

Quantenmechanik 1

gelesen von Prof. Carsten Honerkamp
L^AT_EX von Wolfgang Bauer
nicht korrekturgelesen

30. Oktober 2008

Inhaltsverzeichnis

1 Anfänge der Quantenmechanik	7
1.1 Planck'sches Gesetz, Hohlraumstrahlung und Photonen	7
1.2 Quantisierte Spektren von Atomen, Bohr'sches Modell	8
1.3 De Broglie's Hypothese und Schrödinger	9
2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung	11
2.1 Doppelspalt und Wahrscheinlichkeitsinterpretation	11
2.2 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen	11
2.3 Superposition ebener Wellen	12
2.4 Wellenpakete (Lösungen mit nichtkonstantem $ \Psi ^2$)	14
2.5 Impulsverteilung	15
2.6 Operatoren, Skalarprodukt, etc	16
2.7 Korrespondenzprinzip, allg. Schrödingergleichung und erste Postulate der QM	17
2.8 Ehrenfest'sche Theorem	17
2.9 Kontinuitätsgleichung	18
2.10 Stationäre Zustände und Eigenwertgleichungen	18
2.11 Messung von quantenmechanischen Observablen	19
3 Eindimensionale Probleme	21
3.1 Harmonischer Oszillator	21
3.2 Stückweise konstante Potentiale	23
3.3 Potentialschwelle	25
3.4 Potentialtopf	26
3.5 Resonanzen am Potentialtopf	29
4 Weitere Elemente Der Quantentheorie	31
4.1 Unschärfe-Relation	31
4.2 Dirac-Notation	33
5 Bahndrehimpuls	35
5.1 Drehung	35
5.2 Eigenwerte des Drehimpuls	35
5.3 Drehimpulseigenfunktionen in Ortsdarstellung	36
6 Zentralpotential	39
6.1 Kugelkoordinaten	39
6.2 Radialgleichung	39
7 Kopplung an elektromagnetisches Feld	41
7.1 Hamilton-Operator	41
7.2 Konstantes Magnetfeld	41
7.3 Normaler Zeeman-Effekt	42
7.4 Eichtransformationen	43
7.5 Aharonov-Bohm-Effekt	44
8 Spin	47
8.1 Stern-Gerlach-Experiment	47
8.2 Formale Beschreibung von Spin $\frac{1}{2}$	48
8.3 Allgemeine Spinzustände und Spinoren	49

8.4	Magnetischer Moment des Spins	49
8.5	Spin- und Bahnzustände	49
9	Drehimpulsaddition	53
9.1	2 Spin $\frac{1}{2}$	53
9.2	Allgemeiner Fall	54
10	Näherungsmethoden für stationäre Zustände	57
10.1	Zeitunabhängige Störungstheorie (Rayleigh-Schrödinger)	57
10.1.1	Stark-Effekt	58
10.1.2	Bsp: Relativistische Korrekturen	60
10.2	Variationsprinzip	60
10.2.1	Bsp: Heliumartige Atome	60
11	Zeitabhängige Störungstheorie	63
11.1	Zeitentwicklungsbilder	63
11.1.1	Schrödinger-Bild	63
11.1.2	Heisenberg-Bild	63
11.1.3	Wechselwirkungs-/Dirac-Bild	64
11.2	Störungsentwicklung	64
11.3	Pulsförmige Störung	66
11.4	Adiabatisches Einschalten	66
11.5	Oszillierende Störung	68
12	Pfadintegral	71

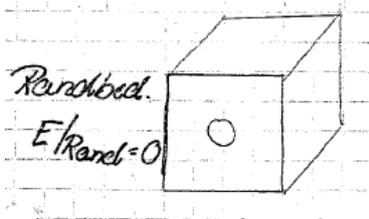
Literaturhinweise

Schwabl
Nolting
Böhm-Reents-Skript

Inhaltsverzeichnis

1 Anfänge der Quantenmechanik

1.1 Planck'sches Gesetz, Hohlraumstrahlung und Photonen



Hohlraum, Wände stehen im thermischen Gleichgewicht mit Strahlungsfeld im Inneren
 Lösungen der Wellengleichung im Inneren

$$E(x, y, z) = E_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

$$\sin(k_x x) = 0 \text{ bei } x = 0, x = L \Rightarrow k_x = n_x \frac{\pi}{L}$$

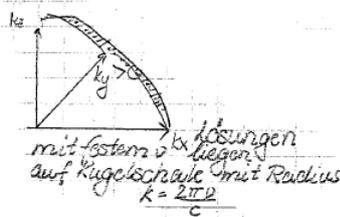
analog: $k_y = n_y \frac{\pi}{L}$ und $k_z = n_z \frac{\pi}{L}$

$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$ 2 Polarisationen $\vec{E}_{0,1} \perp \vec{E}_{0,2}$

$$\omega = ck, \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$$

$$\nu = \frac{c|\vec{k}|}{2\pi} \text{ Dispersionsbeziehung}$$

Zustände in $\frac{1}{8}$ Kugelschale mit Dichte $dk \frac{1}{8} \cdot 2 \cdot 4\pi \cdot (k = \frac{2\pi\nu}{c})^2 dk / (\frac{\pi}{L})^3$



$D(\nu)d\nu = \# \text{ Zustände in } \frac{1}{8} \text{ Kugelschale mit Dicke } d\nu. \text{ Schreibe nun } dk = d\nu \cdot \frac{2\pi}{c}$

→ Modendichte pro $d\nu$

$D_\nu(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \cdot L^3 d\nu$ für den gesamten Hohlraum

$$D(\nu)d\nu = \underbrace{2}_{\text{Polarisationen}} \cdot \underbrace{\frac{4\pi}{8} \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2}_{\frac{1}{8} \text{ Kugeloberfläche}} \cdot \underbrace{\frac{d\nu}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3}}_{\text{diskrete } \vec{k} \text{ Werte}}$$

$$\rightarrow \frac{D(\nu)}{L^3} = 8\pi^2 \frac{\nu^2}{c^3}$$

Modenzahl

$$D(\nu) = 2 \cdot \frac{1}{8} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \int d^3k \delta\left(\frac{ck}{2\pi} - \nu\right) \quad (1.1)$$

$$= \frac{1}{4} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 4\pi \int dk k^2 \delta\left(\frac{ck}{2\pi} - \nu\right) \quad (1.2)$$

$$= \frac{1}{4} \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 4\pi \int dk \frac{2\pi}{c} \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \delta\left(k - \frac{2\pi\nu}{c}\right) \quad (1.3)$$

1 Anfänge der Quantenmechanik

(Wegen $\delta(f(x)) = \frac{1}{f'(x)}\delta(x)$)

Energiedichte? klassisch (Rayleigh): Jede Mode trägt $\frac{k_B T}{2}$

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{k_B T}{2}$$

\Rightarrow Gesamtenergiedichte $u = \int_0^\infty d\nu U(\nu) \propto \int_0^\infty d\nu \nu^2$

“Ultraviolett-Katastrophe”

Experimentell: Wien $u(\nu) \propto \nu^3 e^{-\frac{\gamma\nu}{T}}$

Planck findet Formel (1900):

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Grundlegende Annahme darin ist, dass Strahlungsenergie nur in Paketen (“Quanten”) $h\nu$ abgegeben wird.

Annahme: $h\nu \ll k_B T, e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1 \approx \frac{h\nu}{k_B T} \Rightarrow u(\nu) \propto \nu^2 k_B T$

Annahme: $h\nu \gg k_B T \Rightarrow u(\nu) \propto \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}$

Planck'sche Konstante (Planck'sches Wirkungsquantum): $h \approx 6,6261 \cdot 10^{-34} Js$

bzw. $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,0546 \cdot 10^{-34} Js \approx 6,5821 \cdot 10^{-22} MeVs$

Quantenphänomen: Quantisierung von Energie

Einstein 1905:

Leitet Planck'sche Formel aus Boltzmannstatistik und Lichtquantenannahme her. Die Lichtquantenannahme sagt, dass Licht selbst aus Quanten der Energie $h\nu = \hbar\omega$ besteht.

1.2 Quantisierte Spektren von Atomen, Bohr'sches Modell

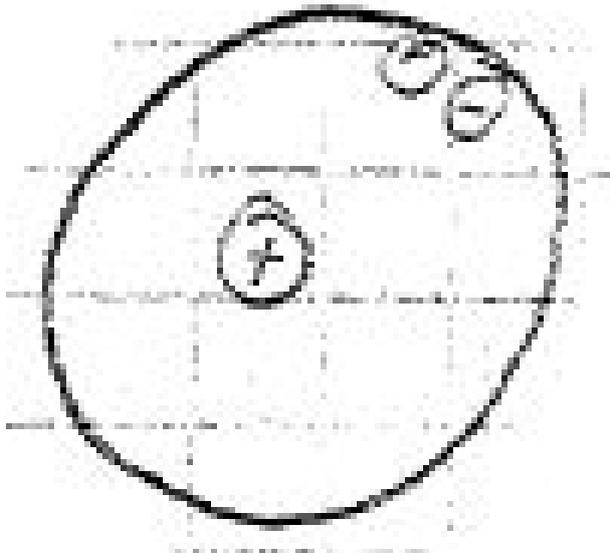
1885 Emissions- und Absorptionslinien ν_{n-m} von Atom sind Differenzen von Spektraltermen A_n

$$\nu_{n,m} = A_n - A_m \quad m, n \in \mathbb{N}$$

Wasserstoff: Balmer-Serie $A_n = \frac{k}{n^2}$

1908 (Geiger, Marsden, Rutherford): Atome bestehen aus sehr kleinen, positiv geladenen Kernen und deren gebundene Elektronen. Dies ergab die folgenden Fragen:

- Warum stürzt das Elektron nicht in den Kern?
- Warum ist die dabei entstehende Abstrahlung diskret?

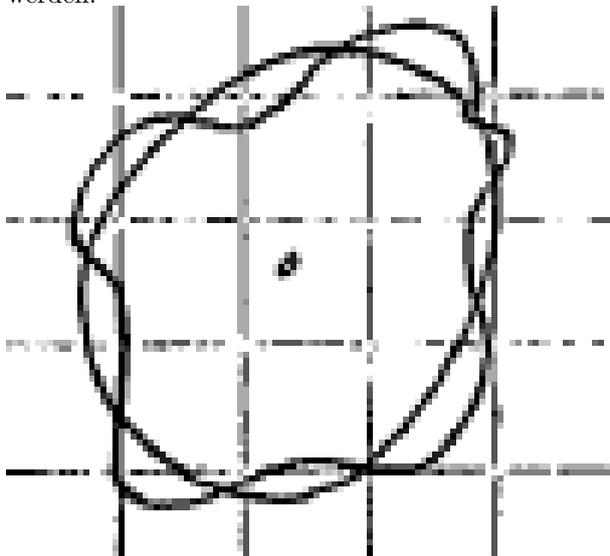


Bohr hat 1913 folgendes Atommodell aufgestellt:

Elektronen bewegen sich ohne Abstrahlung auf Bahnen, die der Quantisierungsbedingung $\oint_{\text{Bahn}} d\vec{r}$
 $\vec{p} = \underbrace{n}_{\in \mathbb{N}} h$ genügen (durch Impulsquantisierung). Bohr erhielt so das Wasserstoffspektrum $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$, $E_0 =$
 $\frac{2\pi^2 m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2}$

1.3 De Broglie's Hypothese und Schrödinger

Systematischer Zusammenhang zwischen Teilchen und Wellencharakter: Jedes Teilchen mit Impuls \vec{p} hat Wellenvektor $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{h}$ $\lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow$ Bahnen der Elektronen um Atomkern können als stehende Wellen erklärt werden:



Schrödinger griff Wellengedanken auf und suchte nach Wellengleichungen, die z.B. die atomaren Spektren erklären konnten.

1927: Davisson und Germer verifizieren de Broglie's Hypothese.

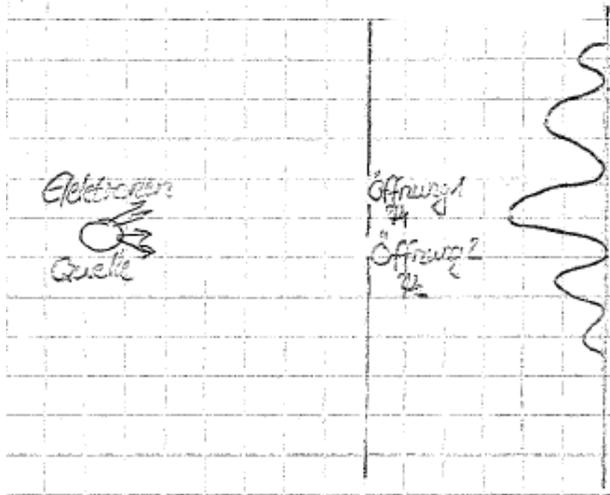
2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

2.1 Doppelspalt und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Sei $\Psi(\vec{x}, t)$ die Welle, die ein freies Elektron mit Impuls \vec{p} und Energie E beschreibt. Nach der Broglie ist $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ und $E = \hbar\omega$

$$\Rightarrow \Psi(\vec{x}, t) = C \cdot e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

Betrachte Doppelspaltexperiment:



Sei $\rho_{\Psi_1 + \Psi_2}(\vec{x}) = |\Psi_1(\vec{x}) + \Psi_2(\vec{x})|^2 = |\Psi_1(\vec{x})|^2 + |\Psi_2(\vec{x})|^2 + 2\text{Re}(\Psi_1\Psi_2^*)$

Wir stellen fest:

- $\rho_{\Psi_1 + \Psi_2}$ ist nicht Summe von $\rho_{\Psi_1} = |\Psi_1|^2$ und $\rho_{\Psi_2} = |\Psi_2|^2$
- Es gibt Interferenzterm $2\text{Re}(\Psi_1\Psi_2^*)$

Die experimentelle Verteilung bestätigt dies! (Quantenphänomen Interferenz)

Qualitative Übereinstimmung zwischen Wellenansatz und Experiment legt folgende Hypothese nahe (Born): Betragsquadrat $|\Psi(\vec{x})|^2$ gibt Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons an. Bemerkung $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$ ist nicht Ladungsverteilung, aber gibt Wahrscheinlichkeit an, die Ladung e bei \vec{x} zum Zeitpunkt t zu finden.

Quantenphänomen der Unbestimmtheit:

Schließt man Spalt 2, um sicherzustellen, dass das Elektron durch Spalt 1 geht, verändert man $\rho(\vec{x})$ gravierend. "Das Elektron geht durch beide Spalte."

2.2 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Folgende Forderungen an partielle Differentialgleichung für Materiewellen:

1. DGL von erster Ordnung in t , d.h. $\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \dot{\Psi} \Rightarrow$ Zeitentwicklung ist für $t > t_0$ durch $\Psi(\vec{x}, t_0)$ festgelegt.
2. linear in Ψ : Superpositionsprinzip (wie in der ED) \Rightarrow Interferenzeffekte
3. homogen in Ψ , d.h. keine Quellterme, $\frac{\partial}{\partial t}\Psi \neq A \Rightarrow$ Gesamtwahrscheinlichkeit $\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2$ zeitlich konstant

2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

4. Ebene Wellen $\Psi(\vec{x}, t) = C \cdot e^{i(\vec{p}\vec{x} - E(\vec{p}, t)/\hbar)}$ sollen Lösungen sein $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -i \frac{E(\vec{p}, t)}{\hbar} \Psi(\vec{x}, t)$, $E(\vec{p}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, d.h. $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{x}, t)$ bzw.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi(\vec{x}, t)$$

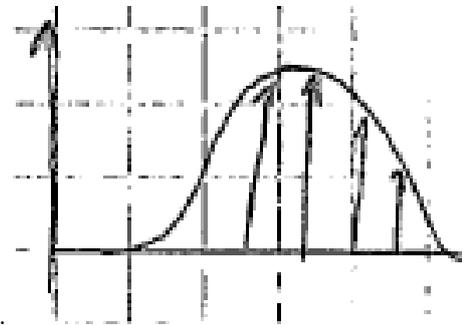
(freie Schrödingergleichung)

Bohr: $\oint d\vec{r} \cdot \vec{p} = nh$, $n \in \mathbb{N} \rightarrow$ Drehimpulsquantisierung $n\hbar$

2.3 Superposition ebener Wellen

Ebene Welle $\Psi(\vec{x}, t) = C \cdot e^{i(\vec{p}\vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)}$ haben Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 = |C|^2$

Normierung auf Volumen V: $1 = \int_V d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = |C|^2 \cdot V \Rightarrow$ Wähle $C = \frac{1}{\sqrt{V}} \Rightarrow \Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{p}\vec{x} - Et/\hbar)}$ normiert. Teilchen ist mit gleicher Wahrscheinlichkeit überall in V, über V ausgeschmiert.

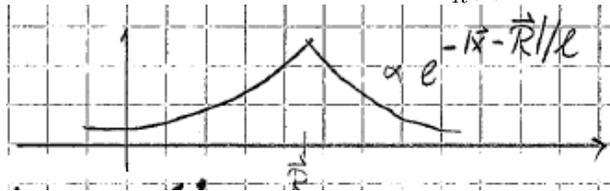


Gegenteil: Lokalisierte Zustände: $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$ auf endliches Raumgebiet konzentriert.

Bsp: Leitungselektronen im Metall sind in guter Näherung durch ebene Wellen beschrieben. Genauer:

Blochwellen $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \underbrace{U_{\vec{k}}(\vec{r})}_{\text{gitterperiodisch}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$

Durch starke Unordnung (Fremdatome, Defekte) werden die Leitungselektronen lokalisiert, die Wellenfunktionen sind dann von der Form $\Psi_{\vec{R}}(\vec{x}) = C \cdot e^{-\frac{|\vec{x}-\vec{R}|}{l}}$



Elektronen sind bei $\vec{x} = \vec{R}$ lokalisiert. (l =Lokalisierungslänge)

Lokalisierte Zustände erhält man durch Entwicklung nach ebenen Wellen (Fouriertransformation)

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \Phi(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)}$$

* Setze $\Phi(\vec{p}) = \Phi_0 \delta(\vec{p} - \vec{p}_0) \Rightarrow \Psi(\vec{x}, t) = \frac{\Phi_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\vec{p}_0\vec{x} - \frac{\vec{p}_0^2}{2m}t)}$

* Eindimensionales Gaußpaket: $\Phi(p) = A \cdot e^{-(p-p_0)^2 \frac{\sigma^2}{\hbar^2}}$



Wie verhält sich $\Psi(x, t)$ im Ortsraum k als Funktion

der Zeit?

$$\Psi(x, t) = A \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t + \frac{i}{\hbar} p x} \quad (2.1)$$

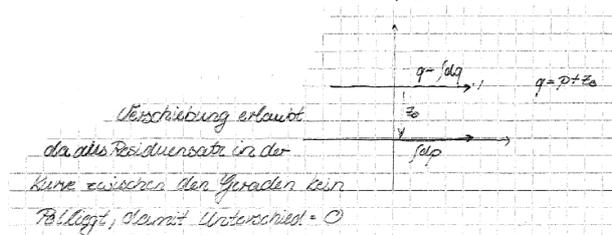
$$= A e^{-\frac{p_0^2 d^2}{\hbar^2}} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\alpha p^2 + \beta p} \quad (2.2)$$

$$\alpha = \frac{d^2}{\hbar^2} + \frac{it}{\hbar 2m}, \quad \beta = \frac{2p_0 d^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} x$$

Löse durch quadratische Ergänzung:

$$\text{Schreibe: } -\alpha p^2 + \beta p = -\alpha \left(p^2 - \frac{\beta}{\alpha} p \right) = -\alpha \left(\underbrace{\left(p - \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2}_{q} - \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right)$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = A e^{-\frac{p_0^2 d^2}{\hbar^2}} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \underbrace{\int dq e^{-\alpha q}}_{= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}$$



$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{d^2}{\hbar^2} + \frac{it}{\hbar 2m}}} A \cdot e^{-\frac{p_0^2 d^2}{\hbar^2}} \cdot e^{\frac{4 \left(\frac{2p_0 d^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar} x \right)^2}{4 \left(\frac{d^2}{\hbar^2} + \frac{it}{\hbar 2m} \right)}}$$

Brauchen $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$:

Benutze i) $|\sqrt{z}|^2 = ?$ mit $z \in \mathbb{C}, z = |z|e^{i\phi}$

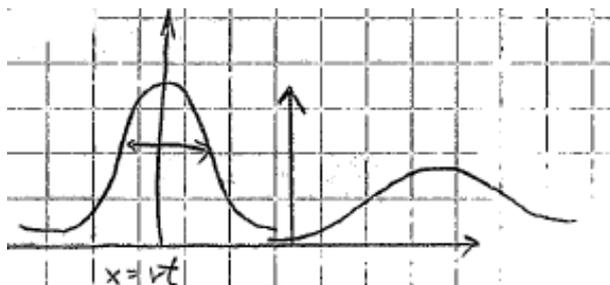
$$\rightarrow \sqrt{z} = \sqrt{|z|}e^{i\frac{\phi}{2}}, (\sqrt{z})^* = \sqrt{|z|}e^{-i\frac{\phi}{2}} \rightarrow |\sqrt{z}|^2 = \sqrt{z}(\sqrt{z})^* = |z|$$

$$\text{ii) } (e^z)^* = e^{z^*}, e^z \cdot (e^z)^* = e^{z+z^*} = e^{2\text{Re}z}$$

$$\text{iii) } \frac{z_1}{z_2} + \left(\frac{z_1}{z_2} \right)^* = \frac{z_1 z_2^*}{|z_2|^2} + \frac{z_1^* z_2}{|z_2|^2}$$

$$\rightarrow \Psi(x, t) \propto \frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}} e^{-\left(\frac{1}{2d^2} \frac{(x-vt)^2}{1+\Delta^2} \right)}$$

$$\Delta = \frac{\hbar t}{2md}, v = \frac{p_0}{m}$$



\Rightarrow Gauß-Funktion

2.4 Wellenpakete (Lösungen mit nichtkonstantem $|\Psi|^2$)



Eindimensionales Gauß-Paket:

$$\phi(p) = Ae^{-(p-p_0)^2 \frac{d^2}{\hbar^2}}$$

$$\rightarrow \Psi(x, t) = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)}$$

$$|\Psi(x, t)|^2 \propto \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta^2}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{2d^2(1 + \Delta^2)}\right)$$

$$\Delta = \frac{\hbar t}{2md} \quad v = \frac{p_0}{m}$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit Gauß-verteilt
- Maximum läuft mit Geschwindigkeit $v = \frac{p_0}{m}$
- Breite im Ortsraum $\propto d\sqrt{1 + \Delta^2}$ wächst mit $t \rightarrow$ Wellenpaket zerfließt

Quantitativ: Mittelwert für Ort x ("Ortserwartungswert"):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x, t)|^2 \quad (\Psi \text{ normiert auf } 1)$$

Für Gauß-Paket:

$$\langle x \rangle = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx (x - vt) |\Psi(x, t)|^2}_{=0, \text{ da } |\Psi|^2 \text{ symmetrisch in } (x - vt)} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx vt |\Psi(x, t)|^2}_{=vt, \text{ da } \Psi \text{ normiert}}$$

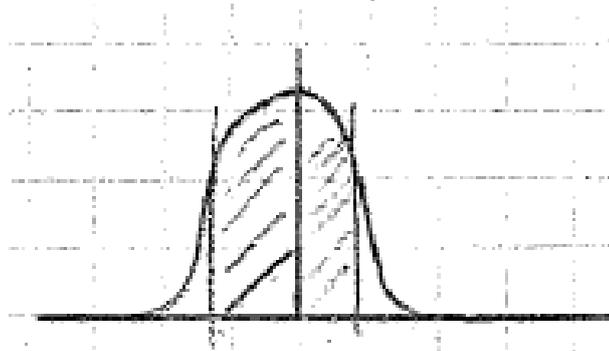
Breite (Schwankungsquadrat, Varianz) des Ortes:

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)^2 |\Psi(x, t)|^2$$

Bei Gauß-Verteilung $e^{-\alpha x^2}$ ist

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

$\rightarrow (\Delta x)^2 = d^2(1 + \Delta^2)$ Varianz, $\Delta x = d\sqrt{1 + \Delta^2}$ Breite Standardabweichung



Δx gibt x -Bereich an, über den $|\Psi|^2$ groß ist
 Δx misst "Ortsunschärfe"

2.5 Impulsverteilung

$\Psi(x, t)$ und $\phi(p, t) = \phi(\vec{p})e^{-i\frac{E(\vec{p})t}{\hbar}}$ sind durch Fouriertransformation verknüpft:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \phi(\vec{p}, t)$$

$$\phi(\vec{p}, t) = \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \Psi(\vec{x}, t)$$

Laut Parseval'schem Theorem gilt: $\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\phi(\vec{p}, t)|^2$, d.h. falls Ψ normiert auf 1, so auch ϕ

\Rightarrow Interpretiere $\phi(\vec{p}, t)$ als Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum, d.h die Wahrscheinlichkeit, \vec{p} zu messen, ist $|\phi(\vec{p}, t)|^2$

Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum

$$W(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2, \langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \vec{x} |\Psi(\vec{x}, t)|^2$$

Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum

$$W(\vec{p}, t) = |\phi(\vec{p}, t)|^2, \langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\phi(\vec{p}, t)|^2$$

Beispiel: Ebene Welle $\phi(\vec{p}) = \phi_0 \delta(\vec{p} - \vec{p}_0)$

$$\rightarrow \Psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \phi_0 \delta(\vec{p} - \vec{p}_0) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \frac{\phi_0}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0\vec{x} - E(\vec{p}_0)t)}$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\phi(\vec{p})|^2 = \vec{p}_0$$

Gauß-Paket:

$$\phi = A e^{-(p-p_0)^2 \frac{d^2}{\hbar^2}}$$

$$\langle p \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\phi(p)|^2 p = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} (p - p_0) |\phi|^2 + \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p_0 |\phi|^2 = p_0 \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\phi|^2 = p_0$$

$$(\Delta p)^2 = \langle (p - p_0)^2 \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2d}\right)^2 \quad \Delta p = \frac{\hbar}{2d} \text{ "Impulsunschärfe"}$$

Insgesamt für Gauß-Paket:

$$\Delta x = d\sqrt{1 + \Delta^2} \quad \Delta p = \frac{\hbar}{2d}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \Delta^2}$$

\Rightarrow Ort und Impuls können nicht gleichzeitig "scharf" sein

Dies ist ein Spezialfall der allgemeinen Unschärferelation in Ort und Impuls

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

(Übungen: Unschärfe als allgemeine Eigenschaft der FT)

Impuls im Ortsraum: $\phi(\vec{p}, t) = \int d^3x e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \Psi(\vec{x}, t)$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \phi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \phi(\vec{p}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x' e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}'} \Psi^*(\vec{x}', t) \int d^3x \vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \Psi(\vec{x}, t)$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \Psi^*(\vec{x}', t) \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \Psi(\vec{x}, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{x}' - \vec{x})}$$

$$= \int d^3x \int d^3x' \Psi^*(\vec{x}', t) \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \Psi(\vec{x}, t) \delta(\vec{x}' - \vec{x})$$

$$\text{Damit } \langle \vec{p} \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\vec{x}, t)$$

$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ "Impulsoperator in Ortsdarstellung"

2.6 Operatoren, Skalarprodukt, etc

Die Wellenfunktionen der Quantenmechanik sind Elemente eines Hilbertraums (vollständiger Vektorraum mit Skalarprodukt). Dieser Raum ist $L^2(\mathbb{R}^3)$ (quadratintegrale Funktionen)

$$L^2(\mathbb{R}^3) = f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \|f\|_2 = \sqrt{\int d^3x |f(x)|^2} < \infty$$

Ein Operator A auf einem Hilbertraum ist eine Abbildung $f(x) \mapsto g(x) = Af(x) \forall f \in D_A$ (Definitionsbereich)

Ein linearer Operator A erfüllt $Af_1 = g_1, Af_2 = g_2, z_1, z_2 \in \mathbb{C}$

1) $A(f_1 + f_2) = Af_1 + Af_2 = g_1 + g_2$

2) $A(z_1 f_1) = z_1 Af_1 = z_1 g_1$

Bsp: ∇ ist linearer Operator:

$$\nabla(f(\vec{x}) + g(\vec{x})) = \nabla f(\vec{x}) + \nabla g(\vec{x}) \quad \nabla(zf(\vec{x})) = z\nabla f(\vec{x}), z \in \mathbb{C}$$

Ortsoperator \vec{x} : $\vec{x}(f(\vec{x}) + g(\vec{x})) = \vec{x}f(\vec{x}) + \vec{x}g(\vec{x})$

$A : f \rightarrow f^2, Af = f^2$ ist nicht linear: $A(f + g) = (f + g)^2 \neq f^2 + g^2$

Im Allgemeinen "vertauschen" Operatoren nicht: Seien A, B zwei Operatoren. Der *Kommutator* von A, B ist definiert als

$$[A, B] = AB - BA$$

Oft ist $[A, B] \neq 0$

Bsp: $A = xi, B = \partial_j \quad i, j \in x, y, z$

$$[x_i, \partial_j]f(\vec{x}) = x_i \partial_j f(\vec{x}) - \partial_j (x_i f(\vec{x})) = x_i \partial_j f - \delta_{ij} f(\vec{x}) - x_i \partial_j f(\vec{x}) = -\delta_{ij} f(\vec{x}) \forall f(\vec{x})$$

$$\Rightarrow [x_i, \partial_i] = \delta_{ij} \text{ oder auch: } \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla, p_j = \frac{\hbar}{i} \partial_j$$

$$[x_i, p_j] = -\frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \text{ kanonische Vertauschungsrelation: Ort und Impulsoperator vertauschen nicht! (für } i=j)$$

L^2 -Skalarprodukt : Abbildung von $L^2 \times L^2 \rightarrow \mathbb{C}$

$$(f, g) = \int d^3x f^*(\vec{x})g(\vec{x}) \quad f, g \in L^2$$

$$\rightarrow \text{Norm } \|f\|_2 = \sqrt{\int d^3x f^*(\vec{x})f(\vec{x})} = \sqrt{\int d^3x |f(\vec{x})|^2}$$

Analog zum Skalarprodukt in \mathbb{C} , x_i Vektoren aus $\mathbb{C} : \langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i, \|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$

Es gilt:

- $(f, g)^* = (\int d^3x f^*(\vec{x})g(\vec{x}))^* = \int d^3x f(\vec{x})g^*(\vec{x}) = (g, f)$

- $(f, z_1 g_1 + z_2 g_2) = z_1 (f, g_1) + z_2 (f, g_2), \quad z_1, z_2 \in \mathbb{C}$

- $(z_1 f_1 + z_2 f_2, g) = z_1^* (f_1, g) + z_2^* (f_2, g)$

linear im zweiten Eintrag, antilinear im ersten Eintrag

Damit Mittelwerte: $\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \phi^*(\vec{p})\vec{p}\phi(\vec{p}) = (\phi, \vec{p}\phi)$

$\langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x})\vec{x}\Psi(\vec{x}, t) = (\Psi, \vec{x}\Psi)$

Adjungierter Operator: A^+ heißt adjungiert zu A, falls $(A^+ f, g) = (f, Ag)$, d.h. $\int d^3x (A^+ f)^* g = \int d^3x f^*(Ag) \quad \forall f, g \in L^2$

Ein Operator heißt selbstadjungiert ("hermetisch"), falls $A^+ = A$ (Vergleiche \mathbb{C}^n : Matrix $A \rightarrow$ Adjungierte $A^+ = (A^*)^T$, wenn $A^+ = A \rightarrow$ Eigenwerte von A

Rechenregel: Es ist $(AB)^+ = B^+ A^+$, da $((AB)^+ f, g) = (f, ABg) = (A^+ f, Bg) = (B^+ A^+ f, g) \forall f, g$

- \vec{x} selbstadjungiert, $(f, \vec{x}) = \int d^3x f^*(\vec{x})\vec{x}g(\vec{x}) = \int d^3x (\vec{x}f)^* g = (\vec{x}f, g)$

- $(f, \vec{p}g) = \int d^3x f^* \frac{\hbar}{i} \nabla g = - \int d^3x (\frac{\hbar}{i} \nabla f)^* g = \int d^3x (\frac{\hbar}{i} \nabla f)^* g = (\vec{p}f, g)$

Randtherme bei PI verschwinden

2.7 Korrespondenzprinzip, allg. Schrödingergleichung und erste Postulate der QM

Beispiel $\langle \vec{p} \rangle = (\Psi, \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi)$

für ebene Welle: $\frac{\hbar}{i} \nabla C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)} = \vec{p} C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)}$

Analog Energie E: $\langle E \rangle = \langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \rangle = \langle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rangle$ bei $\Psi : (\Psi, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi)$

⇒ QM-Operator $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ korrespondiert zur Energie

Allgemeines Korrespondenzprinzip: Den physikalischen Größen (\vec{x}, \vec{p}, E, etc) sind in der Quantenmechanik Operatoren ($\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \nabla, i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, etc$) zugeordnet.

(historisch: Korrespondenzprinzip $\hat{=}$ klassisches Verhalten für hohe Quantenzahlen)

Freie Schrödingergleichung (ohne Potentiale): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi$

⇒ im freien Fall: Operatoridentität $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{\text{freie Hamiltonfunktion}}$ Ersetze klassischen Impuls durch Impuls-

operator $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$, d.h.

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

Wie sieht Hamiltonoperator H in Gegenwart von Potentialen $V(\vec{x})$ aus?

Korrespondenzprinzip → Nehme klassische Hamiltonfunktion $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$, fasse \vec{p} und \vec{x} als QM-Operatoren auf!

→ $H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x})$

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

Diese Sachverhalte ergeben 4 Postulate für die Quantenmechanik

1. Der Zustand eines Systems (Teilchen) wird durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ beschrieben. $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen bei Zeit t im Volumenelement d^3x um \vec{x} herum zu finden.
2. Messgrößen (E, \vec{p}, \vec{x}, etc) entsprechen in der Quantenmechanik Operatoren ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i} \nabla, \vec{x}, etc$)
3. Mittelwerte der Messungen ergeben sich aus den Mittelwerten der Operatoren, z.B. für A ist der Mittelwert: $\langle A \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, t) A \Psi(\vec{x}, t) = (\Psi, A \Psi)$. Im Allgemeinen ist $\langle A^2 \rangle \neq \langle A \rangle^2 \rightarrow \Delta A \neq 0$ (Fluktuationen um Mittelwert)
4. Zeitentwicklung: Schrödingergleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = H \Psi(\vec{x}, t)$ mit $H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{x})$

Bemerkung:

- Zeit t ist kein Operator in Quantenmechanik, sondern ein Parameter.
- Postulate können auf N-Teilchensysteme erweitert werden.

2.8 Ehrenfest'sche Theorem

Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi$ wird komplex konjugiert:

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

Zeitentwicklung von Mittelwerten:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int d^3x [(\partial_t \Psi^*) A \Psi + \Psi^* (\partial_t A) \Psi + \Psi^* A (\partial_t \Psi)]$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle (\partial_t A) \rangle + \frac{i}{\hbar} \int [(H \Psi^*) A \Psi - \Psi^* A H \Psi] = \langle \partial_t A \rangle + \frac{i}{\hbar} [(H \Psi, A \Psi) - (\Psi, A H \Psi)]$$

$$= \langle \partial_t A \rangle + \frac{i}{\hbar} (\Psi, [H, A] \Psi) \text{ mit } [H, A] = H A - A H$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \partial_t A \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$

- Formal ähnlich zu $\frac{d}{dt} f(p, q, t) = \frac{\partial f}{\partial t} + H, f$, mit $f, g = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q}$

2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

Konkreter: Sei $A = \vec{x}$ oder \vec{p} . $\rightarrow [H, x_i] = [\sum_j \frac{p_j^2}{2m} + V(\vec{x}), x_i]$ (Komponenten des Ortsoperators kommutieren $[x_j, x_i] = 0 \forall i, j$)
 $= -\frac{i\hbar p_i}{m}$

$$\rightarrow [H, p_i] = [V(\vec{x}), p_i] = (V(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \partial_i - \frac{\hbar}{i} \partial_i V(\vec{x})) = (V(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \partial_i - V(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \partial_i - \frac{\hbar}{i} (\partial_i V(\vec{x}))) = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i}$$

Damit $\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}$ und $\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{x}) \rangle$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} m \langle \vec{x} \rangle = -\langle \nabla V(\vec{x}) \rangle = -\langle F(\vec{x}) \rangle \text{ (Newton)}$$

Ehrenfest'sches Theorem: klassische Gleichungen gelten für Erwartungswerte $\langle \vec{x} \rangle, \langle \vec{p} \rangle$, etc.

2.9 Kontinuitätsgleichung

Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{x}, t)\Psi(\vec{x}, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) = (\partial_t \Psi^*)\Psi + \Psi^*(\partial_t \Psi) = \frac{i}{\hbar} (H\Psi^*)\Psi - \frac{i}{\hbar} \Psi^*(H\Psi)$$

Potential $V(\vec{x})$ fällt heraus. Setze $\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$

$$\partial_t \rho(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} ((\nabla^2 \Psi^*)\Psi - \Psi^*(\nabla^2 \Psi)) \quad (2.3)$$

$$= -\nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) \text{ (Kontinuitätsgleichung)} \quad (2.4)$$

$$j(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^*(\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*)\Psi)$$

Bsp: $\Psi(\vec{x}, t) = N e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)}$

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

$$\nabla \Psi^*(\vec{x}, t) = -i \frac{\vec{p}}{\hbar} \Psi^*$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* i \frac{\vec{p}}{\hbar} \Psi - (-i \frac{\vec{p}}{\hbar}) \Psi^* \Psi) = \frac{\vec{p}}{m} \Psi^* \Psi$$

2.10 Stationäre Zustände und Eigenwertgleichungen

Sei H zeitunabhängig. Setze an $\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x})f(t)$

$$i\hbar \partial_t \Psi = H\Psi \Rightarrow i\hbar \Psi(\vec{x}) \partial_t f(t) = f(t) H\Psi(\vec{x})$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\frac{i\hbar \partial_t f(t)}{f(t)}}_{\text{nur von } t \text{ abh.}} = \underbrace{\frac{H\Psi(\vec{x})}{\Psi(\vec{x})}}_{\text{nur von } \vec{x} \text{ abh.}}$$

\rightarrow linke Seite = Konstante = rechte Seite $\Rightarrow i\hbar \partial_t f(t) = E f(t) \Rightarrow f(t) = f(t=0) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$

Rechte Seite (Zeitunabhängige Schrödingergleichung): $H\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x})$

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

- Zustände vom Typ $\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ heißen stationäre Zustände, da $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 = |\Psi(\vec{x})|^2$ (zeitunabhängig)
- Zeitunabhängige Schrödingergleichung ist ein Eigenwertproblem $\hat{H}\Psi = E\Psi$ (H =Operator, E =Eigenwert, Ψ Eigenzustand, Eigenfunktion)

Eigenwertproblem: Sei A ein linearer Operator. Ψ ist Eigenfunktion zu A mit Eigenwert $a \in \mathbb{C}$, falls $A\Psi = a\Psi$ gilt. Die Eigenwerte a bilden das Spektrum von A .

Bemerkungen:

1. Eigenwerte von hermiteschen Operatoren ($A = A^+$) sind reell, denn mit $A\Psi = a\Psi$ bilde man $(\Psi, A\Psi) = a(\Psi, \Psi) = (A\Psi, \Psi) = a^*(\Psi, \Psi) \Rightarrow a = a^* \Rightarrow a \in \mathbb{R}$

- Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal, d.h. falls $A\Psi_1 = a\Psi_1$ und $A\Psi_2 = a_2\Psi_2$, $a_1 \neq a_2 \Rightarrow (\Psi_1, \Psi_2) = 0$
- Sind zwei oder mehrere Eigenwerte identisch ("entartet"), dann kann man die Eigenfunktionen zum identischen Eigenwert orthogonalisieren. Sei $A\Psi_n = a\Psi_n$ für $n \in \text{Indexmenge}$
 \rightarrow neue Funktionen $\Psi_n = \sum_m u_{nm} \Psi_m$ mit $(\Psi_n, \Psi_m) = 0$ für $n \neq m$
- Eigenfunktionen können normiert werden: $\Psi_n \rightarrow \frac{\Psi_n}{\sqrt{(\Psi_n, \Psi_n)}}$. Damit ist $\|\Psi_n\| = \sqrt{(\Psi_n, \Psi_n)} = 1$
 \Rightarrow Satz von orthonormierten Eigenfunktionen $\Psi_n, (\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{mn}$ ("Orthogonalitätsrelation")

Wenn weiter die Vollständigkeitsrelation $\sum_n \Psi_n^*(\vec{x}') \Psi_n(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$ gilt, bilden die Eigenfunktionen eine vollständige Orthonormalbasis (VONB) des Funktionenraums, oder auch Eigenbasis. Dann besitzt jede Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ die Darstellung $\Psi(\vec{x}) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x})$ mit $c_n = (\Psi_n, \Psi) = \int d^3x \Psi_n^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x})$
 $(\Psi(\vec{x}) = \int d^3x' \delta(\vec{x} - \vec{x}') \Psi(\vec{x}') = \sum_n \Psi_n(\vec{x}) \int d^3x' \Psi_n^*(\vec{x}') \Psi(\vec{x}'))$
 Mit der Entwicklung nach Eigenfunktionen des Hamiltonoperators wird Zeitentwicklung einfach. Sei $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ gelöst, d.h. Eigenfunktionen bekannt. Für $\Psi(\vec{x}, 0) = \Psi(\vec{x})$ berechne $c_n = (\Psi_n, \Psi(t=0))$, $\Rightarrow \Psi_n(\vec{x}, t) = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n(\vec{x}, t=0)$

$$\rightarrow \Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}, 0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\left(\text{Beweis: } i\hbar \partial_t \Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n E_n \Psi_n(\vec{x}, 0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = H(\sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}, 0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}) \right)$$

- Es gibt auch Operatoren, die ein kontinuierliches Spektrum haben, d.h. keine separierten/isolierten Eigenwert, z.B. Impulsoperator $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ im \mathbb{R}^3

$$\underbrace{\vec{p}}_{\text{Operator}} N e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = \frac{\hbar}{i} \nabla N e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = \underbrace{\vec{p}}_{\text{Eigenwert}} N e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} \Rightarrow \Psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\phi(\vec{p})}_{\hat{=} c_n} \underbrace{e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}}_{\Psi_n^*} = \text{FT}$$

- Ortsoperator-Eigenfunktionen: $\vec{x}f(\vec{x}) = \vec{x}_0f(\vec{x})$ Eigenwertgleichung gelöst durch $f_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$, Eigenwert \vec{x}_0

(Zwei Funktionen f_1, f_2 gleich, wenn alle Skalarprodukte $(g_n, f_1) = (g_n, f_2)$ für Basisfunktionen $g_n(\vec{x})$)
 Damit $(g_n, \vec{x}f_{\vec{x}_0}) = \int d^3x g_n^*(\vec{x}) \vec{x} \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) = \int d^3x g_n^*(\vec{x}) \vec{x}_0 \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) = (g_n, \vec{x}_0 f_{\vec{x}_0})$

- Seien A, B zwei Operatoren mit $[A, B] = AB - BA = 0$. Dann haben A und B eine gemeinsame Eigenbasis.

Beweis: Sei $A\Psi_n = a_n\Psi_n$, a_n isolierter, einfacher Eigenwert. Dann ist $AB\Psi_n = BA\Psi_n = B a_n \Psi_n = a_n B\Psi_n$
 \Rightarrow Auch $B\Psi_n$ Eigenwert zu $a_n \Rightarrow B\Psi_n = b_n \Psi_n$

2.11 Messung von quantenmechanischen Observablen

Jede Observable ($\hat{=}$ Messgröße) entspricht einem hermiteschen Operator A . Was sind die möglichen Messwerte?

Sei System in einem Eigenzustand von A . d.h. $A\Psi_n = a_n\Psi$

$$\langle A \rangle = (\Psi_n, A\Psi_n) = a_n$$

Schwankung der Messwerte? $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = 0$, da $\langle A^2 \rangle = (\Psi_n, A^2\Psi) = a_n^2 = \langle A \rangle^2$
 \Rightarrow scharfe Messung von A , keine Fluktuation der Messwerte.

Allgemein: Superposition von Eigenzuständen $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$
 $\langle A \rangle = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} (\Psi_{n'}, A\Psi_n) = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} a_n \underbrace{(\Psi_{n'}, \Psi_n)}_{\delta_{nn'}}$

$$\langle A \rangle = (\Psi, A\Psi) = \sum_n \underbrace{|c_n|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeit für } \Psi_n \text{ Messgröße in } \Psi_n} \underbrace{a_n}_{\text{Eigenwert}}$$

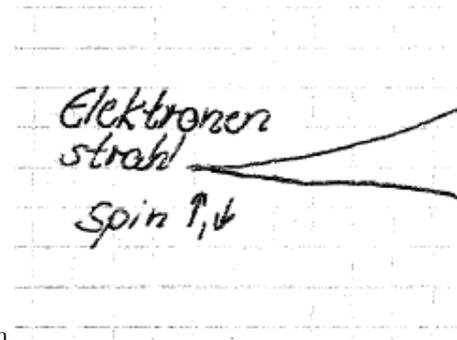
2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

Ψ_n normiert $\Rightarrow \sum_n |c_n|^2 = 1$

vgl. mit Statistik: Mittelwert $X = \int dx P(x)x$, $\int dx P(x) = 1$

Interpretation: Mögliche Messwerte sind Eigenwerte a_n , die Wahrscheinlichkeit, a_n zu messen, ist $|c_n|^2$

Postulat: Mögliche Messergebnisse sind Eigenwerte von A Bem:

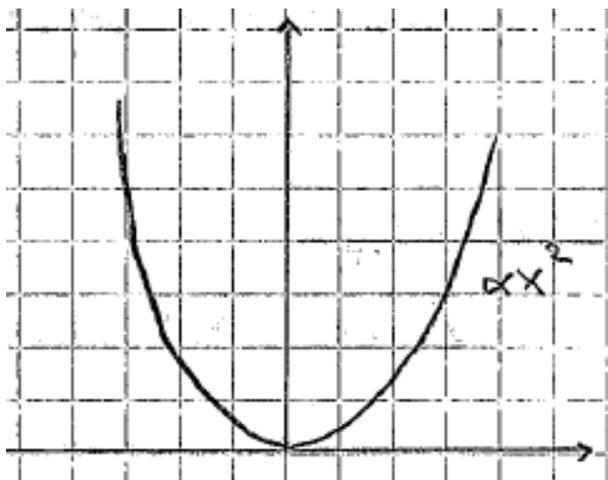


1. Dieses Postulat wird von Experimenten bestätigt, z.B. Stern-Gerlach-Versuch
Messergebnis: Zwei Auftreffpunkte entsprechen möglichen Eigenzuständen des Spinoperators
2. Die möglichen Messergebnisse (a_n) hängen nur von der Messgröße (A) ab, nicht von Ψ . Ψ bestimmt aber Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$, a_n zu messen.
3. Postulat konsistent mit Forderung, dass wiederholte, kurz danach stattfindende Messung den selben Messwert A_n ergeben soll.

Schlussfolgerung: Bei Messung von A , welche a_n ergibt, "kolabiert" Wellenfunktion in Eigenzustand Ψ_n (Reduktion der Wellenfunktion auf einen Eigenzustand). Erneute Messung ergibt mit Wahrscheinlichkeit 1 wieder a_n (nach $(\Delta A)^2 = 0$ für Eigenzustände).

3 Eindimensionale Probleme

3.1 Harmonischer Oszillator



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

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\text{bzw. } \left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\Psi = \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi$$

$$\text{charakteristische Länge } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Algebraische Methode:

$$\hat{a} = \frac{\omega m \hat{x} + i \hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad \hat{a}^+ = \frac{\omega m \hat{x} - i \hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

$$\text{bzw. } \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+), \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}}(a - a^+)$$

$$\text{Aus } [\hat{p}, \hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = i\hbar \text{ folgt } [\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1.$$

$$\text{Alternativ: } \hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx}\right) \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx}\right)$$

Damit lässt sich \hat{H} schreiben als $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})$

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

\hat{n} : Besetzungszahloperator

Was sind die Eigenzustände von $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$ bzw. \hat{H} ?

Sei Ψ_ν Eigenfunktion von \hat{n} , d.h. $\hat{n}\Psi_\nu = \nu\Psi_\nu$ mit Eigenwert ν . Ψ_ν normierbar $\rightarrow \nu(\Psi_\nu, \Psi_\nu) = (\Psi_\nu, \hat{n}\Psi_\nu) = (\Psi_\nu, \hat{a}^+\hat{a}\Psi_\nu) = (\hat{a}\Psi_\nu, \hat{a}\Psi_\nu) = \|a_\nu\Psi_\nu\|^2 \geq 0$

\Rightarrow Eigenwerte $\nu \geq 0$ Kleinstmöglicher Eigenwert $\nu = 0$.

Für $\nu = 0$ gilt $\|\hat{a}\Psi_\nu\|^2 = 0 \Rightarrow \hat{a}\Psi_\nu = 0 \Rightarrow \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx}\right)\Psi(x) = 0$

Lösung ist Gauß-Funktion: $\Psi_0(x) = (\sqrt{\pi}x_0)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right)$

Beweis durch Nachrechnen \Rightarrow Eigenwert ν_0 existiert, Energie $\frac{\hbar\omega}{2}$ Grundzustand

Andere Eigenfunktionen? $\rightarrow [\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}^+$

$[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}$

Behauptung: $\hat{a}^+\Psi_\nu$ ist Eigenfunktion zu Eigenwert $\nu + 1$

Bew: $\hat{n}(\hat{a}^+\Psi_\nu) = (\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{n})\Psi_\nu = (1 + \nu)(\hat{a}^+\Psi_\nu)$

Norm: $\|\hat{a}^+\Psi_\nu\|^2 = (\hat{a}^+\Psi_\nu, \hat{a}^+\Psi_\nu) = (\Psi_\nu, \hat{a}\hat{a}^+\Psi_\nu) = (1 + \nu)(\Psi_\nu, \Psi_\nu)$

3 Eindimensionale Probleme

$$\Rightarrow \nu = 0 \quad \Psi_1 = \hat{a}^+ \Psi_0$$

$$\nu = 1 \quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^+ \Psi_1$$

$$\text{allgemein: } n \in \mathbb{N} : \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ \Psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \Psi_0$$

\hat{a}^+ = Aufstiegsoperator, Leiteroperator, Erzeugungsoperator für Schwingungsquanten.

Schreibe \hat{a}^+ als $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) \rightarrow$ Wellenfunktionen bekannt:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \Psi_0(x)$$

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

Analog zu \hat{a}^+ ist \hat{a} der Absteige- (Vernichtungs-)operator.

Beh: $\hat{a} \Psi_\nu = (\nu - 1) \hat{a} \Psi_\nu$, d.h. $\hat{a} \Psi_\nu$ ist Eigenfunktion zu $\nu - 1, \propto \Psi_{\nu-1}$

Beweis: $\hat{n} \hat{a} \Psi_\nu = (-\hat{a} + \hat{a} \hat{n}) \Psi_\nu = (\nu - 1) (\hat{a} \Psi_\nu)$

Normiere: $\Psi_{\nu-1} = \frac{1}{\sqrt{\nu}} \hat{a} \Psi_\nu$

$\hat{a} \Psi_\nu = \sqrt{\nu} \Psi_{\nu-1}$, d.h. $\hat{a} \Psi_0 = 0$

Vernichtungsoperator vernichtet Grundzustand Ψ_0 !

Gibt es andere Eigenfunktionen zu ungeradzahligem $\nu = n + \alpha \quad 0 < \alpha < 1$?

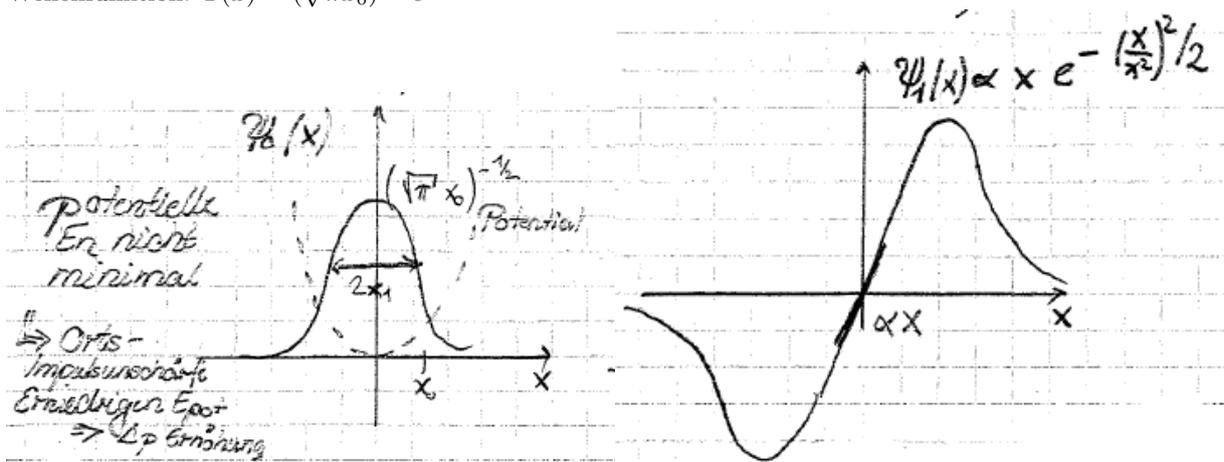
Nein, denn $\hat{n} \Psi_\nu = \nu \Psi_\nu = (n + \alpha) \Psi_\nu$

$\hat{n} (\hat{a}^n \Psi_\nu) = (\nu - n) (\hat{a}^n \Psi_\nu) = \alpha (\hat{a}^n \Psi_\nu)$

$\hat{n} (\hat{a}^{n+1} \Psi_\nu) = (\alpha - 1) (\hat{a}^n \Psi_\nu)$

Widerspruch zur bewiesenen Aussage $\nu \geq 0$

Wellenfunktion: $\Psi(x) = (\sqrt{\pi} x_0)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}$



$$\text{Allgemein: } \Psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}$$

$H_n(x)$ Hermite Polynome

$$H_0(x) = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = (4x^2 - 2), \text{ usw.}$$

H_n hat n Nullstellen, bilden orthogonales vollständiges Funktionensystem auf $[-\infty, \infty]$

Spektrum von H:

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

Es gilt $a \Psi_0 = 0$.

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \Psi_0 \quad \Psi_0 \propto e^{-\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 / 2}$$

$$\Psi_n(x) = (\text{Polynom } n\text{-ten Grades}) \cdot e^{-\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 / 2}$$

Bem: Nullpunktsenergie: Grundzustand ($n=0$) hat nicht $E_0 = 0$, sondern $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

Mittelwerte und Unschärfen:

$$\langle x \rangle_n = (\Psi_n, x \Psi_n) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\Psi_n, (a + a^\dagger) \Psi_n) = 0, \text{ da } a^{(\dagger)} \Psi_n \propto \Psi_{n\pm 1} \perp \Psi_n$$

$$\text{Analog: } \langle p \rangle_n = (\Psi_n, p \Psi_n) = 0$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_n, (a + a^\dagger)^2 \Psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_n, (a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger) \Psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_n, (2a^\dagger a + 1) \Psi_n \rangle$$

wegen $[a, a^\dagger] = 1$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega} (n + \frac{1}{2}) = x_0^2 (n + \frac{1}{2})$$

Analog $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle_n = \frac{\hbar^2 \omega m}{\hbar} = \frac{\hbar^2}{x_0^2} (n + \frac{1}{2})$

Damit ist $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar (n + \frac{1}{2})$

Grundzustand: $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ "minimale Unschärfe"

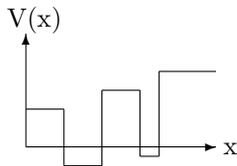
Energieerwartungswerte $\langle T \rangle, \langle V \rangle$:

$$\langle T \rangle = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{2m x_0^2} (n + \frac{1}{2}) \quad x_0^{-4} = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2}$$

$$\langle V \rangle = \langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 (n + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 m^2 \omega^2 x_0^2}{\hbar^2 m} (n + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m x_0^2} (n + \frac{1}{2}) = \langle T \rangle$$

$\hat{=}$ klassischer Gleichverteilung, ist aber speziell für harm. Oszillator

3.2 Stückweise konstante Potentiale



Zeitunabhängige Schrödingergleichung $\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x)$

Aus $|V(x)| < \infty$ folgt $|\Psi''| < \infty \Rightarrow \Psi'$ stetig $\Rightarrow \Psi$ stetig $\forall x$

Strategie: Löse Schrödingergleichung für Bereiche, wo $V(x) = const$, "klebe" Lösungen an Sprungstellen von $V(x)$ mit Stetigkeitsbedingungen zusammen.

Sei nun $V(x)$ konstant auf Intervall I :

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Psi(x)$$

allg. Lösung: $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ mit $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$

Fall 1: $E > V_0 \Rightarrow k \in \mathbb{R}$ Oszillierende Lösung (ebene Welle)

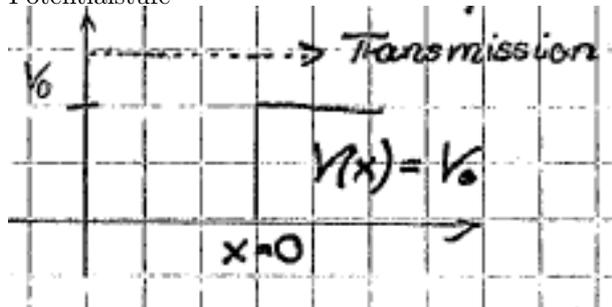
Wahrscheinlichkeitsdichte: $|\Psi(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}$
 $= |A|^2 + |B|^2 + 2 \text{Re}(AB^* e^{2ikx}) = |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B| \cos(2kx + \delta)$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $j = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \partial_x \Psi - \Psi \partial_x \Psi^*) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$

$A \neq 0, B = 0$ Strom in "+"-Richtung (e^{ikx})

$A = 0, B \neq 0$ Strom in "-"-Richtung (e^{-ikx})

Potentialstufe



$$x < 0 \Psi_{<}(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$x > 0 \Psi_{>}(x) = T e^{iqx} \quad q = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

3 Eindimensionale Probleme

Fordere Stetigkeit von Ψ_{\geq} und Ψ'_{\geq} bei $x = 0$

$$x = 0: \Psi_{\geq} = 1 + R = T$$

$$\Psi'_{\geq} = ik(1 - R) = iqT$$

Lösung: $T = \frac{2k}{k+q} \rightarrow$ transmittierter Strom $|T|^2 = \left(\frac{2k}{k+q}\right)^2$

$$R = \frac{k-q}{k+q} \rightarrow \text{reflektierter Strom } |R|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 = \frac{\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E-V_0)}}{\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E-V_0)}}$$

$$R^2 \propto \left(\frac{V_0}{E}\right)^2, E \gg V_0$$

\rightarrow Immer Reflexion, auch wenn $E \gg V_0 \rightarrow |T| \neq 0, |R| \neq 0$

Fall 2: $V_0 > E$ in Gebiet II bei $V(x) = V_0$:

$$q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar^2 = i\kappa \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar^2$$

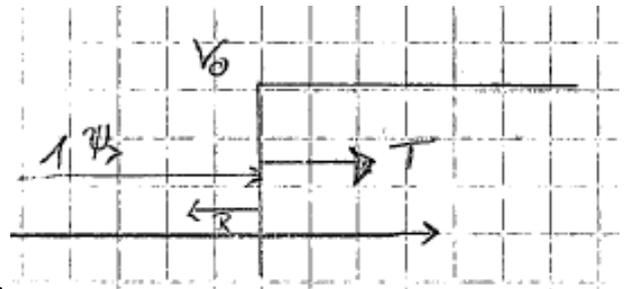
Lösungen bei $x > 0$: $\Psi_{>}(x) = Ce^{-i\kappa x} + De^{\kappa x}$

Lösungen mit $D \neq 0$ nicht brauchbar für $x \rightarrow +\infty$, da $\Psi_{>}$ sonst divergent. \Rightarrow Nur $C \neq 0, D = 0$ Lösungen erlaubt. Dies trägt keinen Strom nach rechts.

Wahrscheinlichkeitsstromdichte von $Ce^{-i\kappa x} + De^{\kappa x}$:

$$j = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \partial_x \Psi - \Psi \partial_x \Psi^*) = \frac{\hbar}{2mi}[(C^* e^{-i\kappa x} + D^* e^{\kappa x})(-C e^{-i\kappa x} + D e^{\kappa x}) - (C e^{-i\kappa x} + D e^{\kappa x})(-C^* e^{-i\kappa x} + D^* e^{\kappa x})]$$

$$\Rightarrow j = 0, D = 0, C \neq 0$$



Bsp: Potentialstufe $E < V_0$, Teilchen von links einlaufend.

$$\Psi_{<} = 1e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

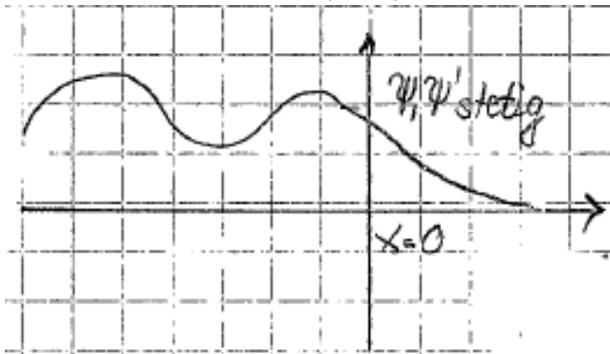
$$\Psi_{>} = Te^{-\kappa x} \quad (T = C)$$

Stetigkeit bei $x = 0$:

$$\Psi: 1 + R = T \quad \Psi': ik(1 - R) = -\kappa T$$

$$\Rightarrow T = \frac{2ik}{ik - \kappa} \neq 0 \quad R = \frac{\kappa + ik}{ik - \kappa}$$

$$|\Psi_{<}|^2 = 1 + |R|^2 + \underbrace{Re^{-2ikx} + R^* e^{2ikx}}_{\propto \cos(2kx + \delta)}$$



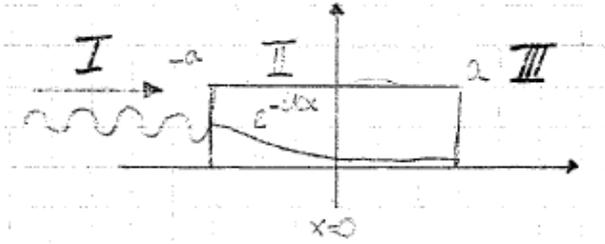
$$|\Psi_{>}|^2 = |T|^2 e^{-2\kappa x}$$

Wellenfunktion $\Psi_{>}$ dringt in klassisch verbotenes Gebiet mit $E < V(x)$ ein, auf Längenskala $\kappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

Im Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ (harte Wand) geht $\kappa \rightarrow \infty$ und Ψ verschwindet sofort für $x > 0$.

\Rightarrow Randbedingung für harte Wand bei $x = 0$: $\Psi|_{Wand} = 0$

3.3 Potentialschwelle



$V(x) = V_0 \Theta(a - |x|)$ Sei $E > 0$, aber $E < V_0$

In Gebiet I: $\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
 In Gebiet II: $\Psi_{II} = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$
 In Gebiet III: $\Psi_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$$

Stetigkeitsbedingung bei $x = -a$:

$$\Psi_I = \Psi_{II} \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ike^{-ika} & -ike^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ -\kappa e^{\kappa a} & \kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\text{Kürzer: } \widehat{M}_k(-a) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widehat{M}_\kappa(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widehat{M}_k^{-1}(-a) \widehat{M}_\kappa(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Stetigkeitsbedingung bei $x = a$:

$$\Psi_{II} = \Psi_{III} \begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & e^{\kappa a} \\ -\kappa e^{-\kappa a} & \kappa e^{\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

$$\text{Kürzer: } \widehat{M}_\kappa(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \widehat{M}_k(a) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widehat{M}_k^{-1}(-a) \widehat{M}_\kappa(-a) \widehat{M}_\kappa^{-1}(a) \widehat{M}_k(a) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

Zusatzbedingung: Kein Teilchen von rechts einlaufend, $G = 0$

Man erhält: $A = F(\cosh(2\kappa a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2\kappa a))e^{2ika}$

$$B = F\left(\frac{-i\eta}{2}\right) \sinh(2\kappa a)$$

$$\epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$$

Transmissionsamplitude:

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\kappa a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2\kappa a)}$$

Tunnelwahrscheinlichkeit ("Durchlässigkeitskoeffizient")

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + (1 + \frac{\epsilon^2}{4}) \sinh^2(2\kappa a)} \quad \cosh^2 - \sinh^2 = 1$$

$$\propto (1 + \frac{\epsilon^2}{4})^{-1} e^{-4\kappa a}, \kappa a \rightarrow \infty$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \approx \frac{e^x}{2}, x \rightarrow \infty$$

Tunnelwahrscheinlichkeit für $E \ll V_0, V_0 \rightarrow \infty$. wird mit exp-Faktor dominiert. $|S(E)|^2 \propto e^{-4\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}a}$

Tunnelwahrscheinlichkeit für kontinuierliche Potentialberge?



N Stufen \rightarrow N+1 Sprungstellen \rightarrow numerische Möglich-

3 Eindimensionale Probleme

keit für $S(E)$

$$\text{Exponent: } \frac{4}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}a = \int_{-a}^a \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx$$

$$\Rightarrow |S(E)|^2 = \alpha e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx}$$

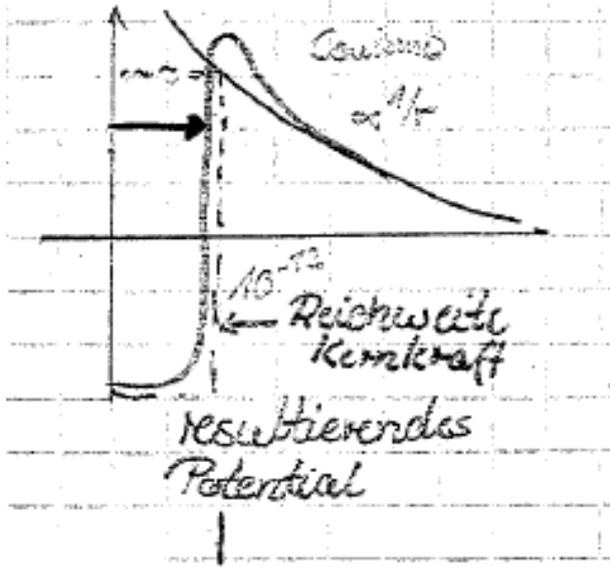
Teilchenstromin Gebiet II:

$$j_{II} = \frac{\hbar}{2mi} \kappa 2i \text{Im}(CD^*) = \frac{\hbar \kappa}{m} \underbrace{\text{Im}(CD^*)}_{\propto e^{-4\kappa a} \propto |S(E)|^2} \neq 0$$

Bsp: α -Zerfall

* Betrachte α -Teilchen als durch Kernkräfte gebunden.

* Coulomb-Abstoßung zwischen α -Teilchen (2-fach Positiv) und Protonen im Kern



$$e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx}$$

\Rightarrow Berechne Tunnelwahrscheinlichkeit: $|S(E)|^2 \propto$

Tunnelrate (Tunnelereignisse pro Zeit) $\tau^{-1} =$

$$\text{Versuchsrate} = \underbrace{\frac{v_\alpha}{2R}}_{\text{Geschwindigkeit / Durchmesser}} \underbrace{|S(E)|^2}_{\text{Tunnelwahrscheinlichkeit für ein einlaufendes } \alpha\text{-Teilchen}}$$

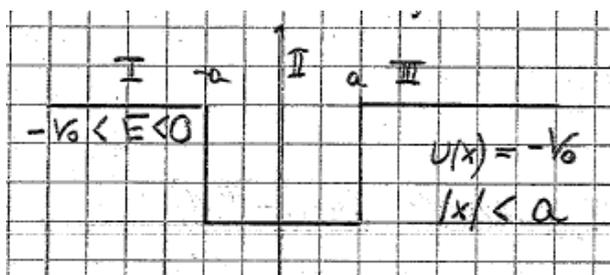
Änderung Anzahl unzerfallener Kerne:

$$dN = -\frac{1}{\tau} dt \cdot N(t) \rightarrow N(t) = N(t=0) e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$\tau \hat{=}$ Lebensdauer des Kerns $\propto |S|^{-2}$

Experimentell findet man: $\log_{10}(\tau) \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$ (vgl. $|S(E)|^2$, Geiger-Nuttall-Regel)

3.4 Potentialtopf



$$V(x) = -V_0, |x| < a$$

$$\Psi_I = A e^{\kappa x} \quad \kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$$

$$\Psi_{II} = Be^{iqx} + Ce^{-iqx} \quad q = \sqrt{2m \underbrace{(E + V_0)}_{\geq 0} / \hbar^2}$$

$$\Psi_{III} = De^{-\kappa x}$$

Nutze Spiegelsymmetrie des Potentials $V(x) = V(-x)$!

$$V(x) = V(-x) \Rightarrow \hat{H}(x) = \hat{H}(-x) \quad (\frac{p^2}{2m} \text{ invariant unter Spiegelung})$$

Paritätsoperator \hat{P} : Sei $\Psi(x)$ Wellenfunktion $\rightarrow \hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x)$.

Es gilt $\hat{P}V(x) = V(-x)$ und $\hat{P}\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$.

$$(\hat{P}\hat{H}(x))\Psi(x) = (\hat{H}(-x)\hat{P}(x))\Psi(x) = \hat{H}(-x)\Psi(-x)$$

Deswegen gilt als Operatorgleichung $[\hat{P}, \hat{H}] = \hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0$

\hat{P} und \hat{H} kommutieren, besitzen gemeinsame Eigenbasis. Falls Ψ Eigenfunktion von \hat{H} zu Eigenwert E (nicht entartet), so ist Ψ Eigenfunktion von \hat{P} . Bei Entartung wähle man Linearkombination.

Da $\hat{P}^2 = 1$ folgt: Eigenwerte von \hat{P} sind $\pm 1 \Rightarrow$ mögliche Eigenfunktionen sind gerade. ($EW + 1$) oder ungerade ($EW - 1$). \Rightarrow Eigenfunktionen von \hat{H} sind entweder gerade oder ungerade.

Lösungen mit gerade Symmetrie:

$$\text{Setze } A = D \text{ und } B = C \rightarrow \Psi_{II}(x) = 2B \cos(qx) = \Psi_{II}(-x)$$

$$\Psi_I = Ae^{\kappa x} \text{ und } \Psi_{III} = Ae^{-\kappa x}$$

Da die Lösungen bei $x = -a$ stetig sein müssen, folgt:

$$Ae^{-\kappa a} = 2B \cos(qa) \text{ und } \kappa Ae^{-\kappa a} = q2B \sin(qa)$$

$\Rightarrow \kappa = q \tan(qa)$ (g) ungerade Lösung:

$$\Psi_I = Ae^{\kappa x} \text{ und } \Psi_{III} = Ae^{-\kappa x}$$

$$\Psi_{II} = \tilde{B} \sin(qx)$$

$$\text{bei } x = -a: Ae^{-\kappa a} = -\tilde{B} \sin(qa)$$

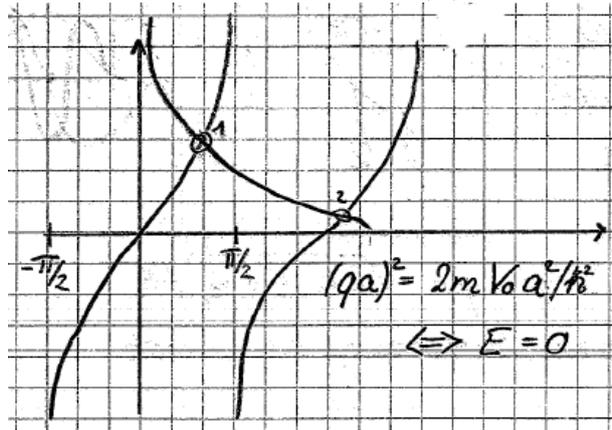
$$\kappa Ae^{-\kappa a} = q\tilde{B} \cos(qa)$$

$$\Rightarrow \kappa = -q \cot(qa)$$

Lösung der Gleichung (g): Drücke κ durch q aus:

$$\rightarrow \kappa = \sqrt{2mV_0/\hbar^2} - q$$

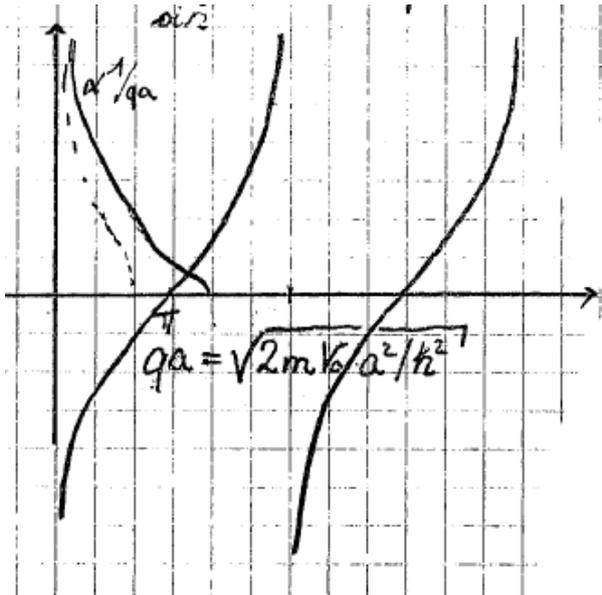
$$(g): \frac{\sqrt{2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2} - (qa)^2}}{qa} = \tan(qa) = \frac{\sin(qa)}{\cos(qa)}$$



- Die Anzahl der Lösungen steigt mit V_0 , pro Intervall der Länge π eine Lösung \Rightarrow #gerader Lösung: $\sqrt{2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2}} / \pi$
- Es gibt immer mind. eine Lösung mit gerader Symmetrie, auch für $V_0 \rightarrow 0$.

ungerade Lösungen:

$$-\cot(qa) = \frac{\kappa a}{qa} = \frac{\sqrt{2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2} - (qa)^2}}{qa}$$



- Es gibt nicht immer eine Lösung mit ungerader Symmetrie, erst ab $\sqrt{2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2}} > \frac{\pi}{2}$ mind. eine Lösung.
- Eine Lösung pro Intervall der Länge π , # ungerade Lösungen $< \frac{\sqrt{2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2}} + \frac{\pi}{2}}{\pi}$

Zusammenfassung :

Energie E wächst monoton mit $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ (genaue Berechnung numerisch)

Zustand	$qa \in$	Symmetrie	# Knoten
Grundzustand	$[0, \frac{\pi}{2}]$	gerade	0
1. angeregter Zustand	$[\frac{\pi}{2}, \pi]$	ungerade	1
2. angeregter Zustand	$[\pi, 3\frac{\pi}{2}]$	gerade	2

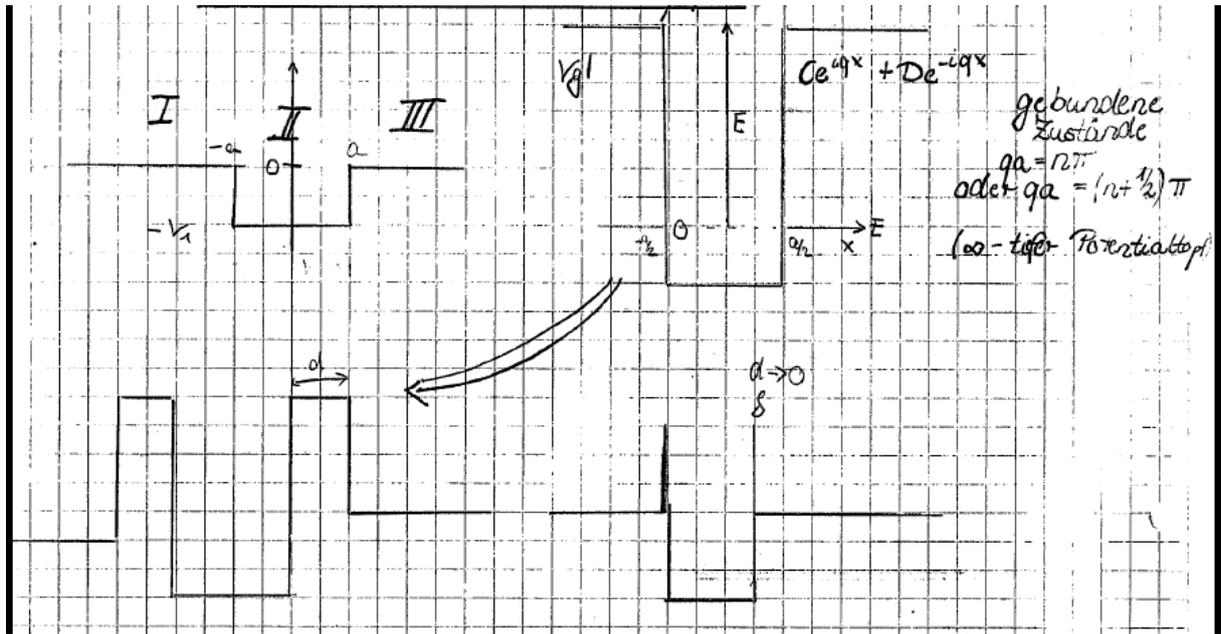
- Unendlich tiefer Potentialtopf $V_0 \rightarrow \infty$, betrachte Energie $\approx -V_0$:
 $\hbar q = \sqrt{2m(E + V_0)} \approx 1$
 $\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|} \rightarrow \infty$
 $\rightarrow \tan(qa) = \frac{\kappa a}{qa} \rightarrow \infty, qa = n\pi \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - V_0 = \frac{\hbar^2 (n\pi)^2}{2ma^2} - V_0 \propto n^2 < 0$
 $-\cot(qa) = \frac{\kappa a}{qa} \rightarrow \infty, qa = (n + \frac{1}{2})\pi \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 (n + \frac{1}{2})^2 \pi^2}{2ma^2} - V_0$
 Wellenfunktion im Inneren:

$$\Psi(x) \propto \cos(qx) \rightarrow \Psi(\pm a) \propto \cos((n + \frac{1}{2})\pi) = 0$$

$$\Psi(x) \propto \sin(qx) \rightarrow \Psi(\pm a) \propto \sin(n\pi) = 0$$

- $V(x)$ reell $\Rightarrow \hat{H}$ reell. Falls $\hat{H}\Psi = E\Psi$ gilt, so auch $\hat{H}\Psi^* = E\Psi^*$.
 \rightarrow mache Ψ reell: $\Psi = N(\Psi + \Psi^*)$ hat auch Eigenwert E.
- für gebundene Zustände sind Ψ und Ψ^* nicht linear unabhängig, d.h. sind nur eine Lösung.
- Bei Streuzuständen (z.B. e^{ikx} mit $k \in \mathbb{R}$) gehören Ψ und Ψ^* zu unterschiedlichen Randbedingungen.
 \Rightarrow Lasse Ψ komplex, da sonst Randbedingungen gemischt werden.

3.5 Resonanzen am Potentialtopf



gebundene Zustände $qa = n\pi$ oder $qa = (n + \frac{1}{2})\pi$ (∞ -tiefer Topf)

$$\Psi_I(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \quad (3.1)$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx} \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} \quad (3.2)$$

$$\Psi_{III}(x) = Se^{ikx} \quad (3.3)$$

Stetigkeit von Ψ und Ψ' bei $x = \pm a$

$$\rightarrow S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(qa) - \frac{i}{2}(\frac{k}{\hbar} + \frac{k}{q})\sin(qa)}$$

$$R(E) = S(E) \cdot \frac{i}{2}(\frac{q}{k} - \frac{k}{q})\sin(2qa)$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist:

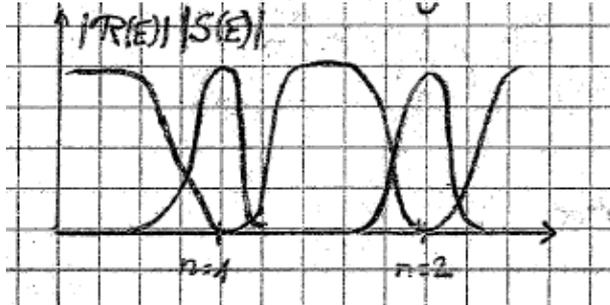
$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\frac{q}{k} - \frac{k}{q})^2 \sin^2(2qa)}$$

$$|R(E)|^2 = 1 - |S(E)|^2$$

Betrachte $|R(E)|^2 = |S(E)|^2 \frac{1}{4}(\frac{q}{k} - \frac{k}{q})^2 \sin^2(2qa)$:

\rightarrow hat Nullstellen bei $2qa = n\pi, n = 0, 1, 2, \dots$

Für diese Energie ist $|R|^2 = 0, |S(E)|^2 = 1 \Rightarrow$ vollständige Transmission

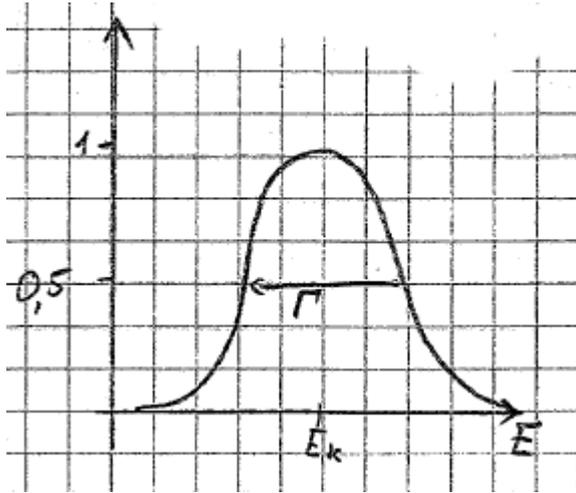


3 Eindimensionale Probleme

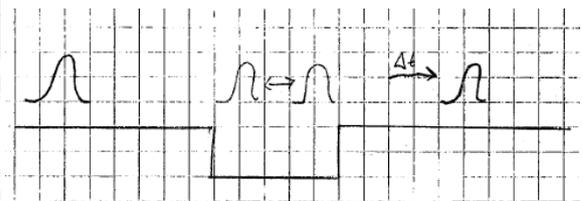
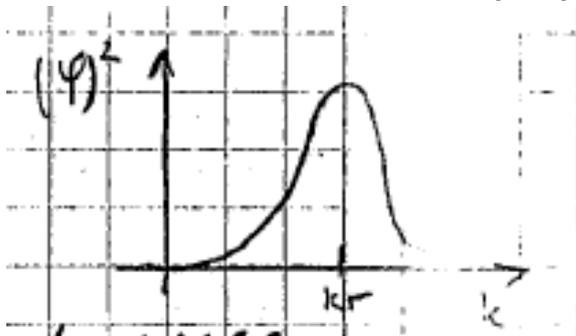
Transmissionsmaxima bei Resonanzenergien: $E_k = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - V_0$

Resonanzenergien entsprechen gebundenen Zuständen eines Potentials, bei dem $V(x)$ für $|x| > a$ groß ist. Vgl. mit Anregung von Oszillatoren in Optik/Akustik, Resonanzen bei Eigenfrequenzen. Die Eigenfrequenzen beim Potentialtopf sind durch Energieniveaus des ∞ -hohen Topfes gegeben.

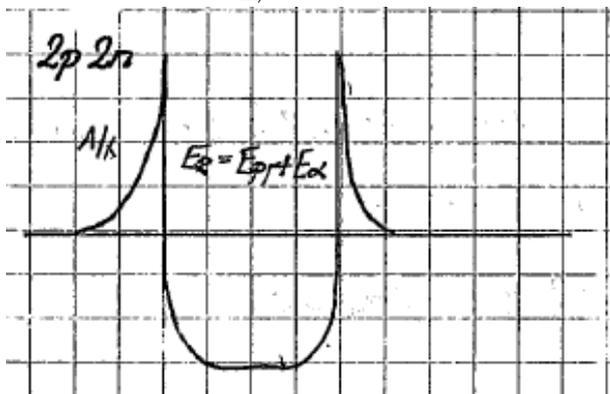
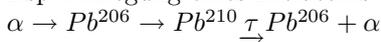
- Je höher E ist, desto breiter sind die Resonanzen.
- Je tiefer $V(x)$ ist, desto schärfer sind die Resonanzen.
- In der Nähe von E_R kann man schreiben: $|S(E)|^2 = \frac{(\frac{\Gamma}{2})^2}{(E-E_R)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2}$ (Lorentz-Kurve/Breit-Wigner)



- Schickt man ein Wellenpaket (mit k-Werten um $k = \sqrt{2mE_R}/\hbar$ zentriert) auf den Potentialtopf, erfährt die transmittierte Welle eine Verzögerung von $\Delta t \approx \frac{2\hbar}{\Gamma}$



Bsp: Anregung eines Bleiatoms:



$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$ Breite gibt Zerfallszeit der Resonanz an!

4 Weitere Elemente Der Quantentheorie

4.1 Unschärfe-Relation

Bislang:

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

Allgemein: Seien H_1 und H_2 zwei hermitesche Operatoren und Ψ ein beliebiger quantenmechanischer Zustand, dann gilt:

$$\Delta H_1 \Delta H_2 \geq \frac{1}{2} | \langle [H_1, H_2] \rangle |$$

wobei $\langle H_1 \rangle = (\Psi, H_1 \Psi)$ und $(\Delta H_1)^2 = \langle H_1 - \langle H_1 \rangle \rangle^2$

Bsp: Ort und Impuls: $[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$ mit $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

$$\rightarrow | \langle [\hat{p}_x, \hat{x}] \rangle | = | (\Psi, \frac{\hbar}{i} \Psi) | = \frac{\hbar}{i} \underbrace{(\Psi, \Psi)}_1$$

$$\Rightarrow \Delta \hat{p}_x \Delta \hat{x} \geq \frac{1}{2} \left| \frac{\hbar}{i} \right| = \frac{\hbar}{2}$$

Beweis der allgemeinen Unschärfe:

Benötigt: Schwarz'sche Ungleichung: ϕ, ψ Wellenfunktionen. Dann gilt $|(\phi, \psi)|^2 \leq (\phi, \phi) \cdot (\psi, \psi)$

Beweis der Schwarz'schen Ungleichung:

$\phi = 0$ ist trivial

$\phi \neq 0$: Schreibe $\psi = z\phi + \chi$ mit $z = \frac{(\phi, \psi)}{(\phi, \phi)}$, $(\chi, \phi) = 0$, d.h. $\chi \perp \phi$

$$\rightarrow (\psi, \psi) = (z\phi + \chi, z\phi + \chi) = z^* z (\phi, \phi) + z^* (\phi, \chi) + z (\chi, \phi) + (\chi, \chi)$$

$$\rightarrow (\psi, \psi) \geq |z|^2 (\phi, \phi) = \frac{|(\phi, \psi)|^2}{(\phi, \phi)^2} (\phi, \phi)$$

$$\text{d.h. } (\psi, \psi)(\phi, \phi) \geq |(\phi, \psi)|^2$$

Def. $\tilde{H}_1 = H_1 - \langle H_1 \rangle$ und $\tilde{H}_2 = H_2 - \langle H_2 \rangle$

Schwarz: $(\tilde{H}_1 \Psi, \tilde{H}_1 \Psi)(\tilde{H}_2 \Psi, \tilde{H}_2 \Psi) \geq |(\tilde{H}_1 \Psi, \tilde{H}_2 \Psi)|^2$

$$(\Psi, \tilde{H}_1^2 \Psi)(\Psi, \tilde{H}_2^2 \Psi) \geq |(\Psi, \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 \Psi)|^2$$

$$\text{Schreibe } \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 = \frac{1}{2} \{ \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 \} + \frac{1}{2} [\tilde{H}_1, \tilde{H}_2]$$

$$\{ \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 \} \text{ ist hermitisch: } (\tilde{H}_1 \tilde{H}_2 + \tilde{H}_2 \tilde{H}_1)^\dagger = \tilde{H}_2^\dagger \tilde{H}_1^\dagger + \tilde{H}_1^\dagger \tilde{H}_2^\dagger = \tilde{H}_2 \tilde{H}_1 + \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 = \{ \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 \}$$

$$[\tilde{H}_1, \tilde{H}_2] \text{ ist antihermitisch: } (\tilde{H}_1 \tilde{H}_2 - \tilde{H}_2 \tilde{H}_1)^\dagger = \tilde{H}_2^\dagger \tilde{H}_1^\dagger - \tilde{H}_1^\dagger \tilde{H}_2^\dagger = \tilde{H}_2 \tilde{H}_1 - \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 = -[\tilde{H}_1, \tilde{H}_2]$$

Hermitesche Operatoren haben reelle Mittelwerte: $(\Psi, H \Psi)^* = (\int d^3x \Psi^*(\vec{x})(H \Psi(\vec{x}))^* = \int d^3x (H \Psi(\vec{x}))^* \Psi(\vec{x}) = (H \Psi, \Psi) = (\Psi, H \Psi) \in \mathbb{R}$

Antihermitesche Operatoren haben imaginäre Mittelwerte: $(\Psi, A \Psi)^* = (A \Psi, \Psi) = (\Psi, A^\dagger \Psi) = -(\Psi, A \Psi)$ rein imaginär.

$$\text{Damit } (\Psi, \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 \Psi)^2 = \frac{1}{2} (\Psi, \{ \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 \} \Psi) + \frac{1}{2} (\Psi, [\tilde{H}_1, \tilde{H}_2] \Psi)^2 = \frac{1}{4} |(\Psi, \{ \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 \} \Psi)|^2 + \frac{1}{4} |(\Psi, [H_1, H_2] \Psi)|^2$$

Damit gilt:

$$|(\Psi, \tilde{H}_1 \tilde{H}_2 \Psi)|^2 \geq \frac{1}{4} |(\Psi, [H_1, H_2] \Psi)|^2$$

also

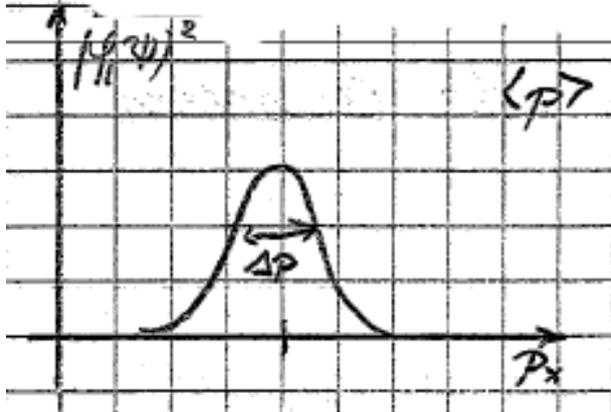
$$\begin{aligned} (\Psi, \tilde{H}_1^2 \Psi)(\Psi, \tilde{H}_2^2 \Psi) &\geq \frac{1}{4} |(\Psi, [H_1, H_2] \Psi)|^2 \\ &= (\Delta H_1)^2 \cdot (\Delta H_2)^2 \geq \frac{1}{4} |(\Psi, [H_1, H_2] \Psi)|^2 \text{ da } \tilde{H}_1 = (H_1 - \langle H_1 \rangle) \end{aligned}$$

4 Weitere Elemente Der Quantentheorie

Bemerkung: Energie-Zeit-Unschärfe: Zeit entspricht keinem Operator in der nichtrel. Quantenmechanik ($t \hat{=} \text{Parameter}$). Dennoch gilt im Allgemeinen die Energie-Zeit-Unschärfe

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

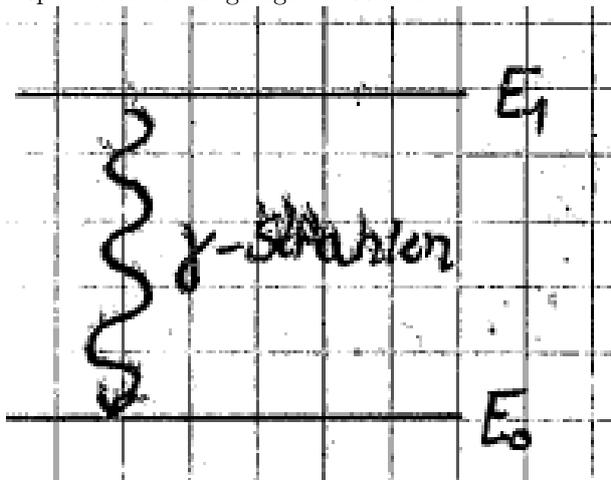
Bsp: Wellenpaket:



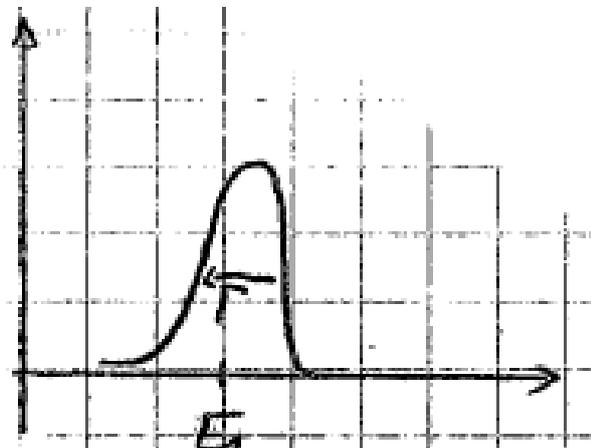
Energieschwankung $\Delta E = \frac{p}{m} \Delta p \approx v_0 \Delta p$ mit $v_0 = \frac{p_0}{m}$
 Zeit, die zum Durchlaufen von Δx benötigt wird: $\Delta t = \frac{\Delta x}{v_0}$

$$\Delta E \cdot \Delta t = v_0 \Delta p \cdot \frac{\Delta x}{v_0} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bsp: Breite von angeregten Zuständen:



Angeregter Zustand E_1 , Zerfallszeit τ



Breite des angeregten Zustands
 $\Delta E \sim \Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau}$

4.2 Dirac-Notation

5 Bahndrehimpuls

5.1 Drehung

Transformation von Operatoren

Sei $A\Psi(x) = \Phi(x)$, Schreibe $U = U_{\vec{\phi}}$

Es gilt: $U^\dagger U = \mathbb{1}$, bzw. $U^{-1} = U^\dagger$.

$\rightarrow U A \Psi(\vec{x}) = U A U^\dagger (U \Psi(\vec{x})) = U \Phi(\vec{x}) \Rightarrow U A U^\dagger \Psi(\vec{x}) = \Phi(\vec{x}')$ (A transformiert Operator in \vec{x}' -System
 $\Rightarrow A' = U A U^\dagger$)

Infinitesimale Drehung um $\delta\vec{\phi} : U \simeq \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \vec{L} \simeq \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi_k L_k$

$\rightarrow A' = (\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi_k L_k) A (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi_k L_k) = A + \frac{i}{\hbar} \delta\phi_k (L_k A - A L_k) = A + \frac{i}{\hbar} \delta\phi_k [L_k, A]$

- Sei A drehinvariant (z.B. nur von $r = |\vec{x}|$ abhängig):
 Dann $A' = A$ unter Drehung ($|\vec{x}'| = |\vec{x}|$)
 $\Rightarrow [L_k, A] = 0$
 L_k und A haben gemeinsame Eigenfunktionen
 Bsp: H-Atom: Hamilton \hat{H} drehinvariant \Rightarrow Energie-Eigenfunktionen sind Drehimpulseigenfunktionen.

5.2 Eigenwerte des Drehimpuls

Algebraisch: Eigenwerte von L_k sind allein durch die Kommutatoren $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ festgelegt. L_i können nicht simultan diagonalisiert werden. \rightarrow Suche Eigenwertz.B. von L_z .

$[\vec{L}^2, L_z] = 0 \Rightarrow \vec{L}^2, L_z$ haben gemeinsame Eigenfunktionen.

Werkzeuge für Herleitung:

- Def. $L_\pm = L_x \pm iL_y$
 Es gilt: $(L_\pm)^\dagger = L_\mp$
- $[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$
- $[L_+, L_-] = [L_x + iL_y, L_x - iL_y] = -2i[L_x, L_y] = 2\hbar L_z$
- $[\vec{L}^2, L_\pm] = 0$
- $L_+ L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z$
- $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_+ L_- - \hbar L_z + L_z^2$
 $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_- L_+ + \hbar L_z + L_z^2$
 $\Rightarrow \vec{L}^2 = \frac{1}{2}(L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2$

\rightarrow Suche Lösungen zu $L_z |l, l_z\rangle = l_z |l, l_z\rangle$ mit $|l, l_z\rangle$ Eigenzustand zu L_z mit Eigenwert l_z und Eigenzustand zu \vec{L}^2 mit Eigenwert, welcher von l abhängt.

Betrachte $L_z L_\pm |l, l_z\rangle = L_\pm L_z |l, l_z\rangle \pm \hbar L_\pm |l, l_z\rangle = (l_z \pm \hbar)(L_\pm |l, l_z\rangle)$
 $L_\pm |l, l_z\rangle$ ist Eigenzustand zu L_z mit Eigenwert $l_z \pm \hbar$

Zustand $l, l_z\rangle$ Eigenzustand zu \vec{L}^2 , Eigenwertfunktion(1) zu L_z , Eigenwert l_z

L_\pm verändert l_z um $\pm\hbar \rightarrow$ Messe Eigenwert l_z in Einheiten von \hbar , schreibe $l_z = \hbar m \Rightarrow L_z L_\pm |l, m\rangle = \hbar(m \pm 1)L_\pm |l, m\rangle$

Sei nun $\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$, da $0 \leq l, m | \vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle < l, m |l, m\rangle$, d.h. $l \geq 0$

5 Bahndrehimpuls

$$\begin{aligned} \vec{L}^2(L_{\pm}|l, m\rangle) &= L_{\pm}\vec{L}^2|l, m\rangle = L_{\pm}m\vec{L}^2|l, m\rangle = L_{\pm}\hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)(L_{\pm}|l, m\rangle) \\ \Rightarrow |l, m\rangle \text{ und } L_{\pm}|l, m\rangle &\text{ haben gleichen Eigenwert } \hbar^2 l(l+1) \text{ von } \vec{L}^2! \\ \Rightarrow L_{\pm} &\text{ verändern nur m-Quantenzahl!} \\ 0 \leq \| \langle L_{\pm}|l, m\rangle \|^2 &= \langle l, m|L_{\mp}L_{\pm}|l, m\rangle = \langle l, m|\vec{L}^2 - L_z \mp \hbar L_z|l, m\rangle = (\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m) \langle l, m|l, m\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (l(l+1) - m(m \pm 1)) &\geq 0 \quad (*) \\ \text{Sei } \langle l, m|l, m\rangle &= 1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle$$

mit auf 1 normierten $|l, m \pm 1\rangle$

Betrachte (*):

$$\text{Sei } m > 0: l(l+1) \geq m(m+1) \Rightarrow m \leq l$$

$$\text{Sei } m < 0: l(l+1) \geq -|m|(-|m|-1) \geq |m|(|m|+1) \Rightarrow |m| \leq l$$

$$\text{D.h. } -l \leq m \leq l$$

Sei nun M das maximale m , $M \leq l$

$$\rightarrow L_+|l, M\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - M(M+1)}|l, M+1\rangle$$

$|l, M+1\rangle$ darf nach Annahme nicht existieren!

$$\Rightarrow \sqrt{l(l+1) - M(M+1)} = 0 \Rightarrow M = l!$$

Analog zeigt man: minimales $m = -l$

Starte nun mit $|l, m = l\rangle$:

$$\rightarrow L_-|l, l\rangle \propto |l, l-1\rangle$$

$$L_-^2|l, l\rangle \propto L_-|l, l-1\rangle \propto |l, l-2\rangle \text{ usw., bis } L_z - QZ \text{ gleich minimalem } m_{\min} = -l$$

D.h. $l - k = -l$ k -faches Absteigen muss zu $|l, -l\rangle$ führen $\Rightarrow l$ entweder ganzzahlig oder halbzahlig! m ebenso!

Es ergibt sich also $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ oder $l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ mit $m = -l, -l+1, \dots, l$

Zu jedem l gibt es $2l+1$ mögliche m -Werte

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

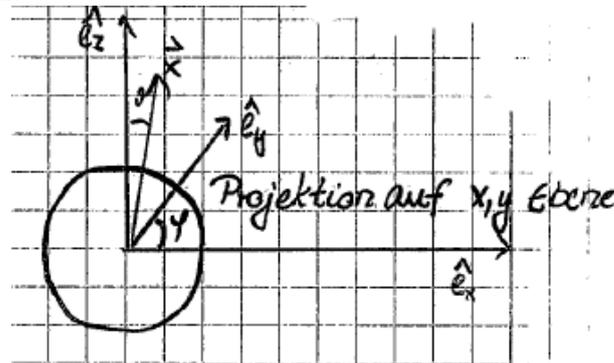
$$L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle$$

5.3 Drehimpulseigenfunktionen in Ortsdarstellung

Drehimpuls in Ortsdarstellung

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

Sphärische Koordinaten:



$$\vec{x} = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

$$\int d^3x := \int dr r^2 \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi = \int dr r^2 \int d\Omega \quad (\text{Raumwinkelelement } \int d\Omega = 4\pi)$$

$$\nabla = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{Aus E-Dyn})$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

⇒ Eigenfunktionen zu L_z und \vec{L}^2 können nun als r-unabhängig gewählt werden
 $\tilde{\psi}_{lm}(\vec{r}) = \Psi_{lm}(\theta, \phi) \cdot R(r)$, $R(r)$ beliebig

Lösungen der Eigenwertgleichungen

$$L_z \Psi_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m \Psi_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\vec{L}^2 \Psi_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{lm}(\theta, \phi)$$

heißen Kugelflächenfunktionen: $\Psi_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi)$

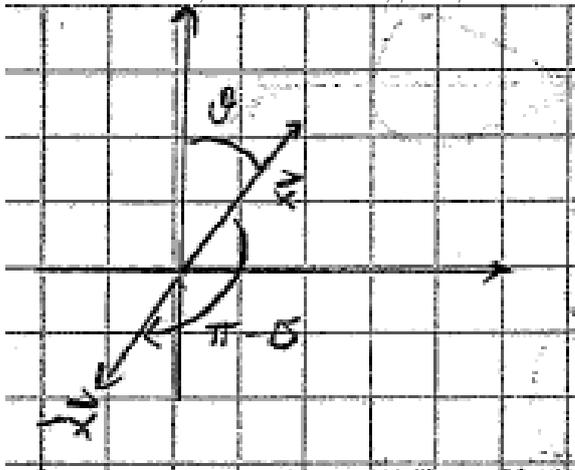
Die $Y_{lm}(\theta, \phi)$ bilden eine vollst. Orthonormalbasis auf Kugeloberfläche. Es gilt:

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} \Psi_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') = (\sin \theta)^{-1} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')$$

Wichtige Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen:

- $Y_{lm}(\theta, \phi) = f(\theta) e^{im\phi} \quad m = -l, \dots, l$
- $Y_{l,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m \Psi_{lm}^*(\theta, \phi) \Rightarrow Y_{l0}$ reell
- Parität: $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, d.h. $\theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi$



$PY_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta - \pi, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{l,m}(\theta, \phi) \rightarrow$
 geradzahlige l haben positive Parität, ungeradzahlige l haben negative Parität

- Explizit ist:

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_{21}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

$$Y_{22}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$$

s-, p-, d-Orbitale

s-Orbital Y_{00} konstant

p-Orbitale: $p_z \propto z \propto \cos \theta$

$$p_x = \frac{-1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1,-1}) \propto \sin \theta \cos \phi$$

$$p_y = \frac{-1}{\sqrt{2}i}(Y_{11} + Y_{1,-1}) \propto \sin \theta \sin \phi$$

d-Orbitale: $d_{3z^2-r^2} \propto Y_{20}(\theta, \phi) \propto (3 \cos^2 \theta - 1)$

$$Y_{21} + Y_{2,-1} \propto \sin \theta \cos \theta \sin \phi \propto d_{yz}$$

$$Y_{21} - Y_{2,-1} \propto \sin \theta \cos \theta \cos \phi \propto d_{xz}$$

$$Y_{22} + Y_{2,-2} \propto \sin^2 \theta \cos 2\phi \propto d_{x^2-y^2}$$

$$Y_{22} - Y_{2,-2} \propto \sin^2 \theta \sin 2\phi \propto d_{xy}$$

6 Zentralpotential

6.1 Kugelkoordinaten

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

Betrachte $\vec{L}^2 = (\vec{x} \times \vec{p})^2 = \vec{x}^2 \vec{p}^2 - (\vec{x}\vec{p})^2 + i\hbar \vec{x}\vec{p}$
 Schreibe $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{\hbar}{i} (\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial}{\partial \phi})$
 $\vec{x} = r \hat{e}_r \quad \vec{x}^2 = r^2 \quad \vec{x} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} r \partial_r$
 $\Rightarrow \vec{p} = \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} [(r \partial_r)^2 + r \partial_r]$
 Zudem $(r \partial_r)^2 f(r) = r \partial_r r \partial_r f = r^2 \partial_r^2 f + r \partial_r f$

Damit ist die Schrödingergleichung für Zentralpotential in Kugelkoordinaten:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \right] \Psi(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \Psi(\vec{x}) = E \Psi(\vec{x})$$

Separationsansatz: $\Psi(\vec{x}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R(r)$, $\vec{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$

$$\rightarrow \left[-\cancel{Y_{lm}} \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) R(r) + R(r) \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \cancel{Y_{lm}} + V(r) \cancel{Y_{lm}} R(r) \right] = E \cancel{Y_{lm}} R(r)$$

\rightarrow Radialgleichung $[-\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) + V_{eff}(r)] R(r) = E R(r)$

$V_{eff} = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalterm } >0 (=0 \text{ für } l=0)}$ effektives Potential

6.2 Radialgleichung

Setze $R(r) = \frac{U(r)}{r}$

$$(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) \frac{U(r)}{r} = \frac{1}{r} \partial_r^2 U(r)$$

$$\rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] U(r) = E U(r)$$

\cong 1D-Schrödingergleichung, allerdings $r \in [0, \infty]$

- Normierbarkeit gebundener Zustände

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x})|^2 = \int_0^\infty dr \cancel{r^2} \frac{|U(r)|^2}{\cancel{r^2}} = \int_0^\infty dr |U(r)|^2 < \infty$$

$$\Rightarrow |U(r)| \ll \frac{\epsilon}{r^{\frac{1}{2}+\epsilon}} \quad \epsilon > 0 \text{ (Abfallverhalten für } r \rightarrow \infty)$$

- $r \rightarrow 0$: $\nabla^2(\frac{U(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi)) = \frac{1}{r} \nabla^2(U(r) Y_{lm}) + U(r) Y_{lm} \underbrace{\nabla^2 \frac{1}{r}}_{-4\pi \delta(\vec{r})}$

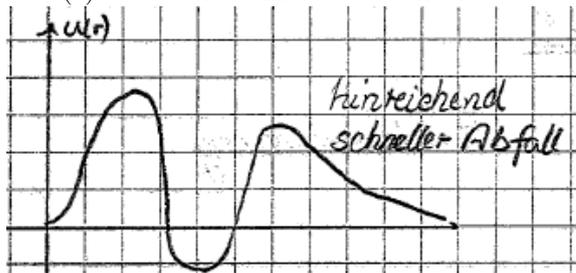
$\delta(\vec{r})$ macht Lösung unmöglich bis auf Fälle, in denen $V(r) \propto \delta(\vec{r}) + \text{Rest}$
 $\Rightarrow U(r) \propto r^n, n \geq 1$ für $r \rightarrow 0$

z.B. $U(r) = a_1 r + a_2 r^2 + \dots$

$\frac{U(r)}{r} = a_1 + a_2 r + \dots \rightarrow$ keine δ -Funktion

6 Zentralpotential

$\Rightarrow U(r)$ verschwindet mindestens linear bei $r \rightarrow 0$



wie bei ungeraden Lösungen von 1D-Problemen auf $[-\infty, \infty]$, dort: nur mind. ein gerader gebundener Zustand für beliebig kleines V , aber nicht notwendig ein ungerader gebundener Zustand!
 \Rightarrow eventuell kein gebundener Zustand in $D=3$, minimale Potentialstärke erforderlich!

- Genaueres Grenzverhalten: (z.B. für $V(r) \propto \frac{1}{r}$
 $r \rightarrow 0$: Zentrifugalterm dominant, da $\propto \frac{1}{r^2} \rightarrow$ vernachlässige $V(r), E$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] U(r) = 0$$

Allgemeine Lösung:

$$U(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}$$

Nur $A \neq 0, B = 0$ Lösungen brauchbar, da $U(0) \equiv 0$

$r \rightarrow \infty$: $V(r)$, Zentrifugalterm fallen ab, sind vernachlässigbar

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 U(r) = EU(r)$$

$$\rightarrow U(r) \propto e^{-\kappa r} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

($E < 0$ für gebundene Zustände)

7 Kopplung an elektromagnetisches Feld

7.1 Hamilton-Operator

Elektromagnetische Felder \vec{E}, \vec{B} werden durch Potentiale beschrieben:

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\partial_t\vec{A}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

klassische Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{1}{2m} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}, t)\right)^2}_{\text{kinetischer Impuls}} + e\Phi(\vec{x}, t)$$

Übergang zur Quantenmechanik : $\vec{p} \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$
 $\vec{x} \rightarrow \hat{x}$

⇒ Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\hat{x}, t) \right)^2 + e\Phi(\hat{x}, t)$$

Ausmultiplizieren der Klammer

$$\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\hat{x}, t)$$

Mischterm:

$$\frac{-e}{2mc} \frac{\hbar}{i} (\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla) \Psi(\vec{x}, t)$$

Benutze Coulomb-Eichung:

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0 \Rightarrow \nabla \vec{A} \Psi = \vec{A} \nabla \Psi$$

$$\rightarrow \frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \nabla \Psi \tag{7.1}$$

\vec{A}^2 -Term:

$$\frac{e^2}{2mc} \vec{A}^2 \Psi(\vec{x}, t) \tag{7.2}$$

7.2 Konstantes Magnetfeld

Sei \vec{B} unabhängig von \vec{x} und t

$$\rightarrow \vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{x} \times \vec{B}) \quad A_k = -\frac{1}{2}\epsilon_{klm}x_l B_m$$

$$(\nabla \times \vec{A})_i = -\frac{1}{2} \underbrace{\epsilon_{ijk}}_{=\epsilon_{kij}} \partial_j \epsilon_{klm} x_l B_m$$

Nutze $\epsilon_{kij}\epsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{jl}\delta_{im}$

$$\rightarrow (\nabla \times \vec{A})_i = -\frac{1}{2}(\delta_{ij}\delta_{jm}\partial_j x_l B_m - \delta_{jl}\delta_{im}\partial_j x_l B_m)$$

$$= -\frac{1}{2}(B_i - B_i \underbrace{\delta_{jl}\delta_{jl}}_3)$$

$$= -\frac{1}{2}(-2B_i) = B_i$$

$$\text{Term 7.1} = -\frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{B}) \cdot \nabla \Psi$$

7 Kopplung an elektromagnetisches Feld

$$= -\frac{(-i\hbar)e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{B}) \cdot B\Psi = -\frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B}\Psi$$

$$\text{Term 7.2} = \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{x} \times \vec{B})^2 \Psi$$

$$= \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{x}^2 \vec{B} - (\vec{x} \cdot \vec{B})^2) \Psi$$

$$\text{Sei } \vec{B} = B\hat{e}_z$$

$$\rightarrow \text{Term 7.2} = \frac{e^2}{2mc^2} ((x^2 + y^2 + z^2)B^2 - z^2B^2) \Psi$$

$$7.2 = \frac{e^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) B^2 \Psi$$

$$\text{Größenordnungen im H-Atom: } \vec{B} \parallel \hat{e}_z : \vec{B} \cdot \vec{L} = BL_z \quad L_z \Psi_{nlm_l} = \hbar m_l \Psi_{nlm_l}$$

$$\frac{|\langle 7.2/\Psi \rangle|}{|\langle 7.1/\Psi \rangle|} = \frac{\frac{e^2}{2mc^2} \langle x^2 + z^2 \rangle B^2}{\frac{e}{2mc} B \hbar m_l} \approx \frac{e}{4c} \frac{a_B^2}{\hbar} B \approx 1,1 \cdot 10^{-10} B \text{ in Gau\ss}$$

\Rightarrow 7.2 vernachlässigbar gegenüber 7.1 in Atomphysik

Bemerkung: Term 7.1 trägt zum Paramagnetismus bei, 7.2 zum Diamagnetismus

$$\frac{|7.1|}{\text{Coulomb-Energie}} = \frac{|\frac{e}{2mc} \hbar B|}{\frac{e^2}{a_B}} \approx 2 \cdot 10^{-10} B \text{ in Gau\ss}$$

7.3 Normaler Zeeman-Effekt

$$\text{Sei } \Phi = 0, \vec{B} = B\hat{e}_z$$

$$\text{H-Atom: } H = \underbrace{\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \right)}_{H_0} - \frac{e}{2mc} BL_z$$

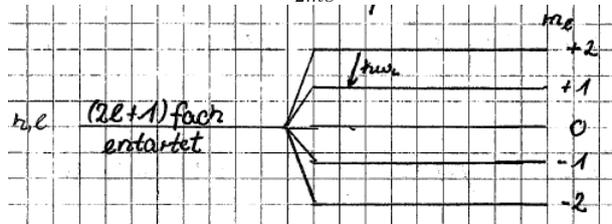
$$H_0 \Psi_{nlm_l} = E_n \Psi_{nlm_l} \text{ mit } E_n = -\frac{E_{Ry}}{n^2}, E_{Ry} = 13,6 \text{ eV}$$

$$L_z \Psi_{nlm_l} = \hbar m_l \Psi_{nlm_l} \text{ (Eigenfkt. zu } L_z)$$

$$\text{Damit } H \Psi_{nlm_l} = \left(\underbrace{E_n - \frac{e\hbar}{2mc} B}_{\text{Spektrum für } B \neq 0} m_l \right) \Psi_{nlm_l} \quad e = -e_0, e_0: \text{ pos. Elementarladung}$$

$\Rightarrow m_l$ -Entartung aufgehoben (klar, da Magnetfeld Rotationsinvarianz bricht)

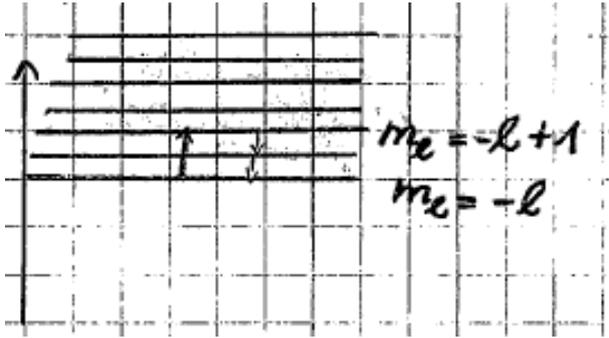
Aufspaltung für m fest: $\frac{e_0 \hbar}{2mc} B m_l = \hbar \omega_l m_l$ mit Larmor-Frequenz $\omega_l = \frac{e_0}{2mc} B$



$$\text{Aufspaltung } \frac{e_0 \hbar B}{2mc} = 13,6 \text{ eV} \cdot 4 \cdot 10^{-10} B \text{ in Gau\ss}$$

$$\text{Bei } B = 1 \text{ T} = 10^4 \text{ Gau\ss} \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ eV (sehr klein)}$$

Atom, bei dem nicht alle m_l -Niveaus besetzt sind.



Energetisch günstigster Zustand hat $\langle m_l \rangle < 0 \rightarrow$
 magnetisches Moment $\langle \mu_z \rangle = \frac{e}{2mc} \langle L_z \rangle = \frac{\hbar e}{2mc} \underbrace{\langle m_l \rangle}_{<0} > 0$

\rightarrow für $\vec{B} = B\hat{e}_z$ folgt $\langle \vec{\mu} \rangle = \langle \mu \rangle \hat{e}_z \Rightarrow$ Magnetisierung und B-Feld in gleiche Richtung "Paramagnetismus"

7.4 Eichtransformationen

Elektrodynamik: $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda(\vec{x}, t)$

$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\partial_t\Lambda(\vec{x}, t)$

\Rightarrow lässt \vec{E}, \vec{B} invariant

Dabei in Schrödinger-Gleichung: $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \rightarrow (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' - \frac{e}{c}\nabla\Lambda)$

Sei $\Psi(\vec{x}, t)$ Lösung der Schrödinger-Gleichung mit \vec{A} , d.h.

$$\frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2\Psi(\vec{x}, t) + e\Phi\Psi(\vec{x}, t) = i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x}, t)$$

Dann erfüllt $\Psi'(\vec{x}) = \Psi(\vec{x}, t)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}$ die Schrödinger-Gleichung mit \vec{A}'

$$(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}')\Psi' = (\vec{p}\Psi)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} + \Psi(\frac{\hbar}{i}\nabla e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}) - \frac{e}{c}\vec{A}'\Psi e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} - \frac{e}{c}(\nabla\Lambda)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} + \Psi(\frac{e}{c}\nabla\Lambda)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\Psi$$

$$e\Phi'\Psi' = (e\Phi - \frac{e}{c}\partial_t\Lambda)\Psi'$$

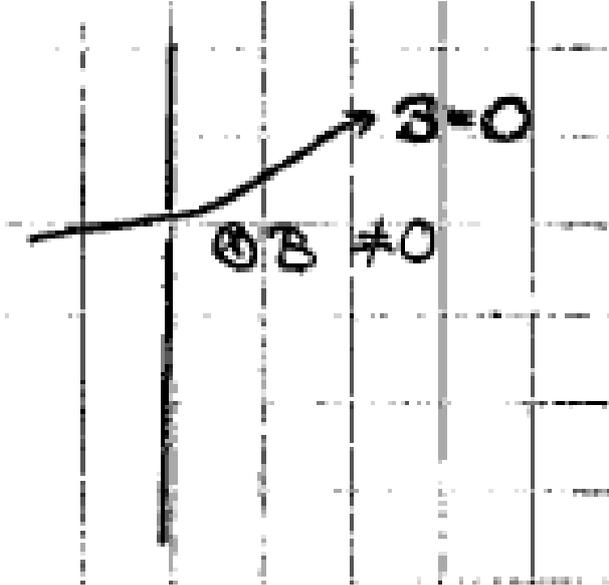
$$i\hbar\partial_t\Psi' = (i\hbar\partial_t\Psi)e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)} - (\frac{e}{c}\partial_t\Lambda)\Psi e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}')^2\Psi' + e\Phi'\Psi' = i\hbar\partial_t\Psi'$$

Physik ist invariant bygl. Umeichung $\vec{A} \rightarrow \vec{A}', \Phi \rightarrow \Phi', \Psi \rightarrow \Psi'$, da $|\Psi'|^2 = |\Psi|^2$, d.h. Aufenthaltswahrscheinlichkeiten unverändert, "U(1) Eichinvarianz"

7.5 Aharonov-Bohm-Effekt

Betrachte Elektron, welches sich in Bereich mit $\vec{B} = 0$ bewegt.



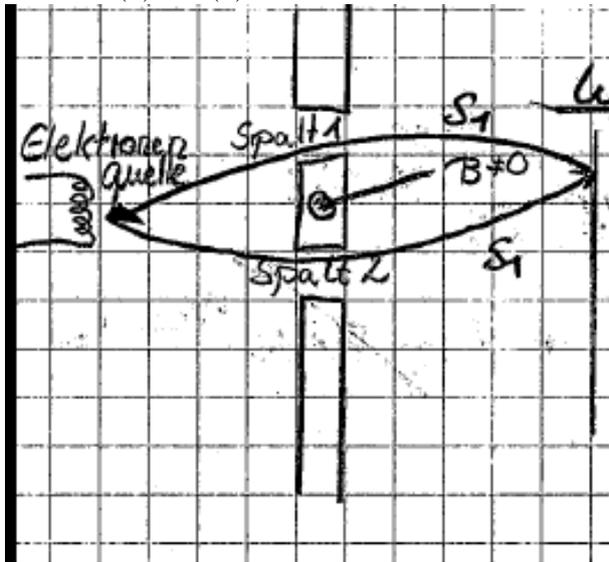
Rotationsfreies Feld: Möglichkeit 1 für Vektorpotential

tial $\vec{A} = 0 \Rightarrow$ Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$

Möglichkeit 2: $\vec{A} = \nabla\Lambda(\vec{x}) \Rightarrow \Psi'(\vec{x}) = \Psi(\vec{x})e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)}$

Schreibe $\Lambda(\vec{x}) = \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \nabla\Lambda(\vec{x}) \cdot d\vec{s} = \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A}'(\vec{x}) \cdot d\vec{s}$

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



Wellenfkt. mit Spalt 2 zu: $\Psi'_1(\vec{x}) = \Psi_1(\vec{x})e^{i\frac{e}{\hbar c} \int_{\vec{x}_{0,1}}^{\vec{x}} \vec{A}'(\vec{x}) \cdot d\vec{s}}$

Wellenfkt. mit Spalt 1 zu: $\Psi'_2(\vec{x}) = \Psi_2(\vec{x})e^{i\frac{e}{\hbar c} \int_{\vec{x}_{0,2}}^{\vec{x}} \vec{A}'(\vec{x}) \cdot d\vec{s}}$

Wahrscheinlichkeitsamplitude f. beide Spalte offen:

$$\Psi'(\vec{x}) = \Psi'_1(\vec{x}) + \Psi'_2(\vec{x}) = \left(\Psi_1(\vec{x})e^{i\frac{e}{\hbar c} \int_{1-2} \vec{A}'(\vec{x}) \cdot d\vec{s}} \right) \Psi_2(\vec{x}) e^{i\frac{e}{\hbar c} \int_2 \vec{A}'(\vec{x}) \cdot d\vec{s}}$$

$$\int_{1-2} \vec{A} \cdot d\vec{s} = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{s}$$

Es ist $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{s} = \int_F d\vec{F} \cdot \nabla \times \vec{A} = \int_F dF \cdot \vec{B} = \Phi_M$ (magnetischer Fluss)

$$|\Psi'(\vec{x})|^2 = |\Psi_1(\vec{x})e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi_M} + \Psi_2(\vec{x})|^2$$

\Rightarrow Interferenzbild hängt von \vec{B} in Bereich zwischen Spalten ab!

Zu Φ_M trägt nur Bereich mit $\vec{B} \neq 0$ bei, der von Elektronen nicht durchquert wird \Rightarrow nichtlokaler Effekt

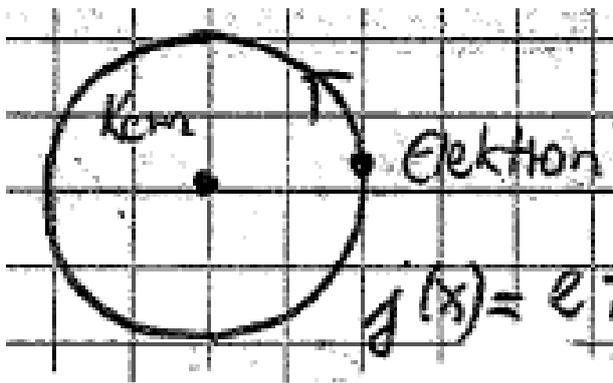
- Für $\vec{B} \neq 0$ ist $\vec{A} = 0$ überall auf Pfad 1 und 2 nicht möglich.

8 Spin

8.1 Stern-Gerlach-Experiment

Klassisch: Magnetisches Moment einer Stromverteilung

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2c} \int d^3x' \vec{x}' \times \vec{j}(\vec{x}')$$



$$\vec{j}(\vec{x}') = e \frac{\vec{p}}{m} \delta(\vec{x}' - \vec{x}(t)) \text{ (für Punktladung } e)$$

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{p}) = \frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Quantenmechanik :

$$\hat{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Die Drehimpulseigenzustände $|l, m_l\rangle$ haben Eigenwerte von $\hat{\mu}_z = \frac{e\hbar}{2mc} m_l$
 $\Rightarrow 2l + 1$ mögliche Messwerte für $\hat{\mu}_z$

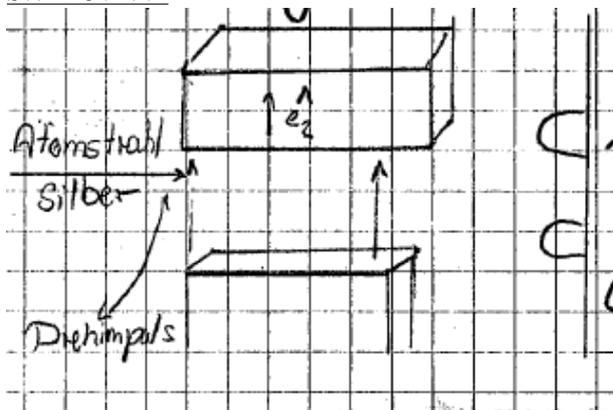
Im Magnetfeld $H_{\vec{B}} = -\frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}$

(auch klassisch $V_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ Potential)

Inhomogenes Magnetfeld: $\nabla|\vec{B}| = B'_z \hat{e}_z$

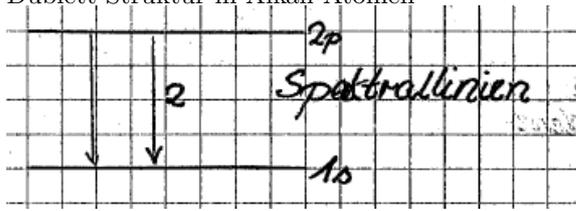
\Rightarrow Kraft $\vec{F} = \nabla(-V_B) = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = (\text{Bei Magnetfeld in z-Richtung}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{e}_z$

Stern-Gerlach



Atome erfahren Kraft $\parallel \hat{e}_z$ je nach μ_z

- Dublett-Struktur in Alkali-Atomen



⇒ 1926 Goudsmith und Uhlenbeck schlagen internen Drehimpuls des Elektrons mit $l_{int} = \frac{1}{2}\hbar$ vor
 → $m_{l_{int}} = \pm \frac{\hbar}{2}$
 Interner Drehimpuls heißt Spin $\vec{L}_{int} = \vec{S}$, $l_{int} = \frac{1}{2}$ mit Eigenwerten von S_z , $m_s = \pm \frac{\hbar}{2}$

8.2 Formale Beschreibung von Spin $\frac{1}{2}$

Sei \vec{S} Drehimpulsoperator zu $s = \frac{1}{2}\hbar$, \hat{e} Einheitsvektor

$$\rightarrow \hat{e} \cdot \vec{S} |\hat{e}, \pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\hat{e}, \pm \rangle$$

d.h. 2 Einstellungen bzgl. Achse \hat{e}

Wähle $\hat{e} = \hat{e}_z$ (Standardwahl) → $S_z |\pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm \rangle$

Schreibe:

$|+\rangle = |\uparrow\rangle$ "Spin up"

$|-\rangle = |\downarrow\rangle$ "Spin down"

- Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal: $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$ und normiert: $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$
- \vec{S} ist Drehimpuls → Vertauschungsrelationen
 $[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$
 $\rightarrow S_{\pm} = S_x \pm iS_y \rightarrow S_x = (S_+ + S_-)/2 \quad S_y = (S_+ - S_-)/2i$
 $[S_z, S_{\pm}] = \hbar S_{\pm}$
 $[S_+, S_-] = 2\hbar S_z$
- \vec{S}^2 hat Eigenwerte $\hbar^2 s(s+1) = \hbar^2 \frac{3}{4}$
- Analog zu Betrachtungen für allgemeine l, m_l findet man: $S_+ |\uparrow\rangle = 0$ (vgl. $L_+ |l, m_l = +l\rangle = 0$)
 $S_- |\downarrow\rangle = 0$
 $S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle$ Spin-flip down → up
 $S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle$

- $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ spannen 2-dim-Raum auf

Schreibe $|\uparrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$

$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

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

Kurz: $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

(Vektorpfeil "lebt" im Ortsraum, 2×2 -Struktur im Spinraum)

Eigenschaften der Pauli-Matrizen σ_i

- $\sigma_i, \quad i = x, y, z$ hermetisch
- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \underline{\underline{1}}$
- $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$
Dabei auch $\sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k$
- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$
- $\sigma_x \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z = i \cdot \underline{\underline{1}}$

Gelten allgemein, auch für andere Wahl von \hat{e}

8.3 Allgemeine Spinzustände und Spinoren

Allgemein: Spinzustand ist Superposition $|\chi\rangle = \alpha_+|\uparrow\rangle + \alpha_-|\downarrow\rangle, \alpha_{\pm} \in \mathbb{C}$

Normierung $\langle\chi|\chi\rangle = |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$

“Spinorenschreibweise”: $|\uparrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$|\chi\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \chi$ “2er-Spinor”, auch $\chi = \alpha_+\chi_{\uparrow} + \alpha_-\chi_{\downarrow}$

Im Spinraum gilt die Vollständigkeitsrelation: $|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \underline{\underline{1}}$

bzw. $\chi_{\uparrow}\chi_{\uparrow}^T + \chi_{\downarrow}\chi_{\downarrow}^T = \underline{\underline{1}}$

8.4 Magnetischer Moment des Spins

Bei Bahnbewegung $\vec{\mu}_{Bahn} = \frac{e}{2mc}\vec{L}_{Bahn}$

Spin hängt nicht mit Bahnbewegung des Elektrons (punktförmig) zusammen, schreibe

$$\vec{\mu} = g\frac{e}{2mc}\vec{S} \text{ mit } g \text{ aus Experiment}$$

Experimentell: $g=2$ (erklärbar durch Dirac-Theorie), genauer $g = 2(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0,3\frac{\alpha^2}{\pi^2} + O(\alpha^3))$ ($\alpha \approx \frac{1}{137}$ Feinstrukturkonstante)

Kopplung von Elektron an \vec{B} -Feld:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\vec{B}} &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -(\vec{\mu}_{Bahn} + \vec{\mu}_{Spin})\vec{B} \\ \hat{H}_{\vec{B}} &= -\frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \\ \text{mit } \mu_B &= -\frac{e\hbar}{2mc} = \frac{e_0\hbar}{2mc} \end{aligned}$$

8.5 Spin- und Bahnzustände

\vec{S} kommutiert mit $\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}$, usw.

Einfachster Ansatz für Gesamtzustand des Elektrons

$$|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_{Bahn} |\chi\rangle_{Spin} \text{ “Produktzustand”}$$

bzw. Wellenfunktion

$$\langle\uparrow|\langle\vec{x}||\Psi\rangle = \Psi(\vec{x})\alpha_+ = \Psi_+(\vec{x}) \text{ “}\uparrow\text{-Komponente”}$$

Allgemeiner

$$|\Psi\rangle = \int d^3x (\Psi_+(\vec{x})|x\rangle|\uparrow\rangle + \Psi_-(\vec{x})|x\rangle|\downarrow\rangle)$$

$$\langle\Psi| = \int d^3x' (\Psi_+(\vec{x}')\langle x'|\langle\uparrow| + \Psi_-(\vec{x}')\langle x'|\langle\downarrow|)$$

Gesamthilbertraum $H = H_{\text{Bahn}} \otimes H_{\text{Spin}} = \underbrace{L^2(\mathbb{R}^3)}_{\text{quadratintegrale Fkt}} \otimes \underbrace{\mathbb{C}^2}_{\text{Linearkombination von } |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle}$

$$\rightarrow \Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}) \\ \Psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

Norm: $\langle\Psi|\Psi\rangle = \int d^3x d^3x' (\Psi_+^*(\vec{x}')\Psi_+(\vec{x})\langle\vec{x}'|\vec{x}\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle + \Psi_+^*(\vec{x}')\Psi_-(\vec{x})\langle\vec{x}'|\vec{x}\rangle\langle\uparrow|\downarrow\rangle + \dots)$ (8.1)

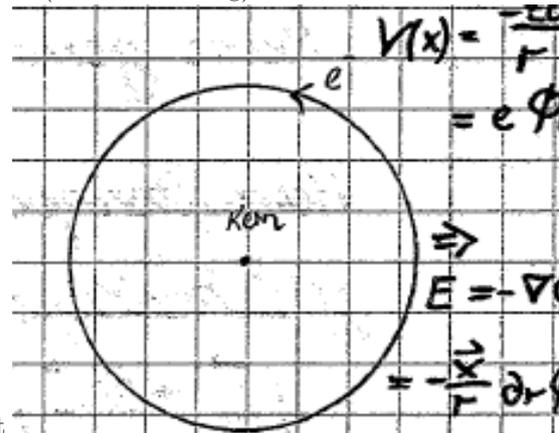
$$= \int d^3x (|\Psi_+(\vec{x})|^2 + |\Psi_-(\vec{x})|^2) = 1$$
 (8.2)

Operatoren: $\hat{O} = \underbrace{\hat{O}_{\text{Bahn}} \otimes \mathbb{1}_{\text{Spin}}}_{\text{Teil a}} + \underbrace{\mathbb{1}_{\text{Bahn}} \otimes \hat{O}_{\text{Spin}}}_{\text{Teil b}}$ (einfachster Fall)

Bsp: $\hat{H} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) + \frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}}_{\text{Teil a}}$

Spin-Bahn-Wechselwirkung

“relativistische Korrektur”, ableitbar aus relativistischer Quantenmechanik (Dirac-Gleichung)



“klassisches Argument”: Betrachte Elektron, welches sich um Kern bewegt
 $V(\vec{x}) = -\frac{Ze^2}{r} = e\Phi(\vec{r}) \Rightarrow \vec{E} = -\nabla\Phi = -\frac{\vec{x}}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r}$

Führe Lorentz-Transformation in Ruhesystem des e^- aus:

$$\vec{E}_{\text{Lab}} \rightarrow \vec{B}_{\text{Bahn}} = -\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}_{\text{Lab}} = -\frac{1}{mc} \vec{p} \times \frac{\vec{x}}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r}$$

$$\rightarrow \hat{H}_{\text{WW}} = -\frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} \tag{8.3}$$

$$= \frac{e}{m^2c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \times \vec{E}) \tag{8.4}$$

$$= \frac{e}{m^2c^2} \vec{S} \cdot \underbrace{(\vec{x} \times \vec{p})}_{\vec{L}} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \tag{8.5}$$

$$\hat{H}_{\text{Spin-Bahn}} = \frac{e}{m^2c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \tag{8.6}$$

- Vorfaktor $\frac{e}{m^2c^2}$ ist um Faktor 2 zu groß im Vergleich mit Experiment und Dirac-Theorie. Richtig ist

$$\hat{H}_{\text{Spin-Bahn}} = \frac{e}{2m^2c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r}$$

(Faktor 2 kann auch aus Thomas-Präzession hergeleitet werden)

- Spin-Bahn-Kopplung führt zu Änderungen im Atomaren Spektrum, Größenordnung $\alpha^2 Ry$ ($\alpha^2 = \frac{1}{20000}$): “Feinstruktur”
 Anderer Beitrag zur Feinstruktur aus $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \simeq mc^2(1 + \frac{p^2c^2}{m^2c^4} \frac{1}{2} + O(\frac{p^4}{m^4c^4})) \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \underbrace{\text{Korrektur}}_{\rightarrow \alpha^2}$

- $\vec{S} \cdot \vec{L} = S_x L_x + S_y L_y + S_z L_z$ kommutiert nicht mit L_x, L_y oder L_z !

$$[\hat{H}_{\text{SpinBahn}}, \vec{L}] \neq 0$$

keine gemeinsame Eigenbasis von \hat{H} und L_z !

Hamilton-Operator ist nur noch invariant unter gleichzeitigen Drehungen von Bahn- und Spinraum ($\vec{L} \rightarrow R\vec{L}, \vec{S} \rightarrow R\vec{S}$)

- Neuer “guter” Drehimpuls, der mit \hat{H} kommutiert: Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (\vec{B} = 0)$$

$$\rightarrow \vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\rightarrow \hat{H}_{\text{SpinBahn}} \propto \vec{L} \cdot \vec{S} \propto \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2$$

\vec{J}^2 ist rotationsinvariant bei simulatenen Drehungen von \vec{L} und \vec{S}

$$[\hat{H}_{\text{SpinBahn}}, \vec{J}^2] = 0$$

Zudem ist $[\hat{H}_{\text{SpinBahn}}, J_z] = 0$, da $J_z = L_z + S_z$, $[J_z, \vec{J}^2] = 0$, $[L_z, \vec{L}^2] = 0$ und $[S_z, \vec{S}^2] = 0$

Folgt aus: $\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + \underbrace{L_+ S_- + L_- S_+ + 2L_z S_z}_{2\vec{L} \cdot \vec{S}} \Rightarrow$ Klassifiziere Atomspektrum nach

Eigenwerten von \vec{J}^2 und J_z !

9 Drehimpulsaddition

Betrachte Summe von Drehimpulsen \vec{J}_1, \vec{J}_2 mit $[J_{i\alpha}, J_{j\alpha}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_{k,\alpha}$, $\alpha = 1, 2$ und $[J_{i\alpha}, J_{j\beta}] = 0$, $\alpha \neq \beta$
 $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ ist Drehimpuls, $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \Rightarrow \vec{J}^2$ hat Eigenwerte $\hbar^2 j(j+1)$, $j \geq 0!$

9.1 2 Spin $\frac{1}{2}$

$$\vec{J}_1 = \vec{S}_1, \vec{J}_2 = \vec{S}_2$$

Basis von Spin 1: $|\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_1$

Basis von Spin 2: $|\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_2$

Produktzustände im Raum, der von

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, |\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, |\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$$

aufgespannt wird. $H = H_{\frac{1}{2}}^{(1)} \otimes H_{\frac{1}{2}}^{(2)} = \oplus H_j$

$$\text{Gesamtspin } \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + S_{+,1}S_{-,2} + S_{-,1}S_{+,2} + 2S_{z,1}S_{z,2}$$

mit $S_+|\uparrow\rangle = 0$

$$S_-|\downarrow\rangle = 0$$

$$S_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle$$

$$S_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$$

Betrachte $|\uparrow\uparrow\rangle$:

$$\vec{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle = \vec{S}_1^2|\uparrow\uparrow\rangle + \vec{S}_2^2|\uparrow\uparrow\rangle + S_{+,1}S_{-,2}|\uparrow\uparrow\rangle + S_{-,1}S_{+,2}|\uparrow\uparrow\rangle + 2S_{z,1}S_{z,2}|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= \hbar^2 \frac{3}{4}|\uparrow\uparrow\rangle + \hbar^2 \frac{3}{4}|\uparrow\uparrow\rangle + 0 + 0 + 2\left(+\frac{\hbar}{2}\right)^2|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= \hbar^2 \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= \hbar^2 s(s+1)|\uparrow\uparrow\rangle, s = 1$$

$\Rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $\hbar^2 s(s+1) = \hbar^2 2$, Gesamtspin $s = 1!$

$$S_z|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{z,1} + S_{z,2})|\uparrow\uparrow\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar|\uparrow\uparrow\rangle$$

$\Rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle$ Eigenzustand zu S_z mit Eigenwert \hbar

$$\Rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle = |S = 1, S_z = +1\rangle = |1, 1\rangle$$

$$\text{Konstruiere } |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|1, -1\rangle \text{ aus } S_-|1, 0\rangle \propto (S_{-,1} + S_{-,2})(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \propto |\downarrow\downarrow\rangle = |1, -1\rangle$$

$H_{\frac{1}{2}} \otimes H_{\frac{1}{2}}$ ist 4-dimensional, $|1, \pm 1\rangle$ und $|1, 0\rangle$ zu $s = 1$ spannen 3-dimensionalen Unterraum auf. 4. Dimension?

$$|4\rangle \perp |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$$

$$\text{Behauptung. } |4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\langle 4|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\uparrow\uparrow|\uparrow\downarrow\rangle - \langle\uparrow\uparrow|\downarrow\uparrow\rangle) = 0$$

$$\langle 4|(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2} = \langle\uparrow\downarrow|\uparrow\downarrow\rangle + \langle\uparrow\downarrow|\downarrow\uparrow\rangle - \langle\downarrow\uparrow|\uparrow\downarrow\rangle - \langle\downarrow\uparrow|\downarrow\uparrow\rangle = 0$$

4. Zustand $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ hat \vec{S}^2 Eigenwert $s = 0$, Eigenwert zu S_z ist 0

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$H_{\frac{1}{2}}^{(1)} \otimes H_{\frac{1}{2}}^{(2)} = \underbrace{H_{s=0}}_{\dim=1} \oplus \underbrace{H_{s=1}}_{\dim=3}$$

Bemerkung: $|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ Produktzustand:

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$ "verschränkter" (entangled) Zustand $\hat{=}$ kein Produktzustand

9.2 Allgemeiner Fall

Betrachte: $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ $j_1 \geq j_2$ $m_i = -j_i, \dots, +j_i$
 Produktbasis $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ spannt $(2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$ -dimensionalen Raum auf.

Übergang auf Gesamtdrehimpulsbasis:

$$| \underbrace{j_1}_{\text{Eigenwert von } \vec{J}_1^2 \cong \vec{L}^2}, \underbrace{j_2}_{\text{Eigenwert von } \vec{J}_2^2 \cong \vec{S}^2}, \underbrace{j}_{\text{Eigenwert von } \vec{J}^2}, \underbrace{m}_{\text{Eigenwert von } J_z} \rangle$$

- mögliche Werte für j,m?
- Clebsch-Gordon-Koeffizienten?

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C(j_1, j_2, m_1, m_2, j, m) |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

- Maximales $m_{max} = m_{1,max} + m_{2,max} = j_1 + j_2 \Rightarrow$ Maximales $j = j_1 + j_2$
- Durch Anwenden von $J_- = J_{1,-} + J_{2,-} \rightarrow$ Zustand mit $j, m = j_1 + j_2 - 1$
- $\Rightarrow |j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$
 Anwenden des Absteigeoperators:
 $|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = N(|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle + |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle)$
 Wiederholtes Anwenden von $J_- \Rightarrow (2(j_1 + j_2) + 1)$ Zustände mit $j = j_1 + j_2, m = -(j_1 + j_2), \dots, (j_1 + j_2)$

Weitere Zustände: Bilde Komplement $|K\rangle$ auf $|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$

$$|K\rangle = N'(|j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle - |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle)$$

$$\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Es ist $J_z |K\rangle = \hbar(j_1 + j_2 - 1) |K\rangle$

Eigenwert von \vec{J}^2 muss $\hbar(j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2)$ sein, d.h. $\vec{J}^2 |K\rangle = \hbar^2 j(j+1) |K\rangle$ mit $j = j_1 + j_2 - 1 \rightarrow$

Wende J_- auf $|K\rangle$ an $\rightarrow (2(j_1 + j_2 - 1) + 1)$ Zustände mit $j = j_1 + j_2 - 1$

Niedrigere Werte von j aus Komplementbildung zu Zuständen mit $m = j_1 + j_2 - 2 \rightarrow j = j_1 + j_2 - 2$ usw.

- Nun gilt

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = \underbrace{(2j_1+1)(2j_2+1)}_{\text{Gesamtdimension}}$$

$$\text{Zerlegung } \oplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} H_j = H_{j_1} \otimes H_{j_2}$$

Beispiel: $j_1 = 1, j_2 = 1$

Mögliche j -Werte: 2, 1, 0 (5, 3, 1 m-Werte)

$$\sum_{j=0}^2 (2j+1) = 1 + 3 + 5 = 3 \cdot 3$$

Beispiel: $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2} \rightarrow j = \frac{3}{2}$ oder $j = \frac{1}{2}$

$$\text{m-Werte: } = \left\{ \begin{array}{c} \frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{array} \right\} \quad m = \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

Zurück zu Spin-Bahn-Wechselwirkung:

Zum Beispiel $j_1 = l = 1$ (p-Zustand), $j_2 = s = \frac{1}{2}$ (Elektronenzustand)

$$j = \frac{3}{2}: \left\{ \begin{array}{l} |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle \\ |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \end{array} \right\} \text{ Quadruplett mit } j = \frac{3}{2}$$

$$j = \frac{1}{2}: |1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \text{ Duplett}$$

$$\hat{H}_{Spin-Bahn} = \beta(r) \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad \beta(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3}$$

Erwartungswert in Zuständen mit $j = \frac{3}{2}$ bzw. $\frac{1}{2}$:

$$\langle \hat{H}_{Spin-Bahn} \rangle_j = \langle \beta(r) \rangle_{\text{radiale Wellenfkt}} \cdot \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \quad (9.1)$$

$$= \langle \beta(r) \rangle_{\text{radiale Wellenfkt}} \cdot \frac{1}{2} \hbar^2 \binom{l}{-l-1} \quad \text{für } \begin{array}{l} j = l + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \\ j = l - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \end{array} \quad (9.2)$$

⇒ Aufspaltung der p-Zustände

$$\frac{p_x, p_y, p_z}{\uparrow, \downarrow} \left\langle \begin{array}{l} \text{4-fach} \\ \text{2-fach} \end{array} \right. \begin{array}{l} j = \frac{3}{2} \\ j = \frac{1}{2} \end{array} \right\rangle \downarrow O(\alpha^2) \text{Feinstrukturaufspaltung}$$

10 Näherungsmethoden für stationäre Zustände

10.1 Zeitunabhängige Störungstheorie (Rayleigh-Schrödinger)

Sei $\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{ungestörtes Problem}} + \lambda \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{Störung}} \quad \lambda \geq 0$

typischerweise $[\hat{H}_0, \hat{H}_1] \neq 0$

$\hat{H}_0|n^0\rangle = E_0|n^0\rangle$ sei gelöst

Die Störung sei klein, z.B. externe Felder, Wechselwirkung

Gesucht: $|n\rangle, E_n$ mit $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

→ Ansatz: $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$

und: $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots$

Bem:

- Konvergieren diese Entwicklungen nach Potenzen von λ ?
- Falls E_n nicht analytisch in λ ist, konvergiert die Störungsreihe evtl. gegen ein falsches Ergebnis (z.B. $E_n \propto e^{-\frac{1}{\text{const.} \cdot \lambda}$)
- Was bedeutet "kleine Störung"?

Setze Ansätze für E_n und $|n\rangle$ in $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ ein:

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

Koeffizientenvergleich:

$$O(\lambda^0): H_0|n^0\rangle = E_n^{(0)}|n^0\rangle$$

$$O(\lambda^1): H_0|n^1\rangle + H_1|n^0\rangle = E_n^{(0)}|n^1\rangle + E_n^{(1)}|n^0\rangle$$

$$O(\lambda^2): H_0|n^2\rangle + H_1|n^1\rangle = E_n^{(0)}|n^2\rangle + E_n^{(1)}|n^1\rangle + E_n^{(2)}|n^0\rangle$$

$$\text{Normiere jetzt } |n\rangle \text{ mit } \langle n^0|n\rangle = 1 \Rightarrow \langle n^0|n\rangle = \langle n^0|n^0\rangle + \lambda \langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2 \langle n^0|n^2\rangle + \dots = 1$$

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

Multipliziere $O(\lambda)$ von links mit $\langle n^0|$:

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

$$\Rightarrow E_n^{(1)} = \langle n^0|H_1|n^0\rangle$$

$$\text{Energiekorrektur zu } E_n^{(0)}: E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n^0|H_1|n^0\rangle + \dots$$

Korrektur $|n^1\rangle$?

$$\rightarrow |n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle \text{ mit } c_m = \langle m^0|n^1\rangle$$

Multipliziere $O(\lambda^1)$ mit $\langle m^0|$:

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

$$c_m(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) = \langle m^0|H_1|n^0\rangle$$

Annahme: Nicht-entarteter Fall: $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ für $n \neq m$

$$\rightarrow c_m = \frac{\langle m^0|H_1|n^0\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

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

Zustandskorrektur 1. Ordnung, vor allem energetisch benachbarte Zustände tragen bei, falls $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle \neq 0$

Energiekorrektur 2. Ordnung:

Multipliziere $O(\lambda^2)$ mit $\langle n^0 |$

$$\langle n^0 | H_0 | n^2 \rangle + \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = E_n^{(0)} \langle n^0 | n^2 \rangle + E_n^{(1)} \langle n^0 | n^1 \rangle + E_n^{(2)} \langle n^0 | n^0 \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Bem:

- Sei $|n^0\rangle$ Grundzustand von $H_0 \Rightarrow E_n^{(0)} < E_m^{(0)}$, Nenner $\neq 0$
2. Ordnung Energiekorrektur zu Grundzustand immer negativ!
- Energetisch benachbarte Zustände machen große Korrektur

2 Zustände $E_n^{(0)}, E_m^{(0)}$ benachbart, andere Zustände energetisch separiert

$$E_n^{(2)} < 0 \text{ für } E_n^{(0)} < E_m^{(0)}$$

$$E_m^{(2)} > 0$$

Niveauabstoßung (level repulsion) Entartungsfall $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$

Seien $|n_1^0\rangle, |n_2^0\rangle, \dots, |n_N^0\rangle$ entartet, d.h. $H_0 |n_i^0\rangle = \epsilon |n_i^0\rangle, i = 1 \dots N$

\rightarrow Diagonalisiere H_1 im Unterraum der entarteten Zustände. Suche Zustände $|n_\alpha^0\rangle, \alpha = 1 \dots N$ mit $|n_\alpha^0\rangle = \sum_{i=1}^N \langle n_i^0 | n_\alpha^0 \rangle |n_i^0\rangle$ und $\langle n_\alpha^0 | H_1 | n_\beta^0 \rangle = E_\alpha^{(1)} \delta_{\alpha\beta}$

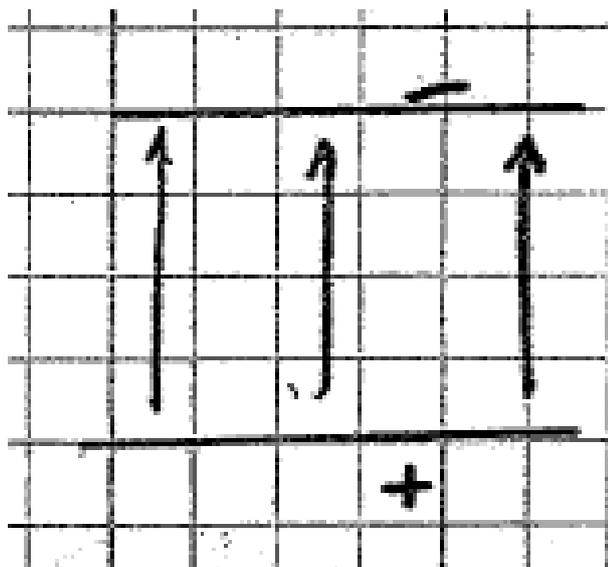
D.h. schreibe Matrix $H_{ij} = \langle n_i^0 | H_1 | n_j^0 \rangle$

Suche Eigenvektoren ($U_{i\alpha}$) und Eigenwerte (E_α) von H_{ij} :

$\Rightarrow U_{i\alpha} = \langle n_i^0 | n_\alpha^0 \rangle$ (Unitäre Matrix mit Eigenvektoren in Spalten)

$$|n_\alpha^0\rangle = \sum_i U_{i\alpha} |n_i^0\rangle$$

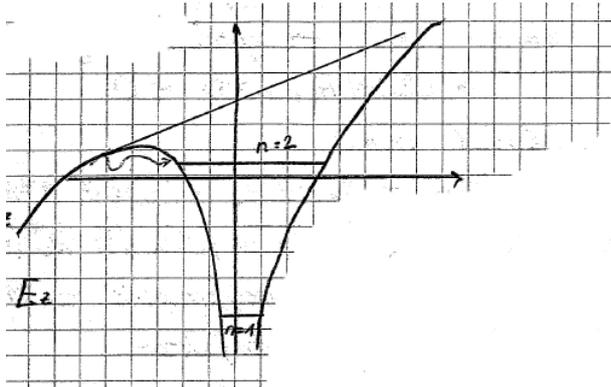
10.1.1 Stark-Effekt



: H-Atom im elektrischen Feld

$$\vec{E} = E \hat{e}_z \quad -\nabla \Phi = \vec{E} \quad \Phi = -Ez$$

$$H_1 = V(\vec{x}) = e\Phi(\vec{x}) = -eEz$$



Elektronen können durch Potentialbarriere tunneln

→ stationäre Zustände erhalten endliche Lebensdauer Effekt ist für niedrige Zustände zu schwach, Energieniveaus verschieben etwas

Störung $H_1 = -eEz$

$|n^0\rangle$ Zustände: Quantenzahlen $n = 1, 2, \dots$ $l = 0, \dots, n-1$ $m = -l, \dots, +l$

$|n^0\rangle \hat{=} |n, l, m\rangle \quad \Psi_{nlm}(\vec{x}) = Y_{lm}(\theta, \phi) R_{nl}(r)$

Ungestörte Energien: $E_n^{(0)} = -\frac{E_{Ry}}{n^2}$

1. Ordnung: Grundzustand:

$E_n(1) = \langle 1, 0, 0 | H_1 | 1, 0, 0 \rangle = -eE \int d^3x \Psi_{100}^*(\vec{x}) z \Psi_{100}(\vec{x}) = -eE \int d^3x z |\Psi_{100}(\vec{x})|^2 = 0$, da z antisym. $|\Psi|^2$ symmetrisch

$|n^1\rangle$ Zustandskorrektur:

$|1, 0, 0^1\rangle = \sum_{n \neq 1, l, m} \frac{|\langle n, l, m^0 | H_1 | 1, 0, 0^0 \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} |nlm^0\rangle$

Welche Zustände tragen zur Summe bei?

$n = 2, l = 0 \rightarrow$ spähärisch-sym. $\Psi_{200} \rightarrow \langle 200 | H_1 | 100 \rangle = 0$

$n = 2, l = 1, m = 0 \rightarrow \Psi_{210} \propto Y_{10}(\theta, \phi) \propto \cos\theta = \frac{z}{r} \rightarrow \langle 210 | z | 100 \rangle \propto \int d^3x (\frac{z}{r} R_{21}^*(r)) z R_{10}(r) > 0$

$\Rightarrow |210\rangle$ wird beigemischt zu $|100\rangle$, mit negativem Vorfaktor

$|21 \pm 1\rangle$: Matrixelement verschwindet wegen Antisymmetrie!

$|100\rangle = N(|100^0\rangle - \lambda|210^0\rangle)$

Diagonalisiere $\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle$ im entarteten Unterraum, aufgespannt durch $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$

Es gilt mit $H_1 = -eEz$

$\langle 200 | H_1 | 210 \rangle = 3a_B e E$, da $\langle \vec{x} | 210 \rangle \propto z^* \exp$. Abfall

$\langle 200 | H_1 | 200 \rangle = 0$, da $\int d^3x |\Psi_{200}(\vec{x})|^2 z = 0$

$\langle 200 | H_1 | 21 \pm 1 \rangle = \langle 210 | H_1 | 21 \pm 1 \rangle = 0$

$\langle 210 | H_1 | 210 \rangle = \langle 21 \pm 1 | H_1 | 21 \pm 1 \rangle = 0$

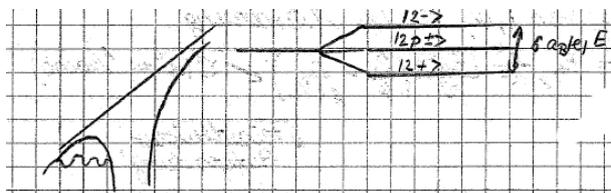
Matrix $\langle n_0 | H_1 | n_0 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 3a_B e E & 0 & 0 \\ 3a_B e E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 3a_B e E \\ 3a_B e E & 0 \end{pmatrix}$ hat Eigenwert $\pm 3a_B e E$, Eigenzustände $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Neue Basis: $|2+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle) \Rightarrow E^{(1)} = -3a_B |e| E$

$|2-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle) \Rightarrow E^{(1)} = +3a_B |e| E$

$|211\rangle \rightarrow E^{(1)} = 0$

$|21-1\rangle \rightarrow E^{(1)} = 0$

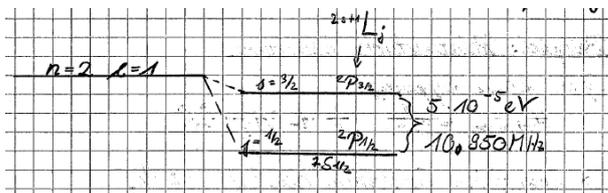


linearer Starkeffekt

10.1.2 Bsp: Relativistische Korrekturen

- Spin-Bahn-Kopplung $H_{Spin-Bahn} = \frac{1}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) \right) \vec{L} \vec{S}$
 → klassifiziere Spektrum nach $j = l \pm \frac{1}{2}$
 $\Delta E_{n,j=l \pm \frac{1}{2}}^{Spin-Bahn} = \frac{1}{2m^2c^2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} Ze^2 \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,l}$
- Relativistische Energie $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots$
 \vec{p}^4 kann mit gebundenen Zuständen nicht diagonalisiert werden → Störungstheorie!
- Darwin-Term $H_{Darwin} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V(r) = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m^2c^2} \delta(\vec{x})$
 → Störungstheorie!

Gesamtaufspaltung von 1,2,3 in 1. Ordnung: $E_{n,j \pm \frac{1}{2},l}^{(1)} = E_{Ry} \frac{Z^2}{n^2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left\{ \frac{3}{4} - \frac{n}{j \pm \frac{1}{2}} \right\} \leftarrow O(\alpha^2 \approx \frac{1}{20000})$ "Feinstrukturaufspaltung" $\approx 5 \cdot 10^{-5} eV$



z.B.

10.2 Variationsprinzip

$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ mit $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$

(Energien nicht entartet)

Sei $|\Psi\rangle$ beliebiger Zustand.

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_n \langle \Psi | n \rangle \langle n | H | \Psi \rangle = \sum_n \langle \Psi | n \rangle E_n \langle n | \Psi \rangle \geq E_0 \sum_n \langle \Psi | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0$$

Dies ermöglicht, Grundzustandsenergie von oben anzunähern: Suche $|\Psi\rangle$, welches $E(|\Psi\rangle)$ minimiert.

Bsp: Mache $|\Psi\rangle$ von Parameter(n) abhängig, minimiere $E(|\Psi\rangle)$ bezgl. Parameter Fehler? Schreibe

$$|\Psi\rangle = \underbrace{|0\rangle}_{\text{exakter Grundzustand}} + \underbrace{|\epsilon\rangle}_{\text{Fehler}}$$

Fehler ist $O(\epsilon = \sqrt{\langle \epsilon | \epsilon \rangle})$

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - E_0 = \frac{\langle 0 | H | 0 \rangle + \langle \epsilon | H | 0 \rangle + \langle 0 | H | \epsilon \rangle + \langle \epsilon | H | \epsilon \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle + \langle \epsilon | 0 \rangle + \langle 0 | \epsilon \rangle + \langle \epsilon | \epsilon \rangle} - E_0$$

Da $|0\rangle$ Eigenzustand von \hat{H} zu nichtentarteten Eigenwert E_0 ist, gilt $\langle \epsilon | 0 \rangle = 0$

$$\rightarrow \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - E_0 = \frac{E_0 + \langle \epsilon | H | \epsilon \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle + \langle \epsilon | \epsilon \rangle} - E_0$$

$$\simeq \frac{E_0}{\langle 0 | 0 \rangle + \langle \epsilon | \epsilon \rangle} + \frac{\langle \epsilon | H | \epsilon \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} - E_0 \simeq E_0 (1 - \langle \epsilon | \epsilon \rangle) + \langle \epsilon | H | \epsilon \rangle - E_0 \langle \epsilon | \epsilon \rangle \rightarrow O(\epsilon^2)$$

10.2.1 Bsp: Heliumartige Atome

z.B. He: 2 Elektronen mit Koordinaten \vec{x}_1, \vec{x}_2

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|x_1|} - \frac{Ze^2}{|x_2|} + \underbrace{\frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}}_{\text{Abstoßung zwischen Elektronen}}$$

Ohne e-e-Wechselwirkung Grundzustand hat beide e^- in 1s-Orbital (Pauli-Prinzip erfordert ein e^- mit Spin up, eins mit Spin down)

$$|\phi\rangle = \underbrace{|100\rangle}_{\text{Elektron 1}} \underbrace{|100\rangle}_{\text{Elektron 2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$E_{\text{Grundzustand}}^0 = -2E_{Ry}Z^2 = 108,8eV \text{ (für } Z=2\text{)}$$

Mit Wechselwirkung:

- Abstoßung zwischen Elektronen erhöht Grundzustandsenergie
- Zweites Elektron sieht durch erstes Elektron abgeschirmte Kernladung (und umgekehrt)

Ersetze in Wellenfunktion: $\propto e^{-Zr/a_B} \Rightarrow e^{Z^*r/a_B}$ (Z^* effektive Kernladung)

Bestimme Z^* durch Energieminimierung:

$$|\phi_{Z^*}\rangle = (|100\rangle_{Z^*} |100\rangle_{Z^*}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$EZ^* = \langle \Psi | H | \Psi \rangle_{Z^*} \Rightarrow \frac{d}{dZ^*} E(Z^*) = 0$$

$$\rightarrow E(Z^*) = -2E_{Ry}(-Z^{*2} + 2ZZ^* - \frac{5}{8}Z^*)$$

$$\text{Minimum: } Z^* = Z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16}$$

$$\text{Damit ist } E(Z^* = \frac{27}{16}, Z = 2) = 77,46eV \text{ experimentell: } E = 78,9eV$$

11 Zeitabhängige Störungstheorie

11.1 Zeitentwicklungsbilder

11.1.1 Schrödinger-Bild

Zustand $|\Psi\rangle$ bei $t = 0$. Die Zeitentwicklung wird beschrieben durch Schrödingergleichung:

$$i\hbar\partial_t|\Psi, t\rangle = H|\Psi, t\rangle$$

$|\Psi, t\rangle$ geht für $t > 0$ aus $|\Psi\rangle$ hervor.

$$\text{Formal: } |\Psi, t\rangle = \underbrace{e^{-iHt/\hbar}}_{\text{Zeitentwicklungsoperator}} |\Psi, 0\rangle$$

Bsp: $|\Psi\rangle$ Eigenzustand von $\hat{H} : H|\Psi\rangle = E_n|\Psi\rangle$

$$e^{-iHt/\hbar}|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iHt}{\hbar}\right)^n |\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iE_n t}{\hbar}\right)^n |\Psi\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\Psi\rangle$$

- Zustände/Wellenzustände zeitabhängig
- Operatoren zeitunabhängig

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi, t | A | \Psi, t \rangle = \langle \Psi, 0 | \underbrace{e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}}_{A_H} | \Psi, 0 \rangle$$

11.1.2 Heisenberg-Bild

Sei A Operator im Schrödingerbild. Der Operator A_H im Heisenbergbild ist definiert als

$$A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A(t) e^{-iHt/\hbar}$$

$A(t)$ evtl. mit externer Zeitabhängigkeit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &= e^{iHt/\hbar} \partial_t A(t) e^{-iHt/\hbar} + \frac{i}{\hbar} H (e^{iHt/\hbar} A(t) e^{-iHt/\hbar}) - (e^{iHt/\hbar} A(t) e^{-iHt/\hbar}) \frac{i}{\hbar} H \\ &\Rightarrow \frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A_H(t)] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \quad \text{Heisenberg-Bild} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A(x, p, \dots) &\rightarrow e^{iHt/\hbar} \partial_t A(x, p, \dots) e^{-iHt/\hbar} \\ \text{z.B. } A &= a \cos(\omega t) x^2 \quad \partial_t A = -a\omega \cos(\omega t) x^2 \\ e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} &= x_H(t) \end{aligned}$$

Zustand im Heisenberg-Bild:

$$|\Psi\rangle_H = e^{iHt/\hbar} |\Psi, t\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle_H = \frac{i}{\hbar} H e^{iHt/\hbar} |\Psi, t\rangle + e^{iHt/\hbar} \left(\frac{-i}{\hbar} H\right) |\Psi, t\rangle = 0$$

- Erwartungswerte und Matrixelemente sind im Schrödinger- und im Heisenberg-Bild identisch \Rightarrow äquivalente Beschreibungen

11 Zeitabhängige Störungstheorie

Bsp: Heisenberg-Gleichung für harmonischen Oszillator

$$\begin{aligned}
 H_{HO} &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\
 \frac{d}{dt}x_H &= \frac{i}{\hbar}[H_{HO}, x_H] \quad x_H = e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} \\
 \frac{d}{dt}x_H &= \frac{i}{\hbar}H_{HO} e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} - \dots = \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} [H_{HO}, x] e^{-iHt/\hbar} \\
 \frac{d}{dt}x_H(t) &= \frac{p}{m} \\
 \frac{d}{dt}p_H(t) &= -m\omega^2 x_H (= F)
 \end{aligned}$$

Bsp: Spinpräzession (Spin \vec{S} im \vec{B} -Feld = $B\hat{e}_z$)

$$\begin{aligned}
 H &= -\frac{ge}{2mc}\vec{S}\vec{B} = -\frac{ge}{2mc}S_z B_z \\
 \frac{d}{dt}S_{x,H}(t) &= \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}[H, S_x]e^{-iHt/\hbar} \\
 \frac{d}{dt}S_{x,H}(t) &= \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}i\hbar S_y e^{-iHt/\hbar}(-\frac{ge}{2mc}B_z) = \omega_0 S_{y,H} \\
 \omega_0 &= \frac{geB_z}{2mc} \text{ Larmor-Frequenz} \\
 \frac{d}{dt}S_{y,H}(t) &= -\omega_0 S_{x,H} \quad \frac{d}{dt}S_{z,H}(t) \propto [S_z, S_z] = 0
 \end{aligned}$$

Lösung:

$$\begin{aligned}
 S_{x,H}(t) &= \cos(\omega_0 t)S_{x,H}(0) + \sin(\omega_0 t)S_{y,H}(0) \\
 S_{y,H}(t) &= \sin(\omega_0 t)S_{x,H}(0) + \cos(\omega_0 t)S_{y,H}(0) \\
 S_{z,H}(t) &= S_{z,H}(0)
 \end{aligned}$$

Spin beschreibt Kreisbahnen um Achse mit Frequenz ω_0

Bem: Falls $[H, A] = 0$, so ist A_H zeitunabhängig:

$$A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} = A$$

11.1.3 Wechselwirkungs-/Dirac-Bild

(Interaction-Picture)

Sei $H = H_0 + V(t)$ mit ungestörtem H_0 und Störung $V(t)$

Def:

$$\begin{aligned}
 |\Psi, t \rangle_I &= e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi, t \rangle \\
 A_I(t) &= e^{iH_0 t/\hbar} A(t) e^{-iH_0 t/\hbar}
 \end{aligned}$$

Ebenfalls äquivalent zu Schrödingerbild

$$\begin{aligned}
 \langle I | \langle \Psi, t | A_I(t) | \Psi, t \rangle_I &= \langle \Psi, t | e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} | \Psi, t \rangle = \langle \Psi, t | A | \Psi, t \rangle \\
 &\rightarrow i\hbar \partial_t |\Psi, t \rangle_I = V_I(t) |\Psi, t \rangle_I \\
 \frac{d}{dt} A_I(t) &= \frac{i}{\hbar} [H_0, A(t)] + \partial_t A_I(t)
 \end{aligned}$$

Für $V(t) = 0$ ist WW-Bild gleich dem Heisenberg-Bild

11.2 Störungsentwicklung

Sei $V(t)$ Störung, die bei t_0 eingeschaltet wird: $V(t) = 0, t < t_0$

Für $t < t_0$ gilt im Schrödinger-Bild:

$$i\hbar \partial_t |\Psi^0, t \rangle = H_0 |\Psi^0, t \rangle \quad |\Psi^0, t \rangle \text{ ist ungestörter Zustand}$$

$t > t_0$:

$$i\hbar \partial_t |\Psi, t \rangle = (H_0 + V(t)) |\Psi, t \rangle \quad \text{mit } |\Psi, t_0 \rangle = |\Psi^0, t_0 \rangle$$

Gehe ins WW-Bild:

$$|\Psi, t \rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi, t \rangle$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi, t \rangle_I &= V_I(t)|\Psi, t \rangle_I \\ V_I(t) &= e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar} \end{aligned} \tag{11.1}$$

Löse 11.1 durch Integration von t_0 nach t :

$$|\Psi, t \rangle_I = |\Psi, t_0 \rangle_I + \int_{t_0}^t dt' V_I(t')|\Psi, t' \rangle_I \tag{11.2}$$

Iteriere 11.2:

$$|\Psi, t \rangle_I \approx |\Psi, t_0 \rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t')|\Psi, t_0 \rangle_I + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t'')V_I(t')|\Psi, t_0 \rangle_I$$

bis auf Terme $O(V^3)$ (Näherung zweiter Ordnung)

Betrachte Term $O(V^n)$:

$$I_n|\Psi, t_0 \rangle_I = \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1)V_I(t_2)\dots V_I(t_n)|\Psi, t_0 \rangle_I$$

Zeitordnung $t > t_1 > t_2 > \dots > t_n > t_0$ Schreibe

$$I_n = \frac{1}{n!} \frac{1}{(i\hbar)^n} T \left(\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1)V_I(t_2)\dots V_I(t_n) \right)$$

T ordnet zusätzlich V_I nach Zeit: $T(V_I(t_1)V_I(t_2)) = V_I(t_2)V_I(t_1), t_1 < t_2$

$\frac{1}{n!}$ korrigiert die Vergrößerung des Integrationsgebietes

$$\rightarrow I_n = \frac{1}{n!} T \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right)^n$$

Zeitentwicklung $|\Psi, t \rangle_I = T \exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right) |\Psi, t_0 \rangle_I$

$$= |\Psi, t_0 \rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t')|\Psi, t_0 \rangle_I + \frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 T(V_I(t_1)V_I(t_2))|\Psi, t_0 \rangle_I + \dots$$

$$\frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 T(V_I(t_1)V_I(t_2)) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 (V_I(t_1)V_I(t_2) + V_I(t_2)V_I(t_1)) \hat{=} 2.$$

Ordnung Näherung

Übergänge 1. Ordnung:

Sei $|\Psi, t_0 \rangle = |m, t_0 \rangle = e^{-iE_m t/\hbar}|m \rangle$ mit $|m \rangle$ Eigenzustand von H_0

Damit ist $|\Psi, t_0 \rangle_I = e^{-iH_0 t/\hbar}|\Psi, t_0 \rangle = |m \rangle$

Setze in 11.2 (Neumann-Reihe) ein:

$$|\Psi, t \rangle_I = |m \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t')|m \rangle + O(V^2)$$

Wahrscheinlichkeitsamplitude in Zustand $|n \rangle$ bei $t > t_0$?

$$\langle n, t | \Psi, t \rangle = \langle n | m \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | V_I(t') | m \rangle$$

$$P_{m \rightarrow n}(t) = \delta_{nm} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n | V(t') | m \rangle$$

Übergangswahrscheinlichkeit von $m \rightarrow n$ in Zeit $t, n \neq m$

$$|P_{m \rightarrow n}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \underbrace{\frac{\sin^2 \left(\frac{E_n - E_m}{2\hbar} t \right)}{\left(\frac{E_n - E_m}{2\hbar} \right)^2}}_{\delta \left(\frac{E_n - E_m}{2\hbar} \right)} \pi t |\langle n | V | m \rangle|^2$$

für $t \rightarrow \infty$ gilt:

$$\begin{aligned} \text{Rate: } \Gamma_{m \rightarrow n} &= \frac{d|P_{m \rightarrow n}|^2}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\delta(E_n - E_m)}_{\text{Energieerhaltung}} |\langle n | V | m \rangle|^2 \\ &\langle n | \text{final state}, \quad |m \rangle \text{ initial state} \end{aligned}$$

11.3 Pulsförmige Störung

Sei $V(t) = V(\Theta(t) - \Theta(t - \tau))$

Sei $n \neq m$:

$$|P_{m \rightarrow n}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{\min(t, \tau)} dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|V|m \rangle \right|^2 \approx |e^{i(\Delta E)\min(t, \tau)/\hbar} - 1|^2 \quad (11.3)$$

$$= \left(\frac{\sin\left(\frac{(E_n - E_m)\min(t, \tau)}{2\hbar}\right)}{(E_n - E_m)/2} \right)^2 |\langle n|V|m \rangle|^2 \quad (11.4)$$

$$|e^{ix} - 1|^2 = |e^{ix/2} - e^{-ix/2}|^2 = |2i \sin(x/2)|^2$$

Nullstellen bei $\Delta E \frac{t}{2\hbar} = \pi$, d.h. bei $\Delta E = h \frac{1}{t}$ bzw. $\frac{h}{\tau}$

- Für $t \rightarrow 0$ steigt $|P_{m \rightarrow n}|^2$ wie t^2
- Für $t > \pi$ Übergänge vor allem zu Endzuständen mit $|\Delta E| = |E_n - E_m| \leq \frac{h}{\tau}$
 \Rightarrow je länger τ ist, desto besser ist die Energieerhaltung erfüllt.

Energie-Zeit-Unschärfe:

Typische "Verletzung" der Energieerhaltung $|\Delta E| \cdot \text{Dauer der Störung} \approx h$ mit Beobachtungszeit $t > \tau$ $|\Delta E| \cdot t > h$

- Sei $t = \tau, \tau \rightarrow \infty$

$$|P_{m \rightarrow n}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2 t \pi} \pi t |\langle n|V|m \rangle|^2 \rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \delta(\alpha) \pi t |\langle n|V|m \rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m \rangle|^2$$

Übergangsrate

$$\Gamma_{m \rightarrow n}(t) = \frac{d|P_{m \rightarrow n}|^2}{dt}$$

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m \rangle|^2$$

Fermi's goldene Regel

Zerfallsraten:

$$\Gamma_m = \sum_n \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m \rangle|^2$$

Falls $|\langle n|V|m \rangle|^2$ nur von Energie abhängig ist:

$$\Gamma_m = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_n \delta(E_n - E_m) \rho(E_n) |\langle n|V|m \rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|m \rangle|^2 \rho(E_m)$$

$\rho(E_m)$: Dichte der Endzustände

$\rho(E)dE = \# \text{Endzustände in } [E, E + dE]$

11.4 Adiabatisches Einschalten

Gegeben ist folgendes Störpotential:

$$V(t) = V e^{\eta t}$$

$\eta > 0$, für $t \rightarrow \infty$ geht $\eta \rightarrow \infty$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} \rightarrow |P_{m \rightarrow n}(t)|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|V|m \rangle e^{\eta t'} \right|^2 \\ &= |\langle n|V|m \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} e^{\eta t}}{E_n - E_m - i\eta\hbar} \right|^2 \\ &= |\langle n|V|m \rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{(E_n - E_m)^2 + \eta^2 \hbar^2} \end{aligned} \quad (11.5)$$

Übergangsrates:

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{d|P_{m \rightarrow n}|^2}{dt} = \frac{2}{\hbar} |\langle n|V|m \rangle|^2 \underbrace{\left(\frac{\eta \hbar}{(\Delta E)^2 + \hbar^2 \eta^2} \right)}_{\pi \delta(\Delta E)} e^{2\eta t}$$

für $\eta \rightarrow 0$:

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m \rangle|^2$$

Bsp: Störung an Potential $V(x)$

Übergangsrates von $|\vec{k} \rangle$ nach $|\vec{k}' \rangle$:

$$\Gamma_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\delta(E(\vec{k}) - E(\vec{k}'))}_{\text{elastische Streuung}} \underbrace{|\langle \vec{k}'|V|\vec{k} \rangle|^2}_{\propto \int d^3x e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}} V(x) \hat{=} \text{FT von } V \text{ bzgl. } \vec{k}-\vec{k}'}} \quad |^2$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$$

z.B. $V(\vec{x}) = V_0 \delta(\vec{x}) \rightarrow \text{FT: } \tilde{V}(\vec{q}) = V_0$, unabhängig von \vec{q}

$$\Rightarrow \Gamma_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E(\vec{k}) - E(\vec{k}')) \cdot V_0^2$$

unabhängig von \vec{k}' , isotrop (vgl. Born'sche Näherung in Streutheorie)

Bezug zur zeitunabhängigen Störungstheorie:

Betrachte Zustand $|\Psi, t \rangle_I \rightarrow |m \rangle$ für $t \rightarrow -\infty$ Nehme adiabatische Evolution an, d.h. $|\Psi, t \rangle_I$ enthält großen Anteil mit $\langle I | \Psi, t \rangle \neq 0$ bei späterem t . $|\Psi, t \rangle_S \propto e^{-i\tilde{E}_m t/\hbar}$ mit gestörten Energie $\tilde{E}_m \rightarrow E_m$ für $t \rightarrow \infty$

$$|\Psi, t \rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi, t \rangle_S \propto e^{-i(\tilde{E}_m - E_m)t/\hbar}$$

Was ist \tilde{E}_m ?

Benutze $i\hbar \partial_t |\Psi, t \rangle_I = V_I(t) |\Psi, t \rangle_I$

$$i\hbar \partial_t \langle m | \Psi, t \rangle_I \simeq (\tilde{E}_m - E_m) \langle m | \Psi, t \rangle_I \quad (11.6)$$

$$= \langle m | V_I(t) | \Psi, t \rangle_I$$

$$= \sum_n \langle m | V_I(t) | n \rangle \langle n | \Psi, t \rangle_I$$

$$= \langle m | V_I(t) | m \rangle \langle m | \Psi, t \rangle_I + \sum_{n \neq m} \underbrace{\langle m | V_I(t) | n \rangle}_{\text{Term A}} \underbrace{\langle n | \Psi, t \rangle_I}_{\text{Term B}}$$

Mit $V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} = V$ lässt sich umformen:

$$\text{A: } = e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} e^{\eta t} \langle m | V | n \rangle$$

$$\text{B: } = P_{m \rightarrow n}(t) = -e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} e^{\eta t} \frac{\langle n | V | m \rangle}{E_n - E_m - i\eta \hbar}$$

Zusammengefasst:

$$i\hbar \partial_t \langle m | \Psi, t \rangle_I = \langle m | V | m \rangle \langle m | \Psi, t \rangle_I + \sum_{n \neq m} \frac{|\langle n | V | m \rangle|^2}{E_m - E_n + i\eta \hbar} e^{\eta t} \underbrace{\langle m | \Psi, t \rangle_I}_{\text{Zusatzterm} \approx 1 + O(V)}$$

Zusatzterm kann hinzugefügt werden, da Fehler $O(V^3)$ bereits gemacht. Benutze Gleichung 11.6, teile durch $\langle m | \Psi, t \rangle_I$ und lasse η gegen 0 gehen:

$$\tilde{E}_m = E_m + \underbrace{\langle m | V | m \rangle}_{\text{Erste Ordnung}} + \underbrace{\sum_{n \neq m} P \frac{|\langle n | V | m \rangle|^2}{E_m - E_n}}_{\text{Zweite Ordnung}} - i\pi \underbrace{\sum_{n \neq m} |\langle m | V | n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n)}_{\text{Imaginärteil} \hat{=} \text{Zerfallsrate}} \quad (11.7)$$

11 Zeitabhängige Störungstheorie

Dabei wurde ausgenutzt: $\frac{1}{x+i\gamma} \rightarrow P\frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$ für $\gamma \rightarrow 0$
Hauptwert P :

$$\text{z.B.: } \int_{-1}^2 P\frac{1}{x} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-1}^{\epsilon} \frac{1}{x} dx + \int_{\epsilon}^2 \frac{1}{x} dx \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\ln\left(\frac{\epsilon}{1}\right) + \ln\left(\frac{2}{\epsilon}\right) \right) = \ln 2$$

Schreibe

$$\Gamma_m = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq n} |\langle n|V|m \rangle|^2 \delta(E_m - E_n)$$

Zerfallsrate von Zustand m :

$$\begin{aligned} |\Psi, t \rangle &\propto e^{-\pi \sum_{n \neq m} |\langle n|V|m \rangle|^2 \delta(E_m - E_n) t / \hbar} \\ |\langle \Psi, t | \Psi, t \rangle|^2 &\propto e^{-\frac{2\pi}{\hbar} \sum |\langle n|V|m \rangle|^2 \delta(E_m - E_n) t} \\ &\propto e^{-\Gamma_m t} \end{aligned}$$

11.5 Oszillierende Störung

$$V(t) = V \cos(\omega t) e^{\eta t} = \frac{V}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{\eta t}$$

$\eta > 0$, aber klein

$$\begin{aligned} |P_{m \rightarrow n}(t)|^2 &= |\langle n | \Psi, t \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dt' \left(e^{i(E_n - E_m + \hbar\omega)t' / \hbar} e^{\eta t'} + e^{i(E_n - E_m - \hbar\omega)t' / \hbar} e^{\eta t'} \right) \langle n | V | m \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} e^{2\eta t} \left| \frac{e^{i(E_n - E_m + \hbar\omega)t / \hbar}}{E_n - E_m + \hbar\omega - i\hbar\eta} + \frac{e^{i(E_n - E_m - \hbar\omega)t / \hbar}}{E_n - E_m - \hbar\omega - i\hbar\eta} \right|^2 |\langle n | V | m \rangle|^2 \end{aligned}$$

(“ziemlich viel weggelassen, weil es sich eh wegkürzt:”)

bis auf oszillierende Terme $\propto \cos(2\omega t)$:

$$\begin{aligned} &\simeq \frac{1}{4} e^{2\eta t} |\langle n | V | m \rangle|^2 \left[\frac{1}{(E_n - E_m + \hbar\omega)^2 + \eta^2 \hbar^2} + \frac{1}{(E_n - E_m - \hbar\omega)^2 + \eta^2 \hbar^2} \right] \\ \Gamma_{m \rightarrow n} &= \frac{d|P_{m \rightarrow n}|^2}{dt} = \frac{e^{2\eta t}}{4} |\langle n | V | m \rangle|^2 \left[\frac{2\eta \hbar}{(E_n - E_m + \hbar\omega)^2 + \hbar^2 \eta^2} + \frac{2\eta \hbar}{(E_n - E_m - \hbar\omega)^2 + \hbar^2 \eta^2} \right] \end{aligned}$$

Mit $\frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \rightarrow \pi\delta(x)$ für $\epsilon \rightarrow 0$ ergibt sich

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\langle n | V | m \rangle|^2}{4} \left[\underbrace{\delta(E_n - E_m + \hbar\omega)}_{E_n = E_m - \hbar\omega \text{ Emission von } \hbar\omega} + \underbrace{\delta(E_n - E_m - \hbar\omega)}_{E_n = E_m + \hbar\omega \text{ Absorption von } \hbar\omega} \right]$$

Bsp: WW mit Lichtfeld in quantisierter Form:

Vektorpotential: $\vec{A}(\vec{x}, t) \approx \sum_{\vec{k}, \lambda} (N_1 \alpha_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{i\omega_1 t} + N_2 \alpha_{\vec{k}, \lambda} e^{-i\omega_2 t})$

$$V = -\frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \vec{p} \left(\text{aus } H = \frac{(\vec{p} - e/c\vec{A})^2}{2m} \right)$$

ergibt auch spontane Emission.

Bsp: Kern-Spin $\frac{1}{2}$ in \vec{B} -Feld $\parallel \hat{e}_z$

$$H_0 = \frac{-\mu_K}{\hbar} B_z S_z$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Spektrum:

$$|\uparrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ mit } E_\uparrow = \frac{-\mu_K}{2} B_z$$

$$|\downarrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ mit } E_{\downarrow} = \frac{\mu_K}{2} B_z$$

$$\hbar\omega_0 = \mu_K B_z \quad \begin{array}{c} \downarrow \text{-----} |\downarrow\rangle \\ \uparrow \text{-----} |\uparrow\rangle \end{array}$$

Störung:

$$V = -\frac{\mu_K}{\hbar} B_x S_x e^{i\eta t} \cos(\omega t)$$

$$\Gamma_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \downarrow | \frac{\mu_K}{\hbar} B_x S_x | \downarrow \rangle \right|^2 \delta(E_{\downarrow} - E_{\uparrow} - \hbar\omega) \propto \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega)$$

12 Pfadintegral

Zeitentwicklung im Schrödingerbild

$$|\Psi, t\rangle = U(t, t_0)|\Psi, t_0\rangle, t_0 \leq t$$

mit $U(t, t_0) = \exp(-iH(t - t_0)/\hbar)$

Zerlege Intervall $[t_0, t]$ in N Stücke

(Skizze 12a)

$$\epsilon = \frac{t - t_0}{N}$$

$$\rightarrow e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = \prod_{j=1}^N e^{-iH(t_j-t_{j-1})/\hbar} = \prod_{j=1}^N e^{-iH\epsilon/\hbar}$$

Ortwellenfunktion:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \Psi, t \rangle = \langle \vec{x} | U(t, t_0) | \Psi, t_0 \rangle = \int d^3x' \langle \vec{x} | U(t, t_0) | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \Psi, t_0 \rangle$$

Damit ist

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int d^3x' K(\vec{x}, t, \vec{x}', t_0) \Psi(\vec{x}', t_0)$$

mit dem Propagator

$$K(\vec{x}, t, \vec{x}', t') = \langle \vec{x} | U(t, t') | \vec{x}' \rangle$$

Mit $U(t, t') = \prod_{j=1}^N e^{-iH\epsilon/\hbar}$ kann man schreiben

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_N, t_N, \vec{x}_0, t_0 \rangle &= \langle \vec{x}_N | e^{-iH\epsilon/\hbar} e^{-iH\epsilon/\hbar} \dots e^{-iH\epsilon/\hbar} | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \int d^3x_1 \dots \int d^3x_{N-1} \langle \vec{x}_N | e^{-iH\epsilon/\hbar} | \vec{x}_{N-1} \rangle \langle \vec{x}_{N-1} | e^{-iH\epsilon/\hbar} | \vec{x}_{N-2} \rangle \dots \langle \vec{x}_1 | e^{-iH\epsilon/\hbar} | \vec{x}_0 \rangle \\ &= \left(\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \right) K(\vec{x}_N, t_N, \vec{x}_{N-1}, t_{N-1}) K(\vec{x}_{N-1}, t_{N-1}, \vec{x}_{N-2}, t_{N-2}) \dots K(\vec{x}_1, t_1, \vec{x}_0, t_0) \end{aligned}$$

(Skizze 12b) Entspricht Integral über alle Pfade von \vec{x}_0 nach \vec{x}_N , welche durch Möglichkeiten für Stützpfade $\{\vec{x}_j, j = 1 \dots N\}$ definiert.

Betrachte Propagator für Teilstück:

$$K(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) = \langle \vec{x}_j | e^{-iH(t_j-t_{j-1})/\hbar} | \vec{x}_{j-1} \rangle$$

Einfügen eines Impulselementes, um den Hamiltonoperator anwenden zu können

$$K(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \vec{x}_j | e^{-iH(t_j-t_{j-1})/\hbar} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}_{j-1} \rangle$$

Entwickeln der exponentialfunktion

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_j | e^{-iH\epsilon/\hbar} | \vec{p} \rangle &\approx \langle \vec{x}_j | \left(1 - \frac{i}{\hbar} H\epsilon \right) | \vec{p} \rangle = \langle \vec{x}_j | \vec{p} \rangle - \frac{i}{\hbar} \widehat{H}(\vec{x}_j, \vec{p}) \langle \vec{x}_j | \vec{p} \rangle \\ &= e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_j / \hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \widehat{H}(\vec{x}_j, \vec{p}) \right) \approx e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_j / \hbar} e^{-i\widehat{H}(\vec{x}_j, \vec{p})\epsilon / \hbar} \end{aligned}$$

Damit ist

$$K(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) \approx \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\widehat{H}(\vec{p}, \vec{x})(t_j-t_{j-1})/\hbar} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1})/\hbar}$$

12 Pfadintegral

\Rightarrow Integral vom Typ $\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\alpha t^2} = \sqrt{\frac{i\pi}{\alpha}}$ nach quadratischer Ergänzung des Exponenten (Fresnel-Integrale).

Damit ist

$$K(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}}{\epsilon}\right)^2 \frac{\epsilon}{\hbar}} e^{-iV(\vec{x}) \frac{\epsilon}{\hbar}}$$

Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bzw. $N \rightarrow \infty$

(Skizzen 12c+d)

Definiere (d=Dimension):

$$\int \mathbb{D}[\vec{x}(t)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{D \left(\frac{N-1}{2}\right)} \int dx_1 \dots \int dx_{N-1}$$

Außerdem gilt $\frac{\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}}{\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \vec{v}$

$$i \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_j - \vec{x}_{j-1}}{\epsilon}\right)^2 \frac{\epsilon}{\hbar} = i S_{kl}(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) / \hbar$$

mit klassischer Wirkung

$$S_{kl}(\vec{x}_j, t_j, \vec{x}_{j-1}, t_{j-1}) = \int_{t_{j-1}}^{t_j} dt L(\vec{x}, \vec{v}, t)$$

mit Lagrange-Funktion

$$L(\vec{x}, \vec{v}, t) = \frac{m}{2} \vec{v}^2 - V(\vec{x})$$

für geraden Pfad von \vec{x}_{j-1} nach \vec{x}_j

$$\Rightarrow K(\vec{x}_N, t_N, \vec{x}_0, t_0) = \int \mathbb{D}[\vec{x}(t)] e^{i S_{kl}(\vec{x}_N, t_N, \vec{x}_0, t_0) / \hbar}$$

Wirkungen für Teilabschnitte addieren sich im Exponenten. Man erhält S für Gesamtpfad (nicht unbedingt gerade).

Bem:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int d^3 x' K(\vec{x}, t, \vec{x}', t') \Psi(\vec{x}', t')$$

Normierung erfordert "Normierung" von K ! Aus $\int d^3 x' \Psi(\vec{x}', t')^2 = 1 \Leftrightarrow \int d^3 x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = 1$ Erlaubt Festlegung der Vorfaktoren in $\int \mathbb{D}[\vec{x}(t)]$

QM-Propagator

$$K(\vec{x}, t, \vec{x}', t') = \int \mathbb{D}[\vec{x}(t)] e^{i S_{kl}(\vec{x}, t, \vec{x}', t') / \hbar} \quad (12.1)$$

- Phase $i S_{kl} / \hbar$ ergibt QM-Interferenzphänomene
- Alle Pfade tragen bei: Teilchenbewegung ausgeschmiert

Frage: Wie erhält man die klassische Physik, in welcher nur Pfad mit extremaler Wirkung beiträgt, zurück im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$?

Def.: \vec{x}_{kl} aus $\frac{\delta S_{kl}[\vec{x}(t)]}{\delta \vec{x}(t)} = 0$

In Umgebung des klassischen Pfades $\vec{x}_{kl}(t)$ variiert $S_{kl}[\vec{x}(t)]$ schwach (da $S_{kl}[\vec{x}(t)]$ extremal). Phasenänderung von $e^{i S_{kl}}$ wird merklich für $\delta S_{kl} = S_{kl}[\vec{x}(t)] - S_{kl}[\vec{x}_{kl}(t)] \approx \hbar$. Für kleinere Abweichungen: konstruktive Interferenz mit ähnlicher Phase. Für größere Abweichungen: $S_{kl}[\vec{x}(t)]$ nicht mehr in der Nähe von Extremum $\rightarrow S_{kl}$ variiert stark, wenn $\vec{x}(t)$ sich ändert \Rightarrow benachbarte Pfade mitteln sich heraus.