lassen sich linearkombinieren:

$$\boxed{\Psi(x) = \sum_n C_n \Psi_n(x)}$$

Was man in der Natur in Form von Spektrallinien findet, manifestiert sich in „Sprüngen“ zwischen solchen stationären Zuständen.

* Quantisierung als Eigenwertproblem (Schrödinger)

Welches sind die Zustände Z , in denen eine Größe \hat{G} einen scharfen Wert besitzt, d.h. $\Delta G = 0$ gilt?

$$(\Delta G) = \langle \hat{G}^2 \rangle - \langle \hat{G} \rangle^2 = \left\langle \left(\hat{G} - \langle \hat{G} \rangle \right)^2 \right\rangle = \langle \Psi | \left(\hat{G} - \langle \hat{G} \rangle \right) \left(\hat{G} - \langle \hat{G} \rangle \right) | \Psi \rangle$$

$$\hat{G}\Psi(x) - \underbrace{\langle \hat{G} \rangle}_{\text{Zahl } g} \Psi(x) = 0$$

Dann erhält man auch wieder ein Eigenwertproblem für den Operator \hat{G} :

$$\boxed{\hat{G}\Psi(x) = g\Psi(x)}$$

Im allgemeinen gilt es davon immer unendlich viele:

$$\boxed{\hat{G}\Psi_n(x) = g_n\Psi_n(x)}$$

Die Ψ_n , Ψ_m zu $g_n \neq g_m$ sind „orthogonal“, also gilt:

$$\int \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = 0$$

Die Menge der Eigenfunktionen $\Psi_n(x)$ ist **vollständig**, d.h.

$$\Psi(x) = \sum_m C_m \Psi_m(x)$$

Jede Funktion ist somit nach $\Psi_n(x)$ entwickelbar (Eigenwerte einfach). Wie berechnet man nun die C_n 's? Man multipliziert dazu die Gleichung mit Ψ_m :

$$\int \Psi_m^* \Psi(x) dx = \sum_n C_n \int \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{für } n \neq m \\ 1 & \text{für } n = m \end{cases}$$

$$\langle \Psi_m | \Psi \rangle = C_m$$

3.3 Freies Teilchen

Es gilt für den Hamilton-Operator und Impuls-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{x} = x$$

Für den Eigenzustand des Impulses erhalten wir:

$$\hat{p}\phi(x) = \hbar k\phi(x)$$

$\hbar k$ ist der Impuls-Eigenwert.

$$-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} = \hbar k\phi(x)$$

$$\phi'(x) = ik\phi(x)$$

Damit erhält man:

$$\phi_k(x) = A_k \exp(ikx) \quad \text{für } -\infty < k < \infty$$

Die Wellenfunktion ist leider nicht normierbar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = |A|^2 \cdot \infty = 1$$

Den Ausweg findet man durch Einführung eines Normierungsvolumens V :

$$A = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

Man führt die Normierung auf δ -Funktionen durch:

$$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \int \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx = \delta(k - k') \quad (\text{„}\delta_{kk}\text{“})$$

Dies ist erfüllt durch:

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$$

Man kann dieses Funktionssystem verwenden, um Wellenpakete aufzubauen:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \phi_k(x) dx$$

$$\int |\Psi|^2 dx = 1$$

Wie sehen die Eigenzustände (stationäre Zustände) zu \hat{H} aus? Die Eigenzustände von \hat{p} sind auch Eigenzustände von \hat{H} mit der Energie E_k :

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

Wir lösen das Problem direkt für den Hamilton-Operator \hat{H} :

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

Dann erhalten wir einen alten Bekannten, nämlich die Gleichung für den Harmonischen Oszillator:

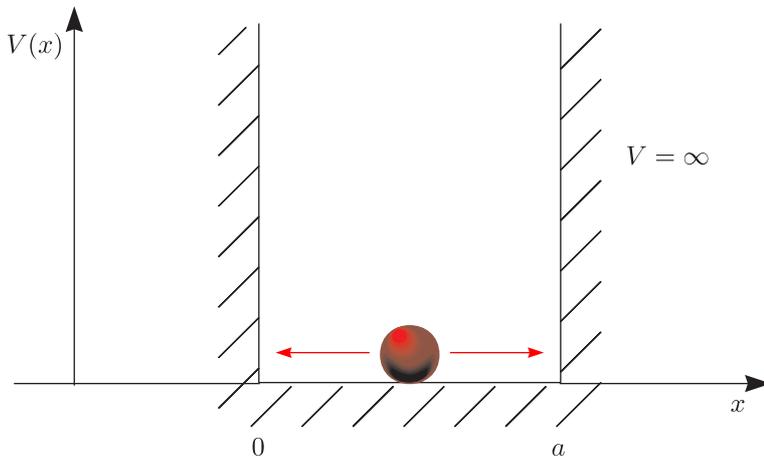
$$\phi''(x) + k^2 \phi(x) = 0$$

$$\phi(x) = \begin{cases} B \sin(kx) & \text{mit } k > 0 \\ C \cos(kx) & \text{mit } k > 0 \text{ wie gehabt!} \\ A \exp(ikx) & \end{cases}$$

Man erhält die Zeitabhängigkeit dann durch:

$$\phi(x, t) = \begin{cases} B \sin(kx) \cdot \exp\left(-i \frac{E_k}{\hbar} t\right) \\ C \cos(kx) \cdot \exp\left(-i \frac{E_k}{\hbar} t\right) \\ A \exp\left(ikx - \frac{E_k t}{\hbar}\right) \end{cases} \quad \text{mit } \omega = \frac{E_k}{\hbar}, \hbar\omega = E_k$$

3.4 Teilchen im „Kasten“



Es gilt für den Hamilton-Operator innerhalb des Kastens:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{für } 0 \leq x \leq a$$

Für die Wellenfunktion gelte am Rand:

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{für } x = 0, a$$

Ein hermitescher Operator ist ein solcher, den man sowohl auf rechts als auch auf links anwenden kann:

$$\int \Psi_1^*(x) [\hat{G}\Psi_2(x)] dx = \int [\hat{G}\Psi_1(x)]^* \Psi_2(x) dx \quad \forall \Psi_n(x)$$

Wenn $\Psi_1 = \Psi_2$ reell sind, so sind auch die Eigenwerte reell. Durch partielle Integration folgt:

$$\int \Psi_1^*(x) \left[-i \frac{\partial \Psi_2(x)}{\partial x}\right] dx = [\Psi_1^*(-i\Psi_2(x))]_0^a - \int (-i\Psi_2(x)) \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx$$

Wenn die Wellenfunktion am Rande gleich Null ist, so fällt der Oberflächenterm heraus, womit folgt:

$$[\Psi_1^*(-i\Psi_2(x))]_0^a - \int (-i\Psi_2(x)) \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx = \int \underbrace{\left[-i \frac{\partial \Psi_1}{\partial x}\right]^*}_{\hat{p}\Psi_1} \Psi_2(x) dx$$

Aufgrund der Randbedingungen kann es sich bei der Wellenfunktion nur um eine Sinusfunktion handeln:

$$\Psi_n(x) = B \sin(kx)$$

* Linker Rand: $x = 0$

$$\Psi_n(x) = 0$$

* Rechter Rand: $x = a$:

$$\Psi_n(a) = B \sin(ka) = 0$$

Damit gilt also:

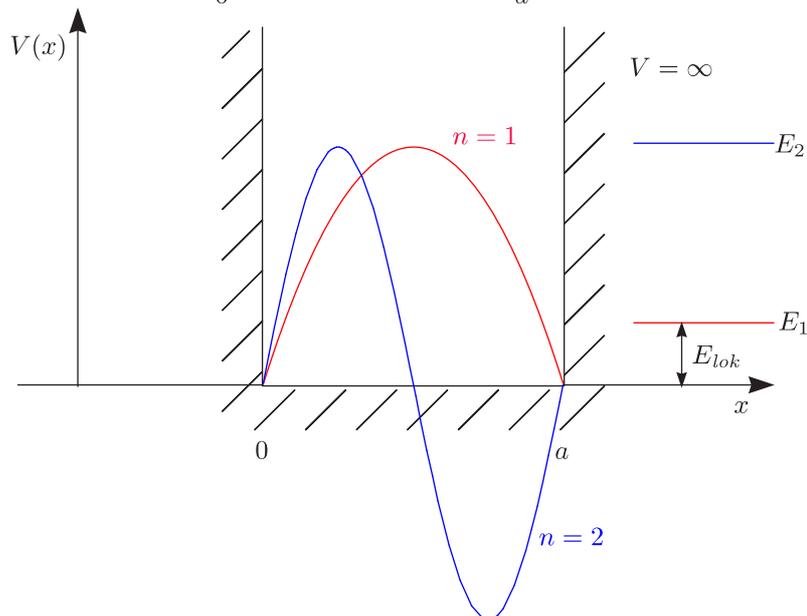
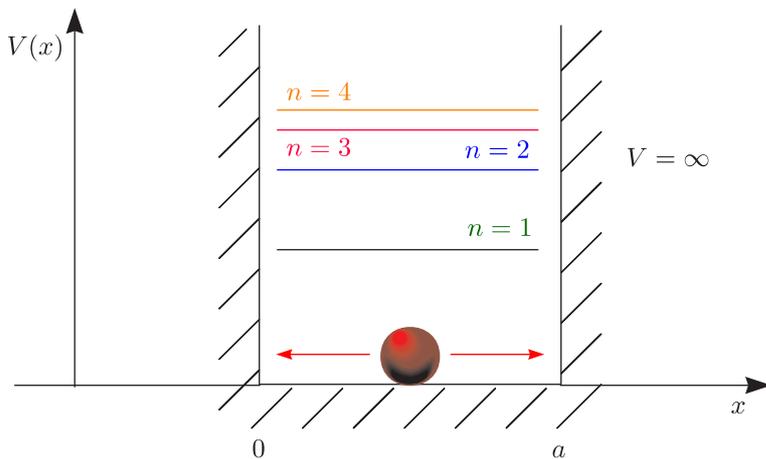
$$ka = \pi, 2\pi, \dots$$

Die Wellenfunktion identisch gleich Null muß hier ausgeschlossen werden, da sie keinem normierbaren Zustand entspricht.

Somit erhält man nach einer Normierung für $n = 1, 2, \dots$:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$



Die Lokalisierungsenergie (Nullpunkt: E_n)

$$E_{lok} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} > \text{Energie in Coulombpotential}$$

Für zwei geladene Teilchen haben wir folgendes Coulombpotential:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Dies gewährleistet die Stabilität der Materie.

Die Wellenfunktionen zu verschiedenen Energien sind orthogonal:

$$\int \Psi_m^*(x)\Psi_n(x) dx = 0 \text{ für } m \neq n$$

Beweis-Idee:

Es gilt:

$$\sin(m\xi) \cdot \sin(n\xi) = \frac{1}{2} [\cos(m-n)\xi - \cos(m+n)\xi] \text{ mit } \xi = \frac{\pi x}{a}$$

Durch Integration folgt dann obigen Orthogonalität.

Erwartungswerte:

Mittels BRONSTEIN oder durch direkte Rechnung folgt dann:

$$\langle x \rangle = \int \Psi_n^*(x)x\Psi_n(x) dx = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int \Psi_n^*(x)x^2\Psi_n(x) dx = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2} \cdot \left(\frac{1}{n\pi} \right)^2 \right)$$

Dann folgt für die Streuung:

$$(\Delta x)^2 = \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2(\pi n)^2} \right] a^2$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_n(x) dx = 0$$

Dies ist natürlich so, weil der Impuls als physikalische Größe reell sein muß!

$$\langle p^2 \rangle = \int \Psi_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi_n(x) dx = \hbar^2 \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2$$

Außerdem zeigen wir, daß für dieses Beispiel die Unschärferelation gilt:

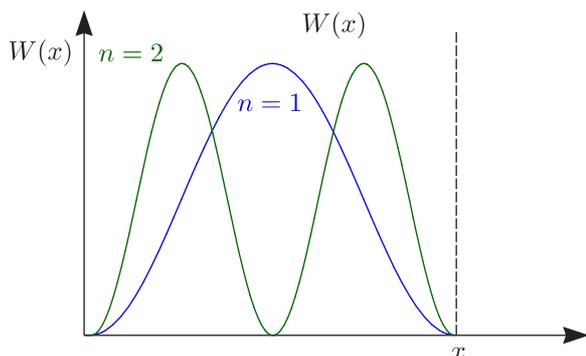
$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\sqrt{\frac{\pi^2}{3} - \frac{2}{n^2}}}_{>1} > \frac{\hbar}{2}$$

3.4.1 Orts-Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x) \cdot x\Psi(x) dx = \int W_X(x) \cdot x dx$$

Damit haben wir also:

$$W(x) = |\Psi(x)|^2$$



Dies ist die „Aufenthaltswahrscheinlichkeit“ des Teilchens.

3.4.2 Impuls-Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\langle p \rangle = \int W(p) \cdot p \, dp = \int \Psi^*(x) \hat{G} \Psi(x) \, dx$$

Wie kann man jetzt $W(p)$ berechnen? Allgemein gilt für kontinuierliche g :

$$\langle G \rangle = \int W(g) \cdot g \, dg$$

Für diskrete g gilt:

$$\langle G \rangle = \sum_n W(g_n) \cdot g_n$$

Wir entwickeln $\Psi(x) = \sum_n C_n \varphi_n(x)$:

$$\hat{G} \varphi_n(x) = g_n \varphi_n(x), \quad \int \varphi_m^* \varphi_n \, dx = \delta_{mn}$$

$$\langle \hat{G} \rangle = \sum_n |C_n|^2 \cdot g_n$$

Man erhält somit die Wahrscheinlichkeitsdichte, einen bestimmten Eigenwert C_n zu finden:

$$W(g_n) = |C_n|^2 = \left| \int \varphi_m^*(x) \Psi(x) \, dx \right|^2$$

Somit gilt für die Eigenfunktionen des Impulses:

$$\hat{p} \varphi_k(x) = \hbar k \varphi_k(x)$$

Wir normieren die Impulswellenfunktionen auf δ -Funktionen:

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$$

k ist hierbei die Impulsquantenzahl, für die $-\infty < k < \infty$ gilt (Impuls: $\hbar k$).

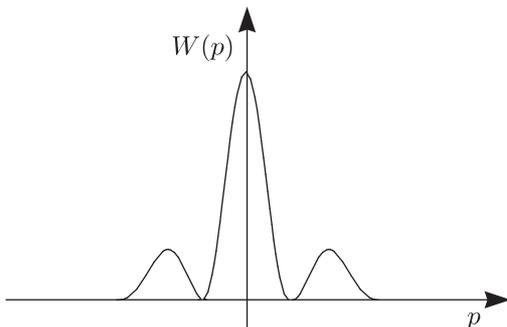
$$\int \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) \, dx = \delta(k - k')$$

δ -Funktionen sind nichts weiteres als die Verallgemeinerung des Kronecker-Deltas. Wir entwickeln unsere Wellenfunktion nach ebenen Wellen:

$$C_n \mapsto C(k) = \int \varphi_k^*(x) \Psi(x) \, dx$$

Dies ist also die Fouriertransformierte der Wellenfunktion. Für die Impulswahrscheinlichkeit erhält man:

$$W(p) = |C(k)|^2 \text{ mit } p = \hbar k$$



3.4.3 Überlagerung zweier stationärer Zustände

$$\Psi(x) = N (\Psi_1(x) + \Psi_2(x))$$

Diese Wellenfunktion ist keine Lösung der stationären Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Es gilt nämlich $E_1 \neq E_2!$

$$\Psi(x, t) = N \left(\Psi_1(x) \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) + \Psi_2(x) \exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right) \right)$$

Per Konstruktion ist dies eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Man muß die Funktion noch normieren:

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

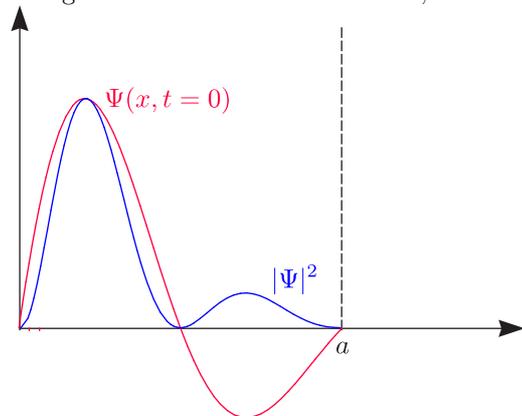
Daraus folgt $N = \frac{1}{\sqrt{2}}$, da $\Psi_{1,2}$ normiert und orthogonal sind. $W(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ ändert sich zeitlich.

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left[|\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 + \Psi_1(x)\Psi_2(x) \left[\exp\left(i\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) + \exp\left(-i\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) \right] \right] = \dots \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right)$$

Die Frequenz des oszillierenden „Wellenpakets“ ist:

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

Wir groß ist die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Wert der Energie bei einer Messung zu finden?



$$W(E_n) = |C_n|^2$$

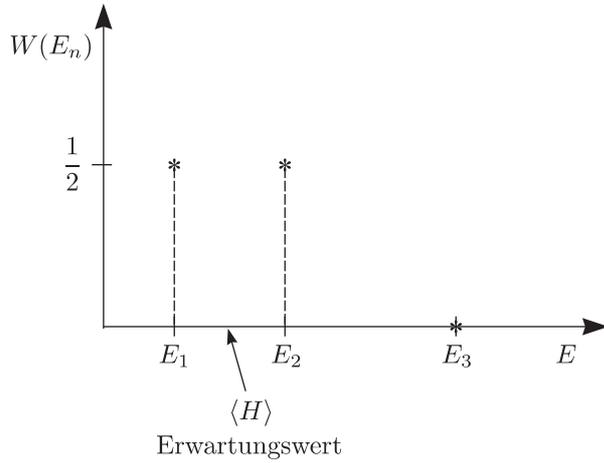
$$\Psi(x) = \sum_n C_n \varphi_n(x)$$

Man muß eine Wellenfunktion nach den Eigenfunktionen entwickeln, nach deren Wahrscheinlichkeit man fragt. Unsere Wellenfunktion ist schon in Eigenfunktionen zerlegt. Deshalb lesen wir direkt ab:

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{E_1 t}{\hbar}\right)$$

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{E_2 t}{\hbar}\right)$$

$$C_3 = C_4 = \dots = 0$$



Die Verteilung ist zeitlich konstant, obwohl $\Psi(x, t)$ gilt. Aus dem Energieerhaltungssatz folgt, daß $\langle \hat{H} \rangle$, ΔH , ... zeitlich konstant sind. Allgemein gilt für \hat{G} :

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(x, t) | \hat{G}(\hat{p}, \hat{x}, t) | \Psi(x, t) \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \hat{G}(\hat{p}, \hat{x}, t) \Psi(x, t) dx = \int \left(\left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right]^* \hat{G} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} \Psi + \Psi^* \hat{G} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx$$

Aufgrund der hermiteschen Eigenschaften haben wir:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi(x, t) | \hat{G}(\hat{p}, \hat{x}, t) | \Psi(x, t) \rangle &= \int \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{H} \Psi]^* (\hat{G} \Psi) + \Psi^* \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} \Psi + \Psi^* \hat{G} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \right) \right) dx = \\ &= \int \Psi^*(x, t) \left[\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H} \cdot \hat{G} - \hat{G} \cdot \hat{H}] \right] \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

Wir nennen $\hat{H} \hat{G} - \hat{G} \hat{H}$ den Kommutator $[\hat{H}, \hat{G}]$. Analog zur klassischen Physik gilt dann mittels der Poisson-Klammern:

$$\frac{d\hat{G}}{dt} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{G}] = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \{H, G\}$$

Wir haben folgende kanonische Variable:

$$\{p, x\} = 1 \mapsto [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

Dann gilt nach der Produktregel:

$$[\hat{p}, x]f(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [xf(x)] - x(-i\hbar) \frac{\partial f(x)}{\partial x} = -i\hbar f(x)$$

Der Hamilton-Operator \hat{H} hängt nicht (explizit) von der Zeit t ab.

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

Das heißt, daß \hat{H} erhalten ist.

3.4.4 Ortseigenzustände

ξ sei der Eigenwert zum Ortsoperator \hat{x} .

$$\hat{x} \Psi_\xi(x) = \xi \Psi_\xi(x)$$

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

Diese Funktionen Ψ sind auch auf δ -Funktionen normierbar.

$$\int \Psi_\xi^*(x) \Psi_{\xi'}(x) dx = \delta(\xi - \xi')$$

3.5 Linearer harmonischer Oszillator

Wir betrachten stationäre Zustände:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Für den Hamilton-Operator gilt mit $V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$:

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

Für die Energie-Eigenwerte ergibt sich dann:

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

Für die Wellenfunktionen erhalten wir:

$$\Psi_n(x) = N \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi)$$

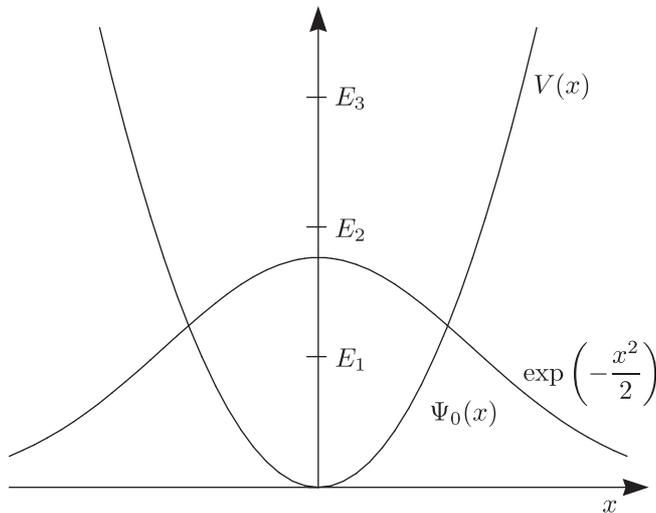
$$\xi = \frac{x}{\lambda}, \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

λ ist die charakteristische Länge des Oszillators. $H_n(\xi)$ sind die sogenannten Hermite-Polynome, die definiert sind durch:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(+\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2)$$

Hier folgen einige Beispiele:

$$H_n(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$



Wir betrachten folgendes Eigenwertproblem:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x) = \frac{1}{2} \cdot 2E\Psi(x)}$$

Für die Randwerte muß $\Psi(\pm\infty) = 0$ gelten, also somit:

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

Wir gehen nun der Übersichtlichkeit halber zu dimensionslosen Größen über:

$$E = \hbar\omega \cdot \varepsilon \Leftrightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} =: \varepsilon$$

$x = \xi \cdot \lambda$ mit λ als geeignete Länge

$$\Psi(x) = f(\xi)$$

Also erhalten wir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2} f''(\xi) + \frac{m\omega^2}{2} \lambda^2 \xi^2 f(\xi) = \frac{1}{2} \hbar \omega \varepsilon$$

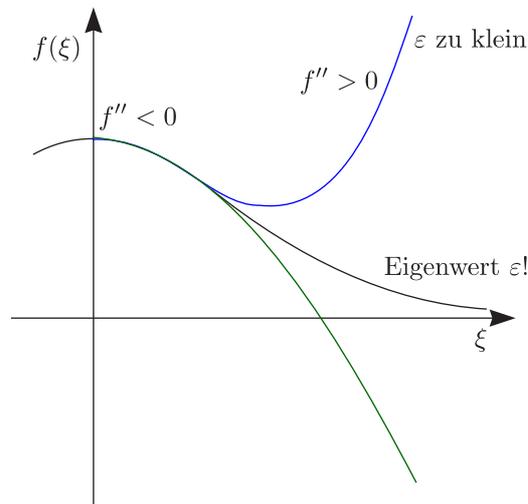
$$-\underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{1}{\hbar \omega} \cdot \frac{1}{\lambda^2} \right)}_{=1} f''(\xi) + \underbrace{\frac{m\omega^2 \lambda^2}{\hbar \omega}}_{=1} \xi^2 f(\xi) = \varepsilon f(\xi)$$

Damit folgt die dimensionslose Gleichung:

$$f''(\xi) = (\xi^2 - \varepsilon) f(\xi) \quad \text{mit } f(\pm\infty) = 0$$

Welche ε sind zulässig? Wir vermuten, daß $\varepsilon > 0$ ist. Die Eigenwerte sind immer größer als der kleinste Wert des Potentials.

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle > 0$$



Jetzt weiß man, wie die Lösung graphisch auszusehen hat. Wir versuchen nun die Asymptotik für $\xi \mapsto \pm\infty$ herauszufinden:

$$f''(\xi) \simeq \xi^2 f(\xi) \quad \text{für } \xi \gg \varepsilon$$

Näherungsweise gilt also:

$$f(\xi) = \exp\left(\pm \frac{1}{2} \xi^2\right)$$

Wir berechnen wir Ableitungen:

$$f'(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right) \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot 2\xi\right)$$

$$f''(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right) \cdot (-\xi)^2 + \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right) \cdot (-1) \mapsto \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right) \cdot \xi^2 + \dots$$

Asymptotisch stimmt dies also. Wir machen deshalb den Ansatz:

$$f(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2\right) \cdot H(\xi)$$

Die Differentialgleichung für $H(\xi)$ lautet also, wie man durch Einsetzen von $f(\xi)$ verifiziert:

$$H''(\xi) - 2\xi H(\xi) + (\varepsilon - 1) H(\xi) = 0$$

Durch Zufall haben wir sogar eine Lösung gefunden. $\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)$ ist Lösung des Eigenwertproblems zu $\varepsilon = 1$. Die erhaltene Differentialgleichung sieht nun aber komplizierter aus als die ursprüngliche! Zur Lösung machen wir einen Potenzreihenansatz:

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots$$

Durch Einsetzen und Koeffizientenvergleich erhält man folgende Rekursionsformel:

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

Durch den Potenzreihenansatz zerfällt die Lösung in zwei unabhängige Teilreihen.

* Gerade Funktionen:

$$a_0 \mapsto a_2 \mapsto a_4 \mapsto \dots$$

* Ungerade Funktionen:

$$a_1 \mapsto a_3 \mapsto a_5 \mapsto \dots$$

Dies ist sinnvoll, weil das Fundamentalsystem aus zwei linear unabhängigen Lösungen bestehen muß. Es handelt sich um eine zweigliedrige Rekursionsformel. Für $k \mapsto \infty$ gilt:

$$\frac{a_{2k+2}}{a_k} \mapsto \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k}$$

Die geraden Lösungen schreiben wir in folgender Form:

$$b_0 + b_1 \xi^2 + b_2 \xi^4 + \dots$$

$$a_k \mapsto b_l \text{ für } l = 2k \text{ und } l = 0, 1, 2, \dots$$

Damit gilt:

$$\frac{b_{l+1}}{b_l} = \frac{3}{2l} = \frac{1}{l}$$

$$f(\xi) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l (\xi^2)^l$$

Welche Reihe verhält sich so? Es handelt sich um die Reihenentwicklung für die Exponentialfunktion:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} x^l = \exp(x)$$

Es gilt nämlich:

$$\frac{l!}{(l+1)!} = \frac{1}{l+1} \sim \frac{1}{l} \text{ für } l \gg 1, \text{ d.h. } H(\xi) \simeq \exp(+\xi^2)$$

Wir nehmen nun an, ε sei eine ungerade Zahl, also gelte $\varepsilon = 2n + 1$ mit $n = 0, 1, 2, \dots$. Genau dann bricht nämlich unsere Rekursion ab! Wir erhalten somit die Hermite-Polynome. Was jetzt noch zu zeigen wäre, ist die Orthogonalität der Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerte, das heißt $m \neq n$. Wir schreiben hierzu die Differentialgleichung für die Wellenfunktion hin für die Eigenwerte n und m :

$$f_m''(\xi) = (\xi^2 - \varepsilon_m) f_m(\xi)$$

$$f_n''(\xi) = (\xi^2 - \varepsilon_n) f_n(\xi)$$

Durch Subtrahieren beider Gleichungen folgt:

$$f_n f_m'' - f_m f_n'' = (\varepsilon_n - \varepsilon_m) f_n f_m$$

Dies können wir umschreiben zu:

$$\frac{d}{d\xi} (f_n f_m' - f_n' f_m) = (\varepsilon_n - \varepsilon_m) f_n f_m$$

Durch Integration folgt nun:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{d\xi} [f_n f_m' - f_n' f_m] d\xi = [f_n f_m' - f_n' f_m]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \stackrel{!}{=} (\varepsilon_n - \varepsilon_m) \int f_n f_m d\xi \text{ für } m \neq n$$

Probleme:

* Problem 1:

Wir betrachten den stationären Zustand eines harmonischen Oszillators:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

Wir haben die stationäre Schrödingergleichung:

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

Daraus ergibt sich dann:

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \Psi(x)$$

$$W(x) = |\Psi(x, t)|^2 = |\Psi(x)|^2$$

Überlagerungen von stationären Zuständen sind im allgemeinen nicht stationär. Wir führen das Beispiel auf dem Übungsblatt an:

$$N \cdot H(\Psi_1 + \Psi_2) = NE_1\Psi_1 + NE_2\Psi_2 \neq E\Psi$$

* Problem 2:

Es gilt folgende Beziehung:

$$p = \hbar k$$

Wir ersetzen die Wellenfunktion durch ihre Fouriertransformierte. Wir zerlegen also in die Impulseigenfunktionen:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(p) \exp(-ikx) dk$$

Wir berechnen den Erwartungswert:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(k') \exp(ik'x) \hat{p} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(ikx) \tilde{\Psi}(x) \stackrel{!}{=} \\ &\stackrel{!}{=} \frac{1}{2\pi} \int dk \tilde{\Psi}^*(x) \hbar k \tilde{\Psi}(x) \end{aligned}$$

Wir raten den Ansatz $\hat{p} = a \frac{\partial}{\partial x}$ und vergleichen:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_{-\infty}^{+\infty} dx \tilde{\Psi}^*(k') \exp(ik'x) \cdot a \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(ikx) \tilde{\Psi}(x) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i[k' - k]x) \tilde{\Psi}^*(k') \cdot aik \cdot \tilde{\Psi}(k) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\Psi}^*(k) \cdot aik \cdot \tilde{\Psi}(k) \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich dann durch Vergleich mit oben:

$$\boxed{a = \frac{\hbar}{i} \text{ und } \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}}$$

* Problem 3:

Wir betrachten folgende Integrale:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-\alpha x^2) dx &= \int_0^{+\infty} x \exp(-\alpha x^2) dx + \int_{-\infty}^0 x \exp(-\alpha x^2) dx = \\ &= \int_0^{+\infty} x \exp(-\alpha x^2) dx + \int_0^{-\infty} y \exp(-\alpha y^2) dy = 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}^3} \end{aligned}$$

Wenn ich den Erwartungswert einer Observablen ausrechnen möchte, mache ich dies durch:

$$\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}) \hat{G} \Psi(\vec{r}) d^3r = \sum_n W_n(\Psi, G) g_n$$

Die Wahrscheinlichkeit hängt natürlich sowohl von der Observablen als auch vom Zustand ab, in dem ich mich befinde.

$$W_n(\Psi, G) = K \cdot \Psi_n | \Psi \rangle^2$$

$$\hat{G} \Phi_n = g_n \Psi_n$$

Die Ortswahrscheinlichkeit ist gegeben durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion im Ortsraum:

$$W(x) = |\Psi(x)|^2$$

Für die Impulswahrscheinlichkeit folgt:

$$W(p) = |\langle \Phi_p | \Psi \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(ikx) \Psi(x) \right|^2$$

Damit W als Wahrscheinlichkeitsdichte aufgefaßt werden kann, muß gelten:

$$\sum_n W_n = 1$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit muß also gleich Eins sein. Für die Ableitung der Gesamtwahrscheinlichkeit muß verschwinden:

$$\frac{d}{dt} \sum_n W_n = 0$$

Wenn dies nicht so ist, passiert irgendetwas von außen mit dem System. Wenn wir ein kontinuierliches Spektrum haben, so folgt:

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3r$$

Dies kann man nun umschreiben, indem man die Ableitung vor der Integration ausführt:

$$\int d^3r \left[\Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \right] \mapsto 0?$$

Dazu betrachten wir die Schrödingergleichung:

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

Für die komplex konjugierte Wellenfunktion Ψ^* gilt auch:

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

Der Hamilton-Operator \hat{H} ist hermitesch. Durch Multiplikation der ersten Gleichung mit Ψ^* und der zweiten mit Ψ und anschließender Addition erhalten wir:

$$\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \frac{1}{i\hbar} (\Psi H \Psi^* - \Psi^* H \Psi) \quad (*)$$

Durch Einsetzen haben wir dann:

$$\frac{d}{dt} W(x) = \int d^3r (\Psi H \Psi^* - \Psi^* H \Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \Psi \rangle^* = 0$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist somit zeitunabhängig.

Der lokale Erhaltungssatz (wie in der Elektrodynamik für Q) erhalten wir durch:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

Daraus folgt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \Psi - \Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi^*$$

$$\frac{d}{dt} W(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*]$$

Es gilt nun folgende Operator-Identität:

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \text{div} (\Psi^* \text{grad} \Psi - \Psi \text{grad} \Psi^*)$$

$$\frac{d}{dt} W(\vec{r}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \text{ mit } \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

Es handelt sich hier um die Kontinuitätsgleichung.

3.5.1 Einschub: Parität und Paritätsoperator

Wir betrachten den Paritätsoperator \hat{P} , der die Inversion am Ursprung benutzt.

$$\left. \begin{aligned} \hat{P}\Psi(\vec{r}) &= \Psi(-\vec{r}) \\ \hat{P}\hat{P}\Psi(\vec{r}) &= \Psi(\vec{r}) \end{aligned} \right\} \hat{P}\Psi(\vec{r}) = P\Psi(\vec{r})$$

$$P = \pm 1$$

Man unterscheidet also:

* Ungerade Parität

$$\hat{P}\Psi_n(\vec{r}) = -\Psi_n(\vec{r})$$

* Gerade Parität

$$\hat{P}\Psi_n(\vec{r}) = +\Psi_n(\vec{r})$$

Satz:

Aus $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ folgt eine Erhaltungsgröße (gemeinsame Eigenzustände). Nicht alle Eigenzustände von \hat{A} sind Eigenzustände von \hat{B} .

Beispiel: Linearer harmonischer Oszillator

Der Hamilton-Operator ergibt sich durch:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \text{ mit } \hat{T} \sim \frac{\partial^2}{\partial x^2} : V \sim x^2$$

$$\hat{P} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}$$

Daraus ergibt sich:

$$[\hat{P}, \hat{T}] = 0$$

$$\hat{P}x^2 = x^2\hat{P}$$

Also gilt:

$$[\hat{P}, \hat{V}] = 0$$

$$[\hat{P}, \hat{H}] = [\hat{P}, \hat{T}] + [\hat{P}, \hat{V}] = 0$$

3.5.2 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

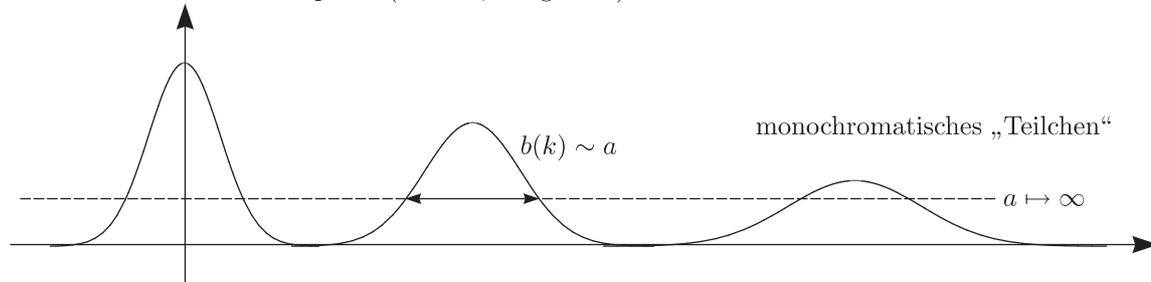
Wir betrachten als Beispiel zwei ebene Wellen:

$$\Psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

Daraus ergibt sich dann für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte mit $p = \hbar k$ und $\frac{p}{m} = v$:

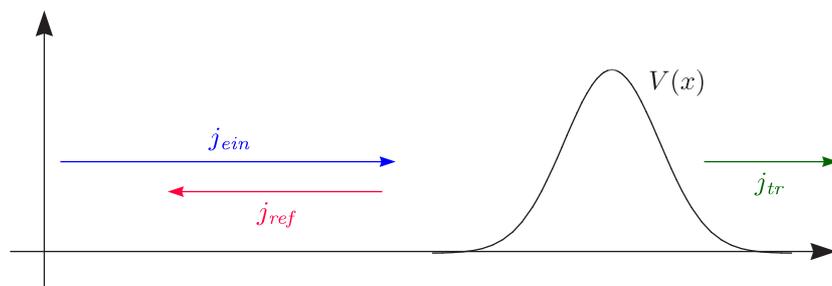
$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{2mi} (A^* \exp(-ikx) + B^* \exp(ikx)) ik (A \exp(ikx) - B \exp(-ikx)) - \\ &\quad \frac{\hbar}{2mi} (A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)) ik (-A^* \exp(-ikx) + B^* \exp(+ikx)) = \\ &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) = j_r(x) + j_c(x) = v|A|^2 - v|B|^2 \end{aligned}$$

Wir betrachten ein Wellenpaket (Blatt 2, Aufgabe 3)



Ein Teilchenstrahl lässt sich sinnvoll durch ebene Welle beschreiben.

3.6 Ein eindimensionales Streuproblem



Der Einfachheit halber betrachten wir als Potential eine δ -Funktion. Die Barriere nimmt keine Energie auf. Die Streuung ist somit elastisch. Wir können dies durch stationäre Zustände beschreiben. Die stationäre Schrödinger-Gleichung dazu lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V_0 \delta(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Wir machen zuvor einen Einschub über die Analytizität der Lösung der Schrödinger-Gleichung. Dazu schreiben wir diese um. Wir trennen die Anteile, in denen die Ableitung von Ψ und Ψ selbst vorkommt:

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

Wir betrachten hierbei folgende Fälle:

- a.) $V(x)$ muß stetig differenzierbar sein.

Daraus ergibt sich dann, daß $\Psi(x)$ und natürlich aus $\Psi'(x)$ stetig differenzierbar ist.

- b.) $V(x)$ hat einen Sprung.

$\Psi(x)$ muß hierbei differenzierbar sein. $\Psi'(x)$ muß stetig sein und einen Knick haben.

- c.) $V(x) \sim \delta(x)$

Dieser Fall führt auf die inhomogene Schrödingergleichung.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\Psi(x) dx - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V_0\Psi(x)\delta(x) dx$$

Damit erhalten wir:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} - \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi'(\varepsilon) - \Psi'(-\varepsilon)) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon E\Psi(0) - V_0\Psi(0)$$

$\Psi(x)$ muß somit stetig sein und $\Psi'(x)$ einen Sprung haben.

Wir erhalten als allgemeine Lösungen:

- a.) Fall ①: $x < 0$

$$\Psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \text{ mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- b.) Fall ②: $x > 0$

$$\Psi(x) = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx) \text{ mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\Psi(x)$ ist stetig in $x = 0$. Damit folgt also:

$$A + B = C + D$$

$\Psi'(x)$ hat an der Stelle 0 einen Sprung, womit gilt:

$$ik(C - D) - ik(A - B) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0(A + B)$$

Wir betrachten den Grenzfall $D = 0$ mit den freien Parametern k , V_0 , A . Dann ergibt sich

$$r = \frac{B}{A} = \frac{V_0}{i\hbar^2 \frac{k}{m} - V_0}; \quad \frac{C}{A} = \frac{i\hbar^2 \frac{k}{m}}{i\hbar^2 \frac{k}{m} - V_0}$$

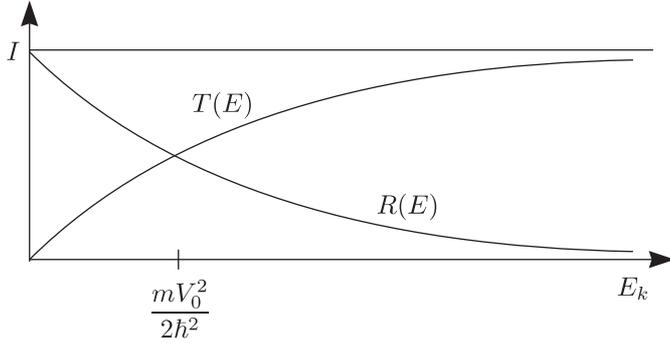
Wir erhalten folgenden Transmissionskoeffizienten:

$$T = \frac{j_{tr}}{j_{ref}} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{E_k}{E_k + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}}$$

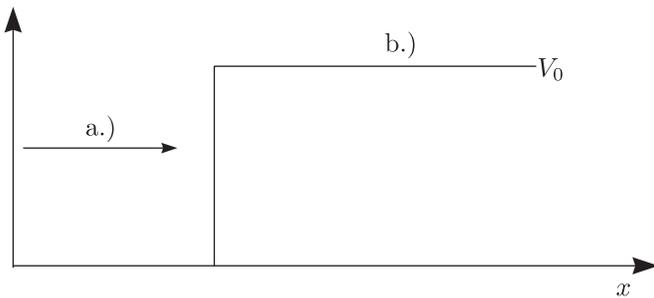
Außerdem gilt für den Reflexionskoeffizienten:

$$R = |r|^2 = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{m \frac{V_0^2}{2\hbar^2}}{E_k + \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}}$$

Infolge der Teilchenerhaltung resultiert die Beziehung $T = 1 - R$.



Einschub: Endliche Potentialbarriere



Die Schrödinger-Gleichung lautet:

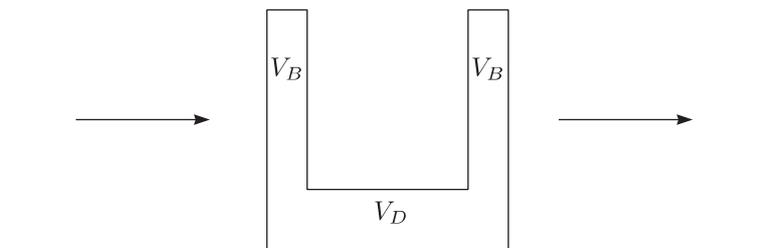
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = \overbrace{(E - V_0)}^F \Psi(x)$$

a.) Aus $V_0 = 0$ ergibt sich $F > 0$.

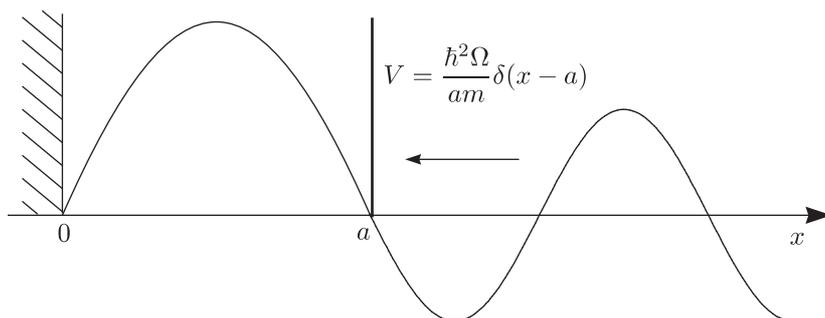
b.) Mit $V_0 > E$ haben wir $F < 0$.

Die Lösung muß von der Form $\exp(\pm kx)$ sein.

Quantendots:



3.7 Virtuelle Energieniveaus bzw. quasi-gebundene Zustände



Für $x > a$ folgt daraus eine Wellenfunktion, die man beschreiben kann durch:

$$\Psi(x) = \sin(kx + \delta) = -\frac{i}{2} \exp(i\delta) \cdot \exp(ikx) + \frac{i}{2} \exp(-i\delta) \cdot \exp(-ikx)$$

Für $0 < x < a$ folgt:

$$\Psi(x) = A \sin(kx) \text{ mit } E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Wir fordern die Stetigkeit von $\Psi(x)$:

$$A \sin(ka) = \sin(ka + \delta)$$

Die Ableitung besitzt einen Sprung:

$$\Psi'(a) = -\frac{1}{2}k [\cos(ka + \delta) + A \cos(ka)] + \frac{\Omega}{a} A \sin(ka) = 0$$

Nach langer Rechnung folgt:

$$A = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\frac{\Omega}{ak} \sin(2ka) + 4\frac{\Omega^2}{a^2 k^2} \sin^2(ka)}}$$

$$\tan \delta = -\frac{\Omega}{ak} \cdot \frac{1 - \cos^2(ka)}{1 + \frac{\Omega}{ak} \sin(2ka)}$$

Für nahezu undurchdringliche Wälle ist $\frac{\Omega}{ak} \gg 1$. Ist ka nicht in der Nähe von $n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), so ergibt sich $A \simeq 0$.

3.8 Drehimpulseigenzustände

Wir betrachten den Drehimpuls-Operator $\vec{J} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ mit $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$ (und zyklisch). Da $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ ist, existiert ein gemeinsames System von Eigenfunktionen $|\lambda, m\rangle$ mit:

$$\hat{J}^2|\lambda, m\rangle = \hbar^2\lambda|\lambda, m\rangle, \hat{J}_z|\lambda, m\rangle = \hbar m|\lambda, m\rangle \text{ mit } \lambda = j(j+1); j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \text{ und } m = -j, -j+1, \dots, j$$

Beweis in fünf Schritten:

1.) Leiteroperator:

$$\hat{J}_\pm := \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \text{ mit } [\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0, [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$$

$$(\hat{J}_\pm)^\dagger = \hat{J}_\mp$$

2.) Es gilt $\lambda \geq m^2$!

Die Voraussetzung dazu ist:

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

Daraus ergibt sich dann:

$$\langle \lambda, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | \lambda, m \rangle = \frac{1}{2} \langle \lambda, m | \hat{J}_+ \hat{J}_z | \lambda, m \rangle + \frac{1}{2} \langle \lambda, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | \lambda, m \rangle$$

Das heißt also:

$$\lambda - m^2 \geq \langle \mu | \mu \rangle + \langle \nu | \nu \rangle \geq 0$$

3.) $\hat{J}_\pm |\lambda m\rangle$ ist Eigenzustand zu \hat{J}_z (mit dem Eigenwert $m = \pm 1$) un zu \hat{J}^2 mit dem Eigenwert λ .

$$\hat{J}_\pm (\hat{J}_z |\lambda, m\rangle) = \hbar m (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

$$\hat{J}_z (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) \mp \hbar (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) = \hbar m (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

Es folgt somit:

$$\hat{J}_z (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) = \hbar(m \pm 1) (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

Da $[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$ gilt, können wir \hat{J}^2 und \hat{J}_\pm vertauschen:

$$\hat{J}_\pm (\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle) = \hat{J}^2 (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) = \hbar\lambda (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

- 4.) Nach Punkt 2 ist $m^2 \leq \lambda$; es muß also (zu festem λ , das wir aber noch nicht kennen) einen größten m -Wert geben, für den die „ m -Leiter“ nach oben abbricht. Für $m_{max} := j$ ist $\hat{J}_+ |\lambda, j\rangle = 0$, womit sich ergibt:

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ |\lambda, j\rangle = \underbrace{(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z)}_{\lambda - j^2 - j = 0} |\lambda, j\rangle = 0$$

Analog existiert ein kleinster m -Wert j' ; die Leiter bricht nach unten ab für $\hat{J}_- |\lambda, j'\rangle = 0$, womit $\lambda - j'^2 - j' = 0$ folgt. Beide Forderungen sind nur möglich, wenn $\lambda = j(j+1) = j'(j'-1)$ ist, das heißt $j' = -j$. ($j' = j+1$ scheidet aus, da $m_{min} > m_{max}$ wäre.)

- 5.) Welche j -Werte sind möglich?

Ausgehend vom kleinsten m -Wert ($= -j$) erreichen wir durch N -fache Anwendung von \hat{J}_+ den größtem m -Wert ($= j$).

$$\hat{J}_+ |\lambda, -j\rangle = \text{const.} |\lambda, -j+1\rangle \quad \dots \quad \hat{J}_+^N |\lambda, -j\rangle = \text{const.} |\lambda, -j+N\rangle$$

Es muß also $-j+N = j$ gelten; es ist nun $N = 2j$, woraus sich die Werte $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ ergeben.

Unterscheide nun folgende Fälle:

- a.) $j = 0, 1, 2, \dots$ ($m = -j, -j+1, \dots, j$)

Hierbei handelt es sich um $2j+1$ Werte. Darunter fällt auch der Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ eines Teilchens, aber auch die Eigendrehimpulse (=Spin) von Bosonen (und deren Gesamtdrehimpulse $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$).

- b.) $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ ($j_z = -j, -j+1, \dots, j$)

Auch hier liegen $2j+1$ Werte vor. Es gibt jedoch dazu kein klassisches Analogon. Hierunter fallen die Eigendrehimpulse \vec{S} von Fermionen (und deren Gesamtdrehimpulse $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$).

Zusammenfassung: (Änderung der Notation bezüglich λ und m)

$$\hat{J}^2 |j, j_z\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, j_z\rangle \text{ mit } j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$$\hat{J}_z |j, j_z\rangle = \hbar j_z |j, j_z\rangle \text{ mit } j_z = -j, -j+1, \dots, j$$

Für festes j läßt sich $|j, j_z\rangle$ als $(2j+1) \times (2j+1)$ -Matrix darstellen, beispielsweise für $l = j = 1$ als 3×3 -Matrix:

$$\mathcal{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

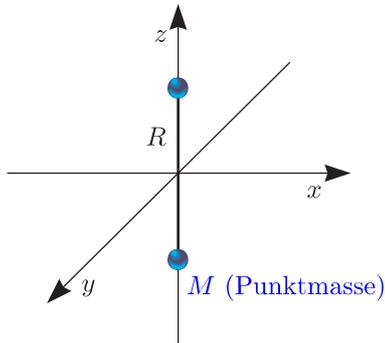
Allgemein gilt:

$$\hat{J}_\pm |j, j_z\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j_z(j_z \pm 1)} |j, j_z \pm 1\rangle$$

Beispiele:

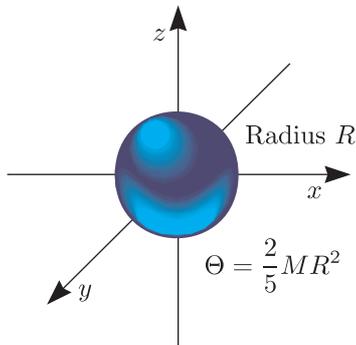
* Starre Hantel oder Keil

$$\hat{H} = \frac{1}{2\Theta} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$$



* Isotroper Rotator

$$\hat{H} = \frac{1}{2\Theta} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)$$



Für den Drehimpulsoperator gilt:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, y\hat{p}_x - x\hat{p}_y)$$

Der Operator ist hermitesch:

$$\hat{L}^+ = (\hat{L})^*$$

Für die Kommutatoren gilt:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{L}_z$$

Man nennt folgende Größen vertauschbare Integrale der Bewegung:

$$[\hat{L}^2, L_z] = 0$$

Es handelt sich um simultane Eigenzustände. Wir haben folgende Eigenwertprobleme:

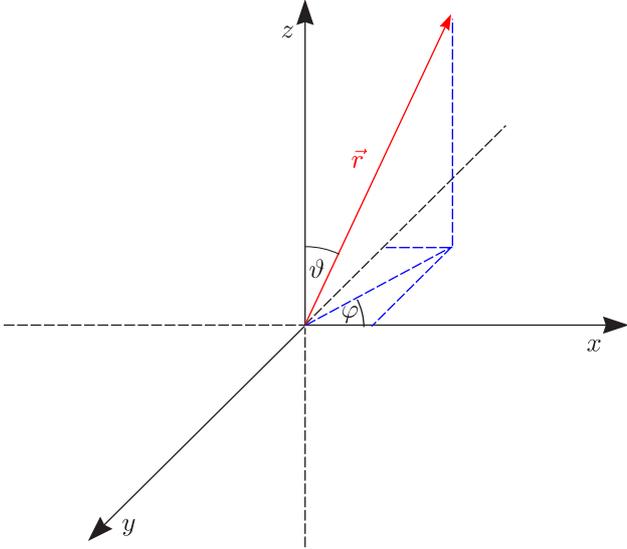
$$\hat{L}^2\Psi(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)\Psi(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z\Psi(\vartheta, \varphi) = \hbar \cdot m\Psi(\vartheta, \varphi)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ und $m = -l, (-l+1), \dots, 0, 1, \dots, l$

Bei m handelt es sich um $2l+1$ Werte. Die Eigenfunktionen des Problems sind die sogenannten Kugelflächenfunktionen $\Psi_{l,m}(\vartheta, \varphi) = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$. Aus Symmetriegründen betrachten wir das ganze in Kugelkoordinaten ($x, y, z \mapsto r, \vartheta, \varphi$):

$$\vec{r} = r\vec{e}_r \text{ mit } \vec{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}$$



Für den Gradienten in Kugelkoordinaten gilt:

$$\vec{\nabla}\Psi = \frac{1}{r}\vec{e}_\vartheta \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r\sin\vartheta}\vec{e}_\varphi \frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} + \vec{e}_r \frac{\partial\Psi}{\partial r}$$

$$\vec{e}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos\vartheta \cos\varphi \\ \cos\vartheta \sin\varphi \\ -\sin\vartheta \end{pmatrix} \text{ und } \vec{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

Weiterhin gilt $\vec{e}_r \times \vec{e}_\vartheta = \vec{e}_\varphi$. Dies führt dann aus $\hat{L}_{x,y,z}$:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cos\varphi \cos\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sin\varphi \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

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

Des weiteren gilt:

$$\begin{aligned} L_x^2\Psi &= L_x(L_x\Psi) = \\ &= -\hbar^2 \left[\sin^2\varphi \frac{\partial^2\Psi}{\partial\vartheta^2} + \cos^2\varphi \cos\vartheta \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} + \left(2\sin\varphi \cos\varphi \cos\vartheta - \cos^2\varphi \frac{\cos\vartheta}{\sin^3\vartheta} \right) \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta\partial\varphi} - \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\sin\varphi \cos\varphi}{\sin^2\vartheta} + \sin\varphi \cos\varphi \cot\vartheta \right) \frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} \right] \end{aligned}$$

$$L_\pm = L_x \pm iL_y = \exp(-i\varphi) \left[\pm \frac{\partial}{\partial\vartheta} + i \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right]$$

Es sei folgender Hinweis gegeben:

$$L_x^2 + L_y^2 = \frac{1}{2} (L_+L_- + L_-L_+)$$

$$(L_x^2 + L_y^2)\hbar = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \cot^2\vartheta \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \Psi$$

$$(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \Psi$$

Für die Eigenzustände zu \hat{L}_z gilt:

$$\hat{L}_z\Psi_z(\varphi) = \hbar m\Psi_z(\varphi)$$

Daraus erhalten wir dann das Resultat:

$$\frac{\hbar}{i}\Psi'(\varphi) = \hbar m\Psi(\varphi)$$

Wir verwenden folgenden Ansatz:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \text{ mit } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Daraus erhalten wir:

$$\boxed{\hbar m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots}$$

Der Drehimpuls in z -Richtung L_z ist als quantisiert (L_z -Drehimpulsquantisierung). Wir berechnen außerdem die Eigenzustände zu \hat{L}^2 . Da $[L^2, L_x] = 0$ gilt, existiert ein gemeinsames System von Eigenfunktionen. Wir wollen dies beweisen:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{A}\Psi = a\Psi \\ \hat{B}\Psi = b\Psi \end{array} \right\} [\hat{A}, \hat{B}]\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{A}\Psi b - \hat{B}\Psi a$$

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ist die notwendige Bedingung für die Evidenz eines Systems gemeinsamer Eigenfunktionen. Wir notieren uns die Eigenwertgleichung:

$$\hat{L}^2\Psi(\vartheta, \varphi) = \hbar^2\lambda\Psi(\vartheta, \varphi)$$

λ sei Eigenwert von $\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}$: Wir machen einen Separationsansatz:

$$\Psi(\vartheta, \varphi) = \hat{F}(\vartheta) \exp(im\varphi)$$

Für die Schrödinger-Gleichung des isotropen Rotators gilt:

$$\left. \begin{array}{l} H\Psi = E\Psi \\ \frac{1}{2\Theta} \hat{L}^2\Psi = E\Psi \end{array} \right\} \hbar^2\lambda = 2\Theta E$$

$$\hat{L}^2\Psi(\vartheta, \varphi) = \hat{L}^2\hat{F}(\vartheta) \exp(im\varphi) = -\hbar^2 \exp(im\varphi) \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) \hat{F}(\vartheta) - \hbar^2 \hat{F}(\vartheta) \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \exp(im\varphi)$$

Daraus ergibt sich dann:

$$\hbar^2\lambda\hat{F}(\vartheta) \exp(im\varphi) = -\hbar^2 \exp(im\varphi) \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) \hat{F}(\vartheta) - \hbar^2 \hat{F}(\vartheta) \frac{1}{\sin^2\vartheta} (-m^2) \exp(im\varphi)$$

Damit erhalten wir folgende Differentialgleichung für $\hat{F}(\vartheta)$:

$$-\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) \hat{F}(\vartheta) + \frac{m^2}{\sin^2\vartheta} \hat{F}(\vartheta) = \lambda\hat{F}(\vartheta)$$

Wir machen die Substitution $\xi = \cos\vartheta$ mit $-1 \leq \xi \leq 1$. Damit geht $\hat{F}(\vartheta)$ über in $F(\xi)$.

$$\sin^2\vartheta = 1 - \xi^2, \sin\vartheta = \sqrt{1 - \xi^2}, \frac{\partial}{\partial\vartheta} = -\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\xi}$$

Der Kosinus ist außerdem sinnvoll, da es sich um eine monotone Funktion für $0 \leq \vartheta \leq \pi$ handelt. Wir erhalten eine Differentialgleichung für $F(\xi)$:

$$\boxed{(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{\partial F(\xi)}{\partial \xi} \right] + [\lambda(1 - \xi^2) - m^2] F(\xi) = 0}$$

Für den Spezialfall $m = 0$ erhalten wir die Legendresche Differentialgleichung:

$$\boxed{\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right] + \lambda F(\xi) = 0}$$

Bei $\xi = \pm 1$ darf $F(\xi)$ nicht singular sein. Wir machen den Reihenansatz, wobei wir dann erhalten, daß die Lösung nur für $\lambda = n(n+1)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ existiert.

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots$$

Durch Einsetzen in die Differentialgleichung ergibt sich:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \sum_{k=1}^{\infty} a_k \xi^{k-1} \right] + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

Dann erhält man weiter:

$$\sum_{k=2}^{\infty} a_k (k-1)k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} [a_k k(k+1) \xi^k + \lambda a_k \xi^k] = 0$$

Wir machen also einen Koeffizientenvergleich:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [a_{k+2}(k+1)(k+2) - a_k k(k+1) + \lambda a_k] \xi^k = 0$$

Daraus folgt die Rekursionsbeziehung:

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

Asymptotisch für $k \mapsto \infty$ erhalten wir:

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{k}{k+2}$$

Wir führen einen Vergleich mit der Taylorreihe von $f(\xi)$ durch:

$$f(\xi) = \ln \left(\frac{1+\xi}{1-\xi} \right)$$

Daraus folgt:

$$F_{as}(\xi) \sim \ln \left(\frac{1+\xi}{1-\xi} \right)$$

Physikalisch gilt für die gesuchte Wellenfunktion Ψ :

$$\Psi \sim \hat{F} \sim F; \int |\Psi(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$$

Dies führt zu einem Widerspruch, da für die asymptotische Lösung gilt:

$$\int_1^{-1} d\xi F_{as}(\xi) \mapsto \infty$$

Infolgedessen muß die Reihe abbrechen, damit wir physikalisch sinnvolle Lösungen erhalten. Dies ist nun dann der Fall, wenn der Zähler des Bruches in der Rekursionsformel gleich Null ist, womit sich ergibt;

$$\lambda_l = l(l+1)$$

Die Lösungen der Gleichung sind die sogenannten Legendreschen Polynome. Wir notieren uns einige dieser Polynome:

$$P_0(\xi) = 1$$

$$P_1(\xi) = \xi$$

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

Allgemein kann man folgende Beziehung zur direkten Berechnung der Polynome herleiten:

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

Außerdem gilt $P_l(1) = 1$, was eine interessante Eigenschaft ist. Für $m \neq 0$ befindet sich in der Differentialgleichung ein m^2 ; das Vorzeichen spielt also keine Rolle mehr. Macht man nun einen Reihenansatz, so erhält man eine dreigliedrige Rekursionsformel. Hier ist es dann hoffnungslos, eine Lösung zu erhalten, da die Reihe nicht abbricht. Es handelt sich dann nachweislich um kein Polynom. Eine geschlossene Form ist des weiteren nicht angebar. $\Theta(\vartheta)$ ist eine Funktion von $\cos \vartheta$ und $\sin \vartheta = \sqrt{1 - \cos^2 \vartheta}$.

$$\Theta(\vartheta) = [\sin \vartheta]^{|m|} \cdot \text{Funktion}(\cos \vartheta)$$

$$F(\xi) = \sqrt{1 - \xi^2}^{|m|} \cdot P(\xi) = F(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} P(\xi)$$

Man erhält dann folgende Differentialgleichung für $P(\xi)$:

$$(1 - \xi^2) P''(\xi) - 2\xi(1 - |m|) P'(\xi) + [\lambda - |m|(|m| + 1)] P(\xi) = 0$$

Wir machen einen Reihenansatz und stellen die Forderung nach nicht singulärem Verhalten. $P(\xi)$ ist dann ein Polynom. Für $m = 0$ gilt wieder:

$$(1 - \xi^2) P_l''(\xi) - 2\xi P_l'(\xi) + l(l + 1) P_l(\xi) = 0$$

Durch Differentiation folgt:

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} (P_l') - 2\xi(1 + 1) \frac{d}{d\xi} (P_l') + (l(l + 1) - 2) (P_l') = 0$$

Es handelt sich um die Differentialgleichung zu $|m| = 1$.

$$P(\xi) = \frac{d}{d\xi} P_l(\xi)$$

$$P(\xi) = P_l^{|m|}(\xi) - \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi) \text{ und } \lambda = l(l + 1) \text{ für } |m| \leq l$$

$P_l(\xi)$ sind die Legendre-Polynome. Außerdem sind die Eigenwerte aufgrund der Isotropie des Problems nicht von m abhängig.

$$P_0(\xi) = 1 \quad P_1(\xi) = \xi \quad P_2(\xi) = \frac{3}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}$$

$$P_1^2(\xi) = 1 \quad P_2^1(\xi) = 3\xi$$

$$P_2^2(\xi) = 3$$

Dann erhält man für die Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta) = (-1)^m \underbrace{\sqrt{\frac{2l + 1}{4\pi} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}}}_{\text{Normierungsfaktor}} \sin^{|m|}(\vartheta) P_l^{|m|}(\cos \vartheta) \exp(im\varphi)$$

Das Vorzeichen ist Konvention. Diese Funktionen sind orthonormal:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Außerdem gilt die Vollständigkeitsrelation:

$$F(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l F_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

l	m	Y_{lm}
0	0	$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
	± 1	$Y_{1\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \exp(\pm i\varphi)$
2	0	$Y_{20}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right)$
	± 1	$Y_{2\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \exp(\pm i\varphi)$
	± 2	$Y_{2\pm 2}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \vartheta \exp(\pm 2i\varphi)$
3	0	$Y_{30}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$
	± 1	$Y_{3\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) \exp(\pm i\varphi)$
	± 2	$Y_{3\pm 2}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta \exp(\pm 2i\varphi)$
	± 3	$Y_{3\pm 3}(\vartheta, \varphi) = \pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta \exp(\pm 3i\varphi)$

3.8.1 Entartung

Neben $\hat{H}(= \vec{L}^2)$ sind L_x , L_y und L_z erhalten, aber es existiert kein vollständiges System aus simultanen Wellenfunktionen zu L_x , L_y und L_z , da diese nicht vertauschbar sind. Für $l = 0$ gilt:

$$L_x = -i\hbar \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos \varphi \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_x Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \hat{L}_x \left(\sqrt{\frac{1}{4\pi}} \right) = 0$$

$$\hat{L}_y = 0$$

$$\hat{L}_z = 0$$

Es handelt sich um simultane Eigenfunktionen von L_x , L_y und L_z zum Eigenwert Null. Für $l = 1$ gilt:

$$\hat{L}_x \hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) \hat{L}_x Y_{lm}$$

Da $[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0$ folgt dies.

$$\hat{L}^2 \underbrace{(\hat{L}_x Y_{lm})}_{\Phi} = \hbar^2 l(l+1) \underbrace{(\hat{L}_x Y_{lm})}_{\Phi}$$

a.) Ψ ist Eigenfunktion zu \hat{L}^2 mit dem Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$.

b.) $\hat{L}_x Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ist aber im allgemeinen nicht Eigenfunktion zu \hat{L}_x .

$$\hat{L}_x Y_{lm} \neq \text{const.} \cdot Y_{lm}$$

Für $l = 1$ folgt:

$$\hat{L}_x Y_{10} = \hat{L}_x \cos \vartheta = \sin \vartheta (-\cos \vartheta) \neq Y_{10} = \dots Y_{11} + Y_{1,-1}$$

Es handelt sich um eine Linearkombination von $l = 1$ zu $m = \pm 1$. Allgemein gilt:

$$\hat{L}_x Y_m = \sum_{m'=-l}^{+l} C_{m'}^{l|m} Y_{m'}$$

3.9 Aufhebung der m-Entartung durch ein \vec{B} -Feld (Zeeman-Effekt)

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(|\vec{r}|) \Rightarrow \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{1}{2m} (\vec{p} - Q \cdot \vec{A})^2 + V(|\vec{r}|)$$

\vec{p} ist der kanonische Impuls $-\hbar \vec{\nabla}$. Der kinetische Impuls folgt durch:

$$p_{kin} = m\vec{v} = \vec{p} + e\vec{A}$$

Für die Entartung ergibt sich dann:

$$H_1 = -\vec{M} \cdot \vec{B}$$

Wir berechnen das magnetische Moment durch:

$$\vec{M} = \frac{-|e|\hbar}{2m} \vec{L}$$

Das \vec{B} -Feld wird durch ein Vektorpotential charakterisiert:

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$$

Beispielsweise gilt für $\vec{B} = (0, 0, B)$:

$$\vec{A} = \begin{cases} (-By, 0, 0) \\ (0, Bx, 0) \\ \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0\right) = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \end{cases}$$

$$(\vec{p} + e\vec{A})^2 = \vec{p}^2 + e(\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + e^2\vec{A}^2$$

Der Operator ist – Gott sei Dank – vertauschbar, falls $\text{div } \vec{A} = 0$ ist, was hier auch gilt ($\hat{p}_x \hat{A}_x = \hat{A}_x \hat{p}_x$, da \hat{p}_x mit y vertauscht).

$$\begin{aligned} (\vec{p} + e\vec{A})^2 &= \vec{p}^2 + 2e \cdot \frac{1}{2} \vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) + e^2 \cdot \frac{B^2}{4} (x^2 + y^2) = \vec{p}^2 + e\vec{B}(\vec{r} \times \vec{p}) + e^2 \cdot \frac{B^2}{4} (x^2 + y^2) = \\ &= \vec{p}^2 + e(\vec{L} \cdot \vec{B}) + \frac{e^2 B^2}{4} (x^2 + y^2) \end{aligned}$$

Damit gilt also:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|) + \underbrace{\left(\frac{e}{2m}\vec{L}\right) \cdot \vec{B}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{e^2 B^2}{8m}(x^2 + y^2)}_{\hat{H}_2}$$

Wir vernachlässigen nun den Operator \hat{H}_2 für kleine \vec{B} -Felder, woraus sich dann ergibt:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2\tilde{m}} L_z$$

\hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z ist dabei ein maximales System vertauschbarer Bewegungsintegrale. Die Eigenzustände ergeben sich durch Betrachtung der Schrödinger-Gleichung:

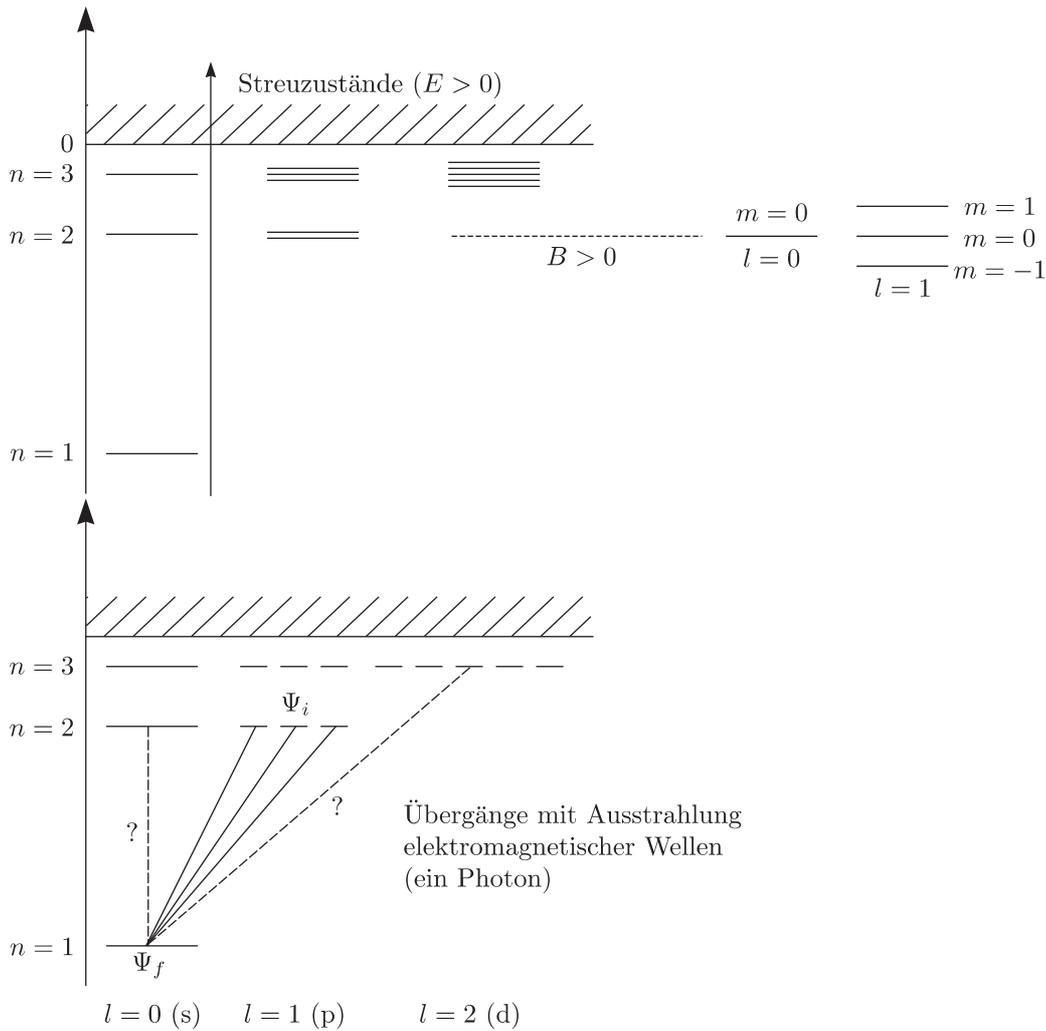
$$\hat{H}\Psi = E(B)\Psi$$

\hat{H} und \hat{H}_0 haben dieselben Eigenzustände:

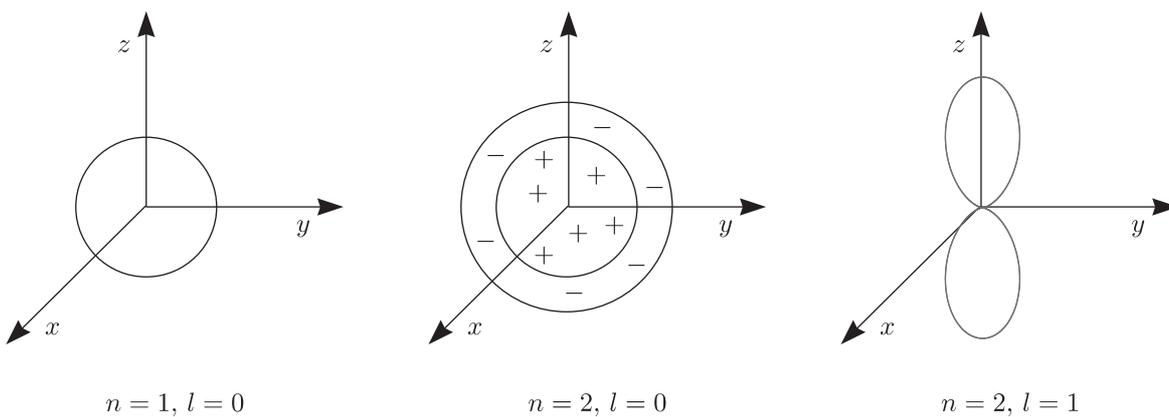
$$E_{nlm}(B) = E_n(0) + \frac{eB}{2\tilde{m}} \hbar m = E_n(0) + \frac{e\hbar}{2\tilde{m}} B m$$

Wir definieren geschickterweise das sogenannte Bohrsche Magneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_{el}} = 9,27 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$$



3.10 Ausstrahlung elektromagnetischer Wellen durch angeregten Zustand



Atom \Leftrightarrow Maxwell-Feld Wir führen eine halb-klassische/-quantenmechanische Beschreibung ein. Das Atom wird hierbei quantenmechanisch und das elektromagnetische Feld klassisch beschrieben.

Elektromagnetisches Feld $\left\{ \begin{array}{l} \text{Absorption} \\ \text{Induzierte Emission} \\ \text{Spontane Emission} \end{array} \right.$

Das Atom wird durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ beschrieben:

$$\Psi(\vec{r}, t) = C_i \Psi_i(\vec{r}) \cdot \exp\left(-i \frac{E_i}{\hbar} \cdot t\right) + C_f \Psi_f(\vec{r}) \cdot \exp\left(-i \frac{E_f}{\hbar} \cdot t\right)$$

Hierbei sei der Anfangszustand mit i („initial“) und der Endzustand mit f („final“) bezeichnet. Wir berechnen den Erwartungswert des elektrischen Dipolmoments:

$$\vec{d}(t) = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{d} \Psi(\vec{r}, t) d^3r$$

Für den Dipoloperator \hat{p} gilt:

$$\hat{p} = e\vec{r}_2 - e\vec{r}_1 = -e\vec{r}$$

Damit resultiert:

$$\vec{d}(t) = -e \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot \vec{r} d^3r$$

Damit folgt nun mit $C_i = |C_i| \cdot \exp(i\varphi_i)$ und $C_f = |C_f| \cdot \exp(i\varphi_f)$:

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= |C_i|^2 \cdot |\Psi_i(\vec{r})|^2 + |C_f|^2 \cdot |\Psi_f(\vec{r})|^2 + \left[C_i C_f \Psi_i \Psi_f^* \exp\left(-i \frac{E_i - E_f}{\hbar} t\right) \right] = \\ &= |C_i|^2 \cdot |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |C_f|^2 \cdot |\Psi_f(\vec{r})|^2 + \left[|C_i C_f| |\Psi_i(\vec{r}) \Psi_f^*(\vec{r})| \exp\left(-i \frac{E_i - E_f}{\hbar} t + i\varphi\right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_x(t) &= -e \cdot \left| \int \Psi_f^*(\vec{r}) x \Psi_i(\vec{r}) d^3r \right| \cdot \exp\left(-i \frac{E_i - E_f}{\hbar} t\right) \cdot \exp(i \cdot \varphi) = \\ &= -e \cdot |x_{fi}|^2 \cdot 2 \cos(\omega t + \varphi) \text{ mit } \omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar} \text{ (Frequenz des Überganges)} \end{aligned}$$

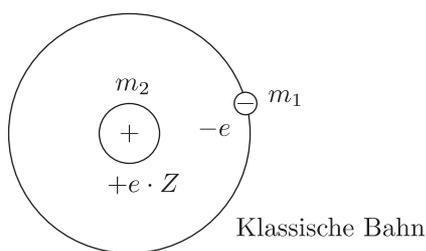
Das zeitabhängige Dipolmoment strahlt mit der Intensität I :

$$I \sim \overline{\left(\ddot{d}(t)\right)^2}$$

„ $\overline{\quad}$ “ bedeutet hierbei der zeitliche Mittelwert.

$$I = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4e^2\omega_4}{3c^3} |C_i(t)C_f(t)|^2 (|x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2) \text{ (durch Wechselwirkung mit elektromagnetischem Feld)}$$

3.11 Wasserstoff-Atom (Zweikörperproblem mit Zentralkraft-Wechselwirkung)



$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Wir zerlegen das Problem in Schwerpunkt- und Relativ-Koordinaten. Hierbei gilt nun außerdem (siehe Theoretische Physik B):

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \text{ und } \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{p} = \frac{m_2}{M} \vec{p}_1 - \frac{m_1}{M} \vec{p}_2 \text{ mit } \vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

Für eine kanonische Transformation gilt $[p_j, x_k] = \delta_{jk}$. Für die reduzierte Masse \tilde{m} und die Gesamtmasse M gilt:

$$\tilde{m} = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \text{ mit } M = m_1 + m_2$$

3.11. WASSERSTOFF-ATOM (ZWEIKÖRPERPROBLEM MIT ZENTRALEKRAFT-WECHSELWIRKUNG)

Damit können wir für die Hamilton-Funktion schreiben:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\tilde{m}} + V(r) = H_{Sp} + H_{rel}$$

Wir gehen nun zur Quantenmechanik über, verwenden also Operatoren:

$$\vec{p} \mapsto -i\hbar\vec{\nabla} \text{ und } \vec{r} \mapsto \vec{r}$$

Damit gilt dann für stationäre Zustände:

$$\hat{H}\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r})$$

Für den Hamilton-Operator folgt damit:

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}}}_{\hat{H}_{Sp}} + \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}\Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r})}_{\hat{H}_{rel}}$$

Die Wellenfunktion $\Psi(\vec{R}, \vec{r})$ kann als Produkt formuliert werden, da $H = H_{Sp}(\vec{R}) + H_{rel}(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Psi_{Sp}(\vec{R}) \cdot \Psi_{rel}(\vec{r})$$

Für $\Psi_{Sp}(\vec{R})$ verwenden wir den Ansatz $\exp(i\vec{k}\vec{R})$. Damit gilt also:

$$\hat{H}\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2M} + E_{rel} \right] \exp(i\vec{k}\vec{R}) \Psi_{rel}$$

$$\hat{H}_{rel}\Psi_{rel}(\vec{r}) = E_{rel}\Psi_{rel}$$

Wir haben ein maximales System vertauschbarer Operatoren. Aus den 6 Freiheitsgraden ergeben sich 11 Bewegungsintegrale bzw 6 involutorische Bewegungsintegrale mit $\{H, I_k\} = 0$ und $\{I, I_k\} = 0$.

* Schwerpunktbewegung:

$$\hat{p}_{K_1, K_2, K_3} \text{ (3 Größen)}$$

* Relativbewegung:

$$\hat{H}_{rel} \text{ (n)}, \hat{L}^2 \text{ (l)}, \hat{L}_z \text{ (m)}$$

Wir suchen das gemeinsame System der Eigenfunktionen zu $\hat{H}_{rel}, \hat{L}_{rel}^2, \hat{L}_{z,rel}$.

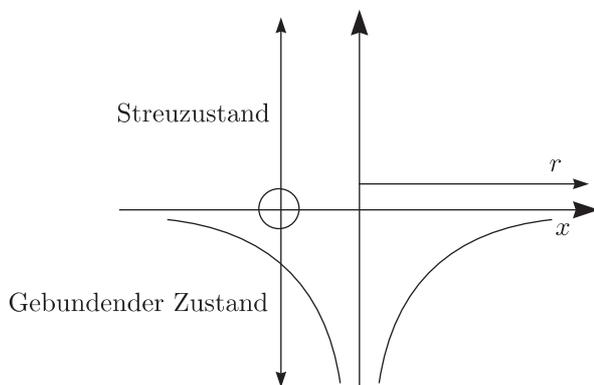
$$\Psi_{rel}(\vec{r}) = R(r)\Psi(\vartheta, \varphi)$$

Durch $R(r)$ erhalten wir die beiden Quantenzahlen n und l .

$$R(r) = \exp\left(-\frac{r}{na}\right) \cdot \text{Polynom (gebundene Zustände)}$$

a sei der Bohrsche Radius. Für das Potential des Wasserstoffatoms gilt:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{-Ze^2}{r}$$



$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} - r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right]}_{\text{Kinetische Energie der Radialbewegung}} + \underbrace{\left[\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}r^2} \vec{L}^2 Y_{lm} R \right]}_{\text{Rotationsenergie}} + V(r) R Y_{lm} = E R Y_{lm}$$

Für die radiale Bewegung gilt:

$$H_{red} = \frac{\tilde{m}}{2} \dot{r}^2 = \frac{p_r^2}{2\tilde{m}}$$

Somit gilt für den Operator des Radialimpulses:

$$-\hbar^2 \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR) \Leftrightarrow \hat{p}_r \cdot \hat{p}_r \cdot R$$

Ist $\hat{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$? Nein! Es gilt aber:

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

$$\hat{p}_r^2 R(r) = (-i\hbar)^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} (rR)$$

$$\hat{p}_r^2 R(r) = (-i\hbar)^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rR) \right)$$

$$[\hat{p}_r, r]R(r) = -i\hbar R(r)$$

Es folgt die Radialgleichung mit $\tilde{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$:

$$R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) - \frac{2\tilde{m}}{\hbar^2} V(r) R(r) + \frac{2\tilde{m}E}{\hbar^2} R(r) = 0$$

Wir untersuchen das asymptotische Verhalten von $R(r)$ für $r \mapsto \infty$:

$$R''(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} R(r) = 0$$

* $E > 0$:

$$R(r) = \exp\left(\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot r\right)$$

Die Funktion ist nicht normierbar; es handelt sich um keinen gebundenen Zustand.

* $E < 0$:

$$R(r) = \exp\left(\pm \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} \cdot r\right)$$

Hierbei haben wir einen gebundenen Zustand.

Zukünftig wird nur der Fall $E < 0$ betrachtet. Wir führen die Längeneinheit λ ein:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2\tilde{m}|E|}}$$

$$\lambda(E) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\tilde{m}R}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\eta}} = \frac{a}{\sqrt{\eta}}$$

Außerdem werden folgende dimensionslose Variablen verwendet:

$$\varrho = \frac{r}{\lambda} \text{ und } \eta = \frac{|E|}{R_y} \text{ mit } R_y = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \hat{=} \text{Rydberg-Energie}$$

$$R(r) \mapsto \tilde{R}(\varrho)$$

$$\tilde{R}''(\varrho) + \frac{2}{\varrho} \tilde{R}'(\varrho) + \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \tilde{R}(\varrho) + \underbrace{\left[\frac{2\tilde{m}}{\hbar^2} \cdot \lambda^2 \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{\lambda} \right]}_{\frac{2}{\sqrt{\eta}}} \cdot \frac{1}{\varrho} \cdot \tilde{R}(\varrho) = \underbrace{\left[\frac{2\tilde{m}}{\hbar^2} \lambda^2 R_y \eta \right]}_{\stackrel{!}{=} 1} \tilde{R}(\varrho) = 0$$

3.11. WASSERSTOFF-ATOM (ZWEIKÖRPERPROBLEM MIT ZENTRALEKRAFT-WECHSELWIRKUNG)

$$\tilde{R}''(\varrho) + \frac{2}{\varrho} \tilde{R}'(\varrho) + \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \tilde{R}(\varrho) + \frac{2}{\sqrt{\eta}} \frac{1}{\varrho} \tilde{R}(\varrho) - R(\varrho) = 0$$

Nun steckt der Energieeigenwert in $\sqrt{\eta}$. Wir machen folgenden Struktur-Ansatz:

$$\tilde{R}(\varrho) = \exp(-\varrho) f(\varrho)$$

Außerdem stellen wir folgende Forderung:

$$f(\varrho) = \begin{cases} f(\varrho 0,) \text{ endlich} & \text{für } \varrho \mapsto 0 \\ f(\varrho) \exp(-\varrho) \mapsto 0 & \text{für } \varrho \mapsto \infty \end{cases}$$

Ist $P(\varrho)$ ein Polynom? Durch Einsetzen erhalten wir eine Differentialgleichung für $f(\varrho)$:

$$f''(\varrho) + 2 \left(\frac{1}{\varrho} - 1 \right) f'(\varrho) + \left[\frac{2}{\varrho} \left(\frac{1}{\sqrt{\eta}} - 1 \right) - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \right] f(\varrho) = 0$$

Wir machen nun einen erneuten Ansatz für $f(\varrho)$ in Form eines verallgemeinerten Potenzreihenansatzes:

$$f(\varrho) = \varrho^\beta P(\varrho) \text{ mit } P(\varrho) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \varrho^j$$

β könnte sogar nicht ganzzahlig sein, aber es muß $\beta \geq 0$ gelten.

$$R(\varrho) \text{ bei } \varrho = 0 \text{ existiert } \begin{cases} 1.) R(\varrho) \text{ regulär bei } \varrho = 0 \\ 2.) R(\varrho) \sim \ln(\varrho) \end{cases}$$

Mittels eines Koeffizientenvergleichs ergibt sich dann:

$$* \varrho^{\beta-2}:$$

$$\beta(\beta - 1) - l(l + 1) = 0$$

Daraus ergibt sich dann $\beta = l$ ($\beta = -(l + 1)$).

$$* \varrho^1 \beta - 2 + 1$$

$$C_{k+1} [(k + 1 + \beta)(k + 2 + \beta) - l(l + 1)] = 2C_k \underbrace{\left[(k + 1 + \beta) - \frac{1}{\sqrt{\eta}} \right]}_{\stackrel{!}{=} 0}$$

Es handelt sich um eine zweigliedrige Rekursionsformel. Wir untersuchen das Verhalten der $P(\varrho)$ -Reihe für $\varrho \mapsto \infty$, also $k \mapsto \infty$:

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} = 2 \cdot \frac{(k + 1 + \dots) \cdot \dots}{(k + 1 + \dots) \cdot (k + 2 + \dots)} \mapsto 2 \cdot \frac{1}{k}$$

Daraus ergibt sich dann:

$$\sum_k \infty \frac{(2\varrho)^k}{k!} \sim \exp(2\varrho)$$

$$\frac{(2\varrho)^{k+1}}{(k+1)!} \cdot \frac{k!}{(2\varrho)^k} \sim \frac{2\varrho}{k+1} \sim \frac{2}{k} \cdot \varrho$$

Für beliebige η bricht die Reihe nicht ab.

$$R(\varrho) \sim \exp(-\varrho) \exp(2\varrho) \sim \exp(+\varrho)$$

Die Funktion ist nicht normierbar, aber wir können selbst dafür sorgen, daß die Reihe abbricht. Dazu setzen wir:

$$\frac{1}{\sqrt{\eta}} = n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Reihe bricht nun ab mit $k - n - (1 + l) \geq 0$, d.h. $l \leq n - 1$.

$$P(\varrho) = C_0 + C_1\varrho + \dots + C_{n-(1+l)}\varrho^{n-(l+1)}$$

$$C_0 = 1, C_1 = 2 \cdot \frac{1+l-n}{(l+1)(l+2) - l(l+1)}, \dots$$

$P(\varrho)$ sind mit den Laguerreschen Polynomen verwandt.

$$P(\varrho) = L_{(n+1)}^{(2l+1)}(\underbrace{2\varrho}_x)$$

Die Laguerre-Polynome $L_n(x)$ sind folgendermaßen zu bilden:

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + ny(x) = 0$$

$$L_n(x) = \exp(x) \frac{d^n}{dx^n} [x^n \exp(-x)]$$

Die zugeordneten Legendre-Polynome sind definiert durch (siehe harmonischer Oszillator):

$$L_n^{(j)}(x) = \frac{d^j}{dx^j} L_n(x)$$

Wir erhalten also folgendes Resultat für die Wellenfunktion:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) \cdot L_{n+1}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right) \sim r^{n-1}$$

n	l	R_{nl}
1	0	$\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$
2	0	$\left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$
2	1	$r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$

* Positronium

Hierbei handelt es sich um ein e^+e^- -System

$$\tilde{m} = \frac{m_{el}}{2}, Z = 1$$

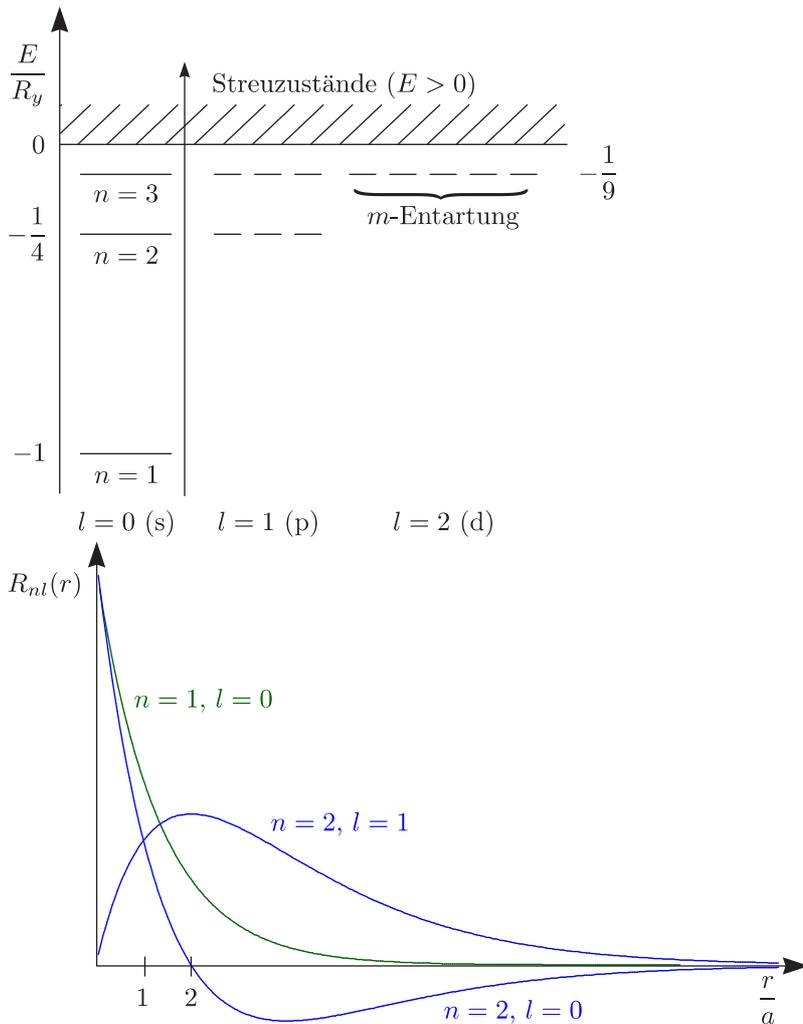
* Exziton:

Dies ist ein gebundenes Elektron-Loch-Paar im Halbleiter.

$$m_{el} \sim 0, 10m_{el}$$

$$m_n \sim 0, 2m_n$$

$$\varepsilon = 10$$



Die radiale Ortswahrscheinlichkeit berechnet sich durch:

$$W_{rel}(r) = r^2 |R_{nl}(r)|^2$$

Das r^2 ergibt sich durch Verwendung von Kugelkoordinaten. Das Maximum befindet sich bei $r = n^2 a$. Klassisch handelt es sich für $l < n - 1$ um Ellipsenbahnen.

Die Wellenfunktionen sind orthogonal:

$$\iiint \Psi_{nlm}^* \Psi_{n'l'm'} r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$n = 1$ und $n = 2, l = 1$ sind bei Radialfunktion positiv.

3.11.1 Entartung

* m -Entartung:

E_{nlm} ist für alle Zentralpotentiale von m unabhängig. Dies kommt aufgrund der Kugelsymmetrie, da keine Richtung für die z -Achse ausgezeichnet ist.

* l -Entartung:

Dabei handelt es sich um die Besonderheit des $\frac{1}{r}$ -Potentials. Im allgemeinen gilt:

Betrachten wir die Bahn klassisch:

* Geschlossene Ellipse (auch beim harmonischen Oszillator)

* Lenz-Runge-Vektor Λ ist ein Bewegungsintegral

Λ vertauscht nicht mit \vec{L}^2 . Aber es gibt doch immer ein fünftes Bewegungsintegral für jedes Zentralproblem.

Der Ausweg ist:

$$I_5 = \dots \frac{1}{r}, \dots \frac{1}{|\vec{p}|}, \dots \frac{1}{\vec{p}^2}, \dots$$

Wir machen dies zu einem Operator, also:

$$\dots \frac{1}{\hat{r}}, \dots \frac{1}{|\hat{p}|}, \dots \frac{1}{\hat{p}^2}, \dots$$

Der reziproke Operator ist wie folgt definiert:

$$\frac{1}{\hat{p}_x} \mapsto (\hat{p}_x)^{-1}$$

Wenn der Eigenwert gleich Null ist, dann existiert kein reziproker Operator.

3.11.2 Entartung bei einer Dimension

* Alle gebundenen Zustände besitzen eine einfache Entartung.

* Streuzustände sind zweifach entartet.

Für ein freies Teilchen gilt:

$$\Psi_k(x) = \exp(ikx)$$

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

Dies gilt für $-\infty < k < \infty$.

Für das Dipolmoment gilt:

$$\vec{d}(t) = \int \Psi^*(\vec{r}, t) (-e\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) d^3r$$

$$d_k(t) = -e \cdot |x_k| \cdot 2 \cos(\omega t + \varphi) = d_{0,x} \cdot \cos(\omega t + \varphi)$$

Wobei gilt:

$$x_{fi} = \int \Psi_f(\vec{r}) x \Psi_i(\vec{r}) d^3r = |x_{fi}| \exp(i\varphi)$$

$$y_{fi} = \int \Psi_f(\vec{r}) y \Psi_i(\vec{r}) d^3r = |x_{fi}| \exp(i\varphi)$$

$$z_{fi} = \int \Psi_f(\vec{r}) z \Psi_i(\vec{r}) d^3r = |x_{fi}| \exp(i\varphi)$$

Hierbei handelt es sich um die sogenannten Matrixelemente des Dipolmoments. Dieses oszilliert mit:

$$\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$$

Für die Energie des Atoms gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d^3r$$

Für die Eigenzustände Ψ_i und Ψ_f gilt:

$$\hat{H} \Psi_i = E_i \Psi_i$$

$$\hat{H} \Psi_k = E_f \Psi_f$$

Also gilt:

$$\langle \hat{H} \rangle = |C_i|^2 E_i + |C_f|^2 E_f$$

3.11. WASSERSTOFF-ATOM (ZWEIKÖRPERPROBLEM MIT ZENTRALEKRAFT-WECHSELWIRKUNG)

Dies ist einsichtig aufgrund der Erhaltung der Energie. Aus Theorie C übernommen:

$$I \sim \overline{\left(\ddot{d}(t)\right)^2}$$

$$I = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4e^2\omega^4}{3c^3} [|x_{fi}|^2 + |y_{fi}|^2 + |z_{fi}|^2] \cdot |C_i C_f|^2$$

$$C_i \mapsto C_i(t)$$

$$C_f \mapsto C_f(t)$$

Wir machen folgenden Ansatz:

$$|C_i(t)|^2 = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad |C_f(t)|^2 = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

Es gilt hiermit:

$$|C_i|^2 |C_f|^2 = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right]$$

Die Energieänderung beträgt:

$$E_i = E_f = \hbar\omega = \int_0^\infty I(t) dt$$

Hieraus kann nun τ bestimmt werden. Für die Zerfalls-Rate gilt:

$$\Gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2\omega^3}{3c^3\hbar} |\vec{r}_{fi}|^2 \sim \frac{1}{\lambda} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$$

* $|x_{fi}|, |y_{fi}|, |z_{fi}| = 0$ sind verbotene Übergänge.

* Sonst gilt $|x_{fi}| \sim a_B$. Daraus ergibt sich dann $\tau \approx 10^{-8}$ s. Hierbei wird sichtbares Licht der Wellenlänge $\lambda \approx 5000 \text{ \AA}$, $\nu \approx 10^{15}$ Hz ausgestrahlt.

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Wir führen Kugelkoordinaten ein:

$$\left. \begin{aligned} x &= r \cos \varphi \sin \vartheta \\ y &= r \sin \varphi \sin \vartheta \end{aligned} \right\} x \pm iy = r \cdot \exp(\pm i\varphi) \sin \vartheta \sim r \cdot Y_{1,\pm 1}$$

$$z = r \cos \vartheta \sim r Y_{10}(\vartheta, \varphi)$$

Für den Übergang $l = 1 \mapsto l = 0$ gilt:

$$z_{fi} = \int R_{10}(r) R_{21}(r) \cdot r \cdot r^2 dr \cdot \underbrace{\int Y_{00}(\vartheta, \varphi) \cdot Y_{10}(\vartheta, \varphi) \cdot Y_{1m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi}_{\text{Konstante}}$$

$$|x_{fi}| = |y_{fi}| \text{ mit Phasenverschiebung } \frac{\pi}{2}$$

$$(x + iy)_{fi} \neq 0$$

$$(x - iy)_{fi} = 0$$

Wir haben in Ausbreitungsrichtung zirkular polarisiertes (mathematisch positiver Drehsinn) Licht.

Die Auswahlregeln für einen beliebigen Zustand sind $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$. Für Quadrupol-Übergänge gilt außerdem $\Delta l = 2$:

$$I_{Qu} \simeq I_{Dip} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$$

$$\frac{a}{\lambda} = \frac{0,5 \text{ \AA}}{5000 \text{ \AA}} = 10^{-4}$$

$$\left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 = 10^{-8}$$

Kapitel 4

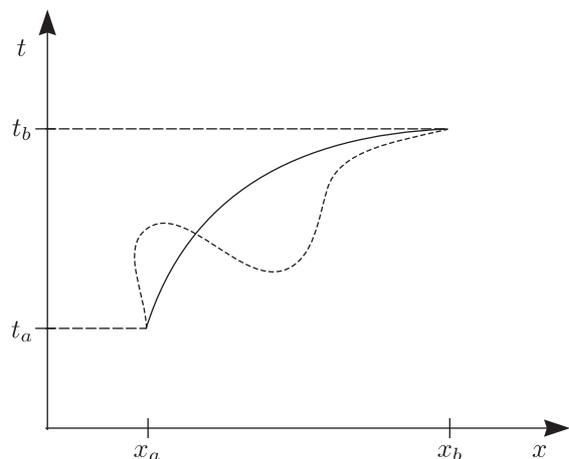
Formalismus der Quantenmechanik

Historisch ist folgendes von Bedeutung:

- * Schrödinger: Wellenfunktion
- * Heisenberg: Matrizen
- * Feynman (Schrödinger, Dirac): Pfad-Integral

Man geht von der klassischen Formulierung aus, wobei S die Wirkung ist:

$$\Psi = \sum_{\text{Pfade } x(t)} \exp\left(i \frac{S[x(t)]}{\hbar}\right)$$



Dies alles sind verschiedene Darstellungen und Formulierungen ein und derselben Theorie nämlich der „Quantentheorie“.

4.1 Vektor-Raumstruktur, lineare Operatoren

Es sei von den Elementen $\Psi(x)$, $\varphi(x)$, usw die Rede. Diese sollen quadratintegrierbar sein:

$$\int |\Psi(x)|^2 dx < \infty$$

Betrachten wir einen Vektorraum Z . In diesem gelten folgende Axiome:

I.) Addition

1.) Kommutativgesetz:

$$\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi_2 + \Psi_1 \in Z$$

2.) Assoziativgesetz:

$$\Psi_1 + (\Psi_2 + \Psi_3) = (\Psi_1 + \Psi_2) + \Psi_3$$

- 3.) $\Psi + \xi = \phi$ gelte für beliebige ϕ, Ψ . Dann gilt auch $\xi = \phi - \Psi$.
 4.) Existenz eines Nullelements $\xi = 0$ mit $\Psi + 0 = \Psi$.

II.) Multiplikation mit komplexen Zahlen $c \in \mathbb{C}$.

- 1.) $C\Psi$
 2.) $(C_1 + C_2)\Psi$
 3.) $C_1(C_2\Psi) = (C_1C_2)\Psi$
 4.) $C(\Psi_1 + \Psi_2) = C\Psi_1 + C\Psi_2 \in Z$

4.1.1 Lineare Unabhängigkeit

$\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ heißen linear unabhängig, wenn aus $\sum_{i=1}^n C_i \varphi_i = 0$ als einzige Lösung $C_i = 0$ folgt. Sonst sind die Elemente linear abhängig,

4.1.2 Basis

Eine Basis ist eine Menge linear unabhängiger Vektoren $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ derart, daß jedes $\Psi \in Z$ durch Linearkombination darstellbar ist:

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^n C_i \varphi_i(x)$$

n ist die Dimension von Z , also die maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren. Für die Quantenmechanik eines Teilchens im Potential gilt $\dim = \infty$ (Hilbert-Raum). Betrachten wir als Beispiel ein Teilchen im Kasten. Die \hat{H} -Eigenzustände sind:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Das Verfahren nach Entwicklung einer Basis heißt Fourier-Reihen-Bildung.

In speziellen Vektorräumen, wie beispielsweise dem Hilbert-Raum, wird außerdem gefordert, daß die Funktionen quadratintegrierbar sind:

$$\int \Psi(x)^2 dx < \infty$$

Es kann außerdem gezeigt werden, daß im Hilbert-Raum die Basis abzählbar ist.

- 1.) Teilchen im Kasten
 2.) Freies Teilchen

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) \text{ für } -\infty < k < \infty$$

Geschickterweise sind diese Funktionen auf δ -Funktionen normiert:

$$\int \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) dx = \delta(k - k')$$

Die Funktion kann mittels einer Fouriertransformation geschrieben werden:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) \exp(ikx) dk$$

Man könnte meinen, daß die Funktion $\Psi(x)$ normierbar sein muß, damit $C(k)$ eine Funktion ist. Tatsächlich reicht aber bereits absolute Normierbarkeit aus:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)| dx < \infty$$

Des weiteren kann ein Skalarprodukt auf einem Vektorraum folgendermaßen definiert werden:

$$\phi, \psi \mapsto \text{Komplexe Zahl } (\phi, \psi) \in \mathbb{C}$$

In unserem Falle ist ϕ und ψ dann direkt gegeben durch folgendes Integral:

$$(\phi, \psi) = \int \phi^*(x)\psi(x) dx$$

Folgende Eigenschaften sind hierbei relevant:

- * Bildung des konjugiert Komplexen:

$$(\phi, \phi)^* = (\psi, \phi)$$

- * Linearität bezüglich der Addition:

$$(\phi, \psi_1 + \psi_2) = (\phi, \psi_1) + (\phi, \psi_2)$$

- * Linearität bezüglich der Multiplikation mit einem Skalar c :

$$(\phi, c\psi) = c(\phi, \psi)$$

- * $(\psi, \psi) \geq 0$, $(\psi, \psi) = 0$ dann und nur dann, wenn $\psi = 0$ (Null-Vektor) ist

- * Schwarzsche Ungleichung:

$$|(\phi, \psi)|^2 \leq (\phi, \phi)(\psi, \psi)$$

Wir wollen dies beweisen. Es seien ϕ, ψ zwei beliebig feste Elemente $\in Z$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$:

$$\varphi = \phi + \lambda\psi$$

Dann werten wir folgendes Skalarprodukt aus:

$$F(\lambda)(\varphi, \varphi) = (\phi, \phi) + \lambda(\phi, \psi) + \lambda^*(\psi, \phi) + \lambda\lambda^*(\psi, \psi) \geq 0$$

Wir suchen das Minimum bezüglich $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$. λ und λ^* sind hierbei unabhängig voneinander:

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda^*} = (\psi, \phi) + \lambda(\psi, \psi) \stackrel{!}{=} 0$$

Daraus folgt dann:

$$\lambda_{min} = \frac{(\psi, \phi)}{(\psi, \psi)}$$

Durch Einsetzen dieses Minimums folgt dann:

$$F = (\phi, \phi) - \frac{|(\phi, \psi)|^2}{|(\psi, \psi)|} \cdot 2 + \frac{|(\psi, \phi)|^2}{(\psi, \psi)^2}(\psi, \psi) \geq 0$$

Durch Multiplikation mit (ψ, ψ) erhält man dann die Schwarzsche Ungleichung.

- * Orthonormalbasen:

- Diskrete Verteilungen:

$$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{m,n}$$

- Kontinuierliche Funktionen:

$$(\varphi_k, \varphi_{k'}) = \delta(k - k')$$

4.1.3 Lineare Operatoren auf Z

Es sei folgende Abbildung bezüglich eines Operators \hat{A} gegeben:

$$\Psi \mapsto \phi = \hat{A}\Psi \in Z$$

\hat{A} kann beispielsweise x oder $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ sein. Wir fordern:

$$(\hat{A}^\dagger \Psi_1 | \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{A} \Psi_2)$$

$$\int \Psi_1^*(x) \hat{A} \Psi_2(x) dx = \int (\hat{A}^\dagger \Psi_1) \Psi_2 dx$$

\hat{A}^\dagger nennt man adjungiert zu \hat{A} . Gilt $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, so heißt der Operator selbst-adjungiert oder in der Physik hermitesch.

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

Für den Impulsoperator gilt beispielsweise (ohne Berücksichtigung des irrelevanten Vorfaktors):

$$\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{A}^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$$

Satz:

Die Eigenwerte des hermiteschen Operators sind reell.

Beweis:

Wir haben folgendes Eigenwertproblem mit dem Eigenwert a :

$$\hat{A}\Psi = a\Psi$$

$$(\psi, \hat{A}\psi) = a(\psi, \psi)$$

Wir nehmen diese Gleichung konjugiert komplex:

$$(\psi, \hat{A}\psi)^* = a^*(\psi, \psi)$$

Mit der ersten Eigenschaft des Skalarprodukts gilt dann:

$$(\psi, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}\psi, \psi)$$

Mit der Hermitizität des Operators, also $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ folgt:

$$(\hat{A}\psi, \psi) = (\psi, \hat{A}^\dagger \psi) = (\psi, \hat{A}\psi)$$

Wir erhalten also:

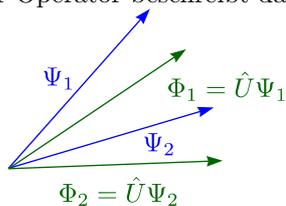
$$(\psi, \hat{A}\psi) = a^*(\psi, \psi)$$

Damit gilt also $a = a^*$.

Ein unitärer Operator ist ein solcher, welcher das Skalarprodukt unverändert läßt:

$$(\Psi_1, \Psi_2) = (\hat{U}\Psi_1, \hat{U}\Psi_2)$$

Der Operator beschreibt dann beispielsweise Drehungen oder Spiegelungen.



Der reziproke Operator ist definiert durch:

$$\hat{J}\Psi = \phi \Rightarrow \Psi = \hat{K}^{-1}\phi$$

Dieser existiert dann nicht, wenn \hat{K} den Eigenwert Null besitzt. Für einen selbstadjungierten Operator, also $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ gilt, wie wir schon gezeigt haben:

- * Eigenwerte sind reell
- * Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

Wir wollen dies beweisen:

$$\hat{A}\Psi_m = a_m\Psi_m$$

$$\hat{A}\Psi_n = a_n\Psi_n$$

Damit gilt dann:

$$(\Psi_n, \hat{A}\Psi_m) = a_m(\Psi_n, \Psi_m)$$

$$(\Psi_m, \hat{A}\Psi_n) = a_n(\Psi_m, \Psi_n)$$

Wir bilden das konjugiert komplexe der zweiten Gleichung:

$$(\Psi_m, \hat{A}\Psi_n)^* = a_n^*(\Psi_m, \Psi_n)^* = (\hat{A}\Psi_n, \Psi_m) = a_n(\Psi_n, \Psi_m)$$

Wir verwenden nun, daß \hat{A} selbstadjungiert ist:

$$(\Psi_n, \hat{A}\Psi_m) = a_n(\Psi_n, \Psi_m)$$

Diese Gleichung wird nun von der ersten ursprünglichen Gleichung subtrahiert:

$$0 = \underbrace{(a_m - a_n)}_{\neq 0 \text{ n.V.}} \underbrace{(\Psi_n, \Psi_m)}_{\stackrel{!}{=} 0}$$

Damit ist die Aussage bewiesen!

Die Eigenwerte eines unitären Operators $U^{-1} = U^\dagger$ sind vom Betrag 1, das heißt:

$$\hat{U}\Psi = \lambda\Psi \text{ mit } |\lambda|^2 = 1, \lambda\lambda^* = 1 \text{ und somit } \lambda^* = \frac{1}{\lambda}$$

Wir dividieren durch λ und multiplizieren mit U^{-1} :

$$\frac{1}{\lambda}\Psi = \hat{U}^\dagger\Psi$$

Wir notieren nun:

$$(\Psi, \hat{U}\Psi) = \lambda(\Psi, \Psi)$$

$$(\Psi, \hat{U}^\dagger\Psi) = \frac{1}{\lambda}(\Psi, \Psi)$$

Durch komplexe Konjugation der zweiten Gleichung folgt:

$$(\Psi, \hat{U}^\dagger\Psi)^* = \frac{1}{\lambda^*}(\Psi, \Psi)^* = (\hat{U}\Psi, \Psi) = \frac{1}{\lambda^*}(\Psi, \Psi)$$

Durch Subtraktion dieser Gleichung von der ersten folgt:

$$0 = \lambda - \frac{1}{\lambda^*}$$

Damit gilt:

$$\lambda\lambda^* = 1$$

4.1.4 Zeitentwicklung

Aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung folgt $\Psi(x, t = 0) \mapsto \Psi(x, t) = \hat{U}\Psi(x, 0)$. \hat{U} ist unitär und es gilt, sofern \hat{H} nicht explizit von der Zeit abhängt:

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

Wir denken uns die anfänglich gegebene Wellenfunktion nach Eigenfunktionen des Hamilton-Operators entwickelt:

$$\Psi(x, t = 0) = \sum_n C_n \varphi_n(x) \text{ mit } \hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n \text{ und } \hat{U}\varphi_n = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}E_n\right)\varphi_n$$

4.1.5 Impulsdarstellung

Wir schreiben mittels der Fouriertransformation:

$$\Psi(x) = \int \phi(k) \exp(ikx) dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\Psi}(p) \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) dp$$

$$\Psi(x) \mapsto \tilde{\Psi}(p)$$

Die Übersetzungsregeln lauten wir folgt:

$$\hat{x} \mapsto x, \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} \mapsto +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \hat{p} \mapsto p$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \hat{1}$$

- 1.) Zugang zur Quantenmechanik mit $\hat{p}, \hat{x}, \Psi(x), [\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar$
- 2.) Zugang zur quantenmechanischen Übersetzung in Operatoren

Wir haben folgende kanonische Transformationen:

$$X = -p \mapsto \hat{p}, P = x \mapsto \hat{x}$$

$$\{P, X\} = 1$$

Beispiel: Harmonischer Oszillator

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

Dieser gilt sowohl in Impuls- als auch in Ortsdarstellung. In dimensionslosen Variablen folgt:

$$\Psi_0(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \Leftrightarrow \Psi_0(p) = \exp\left(-\frac{p^2}{2}\right)$$

$$\Psi_m(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_m(x) \Leftrightarrow \Psi_m(p) = \exp\left(-\frac{p^2}{2}\right) H_m(p)$$

Das gilt aber nur für den harmonischen Oszillator.

4.2 Matrixformulierung der Quantenmechanik

Es sei Ψ_n der Entwicklungskoeffizient und $\varphi_n(x)$ das Basissystem.

$$\Psi(x) = \sum_n \Psi_n \cdot \varphi_n(x), \hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$$

a_n sei dann der Eigenwert von \hat{A} , wobei \hat{A} beliebig sei.

$$\Psi(x) \Leftrightarrow \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$$

Der Operator \hat{B} wirke nun auf die Wellenfunktion $\Psi(x)$:

$$\hat{B}\Psi(x) = \Phi(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \psi_m \cdot \hat{B}\varphi_m(x)$$

Für $\Phi(x)$ sei nun folgende Entwicklung gegeben:

$$\Phi(x) = \sum \phi_k \varphi_k(x)$$

Wir hängen nun die ϕ_k mit den ψ_m zusammen? Dazu bilden wir das Skalarprodukt (φ_n, Φ) :

$$\sum_k \phi_k \varphi_k(x) = \sum_m \psi_m \hat{B}\varphi_m(x)$$

$$\varphi_m \sum_k \phi_k \varphi_k(x) = \sum_m \psi_m \left(\varphi_m, \hat{B} \varphi_m(x) \right)$$

Dadurch fallen links alle Glieder bis auch das mit $m = k$ weg:

$$\phi_m = \sum_m \underbrace{\left(\varphi_m(x), \hat{B} \varphi_m(x) \right)}_{B_{n,m}} \cdot \psi_m$$

$B_{m,n}$ sind die Matrixelemente der Operator \hat{B} bezüglich der Basis $\varphi_m(x)$.

$$\phi_n = \sum_m B_{nm} \psi_m$$

In Matrixdarstellung gilt nun:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\Phi} = \underbrace{\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}}_{\mathcal{B}} \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\Psi}$$

Wobei die Regeln für die Multiplikation der Matrix \mathcal{B} mit dem Spaltenvektor Ψ gelten. Eine Matrix wird adjungiert durch:

$$\mathcal{B} \mapsto \mathcal{B}^\dagger \text{ mit } (\mathcal{B}^\dagger)_{m,n} = B_{n,m}^*$$

Wenn man einen Vektor adjungiert, so schreibt man ihn als Zeilenvektor:

$$\Psi^\dagger \mapsto (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \dots)$$

Bei Adjungieren eines Produkts gilt:

$$(\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger = \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger$$

Speziell gilt:

$$(\mathcal{B}\Psi)^\dagger = \Psi^\dagger \mathcal{B}^\dagger$$

Wir adjungieren die obige Gleichung in Matrixdarstellung:

$$(\phi_1^*, \phi_2^*, \dots) = (\phi_1^*, \psi_2^*, \dots) \begin{pmatrix} B_{11}^* & B_{12}^* & B_{31}^* \\ B_{21}^* & B_{22}^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Wir betrachten das Eigenwertproblem eines Operators \hat{B} :

$$\hat{B}\Psi = b\Psi$$

In Matrixform ist dieses Problem äquivalent (Matrixeigenwertproblem):

$$\mathcal{B}\Psi = b\Psi$$

4.3 Dirac'sche Schreibweise

Die Vektoren $\varphi(x)$ (Ortswellenfunktion), $\Psi(p)$ (Impulswellenfunktion), Ψ_m (Spaltenvektor) sind nun Darstellungen eines abstrakten Vektors $|\Psi\rangle$. φ^* , $\psi(p)^*$, Ψ^* nennen wir nun Bra-Vektor $\langle\Psi|$. Das Skalarprodukt besitzt folgende Darstellung:

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi^*(x)\Phi(x) dx = \int \Psi^*(p)\Phi(p) dp = (\psi_1^*, \dots) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \underbrace{\langle\Psi|\Phi\rangle}_{\text{Bracket}}$$

Ein Operator besitzt folgende Darstellung:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = |\phi\rangle$$

Die statischen Zustände des harmonischen Oszillators sind:

$$\Psi_m(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_m(x)$$

Kurz bezeichnet man diese mit $|n\rangle$. Für dessen Ortsdarstellung gilt:

$$\Psi_m(x) = \langle X|n\rangle$$

X sei die Ortseigenfunktion zum Eigenwert x und $|n\rangle$ der Zustand des Oszillators. In Impulsdarstellung gilt analog:

$$\Psi_m(p) = \langle p|n\rangle$$

Des weiteren soll die Matrixdarstellung angeführt werden:

$$\Psi_m = \langle \alpha|n\rangle, \hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

Wir stellen Skalarprodukte dar als:

$$\langle \Psi_1|\Psi_2\rangle = \int \Psi_1^*(x)\Psi_2(x) dx$$

Erwartungswerte berechnen sich dann nach folgender Notation:

$$\langle \Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \int \Psi^*(x)\hat{A}\Psi(x) dx$$

Wir geben die Matrixelemente von \hat{A} bezüglich der Basis $|m\rangle$ an als:

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle = \int \varphi_m^*(x)\hat{A}\varphi_n(x) dx = A_{mn}$$

Die Dirac'sche Schreibweise hat den Vorteil, daß man bestimmte Operatoren gut darstellen kann. Wir betrachten $\hat{P} = |g\rangle\langle g|$ mit $\hat{G}|g\rangle = g|g\rangle$, wobei $|g\rangle$ der Eigenvektor und g der zugehörige Eigenwert darstellt.

$$\hat{P}\hat{P} = |g\rangle \underbrace{\langle g|g\rangle}_{=1} \langle g| = \hat{P}$$

$$\hat{P}|\Psi\rangle = |g\rangle \underbrace{\langle g|\Psi\rangle}_{\text{Zahl}} = \langle g|\Psi\rangle|g\rangle$$

Wir erhalten somit einen Vektor parallel zu $|g\rangle$. Ein Operator mit solchen Eigenschaften nennt man Projektionsoperator auf den Vektor $|g\rangle$.

$$\sum_n |g_n\rangle\langle g_n| \Rightarrow \boxed{\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}}$$

Es handelt sich hierbei um die Zerlegung des $\hat{1}$ -Operators (Vollständigkeit). Dazu machen wir ein Beispiel:

$$\Psi(x) = \sum C_n \varphi_n(x) \text{ mit } \hat{G}\varphi_n(x) = g_n \varphi_n(x)$$

φ_n sei hermitesch und es gelte $(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$. Wir bestimmen die C_m :

$$C_m = (\varphi_m, \Psi)$$

Ein Einsoperator kann überall eingeschoben werden:

$$|\Psi\rangle \equiv \hat{1}|\Psi\rangle = \sum_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{C_n} \Psi$$

Gegeben sei $\Psi(x)$ ($|\Psi\rangle$) und gefragt sei, wie groß die Wahrscheinlichkeit bei einer Messung der Größe \hat{G} den Eigenwert g_n zu finden.

$$W(g_n) = |C_n|^2 = |(\varphi_n, \Psi)|^2 = \langle \Psi|\hat{W}|\Psi\rangle = |\langle g_n|\Psi\rangle|^2 = \langle g_n|\Psi\rangle\langle \Psi|g_n\rangle = \langle \Psi|g_n\rangle\langle g_n|\Psi\rangle$$

Also ist $|g_n\rangle\langle g_n|$ der Wahrscheinlichkeitsoperator \hat{W} und $\langle \Psi|g_n\rangle\langle g_n|\Psi\rangle$ der Erwartungswert des Wahrscheinlichkeitsoperators.

4.4 Die Unschärferelation

Gegeben seien drei hermitesche Operatoren $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$ und $\hat{C} = \hat{C}^\dagger$ mit $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Dies gilt beispielsweise für \hat{p} und \hat{x} ($[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar$). Wir behaupten nun:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle| \text{ mit } (\Delta A)^2 = \langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle^2 \text{ und } (\Delta B)^2 = \langle \Psi | \hat{B}^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle^2$$

Wir wollen dies beweisen. Dazu nehmen wir o.B.d.A. den Erwartungswert von \hat{A} als Null an:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = 0, \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle = 0$$

Ist dies nicht der Fall, so führt man folgende Transformation durch:

$$\hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{A} - \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

Dies macht man analog für \hat{B} . Dies läßt die Vertauschungsrelation unverändert:

$$\langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' - \hat{B}' \hat{A}' | \Psi \rangle = i \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle$$

Dazu zeigen wir:

$$\langle \Psi, \hat{B}' \hat{A}' \Psi \rangle = \langle \hat{B}' \Psi, \hat{A}' \Psi \rangle = \langle \hat{A}' \hat{B}' \Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, \hat{A}' \hat{B}' \Psi \rangle^*$$

Damit folgt:

$$\langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{B}' \hat{A}' | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{B}' \hat{A}' | \Psi \rangle^* = 2 \cdot \text{Im} \langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle$$

Wir quadrieren den letzten Ausdruck:

$$\begin{aligned} \left(\text{Im} \langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle \right)^2 &= \frac{1}{2^2} \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle^2 \\ \left(\text{Re} \langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle \right)^2 + \left(\text{Im} \langle \Psi | \hat{A}' \hat{B}' | \Psi \rangle \right)^2 &\geq \frac{1}{2^2} \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle^2 \end{aligned}$$

Es gilt die Schwarzsche Ungleichung:

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle$$

Damit erhalten wir:

$$\left| \underbrace{\langle \Psi | \hat{A}' | \Psi \rangle}_{|\alpha\rangle} \underbrace{\langle \Psi | \hat{B}' | \Psi \rangle}_{|\beta\rangle} \right|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle|^2 \text{ mit } |\alpha\rangle = \hat{A}' | \Psi \rangle$$

Wir vergrößern die linke Seite mittels der Schwarzschen Ungleichung:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle^2 \cdot \langle \beta | \beta \rangle^2 &\geq \frac{1}{4} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle|^2 \\ \langle \Psi | \hat{A}' | \Psi \rangle^2 \cdot \langle \Psi | \hat{B}' | \Psi \rangle^2 &\geq \frac{1}{4} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle|^2 \\ (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 &\geq \frac{1}{4} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle|^2 \end{aligned}$$

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle|} \arccos$$

Als Anwendung verwenden wir die Drehimpulsoperatoren:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

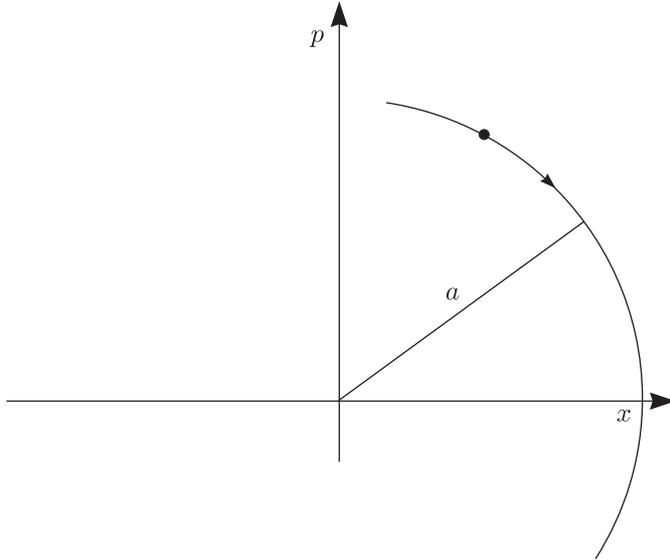
$$\Delta L_x \cdot \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle|^2$$

Für Ψ_{lm} mit $m = 0$ ergibt sich dann $\Delta L_x \cdot \Delta L_y \geq 0$. Beispielsweise gilt für Y_{00} , daß $\Delta L_x = \Delta L_y = 0$ ist.

4.5 Harmonischer Oszillator in algebraischer Behandlung

Wir erinnern uns an die klassische Physik:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \text{ mit } \{p, x\} = 1$$



Anstelle vom reellen x und p verwenden wir die komplexe Amplitude a .

$$x \leftrightarrow \operatorname{Re}(a), p \leftrightarrow \operatorname{Im}(a)$$

Wir definieren a :

$$a = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

Es handelt sich um eine dimensionslose komplexe Amplitude. Das \hbar wird an dieser Stelle eingeschmuggelt!

$$\hat{a}^* = \frac{m\omega x - ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

$$\{a, a^*\} = +i\hbar$$

In der Quantenmechanik erhalten wir hieraus dann:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Die freie Bewegung des harmonischen Oszillators läßt sich beschreiben als:

$$a(t) = |a_0| \exp(-i\omega t)$$

Nun zur Quantentheorie:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \text{ mit } [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

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

Durch Einsetzen von \hat{a} und \hat{a}^\dagger in den Hamilton-Operator erhalten wir:

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

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1$$

Also gilt:

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

Wir erinnern uns:

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

Wir untersuchen den Operator $\hat{A} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{A}^\dagger$ näher:

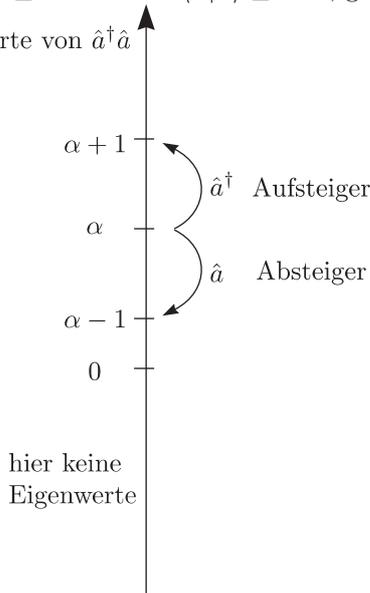
$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \text{ mit } \alpha \in \mathbb{R}$$

Wir wollen zeigen, daß $\alpha \geq 0$:

$$\underbrace{\langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle}_{\langle \beta | \beta \rangle} = \alpha \underbrace{\langle \alpha | \alpha \rangle}_1$$

Da $\langle \beta | \beta \rangle \geq 0$ und auch $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$ ist, gilt $\alpha \geq 0$.

Eigenwerte von $\hat{a}^\dagger \hat{a}$



Angenommen, es existieren $|\alpha\rangle$ Eigenzustände von \hat{A} , dann sind:

$$\left. \begin{aligned} \hat{a}^\dagger |\alpha\rangle &= \text{const.} |\alpha + 1\rangle \\ \hat{a} |\alpha\rangle &= \text{const.} |\alpha - 1\rangle \end{aligned} \right\} \text{ sind Eigenzustände von } \hat{A} \text{ mit Eigenwert } \begin{cases} \alpha + 1 \\ \alpha - 1 \end{cases}$$

$$\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a} |\alpha\rangle) = \alpha \hat{a}^\dagger |\alpha\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1)$$

$$(\hat{a}^\dagger \hat{a}) (\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle) - \hat{a}^\dagger |\alpha\rangle = \alpha \hat{a}^\dagger |\alpha\rangle = (\alpha + 1) (\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle)$$

$$(\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger$$

Betrachten wir weiterhin:

$$\hat{a}^N |\alpha\rangle = |\beta\rangle \text{ und } \langle \beta | \beta \rangle \geq 0$$

Für $N = 0$ gilt nach Voraussetzung $\langle \beta | \beta \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. Für $N = 1$ erhalten wir:

$$\langle \alpha | \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\alpha |\alpha\rangle} | \alpha \rangle = \alpha \underbrace{\langle \alpha | \alpha \rangle}_1 = \alpha \geq 0$$

Für $N = 2$ folgt:

$$\langle \alpha | \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1} \hat{a} | \alpha \rangle = \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger \hat{a}) (\hat{a}^\dagger \hat{a}) - (\hat{a}^\dagger \hat{a}) | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha^2 | \alpha \rangle = \alpha(\alpha - 1) \geq 0$$

$\langle \beta | \beta \rangle \geq 0 \forall N$ erfordert, daß α eine natürliche Zahl (einschließlich der Null ist), also gilt: $\alpha = 0, 1, 2, \dots$

* Grundzustand: $|0\rangle, \hat{a}|0\rangle = 0, \langle 0|0\rangle = 1$

$$* |1\rangle = \text{const.} \cdot \hat{a}^\dagger |0\rangle$$

$$* |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \text{ für } n = 0, 1, 2, \dots$$

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

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

Man kann mit den \hat{a}^\dagger , \hat{a} alles ausrechnen, was man mit den Wellenfunktionen ausrechnen kann. Wir berechnen das Matrixelement des Ortsoperators:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

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

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle m|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle m|\hat{a}|n\rangle + \langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\langle m|\sqrt{n}|n-1\rangle + \langle m|\sqrt{n+1}|n+1\rangle] = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n} \cdot \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}] = X_{m,n} \end{aligned}$$

Wir wollen die Ortswellenfunktion des Grundzustandes $\Psi_0(x) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ bestimmen. Wir starten von der Gleichung, welche den Grundzustand bestimmt:

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

$$m\omega\hat{x}|0\rangle + i\hat{p}|0\rangle = 0$$

$$\Psi_0(x) = \langle x|0\rangle, \hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

Wir projizieren diese Gleichung auf den Ortseigenzustand:

$$m\omega\langle x|\hat{x}|0\rangle + i\langle x|\hat{p}|0\rangle = 0$$

Dann gilt mit $\langle x|0\rangle = \Psi_0(x)$ und $\langle p|0\rangle = \Psi_0(p)$:

$$\text{a.) } m\omega x\langle x|0\rangle + i \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle \langle x'|0\rangle$$

$$\text{b.) } m\omega x\langle x|0\rangle + i \int dp \langle x|\hat{p}|p\rangle \langle p|0\rangle$$

$|p\rangle$ ist ein Impuls-Eigenzustand und $\langle x|p\rangle$ die Ortswellenfunktion des Impuls-Eigenzustandes, also $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ikx)$ mit $k = \frac{p}{\hbar}$. Es handelt sich um eine Fourier-Transformation:

$$m\omega x\Psi_0(x) + i \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\hat{p}} \Psi_0(x) = 0$$

$$\Psi_0'(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \cdot \Psi_0(x)$$

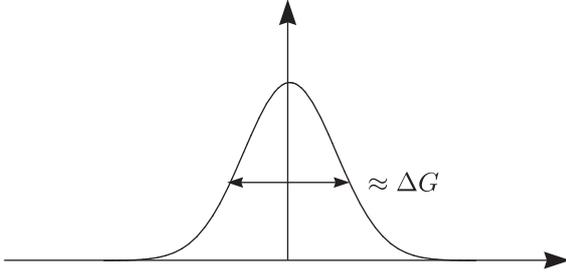
Durch Lösen dieser Differentialgleichung folgt:

$$\Psi_0(x) = \text{const.} \cdot \exp\left[-\frac{x^2}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\right] \text{ mit } \lambda^{-2} = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\Psi_m(x) = \left(m\omega\hat{x} - \hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Psi_0(x)$$

4.6 Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators (Glauber-Zustände, α -Zustände)

Wir betrachten ein Schrödingersches Wellenpaket:



$x_0, p_0 \mapsto x_0(t), p_0(t)$ nach klassischer Bewegung. Sowohl Δx als auch Δp sind zeitlich konstant.

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2} \hbar$$

Diese Zustände sind Eigenzustände des Absteigers \hat{a} :

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

- * \hat{a} ist nicht hermitesch.
- * Es existieren Eigenzustände.
- * α ist komplex (kontinuierlich).
- * $|\alpha\rangle$ ist aber normierbar.
- * $\langle x|\alpha\rangle$ entspricht der klassischen Bewegung des harmonischen Oszillators.

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$$

4.7 Drehimpuls-Eigenzustände

Wir notieren uns den Drehimpuls-Operator $\hat{I} = (\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z)$. Es gilt folgende Vertauschungsrelation:

$$[\hat{I}_x, \hat{I}_y] = i\hbar \hat{I}_z \text{ und zyklisch}$$

Da $[\hat{I}^2, \hat{I}_z] = 0$ ist, existiert ein gemeinsames System aus Eigenfunktionen.

$$\hat{I}^2 |\lambda, m\rangle = \hbar^2 \cdot \lambda |\lambda, m\rangle$$

$$\hat{I}_z |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle$$

Welche möglichen Werte nehmen λ und m an? Für den Bahndrehimpuls gilt:

$$\hat{I} = \hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen sind die $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit $l = 0, 1, 2, \dots$ und $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l$. Das Ergebnis ist dann:

$$\lambda = j(j+1), m = -j, (-j+1), \dots, +j$$

$$j = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots & \text{(Bahndrehimpuls+Eigendrehimpuls von Boson)} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} & \text{(Eigendrehimpuls von Fermionen (+Kombination))} \end{cases}$$

$$\lambda = j(j+1) \text{ mit } m = -j, -j+1, \dots, j$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

Es gibt für die Bruchzahlen kein klassisches Analogon.

4.8 Spin 1/2

Im Jargon bedeutet dies, daß die Eigenwerte von \hat{J}^2 $j = \frac{1}{2}$ und $m = \pm\frac{1}{2}$ sind. In Zukunft schreiben wir:

$$\hat{J}^2|j, j_z\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, j_z\rangle$$

$$\hat{J}_z|j, j_z\rangle = \hbar j_z|j, j_z\rangle$$

$j = \frac{1}{2}$ kommt nur als Eigendrehung vor (Spin \hat{S}). Die Eigenwerte lauten von \hat{S}^2 :

$$\hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4} \hbar^2$$

Zu \hat{S}_z lauten diese $\pm\frac{\hbar}{2}$. Wir definieren folgendes:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$$

Der entsprechende Eigenwert von $\hat{\sigma}^2$ lautet 3 und die zu $\hat{\sigma}_z$ sind ± 1 . Das System besitzt nur zwei unabhängige Basen. Wir stellen $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ und $\hat{\sigma}_z$ durch 2X2-Matrizen dar.

Die Matrix von $\hat{\sigma}_z$ ist nun so einzurichten, daß die Vertauschungsregeln für $\hat{\sigma}_z$, $\hat{\sigma}_y$ und $\hat{\sigma}_x$ erfüllt werden und des weiteren die Eigenwerte von $\hat{\sigma}_z = \pm 1$ sind.

$$\hat{\sigma}_z \hat{=} \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Wir wählen als Basis die Eigenzustände von σ_z . Da die Matrizen hermitesch sein sollen, müssen a_{11} , a_{22} reell sein und außerdem $a_{21} = a_{12}^*$ gelten. Dies gilt analog für b_{jk} .

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Vertauschungsrelation}} \begin{pmatrix} 0 & a \\ a^* & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Konvention } a=1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Vertauschungsrelation}} \begin{pmatrix} 0 & -ia \\ ia^* & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Konvention } a=1} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Diese Matrizen nennt man Pauli-Matrizen. Wir erkennen folgende Eigenschaften dieser Matrizen: Für die Eigenvektoren von σ_z gilt:

$$|\sigma_z = 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle \hat{=} \text{Spin up}$$

$$|\sigma_z = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle \hat{=} \text{Spin down}$$

* $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathcal{I}$, d.h. die Eigenwerte von $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ und $\hat{\sigma}_z$ sind gleich ± 1 .

* Antikommutator:

$$\sigma_x \cdot \sigma_y + \sigma_y \cdot \sigma_x = \mathcal{O}$$

Die Matrizen sind also antikommutativ.

* $\hat{\sigma}_x|\sigma_z = 1\rangle$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es findet ein sogenannter „Spinflip“ statt:

$$\hat{\sigma}_x|\uparrow_z\rangle = |\downarrow_z\rangle$$

$$\hat{\sigma}_x|\downarrow_z\rangle = |\uparrow_z\rangle$$

* $\hat{\sigma}_j$ ist für $j = x, y, z$ hermitesch und außerdem unitär mit $(\hat{\sigma}_x)^{-1} = \hat{\sigma}_x$.

* Spin in Richtung von $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ mit $\vec{n}^2 = 1$:

$$\hat{\sigma}_n = \vec{n} \cdot \hat{\vec{\sigma}} = n_x \hat{\sigma}_x + n_y \hat{\sigma}_y + n_z \hat{\sigma}_z$$

$$(\hat{\sigma}_n)^2 = \hat{1}$$

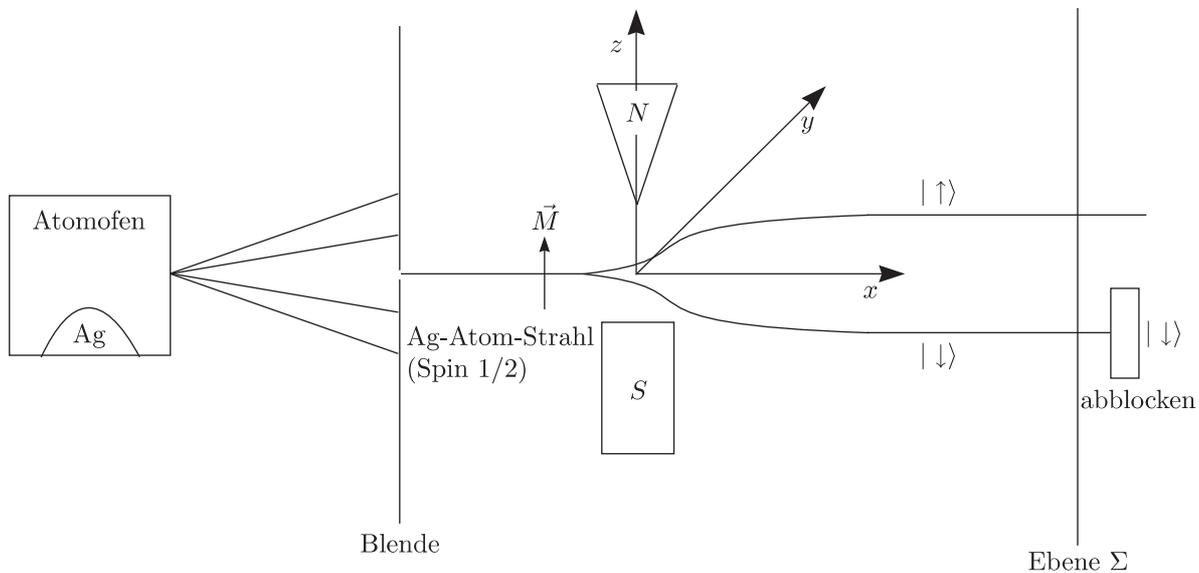
Die Eigenwerte von $\hat{\sigma}_n$ bezüglich jeder Richtung sind ± 1 .

$$\sqrt{\hat{1}} = \hat{A}, \hat{A}^2 = \hat{1}$$

Die Wurzel aus einem Operator („Betrag“) ergibt kontinuierlich viele Lösungen.

4.9 Beispiele zu Spin-1/2-Systemen

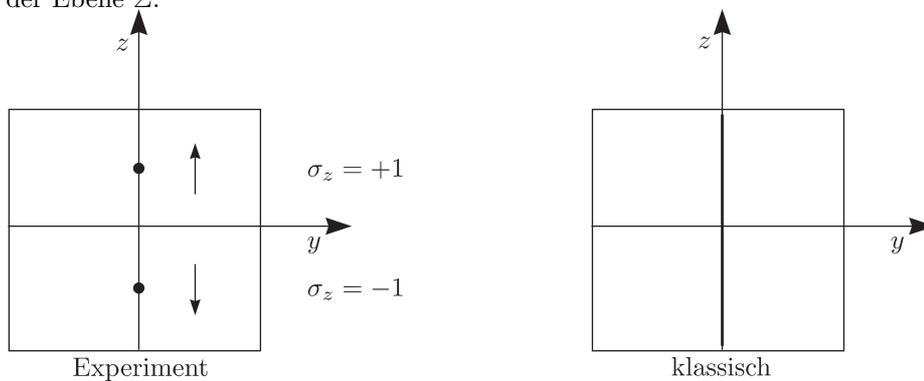
4.9.1 Stern-Gerlach-Experiment

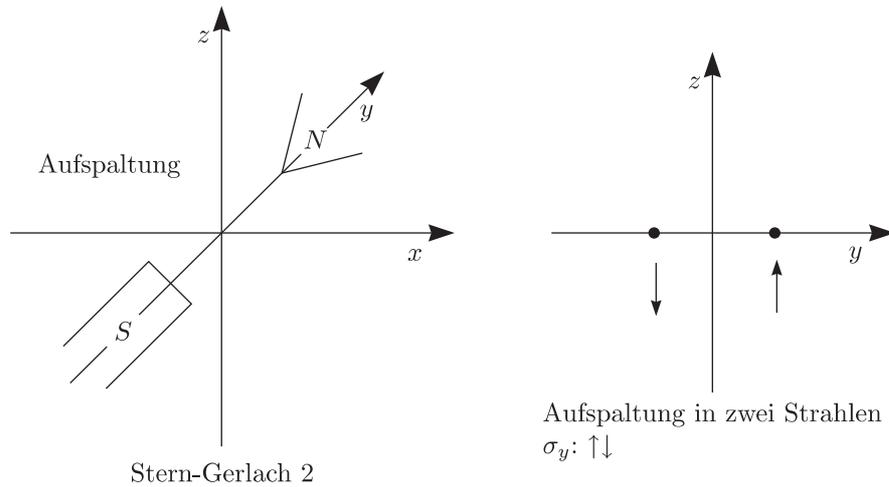


Das magnetische Moment des Spins 1/2 lautet:

$$\vec{M} = g \cdot \frac{Q}{2m} \cdot \vec{S}$$

Es gilt $g = 2$ für Elektronen, $g_P = 2,79$ für Protonen und $g_N = 1,7$ für Neutronen ($Q = 0$). Wir messen $\hat{\sigma}_z$ in der Ebene Σ :





Was messen wir im zweiten Stern-Gerlach-Versuch? Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Messung der Eigenwerte ± 1 von $\hat{\sigma}_y$ im Eigenzustand von $\hat{\sigma}_z$ zum Eigenwert $\sigma_z = +1$.

$$|\Psi\rangle = |\sigma_z = 1\rangle$$

$$W(\sigma_y = 1) = |\langle \sigma_y = 1 | \Psi \rangle|^2$$

$$W(\sigma_y = -1) = |\langle \sigma_y = -1 | \Psi \rangle|^2$$

Die Eigenzustände von $\hat{\sigma}_y$ lauten:

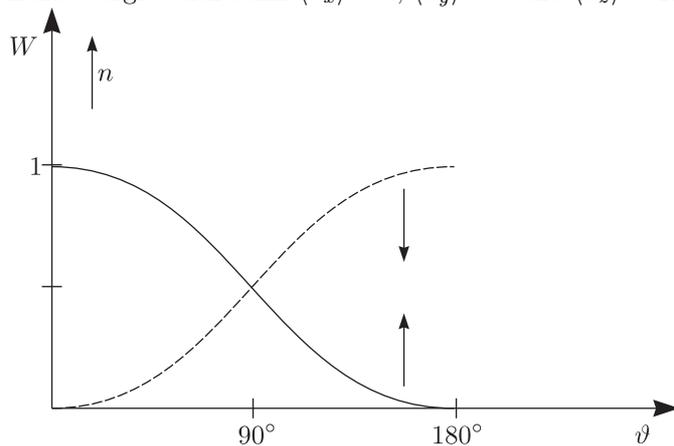
$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\sigma_y = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, |\sigma_y = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$W(\sigma_y = 1) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -i) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$W(\sigma_y = -1) = \frac{1}{2}$$

Daraus ergibt sich dann $\langle \hat{\sigma}_x \rangle = 0$, $\langle \hat{\sigma}_y \rangle = 0$ und $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = 1$. Der Winkel ϑ gegen die z -Achse lautet:



In welchem Zustand befindet sich der Ag-Spin nach Verlassen des Ofens? Ein Zustand wird beschrieben durch einen zweikomponentigen Vektor:

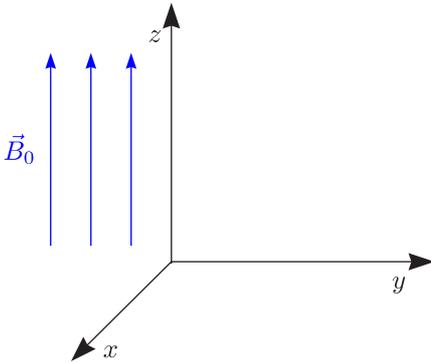
$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Der Spin muß sich in irgendeinem Zustand befinden; dieser ist mir nur unbekannt! Die Meßresultate sind, daß man $\sigma_n = \pm 1$ mit gleicher Häufigkeit finden für jede beliebige Orientierung \vec{n} . Es resultiert:

$$\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$$

Aber es muß sein:

$$\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2 = 1$$

4.10 Spin-Resonanz im zeitlich konstanten Magnetfeld \vec{B}_0


Das magnetische Moment \vec{M} berechnet sich nach:

$$\vec{M} = 2 \cdot \frac{Q}{2m} \cdot \vec{S} = \underbrace{\frac{e\hbar}{2m}}_{\mu_B} \cdot \vec{\sigma}$$

Es gilt $g = 2$ für den Spin $\frac{1}{2}$. Das Bohrsche Magneton berechnet sich nun nach (siehe oben):

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}} = 5,8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

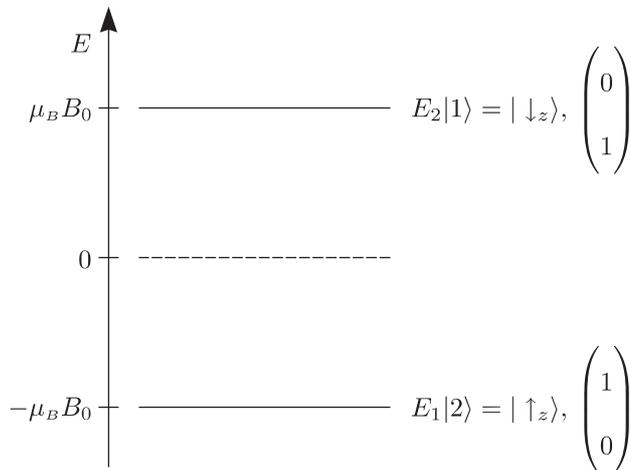
Der Hamilton-Operator lautet:

$$\hat{H} = -\hat{\vec{M}} \cdot \vec{B}_0 = \mu_B \cdot B_0 \cdot \hat{\sigma}_z, \quad \vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$$

Die Eigenzustände sind dann:

$$E_{1/2} = \mp \mu_B B_0$$

$$|\uparrow_z\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_z\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$



Ein beliebiger Zustand wird beschrieben durch:

$$|\Psi(0)\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = C_1 |\uparrow_z\rangle + C_2 |\downarrow_z\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = C_1 \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |\uparrow_z\rangle + C_2 \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) |\downarrow_z\rangle$$

Mit welcher Wahrscheinlichkeit mißt man Spin \uparrow, \downarrow bezüglich x, y, z -Richtung und Zeitabhängigkeit des Spin-Eigenwerts $\langle \Psi(t) | \hat{\sigma} | \Psi(t) \rangle = \vec{\sigma}(t)$?

$$W_{\hat{\sigma}_x}(\sigma_x = \pm 1) = |\langle \sigma_x = \pm 1 | \Psi(t) \rangle|^2 = \begin{cases} \cos^2\left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t\right) \\ \sin^2\left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t\right) \end{cases}$$

$$W_{\hat{\sigma}_y}(\sigma_y = \pm 1) = |\langle \sigma_y = \pm 1 | \Psi(t) \rangle|^2 = \begin{cases} \sin^2 \left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t - \frac{\pi}{4} \right) \\ \cos^2 \left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t - \frac{\pi}{4} \right) \end{cases}$$

Wir betrachten folgendes Beispiel:

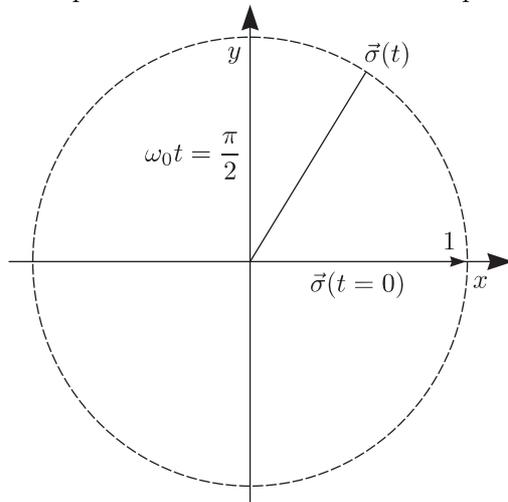
$$|\Psi(0)\rangle = |\hat{\sigma}_x = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |\sigma_y = \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

$$\langle \sigma_x \rangle = 1 \cdot \cos^2 \left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t \right) + (-1) \sin^2 \left(\frac{\mu_B B_0}{\hbar} t \right) = \cos \left[\underbrace{2 \frac{\mu_B B_0}{\hbar} t}_{\omega_0} \right]$$

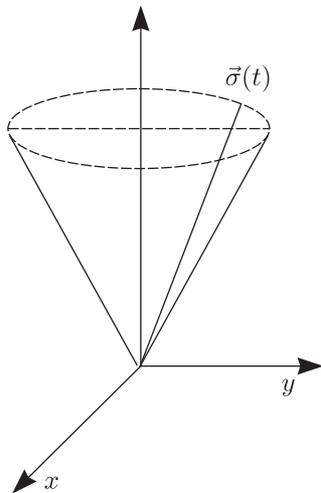
$$\langle \sigma_y \rangle = \sin(\omega_0 t)$$

$$\langle \sigma_z \rangle = 0$$

Der Spin-Vektor läuft mit der Kreisfrequenz ω_0 .



Für einen beliebigen Anfangszustand $|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ gilt:



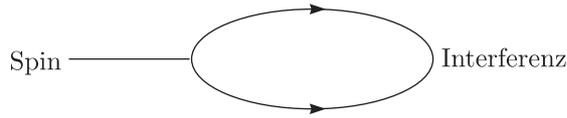
Man nennt diese Bewegung Larmor-Präzession. Die Larmor-Frequenz berechnet sich nach:

$$\omega_0 = 2 \frac{\mu_B B_0}{\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

- a.) Spin-Vektor nach einer Periode von $\langle \hat{\sigma} \rangle = \vec{\sigma}(t)$, d.h. nach Zeit T mit $2 \frac{\mu_B B_0}{\hbar} T = 2\pi$.

$$|\Psi(t)\rangle = C_1 \exp(i\pi) |\uparrow_z\rangle + C_2 \exp(-i\pi) |\downarrow_z\rangle \neq -|\Psi(0)\rangle$$

Eine Drehung des Koordinatensystems von π reproduziert somit NICHT den Spin-Zustand.



4.11 g-2-Experiment

Nach der relativistischen Dirac-Gleichung gilt $g = 2$. Experimentell gilt jedoch:

$$a = \frac{g-2}{2} = 0,001\,159\,637\,7\dots = \frac{\alpha}{2\pi} + \dots$$

α ist hierbei die Feinstruktur-Konstante, für die gilt:

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$$

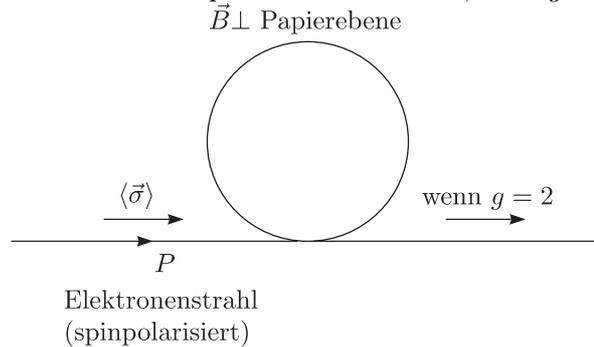
* Zyklotron-Frequenz:

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e}$$

* Spin-Präzessions-Frequenz:

$$\omega_s = g \frac{eB}{2m}$$

Diese beiden Frequenzen sind identisch, wenn $g = 2$ ist. Dabei gibt es folgendes raffiniertes Experiment:



Mittels der Zahl der Umläufe und der Winkeldifferenz zwischen Flugrichtung und Spin erhält man $g = 2$. Woher kommt $g = 2$? Feynman (Sakran, Seite 78) beschreibt dies folgendermaßen:

Die Energie eines freien Elektrons ist unabhängig vom Spin!

$$\begin{array}{ccc} \frac{\vec{p}^2}{2m} & \xrightarrow{\text{mit Spin } (B=0)} & \frac{1}{2m} (\vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \\ \downarrow \text{mit } B \text{ (ohne Spin)} & & \downarrow B=0 \\ \frac{1}{2m} (\vec{p} - Q\vec{A})^2 & & \frac{1}{2m} [(\vec{p} - Q\vec{A}) \cdot \vec{\sigma}]^2 \end{array}$$

\vec{p} und $\vec{\sigma}$ sind Vektoren und \vec{p}^2 , $\vec{\sigma}^2 = \epsilon$ und $\vec{p} \cdot \vec{\sigma}$ sind Invarianten.

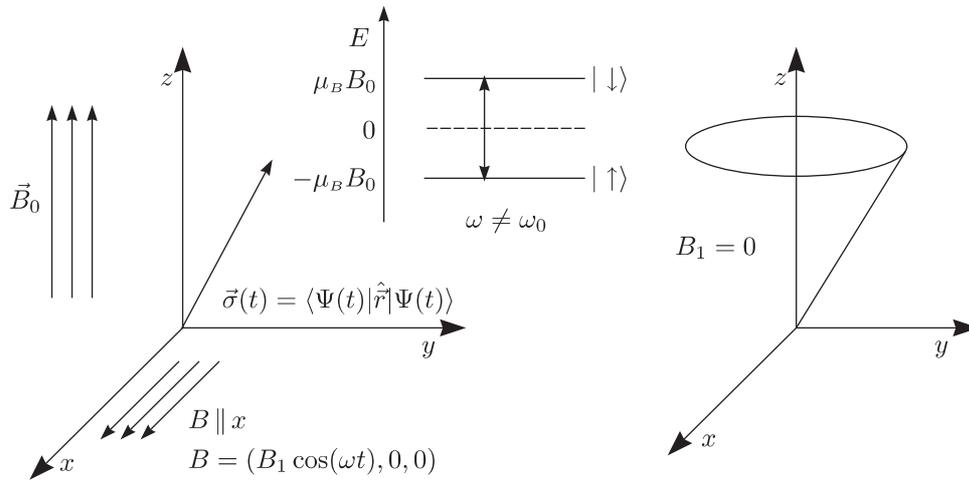
$$[(p_x - QA_x) \hat{\sigma}_x + \dots] [(p_x - QA_x) \hat{\sigma}_x \dots]$$

$\hat{\sigma}_i$ und \hat{p}_j vertauschen:

$$[\hat{p}_x, F] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x}$$

$$H = \frac{(\vec{p} - Q\vec{A})^2}{2m} - 2 \frac{Q \cdot \vec{S}}{2m} \cdot \vec{B}$$

4.12 Spin-Resonanz



* 1.Weg:

$$|\Psi(t)\rangle = C_1(t) \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right) |\uparrow_z\rangle + C_2(t) \exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right) |\downarrow_z\rangle$$

Basiszustand, $C_1(t)$ und $C_2(t)$ beschreiben die zeitabhängige Störung. Wir haben 2 lineare, gekoppelte Differentialgleichungen 1.Ordnung.

* 2.Weg:

Stelle Gleichungen für $\sigma_x(t) = \langle\Psi(t)|\hat{\sigma}_x|\Psi(t)\rangle$ etc. auf und löse diese OHNE $|\Psi(t)\rangle$, d.h. $C_1(t)$, $C_2(t)$ zu benutzen.

Der Hamilton-Operator lautet:

$$\hat{H} = \hat{M} \cdot \vec{B} = -\mu_B B_0 \cdot \hat{\sigma}_z - \mu_B B_1 \cos(\omega t) \hat{\sigma}_x$$

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\frac{d}{dt} \overbrace{\langle\Psi(t)|\hat{\sigma}_x|\Psi(t)\rangle}^{\sigma_x(t)} = \left\langle\Psi(t)\left|\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x]\right|\Psi(t)\right\rangle$$

Wir werten zuvor den Kommutator aus:

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x] = \frac{i}{\hbar} (-\mu_B B_0) \underbrace{[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x]}_{2\hat{\sigma}_y} + \frac{i}{\hbar} (-\mu_B B_1 \cos(\omega t)) [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_x]$$

Man erhält somit ein System aus Differentialgleichungen:

$$\frac{d}{dt} \sigma_x(t) = \omega_0 \sigma_y(t)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_y(t) = -\omega_0 \sigma_x(t) + \omega_R \cos(\omega t) \sigma_z(t)$$

$$\frac{d}{dt} \sigma_z(t) = -\omega_R \cos(\omega t) \sigma_y(t)$$

Man nennt den Ausdruck $\omega_R = 2\mu_B B_1$ die Rabi-Frequenz und ω_0 die Bloch-Frequenz. Anstelle eines linear polarisierten Feldes $\parallel x$ lege der Experimentalphysiker ein Drehfeld an:

$$\vec{B}_w = (B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), 0)$$

Damit erhalten wir:

$$\frac{d}{dt} \sigma_x(t) = \omega_0 \sigma_y(t) + \omega_R \sin(\omega t) \cdot \sigma_z(t)$$

$$\frac{d}{dt}\sigma_y(t) = -\omega_0\sigma_x(t) + \omega_R \cos(\omega t)\sigma_z(t)$$

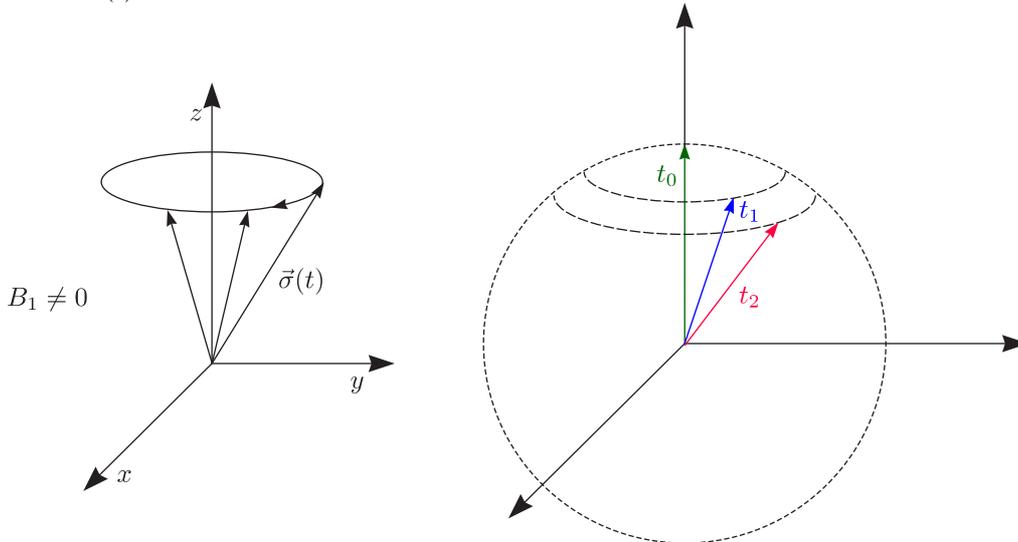
$$\frac{d}{dt}\sigma_z(t) = \omega_R \sin(\omega t)\sigma_x(t) - \omega_R \cos(\omega t)\sigma_y(t)$$

Dieses können wir in Form eines Kreuzproduktes schreiben:

$$\frac{d}{dt}\vec{\sigma}(t) = \vec{\Omega}(t) \times \vec{\sigma}(t)$$

$$\vec{\Omega} = \vec{\Omega}_0 + \vec{\Omega}_1(t) \text{ mit } \vec{\Omega}_0 = (0, 0, -\omega_0) \text{ und } \vec{\Omega}_1 = (-\omega_R \cos(\omega t), \omega_R \sin(\omega t), 0)$$

Durch $\vec{\Omega}(t)$ wird die momentane Drehachse beschrieben.



Wir haben eine Resonanz bei $\omega = \omega_0$. Das „Umkippen“ des Spins nennt man Rabi-„Flopping“.

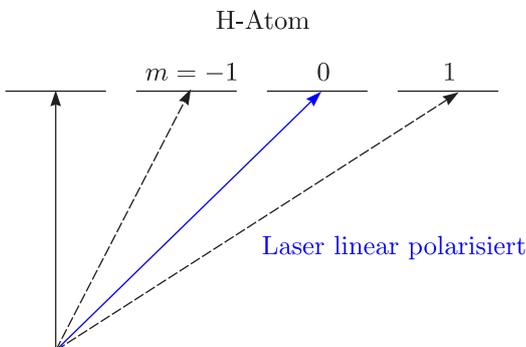
$$|\Psi(t)\rangle = |\sigma_z = 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dies ist stationär für $B_1 = 0$. Daraus folgt dann:

$$\begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$$

Die Bewegung des Spin-Vektors setzt sich aus zwei Anteilen zusammen:

- * „Schnelle“ Bewegung um z (Larmor)
- * Langsame Bewegung (wenn $\omega_R \ll \omega_0$) (Rabi-Oszillation)



Es ergibt sich eine Aufspaltung durch „Pseudo-Magnetfeld“ (beide Zustände $\hat{=}$ $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$).

- 1.) Jedes nahezu resonant erregte System läßt sich als Zwei-Niveau-System beschreiben.
- 2.) Jedes Zwei-Niveau-System ist äquivalent Spin $\frac{1}{2}$ im Magnetfeld

Ein rotierendes System (mit dem Drehfeld) wird beschrieben durch:

$$\left. \begin{aligned} R_1 &= \sigma_x(t) \cos(\omega t) - \sigma_y(t) \sin(\omega t) \\ R_2 &= \sigma_x \sin(\omega t) + \sigma_y \cos(\omega t) \\ R_3 &= \sigma_z(t) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \dot{R}_1 &= -(\omega - \omega_0)R_2 \\ \dot{R}_2 &= (\omega - \omega_0)R_1 + \omega_R R_3 \\ \dot{R}_3 &= -\omega_R R_2 \end{aligned}$$

4.13 Störungsrechnung und Anwendungen

Es gibt folgende Näherungsverfahren in der Quantenmechanik:

- a.) Quantenmechanisch-Klassische Näherung
Stationär=Klassische Physik, Reihe nach \hbar
- b.) Schranken für Energien
 $s < E_0 < S$
- c.) Störungsreihe

Die Störungsrechnung nach Schrödinger lautet:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$$

* Eigenzustand von \hat{H}_0 bekannt

$$\hat{H}_0 |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(0)}$$

* λ sei kleiner Parameter
 $\lambda \hat{v}$ ist der Störoperator.

Die Störungsreihe lautet:

$$|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + \lambda |n\rangle^{(1)} + \dots$$

$$E_n = E_0^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots$$

Die Korrekturen erster und zweiter Ordnung sind rekursiv.

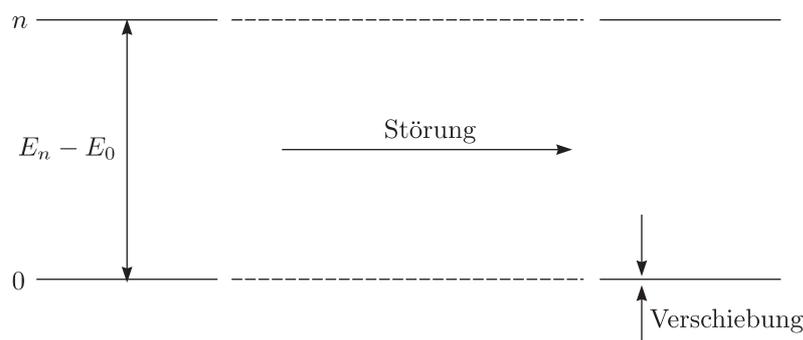
$$\lambda E_n^{(1)} = {}^{(0)}\langle n | \lambda \hat{V} | n \rangle^{(0)}$$

Die Korrektur erster Ordnung ist also gerade durch den Erwartungswert von $\lambda \hat{V}$, also des Störoperators gegeben.

$$\Psi_n^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^{(0)}(\vec{r})$$

Man nimmt als Basis die bekannten Wellenfunktionen $\Psi_{n'}^{(0)}$. Die Energiekorrektur zweiter Ordnung lautet:

$$\lambda E_n^{(2)} = \sum_{n'} \frac{|{}^{(0)}\langle n' | \lambda \hat{V} | n \rangle^{(0)}|^2}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \text{ mit } n' \neq n$$



4.13.1 Stark-Effekt beim Wasserstoff-Atom

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + (-e)\phi(\vec{r})$$

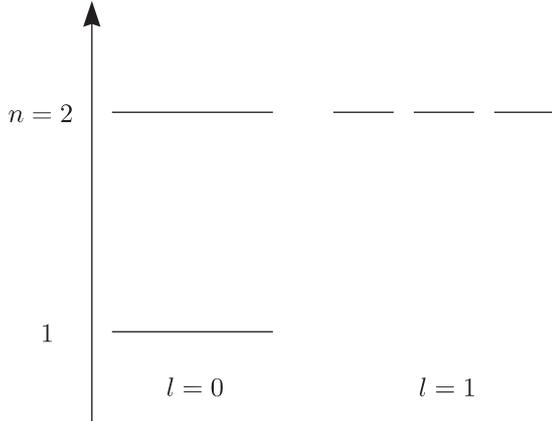
Das elektrische Potential für $\vec{E} = (0, 0, E_0)$ lautet:

$$\phi) = E_0 z$$

$$\lambda \hat{V} \hat{=} E_0 \cdot e \cdot z$$

E_0 sei hierbei der Stör-Parameter. Der Grundzustand wird beschrieben durch:

$$|n = 1, l = 0, m = 0\rangle \hat{=} \Psi_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r) \cdot Y_{00}(\vartheta, \varphi)$$



$$E_1^{(0)} = -R_y$$

Für die Korrektur erster Ordnung gilt nun:

$$\lambda E_n^{(1)} \hat{=} \langle 1, 0, 0 | eE_0 z | 1, 0, 0 \rangle^{(0)} = eE_0 \cdot \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle^{(0)}$$

$$\langle 100 | z | 100 \rangle = \iiint \Psi_{1m}^*(\vec{r}) \cdot z \cdot \Psi_{100}(\vec{r}) d^3r = \iiint \underbrace{|\Psi_{110}(\vec{r})|^2}_{\text{gerade}} \cdot z d^3r = 0$$

(Siehe auch Auswahlregeln für Dipolstrahlung) Wir berechnen die Korrektur 2.Ordnung:

$$\lambda E_n^{(2)} \hat{=} \sum \frac{|\langle n'l'm' | eE_z z | 100 \rangle^{(0)}|^2}{E_1^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \text{ für } n' = 2, 3 \text{ und } l' = 1 \text{ und } m' = 0$$

Hier kommen sowohl die gebundenen als auch die Streuzustände vor. Beispielsweise berechnen wir $\langle 210 | z | 100 \rangle \sim a_B$.

* 0.Ordnung:

$$C_m^0(t) = \delta_{m,0}$$

* 1.Ordnung:

$$C_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle m | \hat{V} | 0 \rangle \cdot \int_{t_0}^t \exp \left[i \frac{E_m - E_0 - \hbar\omega}{\hbar} t' \right] dt'$$

$$|C_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle m | \hat{V} | 0 \rangle|^2 \cdot \left[\frac{\sin \left[\frac{\omega_{m0} - \omega}{2} t \right]}{\frac{\omega_{m0} - \omega}{2} t} \right]^2 \cdot t^2 + \text{Anteil von } \exp(+i\omega t) \sim t \text{ für große } t$$

$$\omega_m = \omega_{m0} = \frac{E_m - E_0}{\hbar}$$

$$\left[\frac{\sin(\alpha t)}{\alpha} \right]^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi \cdot t \delta(\alpha)$$

Der Anteil zu $\omega \mapsto -\omega$ ist nicht relevant. Mit $t \mapsto \infty$ ist $|C_m(t)|^2 \sim t$.

An dieser Stelle wollen wir eine Rate definieren:

$$\Gamma_{0 \rightarrow m} = \frac{d|C_m(t)|^2}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m | \hat{V} | 0 \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 - \hbar\omega)$$

Man nennt diese auch Fermis Goldene Regel zur Berechnung der Übergangsintegrale. Die exakte Wellenfunktion lautet:

$$|\Psi_{sfr}\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{N_0}} \left[\exp(ikz) + f(\vartheta, E) \underbrace{\frac{\exp(ikr)}{r}}_{\text{Kugelwelle}} \right]$$

$$\langle \vec{k}' | V(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V_0} \iiint V(\vec{r}) \exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}] d^3r$$

Es handelt sich hierbei (bis aus den Vorfaktor) um die Fourier-Transformierte von $V(r)$: $\tilde{V}(\vec{q})$ mit dem Impuls-Übertrag $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. Die Übergänge pro Sekunde berechnen sich nach:

$$F_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{1}{V_0} \tilde{V}(\vec{q}) \right|^2 \underbrace{\delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'})}_{\substack{\text{Energiesatz,} \\ \text{elastisch}}}$$

Die Summe der in $d\Omega$ gestreuten Teilchen ist dann:

$$\sum_{k'} \Gamma_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} \text{ mit } k' \in d\Omega$$

Wir rechnen ein Beispiel mit der δ -Funktion:

$$V(\vec{r}) = a\delta(\vec{r}) \mapsto V(\vec{q}) = a, \frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{const.}$$

4.13.2 Frequenzabhängige Polarisierbarkeit eines Atoms

$$W(t) = e \cdot x \cdot E_0 \cos(\omega t) = \frac{e}{2} \cdot x \cdot \exp(-i\omega t) + \frac{e}{2} \cdot E_0 \cdot x \cdot \exp(+i\omega t)$$

$$|\Psi(t)\rangle = 1 \cdot \exp\left(-i\frac{E_0}{\hbar}t\right) |0\rangle + \sum_{m \geq 1} C_m^{(1)}(t) \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) |m\rangle$$

Mittels des elektrischen Dipolmoments $\hat{d} = -e\hat{x}$ erhalten wir dann:

$$\langle \Psi(t) | \hat{d} | \Psi(t) \rangle = \langle 0 | \hat{d} | 0 \rangle + \sum_m \left[C_m(t) \exp(-i\omega_m t) \langle 0 | \hat{d} | m \rangle + \text{Konjugiert komplexer Anteil} \right] \text{ mit } \omega_m = \frac{E_m - E_0}{\hbar}$$

$$C_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle m | \frac{e}{2} E_0 x | 0 \rangle \int_{-\infty}^t \exp[i(\omega_m - \omega)t'] dt'$$

Bei Störung wird adiabatisch eingeschaltet, um das Nicht-Abklingen der „homogenen Lösung“ auszuschalten.

$\xi(t) = \xi_0 \cos(\omega t) \exp(\delta t)$ für $\delta \mapsto +0$ am Ende aller Rechnungen

$$\int_{-\infty}^t = \frac{1}{i(\omega_m - \omega) + \delta} \exp[i(\omega_m - \omega)t] \exp(\delta t) \Big|_{-\infty}^t = \frac{i}{\underbrace{(\omega + i\delta) - \omega_m}_{\text{Resonanz-Nenner}}} \exp[i(\omega_m - \omega)t] \exp(\delta t)$$

$d(t)$ ist reell:

$$d(t) = \underbrace{\sum_{m \geq 1} |\langle m | e \cdot x | 0 \rangle|^2 \cdot \left[\frac{1}{E_m - E_0 - \hbar(\omega + i\delta)} + \frac{1}{E_m - E_0 + \hbar(\omega + i\delta)} \right]}_{\text{Komplexe Polarisierbarkeit } d(\omega)} \cdot \underbrace{\xi_0 \cdot \exp(-i\omega t) \exp(\delta t)}_{\text{Komplexes angelegtes Feld}}$$