

Theoretische Physik 4

Quantenmechanik

Wintersemester 2023/24



Schrödinger's Katze am Emmy Noether Campus: sie lebt!

Alexander Lenz

Universität Siegen

22. Februar 2024

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	9
1	Theoretische Quantenmechanik - Überblick	12
1.1	Von klassischer Mechanik zur Quantenmechanik	12
1.2	Historischer Überblick	15
1.3	Quantenmechanik	20
2	Die Wellenfunktion fällt vom Himmel	21
2.1	Die Schrödinger-Gleichung	21
2.2	Interpretation der Wellenfunktion	22
2.3	Wahrscheinlichkeiten	25
2.3.1	Diskrete Variablen	25
2.3.2	Kontinuierliche Variablen	26
2.4	Normierung	27
2.5	Impuls	28
2.6	Unschärferelation	31
3	Motivation der Schrödinger-Gleichung	33
3.1	Wellenfunktion	33
3.2	Wahrscheinlichkeitsinterpretation	33
3.3	Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen	34
4	Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung I	35
4.1	Stationäre Zustände	35
4.2	Der unendlich tiefe Potentialtopf	37
4.3	Der harmonische Oszillator	42
4.3.1	Allgemeines	42
4.3.2	Potenzreihenentwicklung	44
4.3.3	Algebraische Lösung	48
5	Operatoren und Skalarprodukte	56
5.1	Definitionen	56
5.2	Korrespondenzprinzip	60
5.3	Postulate der Quantenmechanik I	60
5.4	Ehrenfestsches Theorem II	61
5.5	Kontinuitätsgleichung in drei Raumdimensionen	63
5.6	Eigenwertgleichungen	64

5.7	Harmonischer Oszillator III	67
5.8	Physikalische Bedeutung der Eigenwerte	69
5.8.1	Wahrscheinlichkeiten II	69
5.8.2	Operatoren mit diskreten Eigenwerten	70
5.8.3	Operatoren mit kontinuierlichen Eigenwerten	72
5.8.4	Operatoren mit diskreten und kontinuierlichen Eigen- werten	73
5.9	Postulate der Quantenmechanik II	74
6	Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung II	75
6.1	Das freie Teilchen	75
6.1.1	Ebene Wellen	75
6.1.2	Wellenpakete	76
6.1.3	Phasen-/Gruppengeschwindigkeit	77
6.2	Potentialstufen	79
6.2.1	Stetigkeit von ψ und ψ'	79
6.2.2	Potentialstufe	81
6.2.3	Teilchenenergie oberhalb der Stufe	82
6.2.4	Teilchenenergie unterhalb der Stufe	86
6.2.5	Grenzfall: unendlich hohe Potentialschwelle	87
6.3	Tunneleffekt	88
6.3.1	Potentialschwelle	88
6.3.2	Kontinuierliche Potentialberg	95
6.3.3	α -Zerfall	95
6.4	Der endlich tiefe Potentialtopf	96
6.4.1	Gerade Symmetrie	97
6.4.2	Ungerade Symmetrie	98
6.4.3	Allgemeine Lösung	99
6.4.4	Grenzfall: ∞ -tiefer Potentialtopf	100
6.5	Symmetrieeigenschaften	102
6.6	Allgemeine Eigenschaften der 1-dimensionalen Schrödinger- Gleichung	103
6.7	Potentialtopf, Resonanzen	106
7	Unschärferelation	107
7.1	Heisenbergsche Unschärferelation	107
7.1.1	Schwarzsche Ungleichung	107
7.1.2	Allgemeine Unschärferelationen	108

7.1.3	Ort-Impuls Unschärferelation	109
7.2	Energie-Zeit Unschärferelation	109
7.2.1	Durchgangsdauer und Energieunschärfe	109
7.2.2	Dauer einer Energiemessung und Energieunschärfe . . .	110
7.2.3	Lebensdauer und Energieunschärfe	110
7.3	Gemeinsame Eigenfunktionen von kommutierenden Operatoren	110
7.4	Dirac-Notation	115
7.4.1	Zustände, Vektoren	115
7.4.2	Operatoren	116
7.4.3	Skalarprodukt	116
7.4.4	Projektionsoperatoren	117
8	Drehimpuls	118
8.1	Vertauschungsrelationen, Drehungen	118
8.2	su(2) Lie-Algebra	118
8.3	Drehungen	120
8.4	Eigenwerte des Drehimpulsoperators	121
8.5	Kugelkoordinaten	125
8.6	Drehimpulseigenfunktionen	126
9	Zentralpotential	128
10	Das Wasserstoffatom	132
10.1	Realistisches Wasserstoffatom	140
10.2	Zweikörper-Problem	141
10.3	Relativistische Wellengleichungen	142
10.3.1	Klein-Gordon-Gleichung	142
10.3.2	Maxwell-Gleichung	143
10.3.3	Dirac-Gleichung	143
10.3.4	Quantenfeldtheorie	145
11	Bewegung im elektro-magnetischen Feld	146
11.1	Fundamentale Wechselwirkungen	146
11.2	Hamilton-Operator	147
11.3	Konstantes Magnetfeld \vec{B}	148
11.4	Normaler Zeeman Effekt	149
11.5	Eichtransformation	150
11.6	Aharonov-Bohm-Effekt	152

11.6.1	Bewegung im magnetfeldfreien Raum	152
11.6.2	Aharonov-Bohm-Interferenz	153
11.7	Supraleiter	155
11.8	Freie Elektronen im Magnetfeld	156
12	Spin	159
12.1	Experimentelle Entdeckung de Spins	159
12.2	Mathematische Formulierung	160
12.3	Eigenschaften der Pauli-Matrizen	162
12.4	Zustände, Spinoren	163
12.5	Magnetisches Moment	163
12.6	Räumliche Freiheitsgrade und Spin	165
13	Heisenberg-Darstellung	167
13.1	Matrizen, Vektoren und unitäre Transformationen	167
13.2	Zustandsvektoren in Dirac-Notation	171
13.3	Axiome der Quantenmechanik	172
13.4	Mehrdimensional System und Vielteilchensysteme	173
13.5	Schrödinger- und Heisenberg-Darstellung	173
13.5.1	Schrödinger-Darstellung	173
13.5.2	Heisenberg-Darstellung	173
13.6	Freies Elektron im Magnetfeld	174
14	Addition von Drehimpulsen	175
14.1	Problemstellung	175
14.2	Addition von Spin 1/2 Operatoren	177
14.3	Addition von Bahndrehimpuls und Spin 1/2 Operatoren	180
14.4	Allgemeiner Fall	182
15	Näherungsmethoden	185
15.1	Zeitunabhängige Störungstheorie	185
15.1.1	Nicht entartete Störungstheorie	186
15.1.2	Entartete Störungstheorie	189
15.2	Variationsmethode	189
15.3	WKB Methode	190

16 Relativistische Korrekturen zum H-Atom	191
16.1 Relativistische kinetische Energie	191
16.2 Spin-Bahn-Kopplung	194
16.3 Darwin-Term	195
16.4 Weitere Korrekturen	195
17 Vielteilchensysteme	196
17.1 Identische Teilchen	196
17.1.1 Fermionen und Bosonen	196
17.1.2 Elementarteilchen	197
17.1.3 Pauli-Verbot	200
17.1.4 Nicht wechselwirkende Teilchen	200
18 Streuung	204
18.1 Introduction and Motivation	204
18.2 Basics in scattering	204
18.3 Potential scattering (general features)	208
18.3.1 The time-independent Schrödinger equation	208
18.3.2 The scattering amplitude	210
18.4 Spherical Bessel functions	211
18.4.1 Separation of variables	212
18.4.2 The simplest Bessel function	213
18.4.3 The spherical Bessel equation	213
18.4.4 Summary of Bessel functions	217
18.4.5 Plane waves	218
18.5 The method of partial waves	219
18.5.1 Definition of partial waves	219
18.5.2 Structure of the solution - Phase shifts	220
18.5.3 Convergence of the partial wave expansion	222
18.5.4 Resonances	223
18.6 The integral equation of potential scattering	225
18.6.1 Definition of the Green's function	225
18.6.2 Deriving the Green's function	226
18.6.3 Lippmann-Schwinger equation	227
18.7 The Born approximation	228
18.7.1 The Born series	228
18.7.2 The first Born approximation	228
18.7.3 The Coulomb potential	229

18.7.4	Propagator	230
18.8	Advanced Topics in Scattering	230
18.8.1	Form factor	230
18.8.2	Electron scattering on nucleon	231
18.8.3	Collisions between identical particles	233
19	Zeitabhängige Störungstheorie	235
20	Quantencomputing	236
20.1	Grundlagen	236
20.1.1	Definition Q-Bit	236
20.1.2	Physikalische Realisation	236
20.1.3	Bloch-Sphäre	238
20.1.4	Modifikation eines Qbits	239
20.2	2 Qbit Zustände	242
20.2.1	Basiszustände	242
20.2.2	Modifikation der 2-Qbit Zustände	242
20.2.3	Quanten Teleportation	244
20.3	Physikalische Realisation	245
21	Pfadintegrale und Interpretationen der QM	246
21.1	Pfadintegral	246
21.2	Interpretationen der QM	251
21.3	Measurements and interpretation	251
21.4	Introduction	251
21.5	The basic question	251
21.6	Einstein-Podolsky-Rosen paradox	254
21.7	Bell's equation	256
21.8	More fancy interpretations	259

0 Einleitung

Laut Modulhandbuch gibt es folgende Lernziele: *Die Studierenden kennen die Prinzipien der Quantentheorie als Grundlage der modernen Physik, insbesondere von Atom- und Molekülphysik, Teilchenphysik, Festkörperphysik und Optik. Sie beherrschen den mathematischen Formalismus der Quantenmechanik. Sie kennen die exakte Beschreibung elementarer Quantensysteme sowie geeignete Näherungsmethoden. Sie sind in der Lage, die mathematischen Methoden auf elementare Quantensysteme anzuwenden, in konkrete Rechnungen umzusetzen und diese erfolgreich auszuführen.*

Der Syllabus dieser Vorlesung ist im Modulhandbuch wie folgt angegeben:

- Zustandsraum, Superpositionsprinzip
- Observable und Wahrscheinlichkeitsinterpretation
- Dirac-Formalismus und Wellenfunktionen in Orts- und Impulsraum
- Hamilton-Operator und Schrödinger-Gleichung
- Einfache quantenmechanische Systeme: Harmonischer Oszillator, H-Atom
- Korrespondenzprinzip und Unschärferelationen
- Drehimpulsalgebra und Clebsch-Gordan-Koeffizienten
- Stationäre und zeitabhängige Störungstheorie
- Streutheorie

Wir werden zusätzlich noch als aktuelle Themen

- Grundlagen des Quantencomputing
- Interpretationen der Quantenmechanik
- Pfadintegrale in der Quantenmechanik

behandeln.

Für diese Vorlesung sind die Standard-Mathematikurse in Siegen Voraussetzung (Mathematischer Vorkurs, Mathematische Ergänzungen, Analysis, Lineare Algebra, TP1), sowie die Physikkurse Theoretische Physik 2 und 3. Erste Berührungspunkte mit der Quantenmechanik gab es schon in der Experimentalphysikvorlesung III bei Prof. Wunderlich.

Literaturempfehlungen: Für die Theoretische Quantenmechanik gibt es eine sehr umfangreiche Literatur. Zusätzlich zur Vorlesung können u.a. folgende Bücher empfohlen werden:

1. F. Schwabl — Springer: Quantenmechanik
Vorlesung orientiert sich daran - auf der Springer-Webseite kann das pdf-File kostenlos heruntergeladen werden.
2. Griffiths: Quantenmechanik - Pearson
3. L. Landau, E. Lifshitz — Akademie Verlag Berlin
Theoretische Physik 3 - Quantenmechanik
Klassiker, knapper als die Vorlesung.
4. L. Susskind, A. Friedman — Penguin
The theoretical Minimum - Quantum Mechanics
Crash-kurs .
5. Cohen-Tannoudji: Quantenmechanik
6. Messiah: Quantenmechanik
7. Fließbach: Quantenmechanik
8. Nolting: Grundkurs Theoretische Physik 5

Ablauf:

- Dienstag 10-12 Vorlesung ENC-D 308 - 1. Termin: 10.10.2023
- Donnerstag 10-12 Vorlesung ENC-B 030 - 1. Termin: 12.10.2023

Parallel zur Vorlesung finden Übungen statt: Das Übungsblatt wird Dienstags in der Vorlesung ausgeteilt und muss am darauffolgenden Montag bis 12:00 mittags abgegeben werden. Am Mittwoch danach werden die Aufgaben besprochen. Es besteht die Möglichkeit eine der beiden Übungsgruppen auf Englisch zu halten.

- Montag 12:00 Übungsblattabgabe - 1. Termin: 16.10.2023
per email an Martin.Lang@uni-siegen.de
- Dienstag 10-12 Übungsblattausgabe - 1. Termin: 10.10.2023
- Mittwoch 8-10 Übung ENC-B 030 - 1. Termin: 18.10.2023, Englisch, Dr. Meril Reboud
- Mittwoch 8-10 Übung ENC-D 115 - 1. Termin: 18.10.2023, Deutsch, Martin Lang

**Striktes Teilnahmekriterium für die Klausur ist:
50% der Hausaufgabenpunkte!**

1 Theoretische Quantenmechanik - Überblick

1. Vorlesung: Dienstag 10.10.2023

1.1 Von klassischer Mechanik zur Quantenmechanik

In **klassischer Mechanik** betrachten wir üblicherweise Punktteilchen auf makroskopischen Maßstäben (z.B. mm bis kosmische Abstände) und bei kleinen Geschwindigkeiten.

- Kleine Geschwindigkeiten werden im Verhältnis zur Lichtgeschwindigkeit definiert: $v \ll c = 299792458 \text{ m/s}$.
- Makroskopische Maßstäbe werden durch den Wert der Wirkung festgelegt. In der Mechanik-Vorlesung hatten wir die Wirkung definiert als

$$S = \int_{t_A=0}^{t_E} L dt = \int_{t_A=0}^{t_E} \left[\frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 - E_{pot}(x(t)) \right] dt. \quad (1)$$

Für die Bewegung im konstanten Gravitationsfeld, $x(t) = 1/2gt^2 - v_0t$, der Erde erhielten wir

$$\begin{aligned} S_p &= \int_0^{t_E} \left[mg^2t^2 - 2mgv_0t + \frac{1}{2}mv_0^2 \right] dt, \\ &= \frac{1}{3}mg^2t_E^3 - mgv_0t_E^2 + \frac{1}{2}mv_0^2t_E, \end{aligned} \quad (2)$$

Für eine Masse $m = 1 \text{ kg}$ erhalten wir für $v_0 = 0$ und $t_E = 1 \text{ s}$ einen Wert der Wirkung von 32 Js .

In der Quantenmechanik werden wir das Plancksche Wirkungsquantum h einführen. Dessen Zahlenwert lautet

$$h = 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Js}. \quad (3)$$

Wirkungswerte in der klassischen Mechanik sind um viele Größenordnungen höher als das Plancksche Wirkungsquantum.

In der **relativistischen Mechanik** werden für Punktteilchen auch Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit betrachtet, jedoch weiterhin bei makroskopischen Maßstäben.

In der **klassischen Elektrodynamik** werden Felder mit unendlich vielen Freiheitsgraden eingeführt, die sich mit Lichtgeschwindigkeit bewegen. Die Behandlung beschränkt sich aber wiederum auf makroskopische Abstände.

In der **Quantenmechanik** behandeln wir einzelne Teilchen auf mikroskopischen Abständen, z.B. ein Elektron, das um einen Atomkern kreist. Um abzuschätzen wie groß hierbei die Wirkung ist betrachten wir sehr naiv die Bewegung eines klassischen Elektrons im Coulomb-Potential eines Protons (Wasserstoffatom). Die Wirkung lautet

$$S = \int_{t_A=0}^{t_E} L dt = \int_{t_A=0}^{t_E} [T - V] = \int_{t_A=0}^{t_E} \left[\frac{m}{2} v^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] dt. \quad (4)$$

Für eine klassische Kreisbewegung gilt

$$F_Z = \frac{mv^2}{r} = F_C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (5)$$

Weiter gilt für eine Umrundung mit $r = \text{const.}$ und $v = \text{const.}$:

$$\begin{aligned} S &= \frac{3}{2}mv^2 \int_{t_A=0}^{t_E} dt = \frac{3}{2}mv^2 \frac{2\pi r}{v} = 3\pi mvr \\ &= 3\pi mr \sqrt{\frac{e^2}{4m\pi\epsilon_0 r}} = \frac{3e}{2} \sqrt{\frac{\pi mr}{\epsilon_0}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Mit den Zahlenwerten (https://pdg.lbl.gov/2023/reviews/contents_sports.html)

$$\begin{aligned} e &= 1.602176634 \cdot 10^{-19} C, \\ m &= 9.1093837015 \cdot 10^{-31} kg, \\ r &= 0.52917721090 \cdot 10^{-10} m, \quad (\text{Bohr-Radius}) \\ \epsilon_0 &= 8.8541878128 \cdot 10^{-12} F/m \end{aligned} \quad (7)$$

erhalten wir

$$S = 9.94 \cdot 10^{-34} Js = 1.5h. \quad (8)$$

In diesem Fall ist der numerische Wert der Wirkung also in der Größenordnung des Planckschen Wirkungsquantums.

Für die Geschwindigkeit des Elektrons erhalten wir einen Zahlenwert von

$$\begin{aligned} v &= \sqrt{\frac{e^2}{4m\pi\epsilon_0 r}} = 2.2 \cdot 10^6 \text{ m/s} = 0.0073c, \\ E &= 13.6\text{eV} \ll mc^2 = 511\text{keV}, \end{aligned} \tag{9}$$

wir sind also im nicht-relativistischen Bereich.

Quantenmechanik beschreibt einzelne, nicht-relativistische Teilchen im mikroskopischen Fall, d.h. die Werte der Wirkung sind im Bereich des Planckschen Wirkungsquantums, durch die Schrödinger-Gleichung. Dies wird der Inhalt dieser Vorlesung sein.

Werden bei mikroskopischen Maßstäben hingegen Energien untersucht, die im relativistischen Bereich liegen, so werden einzelne Teilchen in der **relativistischen Quantenmechanik** durch die Dirac-Gleichung (Spin 1/2) bzw. durch die Klein-Gordon-Gleichung (Spin 0) beschrieben.

Bei Energien die größer als die doppelte Ruhemasse der behandelten Teilchen ist, ergibt sich dann die Möglichkeit der Paarerzeugung - ein Photon kann z.B. in ein Elektron und Positron Paar aufspalten. Um diese Effekte zu beschreiben, muss die Einteilchen Quantentheorie zu einer Vielteilchentheorie erweitert werden, der sogenannten **Quantenfeldtheorie**. Hiervon gibt es mehrere Spezialfälle:

- Die Wechselwirkung von Materie mit Licht (als Quantenfeld) wird dann durch die **Quantenelektrodynamik** beschrieben. In dieser Vorlesung werden wir näherungsweise die Wechselwirkung von einzelnen Teilchen mit einem klassischen Strahlungsfeld behandeln.
- Die starke Wechselwirkung, welche Quarks zu Protonen und Neutronen bindet, sowie Protonen und Neutronen zu Kernen wird durch die **Quantenchromodynamik** beschrieben.
- Die schwache Wechselwirkung, die dem β -Zerfall (Energieerzeugung in der Sonne, radioaktiver Zerfall) zugrunde liegt, wird durch die **Quantenflavourdynamik** beschrieben.

Im Folgenden Diagramm werden die Theorievorlesungen in Siegen systematisch gegenübergestellt:

	$v \ll c$ 1-Teilchen	$v \approx c$ 1-Teilchen	$v \approx c$ ∞ -viele Teilchen
$S \gg \hbar$	Klassische Mechanik $F = m \cdot a$ Newton $L = T - V$ Lagrange $H = H(p, q)$ Hamilton TP2	Relativistische Mechanik TP3	Klassische Feldtheorie $\mathcal{L} = -\frac{1}{2} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$ Maxwell
$S \approx \hbar$	Quantenmechanik $i\hbar \partial_t \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi$ Schrödinger TP4	Relativistische Quantenmechanik $(i\hbar \not{\partial} - m) \psi = 0$ Dirac $(\square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \phi = 0$ Klein-Gordon	Quantenfeldtheorie TP1 + TP2

1.2 Historischer Überblick

Klassisch betrachten wir Atome (atomos = unteilbar) als kleine Teilchen und Licht als Welle (siehe Maxwell-Gleichungen oder Doppelspaltexperiment mit Licht: 1802 Thomas Young).

Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts gab es eine Vielzahl von experimentellen Hinweisen, die auf eine Notwendigkeit einer Erweiterung des klassischen Weltbildes im Mikrokosmos hinwiesen. Diese Experimente wurden im Detail in der Physik III Vorlesung besprochen.

- Elektromagnetische Wellen verhalten sich wie Teilchen: Photonen
 1. Hohlraumstrahlung: kann hergeleitet werden, wenn man annimmt, dass die Strahlungsenergie quantisiert ist. $u(\omega)d\omega$ sei die Energiedichte der Strahlung eines schwarzen Körpers bei der Temperatur T pro Volumeneinheit und im Frequenzintervall $[\omega, \omega + d\omega]$. Aus klassischen theoretischen Überlegungen (stehende Wellen in Hohlraum mit reflektierenden Wänden abzählen) ergibt sich das Rayleigh-Jeans Gesetz

$$u(\omega) = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^3.$$

Integriert man diese Energiedichte über alle Frequenzen, so ergibt sich unendlich - die Ultravioletkatastrophe.

Diese Formel stimmt bei sehr niedrigen Frequenzen mit dem Experiment überein, während bei hohen Frequenzen eine massive Abweichung gefunden wurde, das Wiensche Gesetz

$$u(\omega) = A\omega^3 e^{-\frac{g\omega}{T}},$$

welches bei Integration einen endlichen Wert liefert.

Max Planck konnte basierend auf der Hypothese, dass Energie von den Wänden an die Strahlung nur in Vielfachen von $\hbar\omega^1$ abgegeben wird, eine Interpolationsformel herleiten, die bei niedrigen Energien mit dem Raleigh-Jeans Gesetz und bei hohen Frequenzen mit dem Wienschen Gesetz übereinstimmt.

$$u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1}.$$

Also ein Hinweis darauf, dass die Energie der Strahlung nicht kontinuierlich ist, sondern quantisiert.

2. Photo(elektrischer) Effekt: Experiment: 1886 Heinrich Hertz, 1888 Wilhelm Hallwachs, 1899 Philipp Lenard, 1912-15 Robert Milikan. Erklärung: Einstein 1905 (NP 1921).

Strahlt man Licht mit der Frequenz ω (meist UV, bei Alkalimetallen auch sichtbar) auf eine Metallfolie/oberfläche so beobachtet man, dass Elektronen mit einer maximalen kinetischen Energie von

$$E_e = \frac{mv_e^2}{2} = \hbar\omega - W$$

emittiert werden, wobei W die Austrittsarbeit ist.

In der klassischen Elektrodynamik findet man für die Energiedichte

$$u(\omega) \propto (E^2 + H^2)I,$$

mit dem elektrischen Feld E , dem magnetischen Feld H und der Intensität I . Man würde also bei kleinen Intensitäten erwarten, dass es eine gewisse Zeit dauert, bis genügend Energie vorhanden

¹ \hbar ist die reduzierte Planckkonstante $\hbar = h/(2\pi) = 1.054571817 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

ist um ein Elektron auszulösen und es sollte auch keine Mindestfrequenz für das Licht geben.

Experimentell beobachtet man hingegen, dass die Elektronenemission sofort einsetzt und dass eine Mindestfrequenz gibt. Einstein stellte daher 1905 die Hypothese auf, dass Licht aus Lichtteilchen (Photonen) besteht mit der Energie $E = \hbar\omega$ und dem Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, wobei \vec{k} der elektromagnetische Wellenvektor ist, mit $\omega = ck$ ($k = |\vec{k}|$).

3. Compton Effekt: Elastische Streuung von Photonen (Röntgenstrahlung) an Elektronen und das Photon verhält sich wie ein Teilchen. Arthur Compton 1922, Washington University (Studium, PhD in Princeton, 1 a Wirtschaft, 1 a Cambridge UK, Washington, Chicago, Manhattan Projekt, St. Louise; NP 1927). Zur Herleitung setzt man die Energie Impuls Erhaltung an und nimmt das Elektron am Anfang als ruhend an

$$\hbar \begin{pmatrix} k \\ \vec{k} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_e c \\ \vec{0} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} k' \\ \vec{k}' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sqrt{\vec{p}'^2 + m_e^2 c^2} \\ \vec{p}' \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Daraus erhält man schliesslich für die Änderung der Wellenlänge ($\lambda = 2\pi/k$) des Photons

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (11)$$

mit der Comptonwellenlänge des Elektrons

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c} = 3.86 \cdot 10^{-13} m. \quad (12)$$

Dieser Zusammenhang, wird experimentell bestätigt, d.h. Licht verhält sich in diesem Fall wie ein Teilchen.

- Teilchen verhalten sich wie Wellen: Materiewellen: Materiewellen wurden von Louis-Victor de Broglie in seiner Dissertation 1924 eingeführt, wofür er 1929 den Nobelpreis für Physik erhielt. Laut seiner Hypothese ist jedem Teilchen mit einer Gesamtenergie E und einem Impuls \vec{p} eine Frequenz $\omega = E/\hbar$ und eine Wellenlänge $\lambda = 2\pi\hbar/p$ zugeordnet. Experimentelle Indizien für den Wellencharakter sind:

1. Reflexion von langsamen Elektronen an Kristallen (Davisson und Germer, 1919) zeigt Interferenzmuster.
 2. Doppelspalt mit Elektronen: 1961 Claus Jönsson
Mit ganzen Atomen 1990 Jürgen Mlynek und Olivier Carnal mit großen Molekülen wie z. B. C60 (Buckyballs) im Jahr 2003 Nairz et al.
- Mikroskopische Teilchen als Teilchen: es gab aber auch weiterhin Hinweise, dass sich Teilchen auch im Mikrokosmos wie Teilchen verhalten.
 1. Ionisationsspuren in der Wilson-Kammer: dringen Elektronen in eine Kammer die mit übersättigtem (höhere Dichte als im thermodynamischen Gleichgewicht) Wasserdampf gefüllte ist ein, so ionisieren sie Gasatome entlang ihrer Flugbahn. Diese Ionen wirken als Kondensationskeime und führen bei Expansion (Abkühlung) des Wasserdampfes zur Bildung kleiner Wassertröpfchen
 2. Streu- und Stoßexperimente zwischen mikroskopischen Teilchen.
 3. Millikan-Versuch: Quantisierung der elektrischen Ladung in Einheiten der Elementarladung $e = 1.6021 \cdot 10^{-19}C$
 - Diskrete Zustände: darüber hinaus hat man im mikroskopischen oft diskrete anstatt von kontinuierlichen Größen wie Energie oder Drehimpuls gefunden.
 1. Diskrete Energie Niveaus: das Thomson'sche (1857-1940) Atommodell ging von einer kontinuierlichen positiven Ladungsverteilung aus, in das leichte, negative geladene Elektronen (Experimente von Lenard - 1862.1947) eingebettet sind. Die Stabilität wird dabei durch Elektrodynamik erklärt. Streuexperimente mit alpha-Teilchen fanden jedoch Rückwärtsstreuung (in Manchester: Geiger, Geiger und Marsden (1908), Rutherford). Dies wurde durch das Rutherfordsche Atommodell erklärt.
Rutherford leitete die Streuformel für einen schweren kleinen Atomkern klassisch her

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (13)$$

(siehe z.B. Übungsblatt 7, Theoretische Mechanik WS 22/23) und dieser Wirkungsquerschnitt wurde experimentell bestätigt. Glücklicherweise stimmt das klassische Ergebnis exakt mit der quantenmechanischen Rechnung überein, die gegen Ende dieser Vorlesung vorgestellt werden wird.

Nachdem Rutherfordschen Atommodell würde man jedoch eine kontinuierliche Dipolstrahlung der kreisenden Elektronen erwarten, somit einen Energieverlust und instabile Atome.

Experimentell fand man hingegen bei Anregung/Abregung ein diskretes Strahlungsspektrum und z.B. die empirische Formel für die Balmer Serie

$$\hbar\omega = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ mit } n, m \in \mathbb{N} \quad (14)$$

und der Rydberg-Energie $R_y = m_e e^4 / (8\epsilon_0^2 \hbar^2) = 13.6 \text{ eV}$.

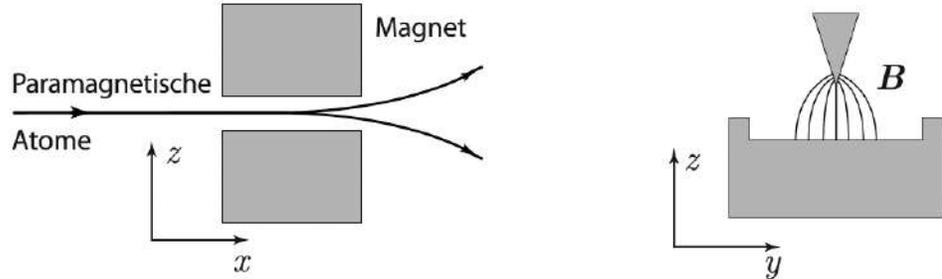
Bohr erklärte diese Abweichung von der klassischen Physik, indem er ad-hoc eine Quantisierungsbedingung postulierte: als stationäre Zustände sind nur jene klassischen Bahnen erlaubt, die die Bedingung

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n \quad (15)$$

erfüllt (für jede Koordinate und jeden generalisierten Impuls). Zusätzlich nahm er ad-hoc an, dass stationäre Zustände keine Energie abstrahlen. Damit konnte die Balmer-Serie erklärt werden, aber diese ad-hoc Annahmen waren doch sehr unzufriedenstellend.

2. Stern-Gerlach Experiment: Stern und Gerlach schossen 1922 einen Strahl paramagnetischer² Atome in ein stark inhomogenes magnetisches Feld.

²Paramagneten werden in ein magnetisches Feld hineingezogen, ihre Magnetisierung folgt dem äußeren Feld. Ohne äußeres magnetisches Feld zeigen sie kein magnetisches Verhalten.



Laut Elektrodynamik gilt für die Kraft \vec{F} , die auf ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ wirkt

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \underset{B_z \gg B_x, B_y}{\approx} \vec{\nabla}(\mu_z B_z) \underset{\partial_z \gg \partial_x, \partial_y}{\approx} \partial_z(\vec{\nabla}(\mu_z B_z)) \vec{e}_z. \quad (16)$$

Klassisch erwartet man eine kontinuierliche Variation von μ_z , also eine kontinuierliche Auffächerung des Atomstrahles, experimentell hingegen findet man hingegen eine diskrete Anzahl von Strahlen, im Falle von Wasserstoffatomen, 2 Strahlen.

Darüberhinaus lieferte dieses Experiment den ersten Hinweis auf die Existenz einer neuen Größe, dem Spin.

1.3 Quantenmechanik

Heisenberg (1925 Matrizenmechanik, 1927 Unschärferelation) und Schrödinger (1926 Wellenmechanik) legten mit ihren Forschungen einen Grundstock für die Quantenmechanik, als Erklärung dieser Abweichungen der Beobachtungen von der klassischen Erwartung.

2 Die Wellenfunktion fällt vom Himmel

2.1 Die Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m , das sich entlang der x -Achse unter dem Einfluss einer Kraft $F(x, t) = -\partial V/\partial x$ bewegt.

In der **klassischen Mechanik** bestimmen wir den Ort dieses Teilchens an jedem beliebigen Zeitpunkt $x(t)$ in dem wir die Newtonschen Bewegungsgleichungen bei gegebenen Anfangsbedingungen $x(t_0)$ und $\dot{x}(t_0)$ lösen.

$$F = ma, \quad (17)$$

$$-\frac{\partial V}{\partial x} = m \frac{d^2 x}{dt^2}. \quad (18)$$

Aus der Kenntnis von $x(t)$ können wir dann die Geschwindigkeit $v(t) = dx(t)/dt$, den Impuls $p = mv$, die kinetische Energie $T = 1/2mv^2, \dots$ zu jedem beliebigen Zeitpunkt genau bestimmen.

In der **Quantenmechanik** behandeln wir dieses Problem, indem wir die **Wellenfunktion** $\Psi(x, t)$ dieses Teilchens als Lösung der eindimensionalen **Schrödinger-Gleichung** suchen.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t). \quad (19)$$

Mit der Anfangsbedingung $\Psi(x, t_0)$ bestimmt die Schrödinger-Gleichung die Wellenfunktion für alle Zeiten.

2.2 Interpretation der Wellenfunktion

Statistische Interpretation der Wellenfunktion von Max Born:

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t zwischen den Punkten a und b zu finden ist gegeben durch

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx . \quad (20)$$

$|\Psi(x, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte am Punkt x und zur Zeit t . Die Wellenfunktion kann komplex sein, die Wahrscheinlichkeitsdichte ist reell und positiv.

Beispiele für Wahrscheinlichkeitsdichten/Wellenfunktionen: Teilchen in Potentialtopf

Die statistische Interpretation bringt eine Unbestimmtheit in die Quantenmechanik: was bedeutet es, wenn man nur die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens bestimmen kann, aber nicht den exakten Ort?

Ein erster Blick auf mögliche Interpretationen: Nehmen wir hypothetisch an wir können den Ort eines Teilchens messen und finden, dass dieses sich am Punkt C befindet. Nun können wir uns die Frage stellen, wo sich das Teilchen direkt vor der Messung befunden hat. Hierzu gibt es drei plausible Antworten, die auch die Hauptdenkrichtungen der Interpretationen der Quantenmechanik darstellen:

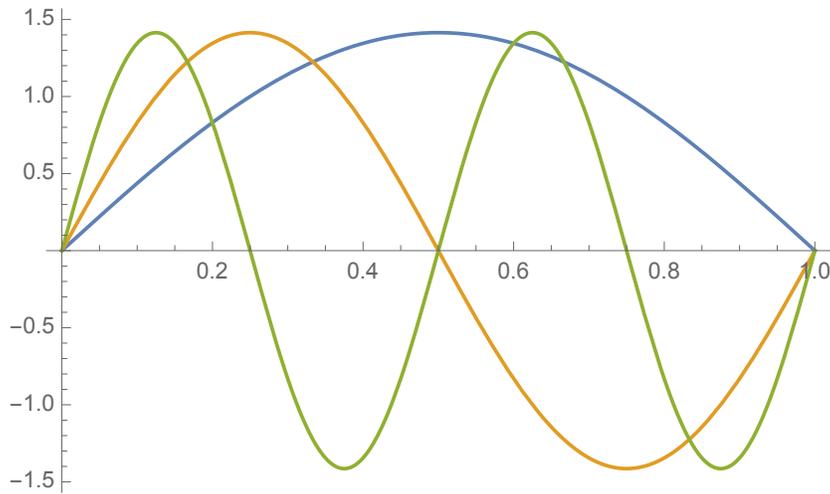


Abbildung 1: Wellenfunktion für Kastenpotential: $\Psi_n(x) = \sqrt{2} \sin(n\pi x)$: Mathematica: `Plot[{Sqrt[2]Sin[Pi x], Sqrt[2]Sin[2Pi x], Sqrt[2]Sin[4Pi x]}, {x, 0, 1}]`

1. **Realistische Position:** *Das Teilchen war an Punkt C.* Scheint sinnvoll und wurde z.B. von Einstein vertreten. In diesem Falle ist die Quantenmechanik aber eine unvollständige Theorie, denn das Teilchen war wirklich am Punkt C während die QM das nicht mit Bestimmtheit aussagen konnte. In diesem Falle beinhaltet die Wellenfunktion Ψ also nicht alle Aspekte der Wirklichkeit und für die vollständige Beschreibung der Realität bräuchte man weitere (verborgene) Variablen: **hidden variables**, z.B. Bohm.
2. **Orthodoxe Position:** *Das Teilchen war nirgendwo.* Erst durch die Messung wurde das Teilchen gezwungen sich zu lokalisieren. **Kopenhagener Interpretation.** In diesem Falle wäre es wohl interessant den Meßprozess an sich weiter zu untersuchen.
3. **Angnostische Position:** *Es gibt keine Antwort dazu.* Scheint erstmal dumm, aber die Grundidee ist, dass die Bestimmung einer Position einen Messprozess erfordert und ohne Messprozess gibt es auch keinen bestimmten Ort.

1964 konnte Bell zeigen, dass es einen beobachtbaren Unterschied gibt, ob ein Teilchen vor einer Messung einen bestimmten Ort einnimmt oder nicht -

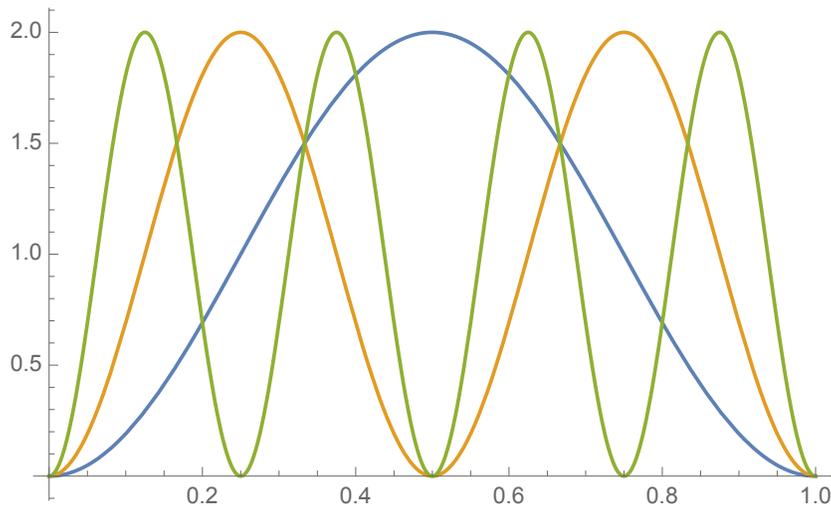


Abbildung 2: Wahrscheinlichkeitsdichte für Kastenpotential: $|\Psi_n(x)|^2 = 2 \sin^2(n\pi x)$: Mathematica: `Plot[{2Sin[Pi x]^2, 2Sin[2Pi x]^2, 2Sin[4Pi x]^2}, {x, 0, 1}]`

damit scheint Position 3 ausgeschlossen (Bellsche Ungleichung). Momentan gibt es einige experimentelle Indizien, die für die orthodoxe Interpretation sprechen. Dies wird ausführlicher am Ende der Vorlesung besprochen.

Siehe auch: Vorlesung Quanteneffekte und Quantenparadoxa: Vorbesprechung: Donnerstag, 12. Oktober 1215, Raum B030 Kontakt: Matthias Kleinmann (Raum B006, matthias.kleinmann@uni-siegen.de)

Was passiert bei einer weiteren Messung, sofort nach der ersten? Es scheint logisch, dass diese wieder zum Wert C führen muss und nicht zu einem völlig anderen Wert. Für die orthodoxe Interpretation bedeutet das aber, dass sich die Wellenfunktion beim ersten Messprozess fundamental geändert haben muss. Nun hat sie eine scharfe Spitze bei $x = c$, man spricht hier vom **Kollaps der Wellenfunktion**; diese scharfe Spitze verschmiert jedoch im Laufe der Zeit wieder. Es scheint also 2 Arten von Zeitentwicklung in der Quantenmechanik zu geben

1. Gewöhnliche Prozesse, bei denen die Zeitentwicklung durch die Schrödinger-Gleichung gegeben ist.
2. Messungen, bei denen die Wellenfunktion plötzlich und unstetig zusam-

menbricht.

2.3 Wahrscheinlichkeiten

2.3.1 Diskrete Variablen

Beispiel 14 Personen unterschiedlichen Alters in einem Raum:

$$N(14 a) = 1$$

$$N(15 a) = 1$$

$$N(16 a) = 3$$

$$N(22 a) = 2$$

$$N(24 a) = 2$$

$$N(25 a) = 5$$

Die Gesamtzahl der Personen im Raum ist

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \quad (21)$$

Die **Wahrscheinlichkeit**, dass eine zufällig ausgewählte Person j Jahre alt ist, beträgt

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \quad (22)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass eine zufällig ausgewählte Person, entweder i oder j Jahre alt ist, beträgt $P(i) + P(j)$. Die **Summe aller Wahrscheinlichkeiten** beträgt 1

$$1 = \sum_{j=0}^{\infty} P(j). \quad (23)$$

Das **Maximum** von $P(j)$ gibt das wahrscheinlichste Alter an, hier 25. Der **Medianwert** liegt vor, wenn genauso viele Leute unter dem Median wie über dem Median liegen, in unserem Fall 23. Das mittlere Alter oder **Durchschnittsalter** berechnet sich zu

$$\bar{j} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j). \quad (24)$$

In unserem Fall 21.

Beachte: Niemand muss das mediane oder mittlere Alter tatsächlich haben!

Im Beispiel gilt $N(21) = 0 = N(23)$.

Der Mittelwert (oder auch Erwartungswert) einer Funktion $f(j)$ ist gegeben durch

$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j)P(j). \quad (25)$$

Wir definieren für die Abweichung vom Mittelwert

$$\Delta j = j - \langle j \rangle \quad (26)$$

und erhalten damit $\langle \Delta j \rangle = 0$. Die quadratische Abweichung oder Varianz hingegen verschwindet im Allgemeinen nicht

$$\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle. \quad (27)$$

Man kann zeigen

$$\sigma^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 \quad (28)$$

und somit $\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2$. σ wird die **Standardabweichung** genannt.

2.3.2 Kontinuierliche Variablen

Nach dem Übergang von diskreten Variablen zu kontinuierlichen Variablen müssen wir Bereiche, Intervalle, betrachten. Wir führen eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** $\rho(x)$ ein:

Wahrscheinlichkeit, dass ein Wert zwischen x und $x + dx$ liegt: $\rho(x)dx$.

Wahrscheinlichkeit, dass x zwischen a und b liegt:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)dx. \quad (29)$$

Weiterhin gilt

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx, \\ \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx, \\ \langle f(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \rho(x) dx, \\ \sigma^2 &= \langle (\Delta(x))^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2. \end{aligned} \quad (30)$$

2.4 Normierung

Nach diesem sehr elementaren Ausflug in die Wahrscheinlichkeitstheorie kommen wir wieder zu unserer Wellenfunktion zurück. Laut unserem Postulat ist $|\Psi(x, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen zum Zeitpunkt t am Ort x zu finden.

Damit folgt sofort

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (31)$$

In anderen Worten: mögliche Wellenfunktionen sind quadratintegrierbar.

Welche Einschränkungen liefert dies an die Wellenfunktion? Ein Blick auf die Schrödingergleichung zeigt: ist $\Psi(x, t)$ eine Lösung davon, so ist auch $A\Psi(x, t)$ mit beliebigem A eine Lösung. Gleichung (31) zeigt nun aber, dass es nur einen Wert von A gibt, so dass die integrierte Wahrscheinlichkeitsdichte 1 ergibt. Die Bestimmung dieses speziellen Wertes von A bezeichnet man die **Normierung der Wellenfunktion**.

Bleibt die Normierung im Laufe der Zeitentwicklung durch die Schrödingergleichung erhalten?

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (32)$$

Die partielle Ableitung kann weiter vereinfacht werden

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}. \quad (33)$$

Laut Schrödinger-Gleichung gilt für die Zeitableitung

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi, \\ \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*, \end{aligned} \quad (34)$$

und damit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]\right). \end{aligned} \quad (35)$$

Diese Gleichung lautet auch **Kontinuitätsgleichung**.

Nun können wir das ursprüngliche Integral lösen

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}. \quad (36)$$

Damit Ψ quadratintegrabel sein kann, muss die Wellenfunktion bei unendlich gegen Null gehen, und damit erhalten wir

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx = 0. \quad (37)$$

Die Normierung der Wellenfunktion ändert sich also bei der Zeitentwicklung durch die Schrödinger-Gleichung nicht. Dies ist eine bemerkenswerte Eigenschaft der Schrödinger-Gleichung.

2.5 Impuls

Der Erwartungswert für den Ort eines Teilchens im Zustand Ψ zum Zeitpunkt t beträgt

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(x,t)|^2 dx. \quad (38)$$

Was bedeutet das?

- Wenn wir beliebig oft hintereinander messen, dann wird der Mittelwert aller Messungen $\langle x \rangle$ betragen? Nein! Nach der ersten Messung kollabiert die Wellenfunktion und es gibt immer den Wert der ersten Messung.
- Wir betrachten ein **Ensemble**³ von vielen identischen Teilchen, die alle im Zustand Ψ sind. Bei allen Ensembles misst man x und der Mittelwert all dieser Messungen ist dann $\langle x \rangle$.

Wie verändert sich der Mittelwert $\langle x \rangle$ mit der Zeit?

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] dx \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] dx = \frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx, \end{aligned} \quad (39)$$

wobei wir in den letzten beiden Schritten jeweils partiell integriert haben unter Beachtung, dass die Wellenfunktion im Unendlichen verschwindet.

Beachte: wir haben hier die zeitliche Ableitung des Erwartungswertes des Ortes definiert, das ist nicht notwendigerweise die Geschwindigkeit des Teilchens.

Wir definieren nun: Der Erwartungswert der Geschwindigkeit ist gleich

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad (40)$$

und der Erwartungswert des Impulses lautet

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad (41)$$

³Zusammengehörende, aufeinander abgestimmte Gruppe von Schauspielern, Tänzern, Sängern oder Orchestermusikern mit festem Engagement.

Somit ergibt sich

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot x \cdot \Psi \, dx, \quad (42)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \Psi \, dx, \quad (43)$$

Wir sprechen nun vom **Ortsoperator** x und vom **Impulsoperator** $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$. Um den Erwartungswert für eine beliebige Größe $Q(x, p)$ (z.B. kinetische Energie $T = p^2/(2m)$ oder Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$) zu berechnen, bestimmen wir

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \Psi \, dx. \quad (44)$$

Damit ergibt sich z.B. für den Erwartungswert der kinetischen Energie

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \, dx. \quad (45)$$

Die fundamentale Relation in Gleichung (44) wird später noch mal etwas grundlegender hergeleitet, bis dahin werden wir sie als Axiom betrachten und uns mit den Konsequenzen vertraut machen.

Weiter kann man das **Ehrenfest-Theorem** zeigen, welches besagt, dass die so definierten Mittelwerte den klassischen Bewegungsgleichungen gehorchen, z.B.

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad (46)$$

3. Vorlesung: Dienstag 17.10.2023
Kap 1, Griffiths; Kap. 2 Schwabl

2.6 Unschärferelation

Anschauliches Beispiel: rhythmisches Auf- und Abbewegen eines Seiles, so dass ein kontinuierliches Wellenmuster erscheint.

Frage: wo ist die Welle? erscheint sinnlos.



Die Welle ist nicht irgendwo, sondern sie erstreckt sich über mehrere Meter!
Bessere Frage: wie groß ist die Wellenlänge? Antwort: 2.5m.

Bei einem einmaligen Auf- und Abbewegen gibt es eine einzelne scharfe Erhebung. Nun erscheint die Frage *wo ist die Welle?* sinnvoll, während die Frage nach der Wellenlänge sinnlos erscheint.

Je genauer man den Ort der Welle kennt, umso weniger weiss man über die

Wellenlänge und umgekehrt.... Formaler kann man das mit Fourier-Analyse zeigen.

Diese Erkenntnis gilt für alle Wellenphänomene und somit auch für unsere Wellenfunktion, die die Schrödinger-Gleichung löst. Nach de-Broglie hängt die Wellenlänge eines Teilchens mit seinem Impuls wie folgt zusammen:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Damit führt unsere obige Beobachtung qualitativ zu der Aussage, dass Ort und Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig genau bestimmt sind. Quantitativ ergibt sich

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (47)$$

σ_x ist dabei die Standardabweichung in x Gleichung (47) ist die berühmte **Heisenbergsche Unschärferelation**.

3 Motivation der Schrödinger-Gleichung

In diesem Kapitel motivieren wir die Form der Schrödinger-Gleichung in 3 Raumdimensionen.

3.1 Wellenfunktion

Im Einklang mit den Ergebnissen der Beugungsexperimente können wir als Ansatz für die Wellenfunktion eines freien Elektrons mit Impuls \vec{p} und Energie $E = \vec{p}^2/(2m)$ eine ebene Welle benutzen

$$\Psi(\vec{x}, t) = C e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}, \quad (48)$$

mit $\omega = E/\hbar$ und $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$.

3.2 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Nun machen wir mit freien Elektronen das Doppelspaltexperiment. Ist nur der Spalt 1 offen, so messen wir hinter dem Schirm die Verteilung $\rho_1(\vec{x})$, ist nur Spalt 2 offen, so findet man die Verteilung $\rho_2(\vec{x})$. Werden Elektronen durch Materiewellen beschrieben, so findet man bei zwei offenen Spalten eine Verstärkung, wenn die Wegdifferenz ein ganzzahlig Vielfaches der Wellenlänge beträgt. Wegen dieser Interferenz gilt dann

$$\rho(\vec{x}) \neq \rho_1(\vec{x}) + \rho_2(\vec{x}).$$

Vergleichen wir dies mit Ergebnis aus der Optik beim analogen Doppelspaltexperiment: das Licht wird nun durch eine elektromagnetische Welle beschrieben. Vom Spalt 1 wird eine Welle mit elektrischem Feld $\vec{E}_1(\vec{x}, t)$ ausgesandt, vom Spalt 2 eine Welle mit elektrischem Feld $\vec{E}_2(\vec{x}, t)$.

Ist nur Spalt 1 offen, so findet man die Intensitätsverteilung $I_1(\vec{x}) = |\vec{E}_1(\vec{x})|^2$ (mit der Annahme $\vec{E}_1(\vec{x}, t) \propto e^{-i\omega t}$, sind hingegen beide Spalte offen, so finden wir

$$I(\vec{x}) = |\vec{E}(\vec{x})|^2 = |\vec{E}_1(\vec{x}) + \vec{E}_2(\vec{x})|^2 = I_1 + I_2 + 2\Re(\vec{E}_1^* \vec{E}_2).$$

Die Gesamtintensität besteht also aus der Summe der beiden Einzelintensitäten, sowie einem Interferenzterm.

Dies führt zu dem Ansatz:

Die Wellenfunktion des Elektrons $\Psi(\vec{x}, t)$ liefert die Wahrscheinlichkeitsverteilung

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

Bemerkungen:

- Jedes Elektron macht einen lokalisierten Einschlag, d.h. einzelnen Elektronen sind nicht ausgeschmiert.
- Die Wahrscheinlichkeitsverteilung kommt jedem einzelnen Elektron zu. Interferenzbild entsteht auch bei einzelnen, aufeinanderfolgenden Elektronen.

3.3 Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen

Die Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion sollte folgende Eigenschaften besitzen:

- i) Damit $\Psi(\vec{x}, t)$ eindeutig durch die Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$ bestimmt ist, sollte sie eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein.
- ii) Sie muss linear in Ψ sein, damit das Superpositionsprinzip gilt.
- iii) Sie muss homogen sein, damit die Wellenfunktion normiert ist.
- iv) Ebene Wellen sollen eine Lösung sein. Für ebene Wellen gilt

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x}, t) = -i\omega\Psi = -\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}\Psi = \frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi \quad (49)$$

Damit erhalten wir als mögliche Bewegungsgleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{x}, t) \quad (50)$$

für freie Elektronen.

4 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung I

Jetzt wieder ein-dimensional.

Zu Beginn betrachten wir Lösungen Schrödinger-Gleichung für den Fall eines zeitunabhängigen Potentials $V(x, t) = V(x)$.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t), \quad (51)$$

4.1 Stationäre Zustände

Dafür suchen wir Lösungen durch einen Separationsansatz

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t). \quad (52)$$

Eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung ergibt dies

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} \psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \phi(t) + V(x)\psi(x)\phi(t), \\ i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x), \end{aligned} \quad (53)$$

wobei wir in der 2. Zeile durch $\psi(x)\phi(t)$ geteilt haben. Die linke Seite von Gl.(53) hängt nur von der Zeit t ab und die rechte Seite nur vom Ort x . Damit die Gleichheit für beliebige Werte von x und t gilt, müssen beide Seiten konstant sein. Wir nennen die Konstante E , es wird sich später herausstellen, dass dies die Energie ist.

Aus der linken Seite von Gl.(53) erhalten wir somit

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} &= E, \\ \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} &= \frac{E}{i\hbar} \phi(t), \\ \Leftrightarrow \phi(t) &= C e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (54)$$

Die Konstante C fügen wir später zu $\psi(x)$ hinzu und können sie daher an dieser Stelle gleich Eins setzen.

Aus der rechten Seite von Gl.(53) erhalten wir dann

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (55)$$

Gl.(55) wird die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung** genannt. Diese kann erst gelöst werden, wenn das Potential weiter spezifiziert wird.

Separable Wellenfunktionen zeichnen sich durch folgende Besonderheiten aus:

1. Separable Wellenfunktionen beschreiben **stationäre Zustände**:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (56)$$

$$\Rightarrow |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (57)$$

Während die Wellenfunktion selbst zeitabhängig ist, ist die Wahrscheinlichkeitsdichte zeitunabhängig. Ebenso sind Erwartungswerte von beliebigen dynamischen Variablen $Q(x, p)$ bei stationären Zuständen zeitunabhängig.

$$\begin{aligned} \langle Q(x, p) \rangle &= \int \Psi^*(x, t) Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \Psi(x, t) dx \\ &= \int \psi^*(x) Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (58)$$

Insbesondere gilt $\langle x \rangle = \text{const.}$ und damit $\langle p \rangle = 0$.

2. Separable Wellenfunktionen beschreiben Zustände mit einer bestimmten Energie E .

In der klassischen Mechanik lautet die Hamilton-Funktion

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (59)$$

Durch die Substitution $p \rightarrow (\hbar/i) (\partial/\partial x)$ erhält man daraus den Hamilton-Operator

$$\hat{H}(x, p) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (60)$$

und kann damit die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung schreiben als

$$\hat{H}(x, p)\psi(x) = E\psi(x). \quad (61)$$

Der Erwartungswert des Hamilton-Operators lautet

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) = E \int \psi^*(x) \psi(x) = E. \quad (62)$$

Für die Varianz von \hat{H} erhält man

$$\sigma_{\hat{H}}^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0. \quad (63)$$

D.h. jede Messung der Gesamtenergie eines stationären Zustandes liefert mit Sicherheit den Wert E .

- Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit einem konstanten Potential kann als Linearkombination von unendlich vielen Eigenfunktionen $\psi_i(x)$ mit Energien E_i geschrieben werden:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (64)$$

Damit lautet die allgemeinste Form der Anfangsbedingung:

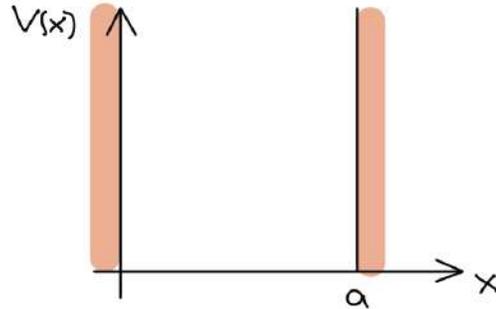
$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (65)$$

Diese Gleichung legt die Werte der Koeffizienten c_n fest!
 Beachte: die allgemeine Lösung in Gl.(64) ist kein stationärer Zustand!

4.2 Der unendlich tiefe Potentialtopf

Als erstes Beispiel betrachten wir den unendlich tiefen Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (66)$$



Außerhalb des Potentialtopfes beträgt die Wahrscheinlichkeit das Teilchen anzutreffen Null, d.h.

$$\Psi(x) = \begin{cases} ? & \text{für } 0 \leq x \leq a, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (67)$$

Innerhalb des Potentialtopfes setzen wir die stationäre Schrödinger-Gleichung an. Mit $V = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi, \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -k^2\psi, \end{aligned} \quad (68)$$

mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Dies ist die Gleichung für den harmonischen Oszillator in der Mechanik. Die allgemeine Lösung der Wellenfunktion lautet daher

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (69)$$

mit Konstanten A und B , welche durch die **Randbedingungen** festgelegt werden. Aus der Stetigkeit der Wellenfunktion folgt:

$$0 = \psi(0) = B, \quad (70)$$

$$0 = \psi(a) = A \sin(ka). \quad (71)$$

Die zweite Gleichung kann entweder durch $A = 0$ erfüllt werden, was zur trivialen (nicht-normierbaren) Lösung $\psi = 0$ führt, oder ein Verschwinden der Sinusfunktion

$$ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (72)$$

$k = 0$ führt wieder zur trivialen Lösung. Die negativen Werte von ka liefern auch nichts neues, weil $\sin(-x) = -\sin x$ und das negative Vorzeichen in den Koeffizienten A gesteckt werden kann. Wir erhalten also folgende, mögliche k -Werte:

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \text{ mit } n = 1, 2, 3, \dots \quad (73)$$

Die Randbedingung bei $x = a$ legt also nicht den Koeffizienten A fest, sondern die möglichen Werte von k . Aus der Definitionsgleichung von $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ergeben sich nun die möglichen Energiewerte

$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (74)$$

Es gibt nun nur bestimmte, diskrete Energiewerte die für das Teilchen erlaubt sind!

Der Wert des Koeffizienten A kann aus der Normierungsbedingung bestimmt werden

$$1 = \int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2}. \quad (75)$$

Nehmen wir A als reell an, so ergibt das $A = \sqrt{2/a}$ und wir erhalten als allgemeine Lösung der Wellenfunktion

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (76)$$

Bemerkungen:

- Es gibt eine unendliche Anzahl von Lösungen.
- Der Zustand mit der niedrigsten Energie $n = 1$ heisst **Grundzustand** ψ_1 .
- Zustände mit höheren Energien heissen **angeregte Zustände**.
- Die Zustände sind abwechselnd **gerade** und **ungerade** im Bezug auf den Mittelpunkt des Potentials: ψ_1 ist gerade, ψ_2 ist ungerade, ψ_3 ist gerade,
- Aufeinanderfolgende Zustände haben jeweils einen **Knoten** (Nulldurchgang) mehr.

- Die Lösungen sind paarweise **orthogonal**, d.h. für $m \neq n$ gilt:

$$\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = 0 \quad (77)$$

- Normierung und Orthogonalität kann zusammengefasst werden in

$$\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn} . \quad (78)$$

Derartige Zustände heissen auch **orthonormiert**.

- Die Lösungen bilden ein **vollständiges System** von Funktionen, d.h. jede andere Funktion $f(x)$ kann als Linearkombinationen von den Lösungen dargestellt werden (Fourier-Reihe, allg. Dirichlet'scher Satz)

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} d_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) . \quad (79)$$

Die Koeffizienten dieser Entwicklung können leicht bestimmt werden

$$d_n = \int \psi_n^*(x)f(x)dx . \quad (80)$$

Die stationären Zustände des Potentialtopfes

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t} . \quad (81)$$

 4. Vorlesung: Donnerstag 19.10.2023
 Kap 2.2/2.3, Griffiths; K

Die allgemeinste Lösung ist nun eine Linearkombination dieser Partikularlösungen

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t}. \quad (82)$$

Die Koeffizienten c_n werden aus der Anfangsbedingung $\Psi(x, 0)$ wie folgt bestimmt:

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) \quad (83)$$

Beispiel: Lautet die Anfangsbedingung beim unendlich tiefen Potentialtopf

$$\Psi(x, 0) = Ax(a - x),$$

so erhalten wir aus der Normierung der Anfangsbedingung: $A = \sqrt{30/a^5}$.
 Für die Koeffizienten c_n der allgemeinen Lösung finden wir

$$c_n = 0 \quad \text{für gerades } n,$$

$$c_n = \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3} \quad \text{für ungerades } n.$$

Aus der Aussage, dass die allgemeinste Lösung normiert ist, folgt

$$1 = \sum_1^{\infty} |c_n|^2. \quad (84)$$

Weiterhin erhalten wir für den Erwartungswert des Hamilton-Operators/Energie

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int \Psi^* H \Psi dx = \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* H \left(\sum c_n \psi_n \right) dx \\ &= \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* E_n \left(\sum c_n \psi_n \right) dx \\ &= \sum \sum c_m^* E_n c_n \int \psi_n^* \psi_m dx\end{aligned}\tag{85}$$

$$= \sum \sum c_m^* E_n c_n \delta_{nm} =\tag{86}$$

$$= \sum |c_n|^2 E_n.\tag{87}$$

$|c_n|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, bei einer Energiemessung den Wert E_n zu erhalten.

Sehr oft ist der Grundzustand dominant, in unserem obigen Beispiel ergibt sich

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 \approx 0.998555\dots$$

4.3 Der harmonische Oszillator

4.3.1 Allgemeines

In der klassischen Mechanik erhielten wir den harmonischen Oszillator, wenn wir z.B. eine Feder mit der Federkonstanten k ohne Reibung betrachteten.

$$F = -kx = m\ddot{x}.\tag{88}$$

Die allgemeinste Lösung war dann

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t),\tag{89}$$

mit der Schwingungsfrequenz $\omega = \sqrt{k/m}$.

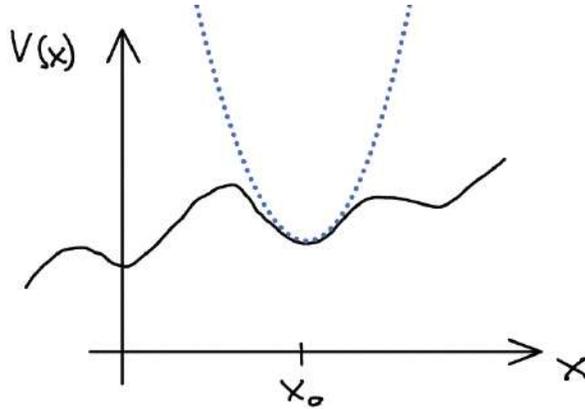
Die zugehörige potentielle Energie ist dann

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2.\tag{90}$$

In der Natur tritt ein reiner harmonischer Oszillator selten auf, aber wenn wir ein beliebiges Potential um ein Minimum bei $x = x_0$ entwickeln, so erhalten

wir

$$\begin{aligned} V(x) &= V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \\ &\approx V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2. \end{aligned} \quad (91)$$



Den konstanten Wert $V(x_0)$ müssen wir nicht berücksichtigen und damit erhalten wir einen harmonischen Oszillator mit der Federkonstanten $k = V''(x_0)$. Dies gilt für jedes beliebige Potential in der Nähe eines Minimums und daher ist die Anwendung des harmonischen Oszillators in der Physik so wichtig.

Wir betrachten nun das Quantenproblem mit dem Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (92)$$

und lösen folgende zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi. \quad (93)$$

Wir werden dieses Problem auf Arten lösen:

1. Potenzreihenentwicklung: etwas mehr Arbeit, aber ziemlich universell anwendbar, z.B. auch beim H-Atom.
2. Algebraische Lösung basierend auf Leiteroperatoren: sehr elegant und wir später in der Quantenfeldtheorie weiterverwendet.

4.3.2 Potenzreihenentwicklung

Zunächst vereinfachen wir die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi &= E\psi, \\ -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2\psi &= \frac{2E}{\omega\hbar}\psi, \end{aligned} \quad (94)$$

durch die Einführung von der dimensionslosen Variablen

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (95)$$

zu

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi &= \frac{2E}{\omega\hbar}\psi =: K\psi, \\ \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= (\xi^2 - K)\psi. \end{aligned} \quad (96)$$

Für sehr große Werte von ξ , gilt $\xi^2 \gg K$ und somit

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi. \quad (97)$$

Diese Gleichung hat die Lösung

$$\psi(\xi) = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{+\frac{\xi^2}{2}}, \quad (98)$$

$$\psi'(\xi) = (-\xi)Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + (\xi)Be^{+\frac{\xi^2}{2}}, \quad (99)$$

$$\begin{aligned} \psi''(\xi) &= \xi^2 Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} - Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2 Be^{+\frac{\xi^2}{2}} + Be^{+\frac{\xi^2}{2}} \\ &\approx \xi^2 Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi^2 Be^{+\frac{\xi^2}{2}} = \xi^2\psi(\xi). \end{aligned} \quad (100)$$

Der Anteil mit dem Koeffizienten B explodiert bei großen Werten von ξ und ist damit nicht normierbar, der sinnvolle Anteil erscheint der, mit dem Koeffizienten A zu sein.

Basierend auf dieser angenäherten Untersuchung der Asymptotik der Wellenfunktion machen wir daher folgenden Ansatz für die Wellenfunktion

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (101)$$

Durch Einsetzen hoffen wir dann im Ende eine einfachere DGL für $h(\xi)$ zu finden, als es die ursprüngliche Schrödinger-Gleichung war.

$$\psi'(\xi) = [h'(\xi) - \xi h(\xi)] e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (102)$$

$$\psi''(\xi) = [h''(\xi) - 2\xi h'(\xi) - h(\xi) + \xi^2 h(\xi)] e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (103)$$

Damit wird die Schrödinger-Gleichung zu

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= (\xi^2 - K) \psi, \\ [h''(\xi) - 2\xi h'(\xi) - h(\xi) + \xi^2 h(\xi)] e^{-\frac{\xi^2}{2}} &= (\xi^2 - K) h(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \\ h''(\xi) - 2\xi h'(\xi) + (K - 1)h(\xi) &= 0, \end{aligned} \quad (104)$$

Nun machen wir einen Potenzreihenansatz für $h(\xi)$

$$h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j, \quad (105)$$

$$h'(\xi) = \sum_{j=1}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} \xi^j, \quad (106)$$

$$h''(\xi) = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) a_j \xi^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1) a_{j+2} \xi^j. \quad (107)$$

Setzen wir dies in unsere Differential-Gleichung ein, so erhalten wir

$$\sum_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1) a_{j+2} \xi^j - 2 \sum_{j=1}^{\infty} j a_j \xi^j + (K-1) \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j = 0 \quad (108)$$

und wegen der Eindeutigkeit der Potenzreihenentwicklung

$$(j+2)(j+1) a_{j+2} - 2j a_j + (K-1) a_j = 0 \quad (109)$$

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+2)(j+1)} a_j. \quad (110)$$

Von a_0 und a_1 ausgehend werden also alle weiteren Koeffizienten erzeugt:

$$a_2 = \frac{1-K}{2} a_0, \quad a_4 = \frac{5-K}{12} a_2 = \frac{(1-K)(5-K)}{24}, \dots \quad (111)$$

$$a_3 = \frac{3-K}{6} a_1, \quad a_5 = \frac{7-K}{20} a_3 = \frac{(3-K)(7-K)}{120} a_1, \dots \quad (112)$$

Die vollständige Lösung kann somit dargestellt werden als

$$h(\xi) = h_{\text{gerade}}(\xi) + h_{\text{ungerade}}(\xi) \quad (113)$$

$$h_{\text{gerade}}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots, \quad (114)$$

$$h_{\text{ungerade}}(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots, \quad (115)$$

Ausgehend von 2 Konstanten (a_0 und a_1) wird also die Differentialgleichung 2. Ordnung vollständig gelöst.

Bei sehr großen Werten für j finden wir aber

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j} a_j, \quad (116)$$

was wiederum durch die Näherungslösung

$$a_j \approx \frac{C}{(j/2)!} \quad (117)$$

gelöst wird. Setzen wir dies in unseren Potenzreihenansatz ein, so erhalten wir

$$h(\xi) = \sum_{j=0, \text{gerade}}^{\infty} a_j \xi^j = \sum_{j=0, \text{gerade}}^{\infty} \frac{C}{(j/2)!} \xi^j = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{C}{j!} \xi^{2j} = C e^{\xi^2} \quad (118)$$

und damit eine nicht renormierbare Wellenfunktion

$$\psi(\xi) = h(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C e^{+\frac{\xi^2}{2}}. \quad (119)$$

Um dies zu vermeiden, muss die Rekursionsformel abrechen, d.h. K muss so beschaffen sein, dass es natürliche Zahlen n gibt, so dass

$$\begin{aligned} K_n &= 2n + 1, \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (120)$$

Beachte: die Abbruchbedingung funktioniert nur innerhalb gerader bzw. ungerader Funktionen. Betrachten wir gerade Funktionen, so müssen wir per Hand $a_1 = 0$ setzen, da es sonst für die ungeraden Terme keinen Abbruch

geben wird. Und umgekehrt.

Die Notwendigkeit die Wellenfunktion zu Normieren führt also im Falle des harmonischen Oszillators zur Quantisierung der Energie!

Für die erlaubten K -Werte, $K_n = 2n + 1$, ergibt die Rekursionsformel

$$a_{j+2} = \frac{2(j-n)}{(j+2)(j+1)}a_j. \quad (121)$$

Für $n = 0$ gibt es zunächst die Möglichkeit eines nichtverschwindenden Koeffizienten a_0 , a_2 ergibt dann schon Null und alle höheren Koeffizient verschwinden damit auch. Als ungerade Lösung zu $n = 0$ finden wir $a_3 = 2/6a_1$, hier wird es keine Abbruchbedingung geben, ausser wir wählen $a_1 = 0$. Somit erhalten wir für $n = 0$

$$h_0(\xi) = a_0, \quad (122)$$

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (123)$$

Für $n = 1$ finden wir

$$h_1(\xi) = a_1 \xi, \quad (124)$$

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (125)$$

Für $n = 2$ finden wir dann $a_2 = -2a_0$ und $a_4 = 0$

$$h_2(\xi) = a_0(1 - \xi^2), \quad (126)$$

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (127)$$

Diese gefundenen Polynome sind proportional zu den **Hermite-Polynome** $H_n(\xi)$:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi, \end{aligned} \quad (128)$$

Damit lässt sich dann die allgemeine Lösung des harmonischen Oszillators schreiben als

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (129)$$

5. Vorlesung: Dienstag 24.10.2023
2.3, Griffiths;

Insbesondere haben wir erhalten:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \quad (130)$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (131)$$

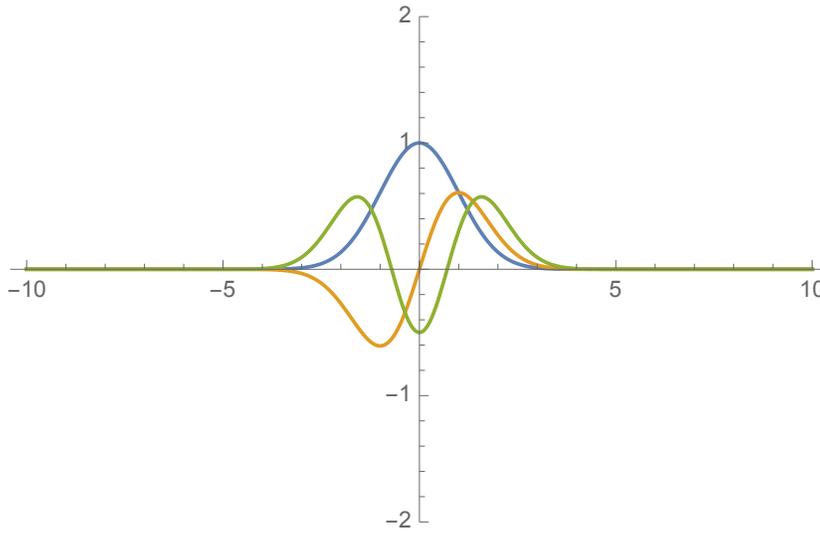


Abbildung 3: Wellenfunktion für harmonischen Oszillator: $\Psi_n(x) = h_n(x)e^{-x^2/2}$: Mathematica: `Plot[{Exp[-x^2/2], xExp[-x^2/2], (x^2 - 1/2)Exp[-x^2/2]}, {x, -10, 10}, PlotRange -> {-2, 2}]`

4.3.3 Algebraische Lösung

Nun stellen wir ein völlig andere Lösung des harmonischen Oszillators vor, die natürlich zum selben Endergebnis führt.

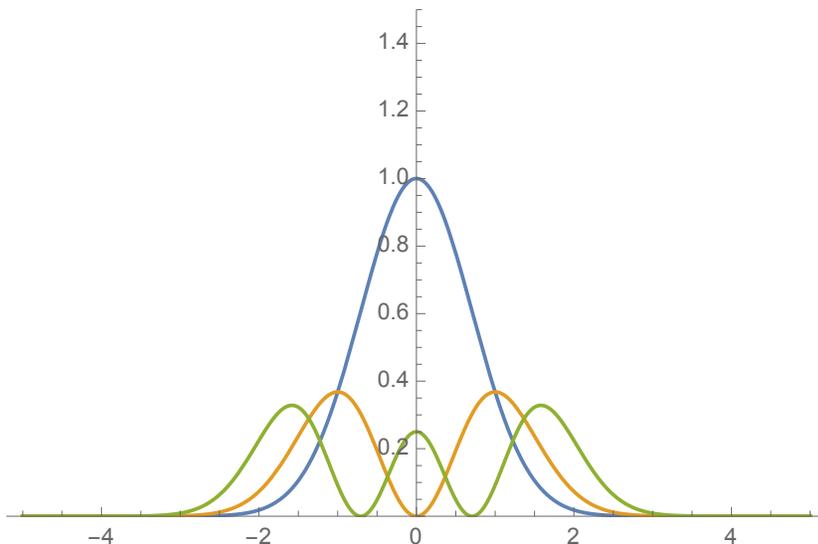


Abbildung 4: Wahrscheinlichkeitsverteilung für harmonischen Oszillator: $\Psi_n(x) = (h_n(x)e^{-x^2/2})^2$: Mathematica: `Plot[{(Exp[-x^2/2])^2, (x Exp[-x^2/2])^2, ((x^2 - 1/2) Exp[-x^2/2])^2}, {x, -5, 5}, PlotRange -> {0, 1.5}]`

Wir starten von der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung mit dem Impulsoperator $\hat{p} = \hbar/i\partial/\partial x$ und dem Ortsoperator $\hat{x} = x$

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\psi &= E\psi, \\ \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2]\psi &= \hat{H}\psi = E\psi \end{aligned} \quad (132)$$

und versuchen den Hamilton-Operator zu faktorisieren. Würde es sich um reine Zahlen handeln, wäre die Faktorisierung einfach, denn

$$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v). \quad (133)$$

Wir haben hier allerdings Operatoren \hat{p} und \hat{x} und werden gleich feststellen, dass diese nicht kommutieren, d.h. $\hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p}$, was wir implizit bei der Herleitung der Faktorisierung von $u^2 + v^2$ angenommen haben.

Wir führen nun die Größe

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (134)$$

ein und betrachten das Produkt

$$\begin{aligned}\hat{a}_-\hat{a}_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2 - im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})) .\end{aligned}\quad (135)$$

Der **Kommutator** von zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} ist definiert als

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} .\quad (136)$$

Damit lautet unser obiges Produkt

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2}{2\hbar m\omega} - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] .\quad (137)$$

Um den Kommutator von \hat{x} und \hat{p} zu bestimmen, wenden wir diese Operatoren auf eine Testfunktion an

$$\begin{aligned}[\hat{x}, \hat{p}] f(x) &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x f(x) \\ &= x \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \right) - \frac{\hbar}{i} f(x) - x \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \right) \\ &= -\frac{\hbar}{i} f(x) .\end{aligned}\quad (138)$$

Somit ergibt sich die **kanonische Vertauschungsrelation** als wichtiges Ergebnis

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar .\quad (139)$$

Damit lautet nun unser obiges Produkt:

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\quad (140)$$

und somit

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \right) .\quad (141)$$

Unsere Hamilton-Operator lässt sich also nur *fast* faktorisieren.
Analog kann man zeigen

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \quad (142)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right), \quad (143)$$

sowie

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1. \quad (144)$$

Die Schrödinger-Gleichung kann also geschrieben werden als

$$\hbar\omega \left(\hat{a}_\pm \hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi. \quad (145)$$

Nun kommt der entscheidende Schritt: ist ψ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit der Energie E , d.h. $\hat{H}\psi = E\psi$, dann gilt:

1. $\hat{a}_+\psi$ ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit der Energie $E + \hbar\omega$, d.h.

$$\hat{H}(\hat{a}_+\psi) = (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi). \quad (146)$$

2. $\hat{a}_-\psi$ ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung mit der Energie $E - \hbar\omega$, d.h.

$$\hat{H}(\hat{a}_-\psi) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi). \quad (147)$$

Beweis:

- 1.

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}_+\psi) &= \hbar\omega \left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \hat{a}_+\psi \\ &= \hbar\omega \hat{a}_+ \left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \right) \psi \\ &= \hbar\omega \hat{a}_+ \left(1 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \psi \\ &= \hbar\omega \hat{a}_+ \left(1 + \frac{E}{\hbar\omega} \right) \psi \\ &= (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi). \end{aligned} \quad (148)$$

2.

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{a}_-\psi) &= \hbar\omega \left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) \hat{a}_-\psi \\
&= \hbar\omega \hat{a}_- \left(\hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2} \right) \psi \\
&= \hbar\omega \hat{a}_- \left(-1 + \hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) \psi \\
&= \hbar\omega \hat{a}_- \left(-1 + \frac{E}{\hbar\omega} \right) \psi \\
&= (E - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi). \tag{149}
\end{aligned}$$

Die Operatoren \hat{a}_\pm heissen **Leiteroperatoren**, \hat{a}_+ ist der **Aufsteigeoperator** und \hat{a}_- der **Absteigeoperator**.

Betrachten wir den **Grundzustand** ψ_0 des harmonischen Oszillators, welcher die niedrigstmögliche Energie besitzt, so muss die Anwendung des Absteigeoperators auf den Grundzustand Null ergeben.

$$\begin{aligned}
\hat{a}_-\psi_0 &= 0, \tag{150} \\
\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial x} + m\omega x \right) \psi_0 &= 0, \\
\Leftrightarrow \frac{\partial \psi_0}{\partial x} &= -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0, \\
\Leftrightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} &= -\frac{m\omega}{\hbar} x dx, \\
\Leftrightarrow \ln \psi_0(x) - \ln \psi_0(x_0) &= -\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x_0^2}{2} \right), \\
\Leftrightarrow \psi_0(x) &= \psi_0(x_0) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x_0^2}{2} \right)} = A e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}} \tag{151}
\end{aligned}$$

Da ist nun diesselbe Lösung, die wir für den Grundzustand mit der Potenzreihenentwicklung erhalten haben. Den Koeffizienten A können wir aus der Normierung bestimmen.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} \tag{152}$$

Somit lautet der normierte Grundzustand

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}. \quad (153)$$

Um die zugehörige Energie zu bestimmen, berechnen wir

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_0 &= E_0\psi_0 \\ \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}\psi_0 \end{aligned} \quad (154)$$

und erhalten somit

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (155)$$

Alle weiteren, angeregten Zustände erhalten wir durch Anwenden des Aufsteigeoperators auf den Grundzustand, die Energie nimmt bei jeder Anwendung um $\hbar\omega$ zu:

$$\psi_n(x) = A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0(x), \quad (156)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (157)$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1(\hat{a}_+)\psi_0(x) = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}} \\ &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}, \end{aligned} \quad (158)$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega. \quad (159)$$

Bestimmen wir die Normierung, so erhalten wir $A_1 = 1$. Unsere Wellenfunktionen ψ_0 und ψ_1 stimmen mit den Ergebnissen aus der letzten Vorlesung überein.

Als letztes bestimmen wir die allgemeinen Normierungsfaktoren algebraisch:

$$\hat{a}_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad (160)$$

$$\hat{a}_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}, \quad (161)$$

mit Proportionalitätskonstanten c_n und d_n .

Nun nutzen wir aus, dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) [\hat{a}_{\pm} g(x)] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_{\mp} f(x)]^* g(x) dx \quad (162)$$

Beweis: partielle Integration mit $f, g, \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \pm\infty$.

Damit gilt insbesondere

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_{\pm} \psi_n(x)]^* [\hat{a}_{\pm} \psi_n(x)] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_{\mp} \hat{a}_{\pm} \psi_n(x)]^* \psi_n(x) dx \quad (163)$$

Erinnern wir uns an die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hbar\omega \left(\hat{a}_{\pm} \hat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi_n &= E_n \psi_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \psi_n, \\ \Rightarrow \left(\hat{a}_{\pm} \hat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) \psi_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n, \\ \Rightarrow \hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n &= n \psi_n, \\ \Rightarrow \hat{a}_- \hat{a}_+ \psi_n &= (n+1) \psi_n. \end{aligned} \quad (164)$$

Daraus folgt nun

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_+ \psi_n]^* [\hat{a}_+ \psi_n] dx = |c_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = (n+1) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx, \quad (165)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_- \psi_n]^* [\hat{a}_- \psi_n] dx = |d_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx. \quad (166)$$

Mit $|c_n|^2 = n+1$ und $|d_n|^2 = n$ erhalten wir

$$\hat{a}_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad (167)$$

$$\hat{a}_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}, \quad (168)$$

welches schliesslich zu

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0 \quad (169)$$

führt.

Weiterhin, kann man zeigen, dass die stationären Zustände des harmonischen Oszillators orthonormal sind, d.h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \psi_n dx = \delta_{mn}. \quad (170)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* [\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_n] dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_m]^* \psi_n dx \\ n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx &= m \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx. \end{aligned} \quad (171)$$

Für $n \neq m$ muss damit das Integral verschwinden!

5 Operatoren und Skalarprodukte

6. Vorlesung: Donnerstag 26.10.2023
2.3, Schwabl

5.1 Definitionen

Wir haben nun schon einige Male Operatoren (Impuls, Ort) gesehen und wollen diese nun etwas grundlegender definieren.

Wir betrachten den Raum der quadratintegriblen Funktionen $L^2(\mathbb{R})$,

$$L^2(\mathbb{R}) := \left\{ f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}; \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)f(x)dx < \infty \right\}, \quad (172)$$

siehe Übungsblatt 2, Übung 2.

Definition: Ein **Operator** \hat{A} bildet den Raum der quadratintegriblen Funktionen in sich ab.

$$\begin{aligned} \hat{A} : L^2(\mathbb{R}) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}), \\ \psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) &\mapsto \hat{A}\psi(x) = \phi(x) \in L^2(\mathbb{R}). \end{aligned} \quad (173)$$

Beispiele:

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi &= \psi^2 + \frac{\partial}{\partial x_i}\psi, \\ \hat{A}\psi &= e^{i\psi}\psi. \end{aligned} \quad (174)$$

Definition: \hat{A} heisst **linearer Operator**, wenn gilt

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}(\psi_1) + c_2\hat{A}(\psi_2) \forall c_1, c_2 \in \mathbb{R}, \psi_1, \psi_2 \in L^2(\mathbb{R}). \quad (175)$$

Beispiele:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi &= x_i\psi, \\ \hat{A}\psi &= \frac{\partial}{\partial x_i}\psi, \\ \hat{A}\psi &= \vec{\nabla}^2\psi, \\ \hat{A}\psi &= \frac{\partial}{\partial t}\psi, \\ \hat{A}\psi &= f(x,t) \cdot \psi.\end{aligned}\tag{176}$$

Aus linearen Operatoren \hat{A} und \hat{B} kann man neue lineare Operatoren erzeugen:

- Multiplikation mit einem Skalar $c \in \mathbb{C}$

$$(c\hat{A})\psi := c(\hat{A}\psi).$$

- Summe zweier Operatoren

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi := (\hat{A}\psi) + (\hat{B}\psi).$$

- Produkt zweier Operatoren

$$(\hat{A}\hat{B})\psi := \hat{A}(\hat{B}\psi).$$

Spezielle Operatoren sind

- Einheitsoperator $\hat{1}$

$$\hat{1}\psi = \psi,\tag{177}$$

$$\hat{1}\hat{A} = \hat{A}\hat{1} = \hat{A}.\tag{178}$$

- Nulloperator $\hat{0}$

$$\hat{0}\psi = 0,\tag{179}$$

$$\hat{0}\hat{A} = \hat{A}\hat{0} = \hat{0}.\tag{180}$$

Operatoren vertauschen im Allgemeinen nicht.

Definition: Der **Kommutator** von zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} ist definiert als

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Beispiele:

•

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0. \quad (181)$$

•

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = 0. \quad (182)$$

•

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \left[x_i, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (183)$$

•

$$[f(x), \hat{p}_j] = \left[f(x), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial x_j}. \quad (184)$$

Als nächstes definieren wir ein Skalarprodukt im Raum der quadratintegrierbaren Funktionen.

Definition: das **Skalarprodukt** zweier Wellenfunktionen ist definiert als

$$\begin{aligned} L_2(\mathbb{C}) \times L_2(\mathbb{C}) &\rightarrow \mathbb{C}, \\ (\phi(x), \psi(x)) &\mapsto \langle \phi(x), \psi(x) \rangle := \int \phi^*(x)\psi(x)d^3x. \end{aligned} \quad (185)$$

Das Skalarprodukt besitzt folgende Eigenschaften:

$$\langle \psi(x), \phi(x) \rangle^* = \langle \phi(x), \psi(x) \rangle, \quad (186)$$

$$\langle \psi(x), c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) \rangle = c_1\langle \psi(x), \phi_1(x) \rangle + c_2\langle \psi(x), \phi_2(x) \rangle, \quad (187)$$

$$\langle c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x), \psi(x) \rangle = c_1^*\langle \phi_1(x), \psi(x) \rangle + c_2^*\langle \phi_2(x), \psi(x) \rangle. \quad (188)$$

Weiterhin gilt

$$\langle \psi(x), \psi(x) \rangle \geq 0, \quad (189)$$

$$\langle \psi(x), \psi(x) \rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0. \quad (190)$$

Operatoren wirken im Skalarprodukt wie folgt

$$\langle \phi(x), \hat{A}\psi(x) \rangle := \int \phi^*(x) \hat{A}\psi(x) d^3x. \quad (191)$$

Definition: \hat{A}^\dagger heisst der zu \hat{A} **adjungierte Operator**, wenn für alle $\phi(x)$ und $\psi(x) \in L_2(\mathbb{C})$ gilt

$$\langle \hat{A}^\dagger \phi(x), \psi(x) \rangle = \langle \phi(x), \hat{A}\psi(x) \rangle, \quad (192)$$

$$\int (\hat{A}^\dagger \phi)^*(x) \psi(x) d^3x = \int \phi^*(x) \hat{A}\psi(x) d^3x. \quad (193)$$

Definition: Der Operator \hat{A} heisst **hermitesch**, wenn für alle $\phi(x)$ und $\psi(x) \in L_2(\mathbb{C})$ gilt

$$\langle \hat{A}\phi(x), \psi(x) \rangle = \langle \phi(x), \hat{A}\psi(x) \rangle, \quad (194)$$

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (195)$$

Aus obiger Definition folgt somit

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

Weiterhin gibt es noch folgende Operatoridentitäten

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B}, \quad (196)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger], \quad (197)$$

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (198)$$

Im letzteren Fall war die Exponentialfunktion durch die Potenzreihe definiert.

Vertauscht der Kommutator von zwei Operatoren mit jedem dieser Operatoren, d.h. $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$, so gilt

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]}, \quad (199)$$

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2}. \quad (200)$$

5.2 Korrespondenzprinzip

Aus der klassischen Mechanik gelangt man zur Quantenmechanik über folgende Zuordnungen bzw. Korrespondenzen

- Impuls

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

- Energie

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Für die klassische Energie-Impuls-Beziehung ergibt sich dann angewandt auf eine Wellenfunktion die Schrödinger-Gleichung:

$$E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(x) \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x) \right] \Psi(\vec{x}, t) \quad (201)$$

5.3 Postulate der Quantenmechanik I

Mit dem bisher eingeführten Konzepten können wir die Postulate der Quantenmechanik wie folgt definieren

1. Der Zustand eines Systems wird durch eine Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ beschrieben. $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ gibt die Wahrscheinlichkeit an das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} im Volumenelement d^3x zu finden.
2. Den Meßgrößen (Observablen) der klassischen Physik entsprechen in der Quantenmechanik Operatoren \hat{A}, \hat{B}, \dots .
3. Die Mittelwerte der Operatoren sind im Zustand $\Psi(\vec{x}, t)$ gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(\vec{x}, t), \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) \rangle = \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) d^3x \quad (202)$$

4. Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x) \right] \Psi(\vec{x}, t) \quad (203)$$

Die Verallgemeinerung auf Mehrteilchensysteme ist trivial

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{1}{2m} \vec{p}_1^2 + \frac{1}{2m} \vec{p}_2^2 + \dots + \frac{1}{2m} \vec{p}_n^2 + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n) \\
 &\rightarrow \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}_i, t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 - \dots - \frac{\hbar^2}{2m_n} \vec{\nabla}_n^2 + V(\vec{x}_i) \right] \Psi(\vec{x}_i, t)
 \end{aligned} \tag{204}$$

5.4 Ehrenfestsches Theorem II

Wir wollen nun noch mal untersuchen inwieweit die klassische Mechanik ein Grenzfall der Quantenmechanik ist. Ausgehend von der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \hat{H} \psi^* \tag{205}$$

betrachten wir den Mittelwert eines Operators

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(\vec{x}, t), \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) \rangle = \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) d^3x \tag{206}$$

und erhalten für die zeitliche Änderung dieses Mittelwertes

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \int \left[\left(\dot{\Psi}^*(\vec{x}, t) \right) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) + \Psi^*(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) \Psi(\vec{x}, t) + \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \left(\dot{\Psi}(\vec{x}, t) \right) \right] d^3x \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{207}$$

Bemerkungen

1. Der Kommutator eines Operators \hat{A} mit dem Hamilton-Operator bestimmt die Zeitentwicklung dieses Operators!
2. Der Hamilton-Operator ist hermitesch: dies kann man einfach zeigen, indem man den Impulsanteil zweimal partiell integriert, das reelle Potential kann man frei zwischen den beiden Wellenfunktionen im Skalarprodukt hin- und herschieben.

$$\int \left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x) \right] \phi(x) \right)^* \psi(x) d^3x = \int \phi^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(x) \right] \psi(x) d^3x. \tag{208}$$

3. Vergleich mit klassischer Mechanik: für Zeitabhängigkeit einer beliebigen Funktion f der generalisierten Koordinaten q und Impuls p gilt

$$\frac{d}{dt}f(q, p, t) = \{H, f\} + \frac{\partial}{\partial t}f(q, p, t) \quad (209)$$

mit der Poissonklammer

$$\{g, f\} := \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q}. \quad (210)$$

Die Poisson-Klammer aus der klassischen Mechanik wird in der Quantenmechanik durch den Kommutator ersetzt:

$$\begin{aligned} f(q, p, t) &\leftrightarrow \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}, t) \\ \{g, f\} &\leftrightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{G}, \hat{F}] \end{aligned} \quad (211)$$

4. Spezielle Kommutatoren:

- Ortsoperator

$$[\hat{H}, x_i] = \frac{1}{2m} \sum_j [\hat{p}_j^2, x_i] = \frac{2}{2m} \sum_j \hat{p}_j [\hat{p}_j, x_i] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_i \quad (212)$$

- Impulsoperator

$$[\hat{H}, \hat{p}_i] = \sum_j \left[V(x), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \right] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (213)$$

5. Zeitentwicklung von Orts- und Impulsoperator: aus unserer Bewegungsgleichung für die Mittelwerte von Operatoren ergibt sich speziell

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle, \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= -\langle \vec{\nabla} V(x) \rangle =: \langle \vec{K}(x) \rangle, \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x} \rangle &= \langle \vec{K}(x) \rangle. \end{aligned} \quad (214)$$

Die letzte Gleichung entspricht dem 1. Newtonschen Gesetz!

Ehrenfestsches Theorem: Die quantenmechanischen Mittelwerte erfüllen die klassischen Bewegungsgleichungen.

Beachte, d.h. nicht, dass die Erwartungswerte für \hat{x} und \hat{p} die Bewegungsgleichung erfüllen! Letzteres wäre nur der Fall, wenn $\langle \vec{K}(x) \rangle = K(\langle \vec{x} \rangle)$.

5.5 Kontinuitätsgleichung in drei Raumdimensionen

Betrachte die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \dot{\Psi}^* \Psi + \Psi^* \dot{\Psi} = -\frac{1}{i\hbar} (H\Psi^*)\Psi + \frac{1}{i\hbar} \Psi^* (H\Psi) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[(\vec{\nabla}^2 \Psi^*)\Psi - \Psi^* (\vec{\nabla}^2 \Psi) \right]. \end{aligned} \quad (215)$$

Somit erhalten wir die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (216)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^* (\vec{\nabla} \Psi) - (\vec{\nabla} \Psi^*) \Psi \right]. \quad (217)$$

Wenden wir den Gaußschen Satz (für ein beliebiges festes Volumen V mit der Oberfläche O) auf die Kontinuitätsgleichung an, so ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) = \int_O d\vec{f} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t). \quad (218)$$

Lassen wir das Volumen V gegen unendlich gehen,

$$\int_V d^3x \rho(|\vec{x}|, t) \rightarrow \int_V 4\pi r^2 dr \rho(|\vec{x}|, t), \quad (219)$$

so finden wir dass die Wellenfunktion stärker als mit $1/|\vec{x}|^{3/2}$ im Unendlichen abfallen muss, damit sie normiert sein kann. Damit finden wir, dass die Stromdichte \vec{j} im Unendlich auch stärker als $1/|\vec{x}|^3$ abfallen sollte. Für das Flächenintegral ergibt sich dann

$$\int_O d\vec{f} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) \rightarrow \int_O d\Omega \frac{|\vec{x}|^2}{|\vec{x}|^3} \rightarrow 0. \quad (220)$$

Damit folgt

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\vec{x}, t) = 0. \quad (221)$$

5.6 Eigenwertgleichungen

Für stationäre Zustände haben wir folgende **Eigenwertgleichung** hergeleitet:

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}). \quad (222)$$

Wir definieren nun allgemein:

ψ ist **Eigenfunktion** zum Operator \hat{A} mit **Eigenwert** $a \in \mathbb{C}$, wenn gilt

$$\hat{A}\psi = a\psi. \quad (223)$$

Theorem 1: Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell.

Beweis: aus der Eigenwertgleichung folgt

$$\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle = \langle \psi, a\psi \rangle = a\langle \psi, \psi \rangle. \quad (224)$$

Da der Operator \hat{A} hermitesch ist gilt

$$\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}\psi, \psi \rangle. \quad (225)$$

Die rechte Seite kann nun wie folgt umgeschrieben werden

$$\langle \hat{A}\psi, \psi \rangle = \langle a\psi, \psi \rangle = a^*\langle \psi, \psi \rangle. \quad (226)$$

Damit erhalten wir

$$(a - a^*)\langle \psi, \psi \rangle = 0. \quad (227)$$

und somit die Aussage $a^* = a$.

Damit Messwerte immer reell sind, müssen allen Meßgrößen hermitesche Operatoren zugeordnet werden!

Theorem 2: Eigenfunktionen von hermiteschen Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Beweis: ausgehend von den Eigenwertgleichungen haben wir:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi_n &= a_n \psi_n, \\ \hat{A}\psi_m &= a_m \psi_m.\end{aligned}\tag{228}$$

Somit erhalten wir

$$a_n \langle \psi_m, \psi_n \rangle = \langle \psi_m, \hat{A}\psi_n \rangle = \langle \hat{A}\psi_m, \psi_n \rangle = a_m \langle \psi_m, \psi_n \rangle.\tag{229}$$

Damit ergibt sich

$$(a_n - a_m) \langle \psi_m, \psi_n \rangle = 0.\tag{230}$$

D.h. wenn $a_n \neq a_m$, dann sind die Zustände orthogonal.

Gehören zu einem Eigenwert mehrere Eigenfunktionen (**Entartung**), dann kann man die Zustände wie folgt orthogonalisieren. Wir definieren:

$$\langle \psi_m, \psi_n \rangle =: C_{mn},\tag{231}$$

$$C_{mn}^* = C_{nm}.\tag{232}$$

Lineare Algebra: eine hermitesche Matrix \hat{C} kann durch eine unitäre Transformation \hat{U} auf Diagonalgestalt $\hat{C}^D = \hat{U}^\dagger \hat{C} \hat{U}$ gebracht werden.

Für diese Transformation gilt

$$\sum_{m,n} \langle U_{m\alpha} \psi_m, U_{n\beta} \psi_n \rangle = \sum_{m,n} U_{m\alpha} C_{mn} U_{n\beta} = C_{\alpha\beta}^D.\tag{233}$$

Die neuen Eigenfunktionen

$$\phi_\beta = \sum_n \psi_n U_{n\beta}\tag{234}$$

sind damit orthogonal.

Mit

$$\phi_\alpha \rightarrow \frac{\phi_\alpha}{\sqrt{\langle \phi_\alpha, \phi_\alpha \rangle}}\tag{235}$$

kann man die neuen Funktionen auf 1 normieren.

Somit können die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators immer so gewählt werden, dass die Orthonormalitätsrelation erfüllt ist

$$\langle \psi_m, \psi_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (236)$$

Weiterhin erfüllen die Eigenfunktionen der von uns betrachteten Operatoren die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x - x'). \quad (237)$$

Daraus folgt die Entwickelbarkeit eines beliebigen, allgemeinen Zustandes $\psi(x)$ in Eigenfunktionen $\psi_n(x)$:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int dx' \delta(x' - x) \psi(x') \\ &= \sum_n \int dx' \psi_n^*(x') \psi_n(x) \psi(x') \\ &= \sum_n \langle \psi_n, \psi \rangle \psi_n(x) =: \sum_n c_n \psi_n(x). \end{aligned} \quad (238)$$

Die Normierungsbedingung des allgemeinen Zustandes und die Orthonormierung der Eigenfunktionen führen dann zu

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (239)$$

Anmerkung: Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren

Man kann linear unabhängige, entartete Eigenfunktionen ψ_1, ψ_2, \dots auch sukzessive orthogonalisieren und normieren:

$$\begin{aligned} C_1 \phi_1 &:= \psi_1, \\ C_2 \phi_2 &:= \psi_2 - \phi_1 \langle \phi_1, \psi_2 \rangle, \\ C_3 \phi_3 &:= \psi_3 - \phi_1 \langle \phi_1, \psi_3 \rangle - \phi_2 \langle \phi_2, \psi_3 \rangle, \end{aligned} \quad (240)$$

mit den Normierungskoeffizienten

$$\begin{aligned} C_1 &= \langle \psi_1, \psi_1 \rangle^{\frac{1}{2}}, \\ C_2 &= \left(\langle \psi_2, \psi_2 \rangle - |\langle \psi_2, \phi_1 \rangle|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (241)$$

5.7 Harmonischer Oszillator III

Zur Erinnerung:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x =: \frac{x}{x_0}, \quad (242)$$

mit der charakteristischen Länge $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Auf und Absteigeoperatoren sind definiert als

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} \pm x_0 \frac{d}{dx} \right) \quad (243)$$

und beistzen den Kommutator

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1. \quad (244)$$

Der Hamiltonoperator lautet somit

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (245)$$

Das Auffinden von Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator, ist äquivalent zum Auffinden von Eigenfunktionen zum **Besetzungszahloperator**

$$\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}. \quad (246)$$

Nun sei ψ_{ν} eine Eigenfunktion zu \hat{n} mit dem Eigenwert ν .

Behauptung: $\nu \geq 0$

Beweis: Aus der Definition des Skalarproduktes wissen wir

$$\langle \hat{a}\psi_{\nu}, \hat{a}\psi_{\nu} \rangle \geq 0. \quad (247)$$

Weiter gilt für dieses Skalarprodukt

$$\langle \hat{a}\psi_{\nu}, \hat{a}\psi_{\nu} \rangle = \langle \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\psi_{\nu}, \psi_{\nu} \rangle = \langle \hat{n}\psi_{\nu}, \psi_{\nu} \rangle = \nu \langle \psi_{\nu}, \psi_{\nu} \rangle. \quad (248)$$

Damit folgt

$$\nu \langle \psi_{\nu}, \psi_{\nu} \rangle \geq 0. \quad (249)$$

und somit $\nu \geq 0$!

In der Vorlesung haben wir bereits gezeigt $\hat{a}^\dagger\psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu + 1$ und $\hat{a}\psi_\nu$ ist Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $\nu - 1$. Für normierte Eigenfunktion ψ_ν gilt

$$\hat{a}^\dagger\psi_\nu = \sqrt{\nu + 1}\psi_{\nu+1}, \quad (250)$$

$$\hat{a}\psi_\nu = \sqrt{\nu}\psi_{\nu-1}. \quad (251)$$

Behauptung: mit $\psi_n, n \in \mathbb{N}_0$ sind alle Eigenfunktionen gefunden.

Ann: es gibt einen Eigenwert $\nu = n + \alpha$ mit $0 < \alpha < 1$ und $n \in \mathbb{N}_0$, so dass

$$\hat{n}\psi_\nu = (n + \alpha)\psi_\nu. \quad (252)$$

Weiter folgt dann

$$\begin{aligned} \hat{n}(\hat{a}^n\psi_\nu) &= \alpha(\hat{a}^n\psi_\nu), \\ \hat{n}(\hat{a}^{n+1}\psi_\nu) &= (\alpha - 1)(\hat{a}^{n+1}\psi_\nu). \end{aligned} \quad (253)$$

Damit ist die Norm des Zustandes $(\hat{a}^{n+1}\psi_\nu)$ gleich $\alpha - 1$ und wenn α nicht verschwindet, dann wäre die Norm negativ, was nicht möglich ist. Damit muss α gleich Null sein.

 8. Vorlesung: Donnerstag 2.11.2023
 2.3, Griffiths;

5.8 Physikalische Bedeutung der Eigenwerte

Gegeben sei ein Operator \vec{A} mit einem vollständigen Orthonormalsystem von Eigenfunktionen ψ_m zu den Eigenwerten a_m , sowie eine Wellenfunktion $\Psi(x)$

$$\Psi(x) = \sum_n c_n \psi_n. \quad (254)$$

Welche physikalische Bedeutung haben die Koeffizienten c_n und die Eigenwerte a_n ?

5.8.1 Wahrscheinlichkeiten II

X sei eine Zufallsvariable, die Werte x annimmt, und $w(x)dx$, die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Zufallsvariable einen Wert im Intervall $[x, x+dx]$ annimmt.

Definition 1:

$$m_n := \int_{-\infty}^{+\infty} x^n w(x) dx =: \langle X^n \rangle \quad (255)$$

heißt **n-tes Moment** der Verteilung $w(x)$.

Definition 2:

$$\chi(\tau) := \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ix\tau} w(x) dx \quad (256)$$

heißt **charakteristische Funktion** der Verteilung $w(x)$.

Bemerkungen:

- $\chi(\tau)$ ist die Fourier-Transformation von $w(x)$. Durch Umkehrung der Fourier-Transformation erhält man

$$w(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ix\tau} \chi(\tau) \frac{d\tau}{2\pi} \quad (257)$$

- Die Entwicklung der Exponentialfunktion ergibt

$$\chi(\tau) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \tau^n m_n. \quad (258)$$

Kennt man alle Momente, so kennt man auch die charakteristische Funktion.

Nun sei $F(X)$ eine Funktion der Zufallsvariablen X .

Definition 3: Der Mittelwert von $F(X)$ ist gegeben durch

$$\langle F(X) \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) w(x) dx =: \langle X^n \rangle. \quad (259)$$

Bemerkungen:

- Das n -te Moment m_n ist der Mittelwert von X^n .
- Die charakteristische Funktion ist der Mittelwert von $\exp(-iX\tau)$

5.8.2 Operatoren mit diskreten Eigenwerten

- i) Das System befindet sich in einem Eigenzustand ψ_m vom Operator \hat{A} . Dann gilt für den Mittelwert von \hat{A}^n

$$\langle \hat{A}^n \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \hat{A}^n \psi_m dx =: \langle \psi_m, \hat{A}^n \psi_m \rangle = a_m^n \langle \psi_m, \psi_m \rangle = a_m^n. \quad (260)$$

Für die charakteristische Funktion erhalten wir daher

$$\chi(\tau) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} a_m^n = e^{-i\tau a_m}. \quad (261)$$

$w(a)da$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die durch \hat{A} dargestellte Observable Werte im Intervall $[a, a + da]$ annimmt. Mit der Fourier-rücktransformation der charakteristischen Funktion erhalten wir

$$\begin{aligned} w(a) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ia\tau} \chi(\tau) \frac{d\tau}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ia\tau} \frac{d\tau}{2\pi} e^{-i\tau a_m} = \delta(a - a_m). \end{aligned} \quad (262)$$

D.h. wir haben eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, die mit Sicherheit den Wert a_m annimmt und man findet bei der Messung von \hat{A} definitiv den Wert a_m .

ii) Das System befindet sich in einem Zustand

$$\psi = \sum c_m \psi_m \quad (263)$$

mit Eigenfunktionen ψ_m vom Operator \hat{A} . Dann gilt für den Mittelwert von \hat{A}^n

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}^n \rangle &= \langle \psi, \hat{A}^n \psi \rangle = \sum_{m,l} \langle c_m \psi_m, \hat{A}^n c_l \psi_l \rangle \\ &= \sum_{m,l} c_m^* (a_l)^n c_l \langle \psi_m, \psi_l \rangle = \sum_m |c_m|^2 (a_m)^n \end{aligned} \quad (264)$$

Für die charakteristische Funktion erhalten wir daher

$$\chi(\tau) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \sum_m |c_m|^2 (a_m)^n = \sum_m |c_m|^2 e^{-i\tau a_m}. \quad (265)$$

$w(a)da$ ist wieder die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die durch \hat{A} dargestellte Observable Werte im Intervall $[a, a+da]$ annimmt. Mit der Fourier-rücktransformation der charakteristischen Funktion erhalten wir

$$\begin{aligned} w(a) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ia\tau} \chi(\tau) \frac{d\tau}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ia\tau} \frac{d\tau}{2\pi} \sum_m |c_m|^2 e^{-i\tau a_m} = \sum_m |c_m|^2 \delta(a - a_m). \end{aligned} \quad (266)$$

D.h. wir haben eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, die mit der Wahrscheinlichkeit $|c_m|^2$ den Wert a_m annimmt und man findet bei der Messung von \hat{A} einen der möglichen Eigenwerte a_m .

Nach einer Messung mit dem Ergebnis a_m muss sich das System im Eigenzustand ψ_m befinden, damit eine wiederholte Messung wieder dasselbe Ergebnis liefern kann.

5.8.3 Operatoren mit kontinuierlichen Eigenwerten

Wir betrachten als Beispiel den Impulsoperator mit der Eigenwertgleichung

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \psi_p(x). \quad (267)$$

Diese wird gelöst durch ebene Wellen

$$\psi_p(x) = \psi_p(0) e^{\frac{i}{\hbar} p x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}. \quad (268)$$

- Orthogonalitätsrelation (siehe Fourier)

$$\int dx \psi_p^*(x) \psi_q(x) = \delta(p - q) \quad (269)$$

- Vollständigkeitsrelation (siehe Fourier)

$$\int dp \psi_p^*(x) \psi_p(y) = \delta(y - x) \quad (270)$$

Die Entwicklung einer beliebigen Wellenfunktion nach Impulseigenfunktionen lautet

$$\psi(x) = \int dp \frac{\phi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (271)$$

Dies ist gleichbedeutend mit einer Fourier-Transformation.

Vergleichen wir dies mit den Formeln für diskrete Spektren, so finden wir

$$c_m \rightarrow \frac{\phi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (272)$$

$$\sum_m \rightarrow \int dp. \quad (273)$$

Damit folgt für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses

$$w(p) = \int dq \left| \frac{\phi(q)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right|^2 \delta(p - q) = \left| \frac{\phi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right|^2. \quad (274)$$

Als zweites Beispiel für kontinuierliche Eigenwerte betrachten wir Orts-eigenfunktionen

$$\psi_\xi(x) = \delta(x - \xi). \quad (275)$$

Diese Wellenfunktionen sind scharf am Ort $x = \xi$ lokalisiert, für sie gilt offensichtlich

$$x\psi_\xi(x) = \xi\psi_\xi(x). \quad (276)$$

- Orthogonalitätsrelation

$$\langle \psi_\xi(x), \psi_{\xi'}(x) \rangle = \delta(\xi - \xi'). \quad (277)$$

- Vollständigkeitsrelation

$$\int d\xi \psi_\xi(x) \psi_\xi(y) = \delta(x - y). \quad (278)$$

Weiterhin kann jede Wellenfunktion $\psi(x)$ durch die Eigenfunktionen dargestellt werden:

$$\psi(x) = \int d\xi \psi(\xi) \psi_\xi(x). \quad (279)$$

In dieser Form sehen wir, dass die Wellenfunktion $\psi(x)$ der Entwicklungskoeffizient in der Entwicklung nach den Ortseigenfunktionen ist. Damit folgt, dass $|\psi(\xi)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort ξ ist.

5.8.4 Operatoren mit diskreten und kontinuierlichen Eigenwerten

In vielen Fällen besteht das Spektrum eines Operators aus einem diskreten (Eigenwerte a_n und Eigenfunktionen ψ_n) und einem kontinuierlichen (Eigenwerte a und Eigenfunktionen ψ_a) Anteil. Dann lautet die allgemeine Entwicklung einer Wellenfunktion

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) + \int da c(a) \psi_a(x) \quad (280)$$

und die Wahrscheinlichkeitsdichte ist dann

$$w(a) = \sum_n |c_n|^2 \delta(a - a_n) + |c_a|^2. \quad (281)$$

5.9 Postulate der Quantenmechanik II

Wir können nun die engültige Form der Axiome der Quantenmechanik formulieren:

1. Der Zustand wird durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ beschrieben.
2. Den Observablen entsprechen hermitesche Operatoren \hat{A}, \dots , wobei Funktionen von Observablen Funktionen von Operatoren entsprechen.
3. Der Mittelwert der Observablen mit zugehörigem Operator \hat{A} ist im Zustand $\Psi(\vec{x}, t)$ gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi, \hat{A} \Psi \rangle \quad (282)$$

gegeben.

4. Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \Psi \quad (283)$$

bestimmt.

5. Wenn bei der Messung von \hat{A} der Wert a_n gefunden wurde, geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion ψ_n über.

6 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung II

9. Vorlesung: Dienstag 7.11.2023
2.3, Griffiths;

6.1 Das freie Teilchen

6.1.1 Ebene Wellen

Verschwundet das Potential überall, i.e. $V(x) = 0$, dann sprechen wir von einem freien Teilchen.

Die Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi, \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= -k^2\psi, \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (284)$$

Die allgemeinste Lösung hiervon ist

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (285)$$

Im Gegensatz zum unendlich tiefen Potentialtopf haben wir nun keine Randbedingungen, die z.B. die Energiewerte einschränken würden.

Betrachten wir noch zusätzlich die Zeitabhängigkeit $\exp(-iEt/\hbar)$ so erhalten wir für die zeitabhängige Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)}. \quad (286)$$

Ist der Ausdruck

$$x \mp \frac{\hbar k}{2m}t = x_0$$

konstant (x_0), dann ist das Argument der Exponentialfunktion konstant und die Wellenfunktion besitzt denselben Wert. Es gilt dann

$$x = x_0 \pm \frac{\hbar k}{2m}t.$$

Dies ist die Gleichung einer geradlinig gleichförmigen Bewegung mit der Geschwindigkeit $v = \hbar k/(2m)$. Damit beschreibt die Exponential-Funktion e^{ikx}

eine sich nach rechts ausbreitende Welle und e^{-ikx} eine sich nach links ausbreitende Welle.

Wir schreiben nun allgemein

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}, \quad (287)$$

mit

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (288)$$

wobei $k > 0$ eine sich nach rechts ausbreitende Welle beschreibt und $k < 0$ eine sich nach links ausbreitende Welle.

Die Geschwindigkeit v_{QM} dieser Welle ist nach oben gegeben durch

$$v_{QM} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}. \quad (289)$$

Die klassische Geschwindigkeit eines Teilchens mit der Energie $E = \frac{1}{2}mv_{klass.}^2$ bestimmt sich hingegen zu

$$v_{klass.} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{QM}. \quad (290)$$

Diese Ungereimtheit werden wir später klären.

Weiterhin stellen wir leider fest, dass die Wellenfunktion nicht normiert ist!

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_k(x, t) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty! \quad (291)$$

Zustände mit einer bestimmten Energie sind also nicht normiert und können damit nicht existieren!

6.1.2 Wellenpakete

Lösung: Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist eine Linearkombination der separierbaren Lösungen

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk, \quad (292)$$

welche wir als Wellenpaket bezeichnen.
Für die Norm erhalten wir nun

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dk \phi^*(q) \phi(k) e^{i\frac{\hbar q^2}{2m}t} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(q-k)x} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dk \phi^*(q) \phi(k) e^{i\frac{\hbar q^2}{2m}t} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \delta(q-k) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dk |\phi(k)|^2.
\end{aligned} \tag{293}$$

Damit ist unser Wellenpaket quadrat-integrabel, wenn $\phi(k)$ über k quadrat-integrabel ist.

$\phi(k)$ kann aus der Anfangsbedingung

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \tag{294}$$

via Fourier-Transformation bestimmt werden:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \tag{295}$$

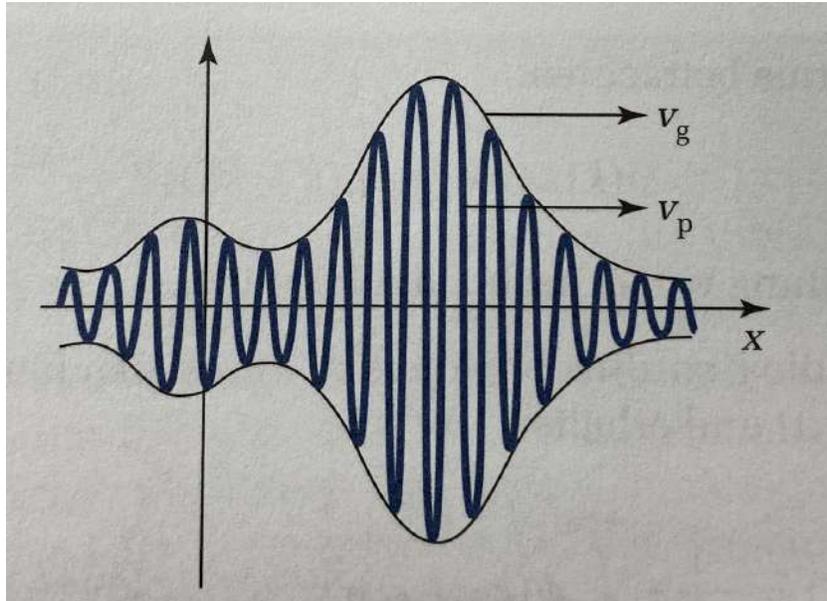
6.1.3 Phasen-/Gruppengeschwindigkeit

Ein Wellenpaket besteht aus vielen Einzelzacken und einer Einhüllenden ϕ .

Die Geschwindigkeit der einzelnen Zacken bezeichnet man mit **Phasengeschwindigkeit** und die Geschwindigkeit der Einhüllenden als **Gruppengeschwindigkeit**. Beide Geschwindigkeiten können verschieden sein.

Wir wollen nun die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpaketes bestimmen

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \tag{296}$$



In unserem Fall lautet die **Dispersionsrelation** (= Zusammenhang zwischen ω und k) $\omega = (\hbar k^2/2m)$. Damit das Wellenpaket lokalisiert ist, nehmen wir an, dass $\phi(k)$ bei k_0 eine enge Spitze hat.

Für die Taylorentwicklung von w um den Punkt k_0 ergibt sich

$$\omega = \omega_0 + \omega'_0(k - k_0) + \dots \quad (297)$$

Das Wellenpaket wird damit zu

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega_0 t - \omega'_0(k - k_0)t)} dk \\ &\stackrel{s:=k-k_0}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(s + k_0) e^{i(sx + k_0 x - \omega_0 t - \omega'_0 s t)} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(s + k_0) e^{i((s+k_0)(x - \omega'_0 t))} ds. \end{aligned} \quad (298)$$

Vergleicht man dies mit dem Wellenpaket zur Zeit $t = 0$

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i((s+k_0)x)} ds, \quad (299)$$

so findet man

$$\Psi(x, t) = e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \Psi(x - \omega'_0 t, 0). \quad (300)$$

Abgesehen vom Phasenfaktor bewegt sich das Wellenpaket mit der Geschwindigkeit

$$v_{\text{Gruppen}} = \omega'_0 = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}. \quad (301)$$

Die Phasengeschwindigkeit ergibt sich

$$\begin{aligned} e^{i(kx - \omega t)} &= e^{ik(x - \frac{\omega}{k}t)} \\ v_{\text{Phasen}} &= \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}. \end{aligned} \quad (302)$$

Wir erhalten also, dass die Gruppengeschwindigkeit zweimal so gross ist, wie die Phasengeschwindigkeit und können so obige Ungereimtheit verstehen.

6.2 Potentialstufen

6.2.1 Stetigkeit von ψ und ψ'

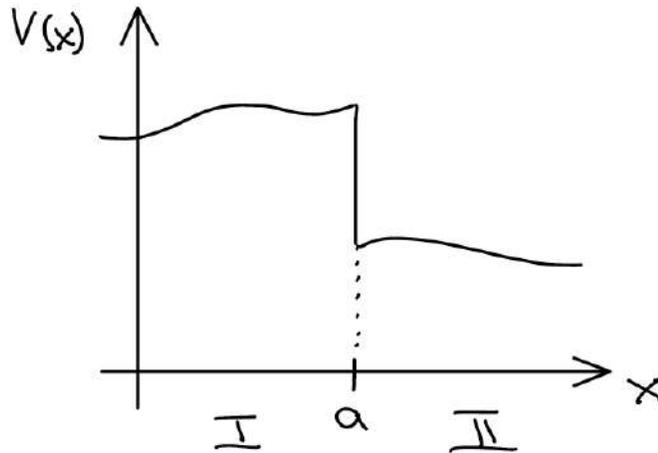
Wir betrachten ein 1-dimensionales Potential $V(x)$ mit einer Unstetigkeit an der Stelle $x = a$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung hierfür lautet

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x). \quad (303)$$

Was passiert an der Unstetigkeitsstelle $x = a$ mit ψ und ψ' ?

Annahme: die Wellenfunktion und/oder die Ableitung sind auch unstetig:



- $\psi(x) \propto \theta(x - a) \Rightarrow \psi''(x) \propto \delta'(x - a)$:
Damit haben wir in der Schrödinger-Gleichung

$$\delta'(x - a) \propto -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \theta(x - a), \quad (304)$$

was nicht möglich ist!

- $\psi'(x) \propto \theta(x - a) \Rightarrow \psi''(x) \propto \delta(x - a)$:
Damit haben wir in der Schrödinger-Gleichung

$$\delta(x - a) \propto -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \int \theta(x - a), \quad (305)$$

was ebenfalls nicht möglich ist!

Damit müssen ψ und ψ' an der Stelle $x = a$ beide stetig sein, d.h.

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a), \\ \psi'_I(a) &= \psi'_{II}(a), \end{aligned} \quad (306)$$

beziehungsweise

$$\frac{\psi'_I(a)}{\psi_I(a)} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)}. \quad (307)$$

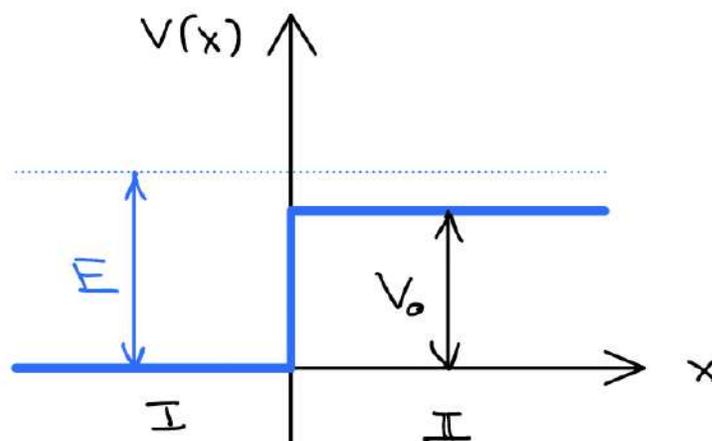
Beachte: die oben angeführte Argumentation verliert im Falle eines δ -Potentials seine Gültigkeit!

6.2.2 Potentialstufe

Wir betrachten nun den Fall

$$V(x) = V_0\theta(x), \quad (308)$$

mit der Konstanten $V_0 > 0$.



Damit erhalten wir als Schrödingergleichung für die beiden Bereiche I ($x < 0$) und II ($x > 0$)

$$I : \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi, \quad (309)$$

$$II : \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi. \quad (310)$$

6.2.3 Teilchenenergie oberhalb der Stufe

$$I : \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \text{ mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (311)$$

$$II : \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi \text{ mit } q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (312)$$

Die Fundamentallösungen dieser Schwingungsgleichungen sind $e^{\pm iKx}$ mit $K = k, q$. Nehmen wir an, dass das Teilchen von links einfällt, dann ist die Wellenfunktion im Gebiet I eine Überlagerung der von linkseinfällenden Welle (auf eins normiert) und einer möglicherweise reflektierten Welle. Im Gebiet II ist sie eine von links kommende und durchgehende Welle. Wir können allgemein ansetzen

$$\Psi_I(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \quad (313)$$

$$\Psi_{II}(x) = Te^{iqx}. \quad (314)$$

Die Koeffizienten R (Reflexion) und T (Transmission) werden aus den Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ bestimmt.

$$1 + R = T, \quad (315)$$

$$ik(1 - R) = iqT. \quad (316)$$

Aufgelöst ergibt dies

$$R = \frac{k - q}{k + q} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} = \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}, \quad (317)$$

$$T = \frac{2k}{k + q} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}. \quad (318)$$

Nun berechnen wir die zugehörigen Stromdichten. Als wir gezeigt haben, dass sich die Normierung der Wellenfunktion zeitlich nicht ändert, erhielten wir

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}j = 0. \quad (319)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte ρ und der Stromdichte j

$$\rho := |\Psi|^2, \quad (320)$$

$$j := \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right]. \quad (321)$$

Im Bereich I ergibt die Stromdichte

$$\begin{aligned}
j_I &= \frac{i\hbar}{2m} [(e^{ikx} + Re^{-ikx})(ik)(-e^{-ikx} + R^*e^{ikx}) - c.c.] \\
&= +\frac{i\hbar}{2m} [(ik)(-1 + R^*e^{2ikx} - Re^{-2ikx} + |R|^2)] \\
&\quad -\frac{i\hbar}{2m} [(-ik)(-1 + Re^{-2ikx} - R^*e^{2ikx} + |R|^2)] \\
&= \frac{k\hbar}{m} [1 - |R|^2] =: j_{\text{ein.}} - j_{\text{refl.}} .
\end{aligned} \tag{322}$$

Im Bereich II ergibt die Stromdichte

$$\begin{aligned}
j_{II} &= \frac{i\hbar}{2m} [Te^{iqx}(-iq)T^*e^{-iqx} - c.c.] \\
&= \frac{i\hbar}{2m} [|T|^2(-iq) - (iq)|T|^2] = \frac{q\hbar}{m}|T|^2 =: j_{\text{trans.}} .
\end{aligned} \tag{323}$$

Wir definieren nun einen Reflexionskoeffizienten und einen Transmissionskoeffizienten

$$r = \frac{j_{\text{refl.}}}{j_{\text{ein.}}} = |R|^2 \quad , \quad t = \frac{j_{\text{trans.}}}{j_{\text{ein.}}} = \frac{q}{k}|T|^2 . \tag{324}$$

10. Vorlesung: Donnerstag 9.11.2023
3, Schwabl;

Bemerkungen:

1. Das Teilchen wird mit der Wahrscheinlichkeit r reflektiert, klassisch gibt es keine Reflexion und das Teilchen wird sich rechts nur mit einer verminderten Geschwindigkeit weiterbewegen. Das quantenmechanische Problem ist ein Wellenphänomen analog zur Reflexion von Licht an der Trennfläche von Medien mit verschiedenen Brechungsindizes.
2. Im Grenzfall $E \rightarrow \infty (E \gg V_0)$ ergibt sich

$$q \rightarrow k, \quad R \rightarrow 0, T \rightarrow 1. \quad (325)$$

D.h. die reflektierte Welle verschwindet.

3. Mit den Ausdrücken für R und T können wir die Stromdichten weiter vereinfachen

$$\begin{aligned} j_I &= \frac{\hbar k}{m} [1 - |R|^2] = \frac{\hbar k}{m} \frac{(k+q)^2 - (k-q)^2}{(k+q)^2} = \frac{4\hbar}{m} \frac{k^2 q}{(k+q)^2}, \\ j_{II} &= \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = \frac{4\hbar}{m} \frac{k^2 q}{(k+q)^2} \end{aligned} \quad (326)$$

und wir finden somit

$$j_I = j_{II}, \quad (327)$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned} j_{\text{ein.}} &= j_{\text{trans.}} + j_{\text{refl.}}, \\ 1 &= t + r. \end{aligned} \quad (328)$$

4. Für $E > V_0$ und $V_0 > 0$ gilt $R > 0$ und damit sind die einlaufende und die auslaufende Welle in Phase. Für eine abfallende Potentialstufe $v_0 < 0$ ergibt sich $R < 0$ und damit sind die einlaufende und die reflektierte Welle um π phasenverschoben.

Beispiel: wir betrachten die Wellenfunktionen für $E = 4/3V_0$, dies führt zu

$$\begin{aligned}
 k &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2mV_0}{3}} \quad , \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mV_0}{3}} \quad , \\
 R &= \frac{1}{3} \quad , \quad T = \frac{4}{3} \quad , \\
 r &= \frac{1}{9} \quad , \quad t = \frac{8}{9} \quad \quad \quad (329)
 \end{aligned}$$

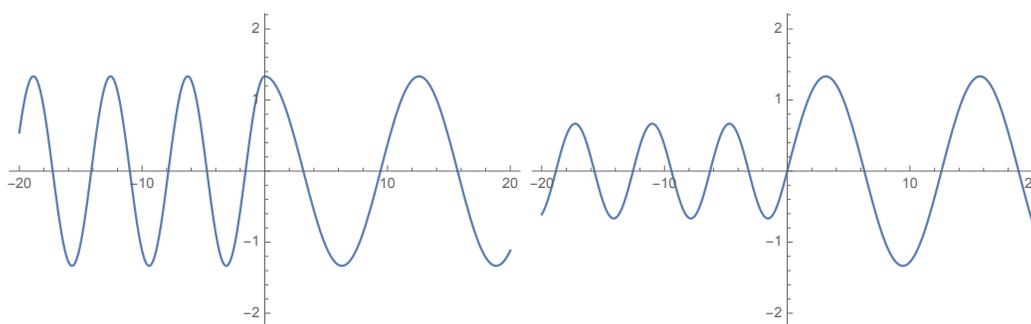


Abbildung 5: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion für ein Teilchen mit einer Energie oberhalb der Potentialschwelle.

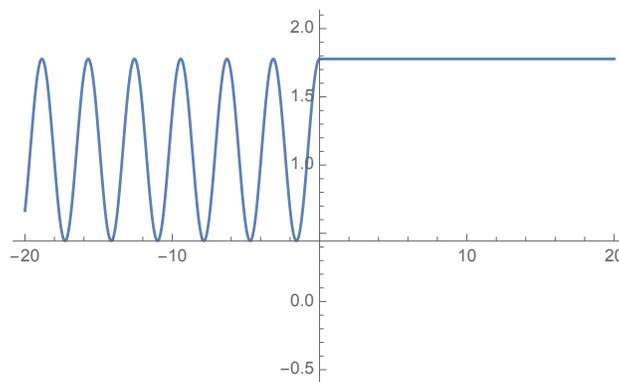


Abbildung 6: Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktion für ein Teilchen mit einer Energie oberhalb der Potentialschwelle.

und somit zu

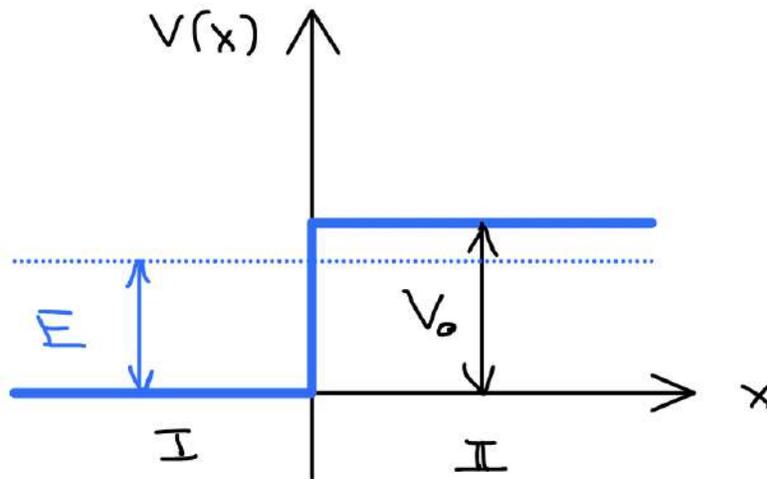
$$\Psi_I(x) = e^{ikx} + \frac{1}{3}e^{-ikx} = \frac{4}{3}\cos(kx) + i\frac{2}{3}\sin(kx), \quad (330)$$

$$\Psi_{II}(x) = \frac{4}{3}e^{i\frac{k}{2}x} = \frac{4}{3}\cos\left(\frac{k}{2}x\right) + i\frac{4}{3}\sin\left(\frac{k}{2}x\right). \quad (331)$$

Damit erhalten wir für den Realteil, den Imaginärteil der Wellenfunktion und für die Wahrscheinlichkeitsdichte die angegebenen Verteilungen.

6.2.4 Teilchenenergie unterhalb der Stufe

Nun soll die Energie E des einfallenden Teilchens kleiner als die Potentialschwelle sein, $E < V_0$.



Die jeweiligen Schrödinger-Gleichungen lauten dann

$$I : \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (332)$$

$$II : \frac{d^2\psi}{dx^2} = +\kappa^2\psi \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (333)$$

Als Lösungsansatz ergibt sich

$$\Psi_I(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \quad (334)$$

$$\Psi_{II}(x) = Te^{-\kappa x}. \quad (335)$$

Wir können die Formeln vom vorherigen Kapitel mit der Ersetzung $q \rightarrow i\kappa$ benutzen.

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad (336)$$

$$T = \frac{2k}{k + i\kappa q}. \quad (337)$$

Bemerkungen:

1. Es gilt $|R|^2 = 1$, es tritt also vollständige Reflexion auf.
2. Damit folgt $j_I = j_{II} = 0$!
3. Wegen $T \neq 0$ dringen die Teilchen rechts in das Potential ein, es gibt aber keinen Teilchenfluss.

Beispiel: wir betrachten die Wellenfunktionen für $V_0 = 4/3E$, dies führt zu

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad , \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mE}{3}} = \frac{k}{\sqrt{3}},$$

$$R = \frac{\sqrt{3} - i}{\sqrt{3} + i} \frac{\sqrt{3} - i}{\sqrt{3} - i} = \frac{1 - \sqrt{3}i}{2} \quad , \quad T = \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{3} + i} \frac{\sqrt{3} - i}{\sqrt{3} - i} = \frac{3 - \sqrt{3}i}{2}.$$

6.2.5 Grenzfall: unendlich hohe Potentialschwelle

Betrachten wir den Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$, so finden wir

$$\kappa \rightarrow \infty, \quad T = 0, \quad R = -1. \quad (338)$$

Damit erhalten wir als Lösung

$$\Psi_I(x) = e^{ikx} - e^{-ikx} = 2i \sin(kx), \quad (339)$$

$$\Psi_{II}(x) = 0. \quad (340)$$

Insbesondere gilt hierbei $\Psi_I(0) = 0$ und damit die allgemeine Randbedingung an eine unendlich hohe Schwelle

$$\Psi|_{\text{Schwelle}} = 0. \quad (341)$$

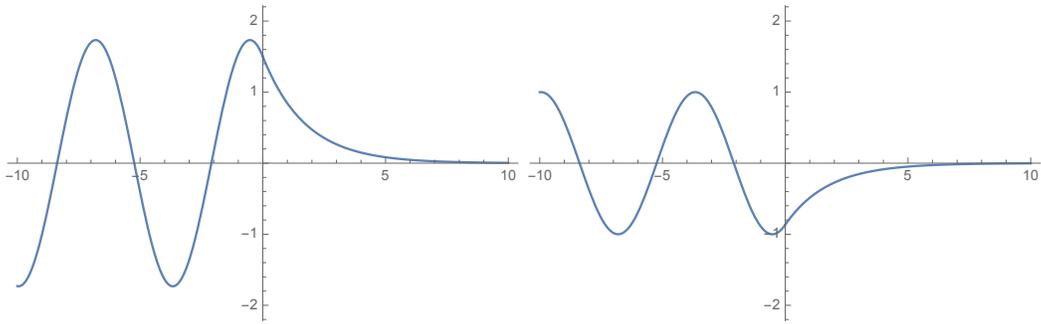


Abbildung 7: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion für ein Teilchen mit einer Energie unterhalb der Potentialschwelle.

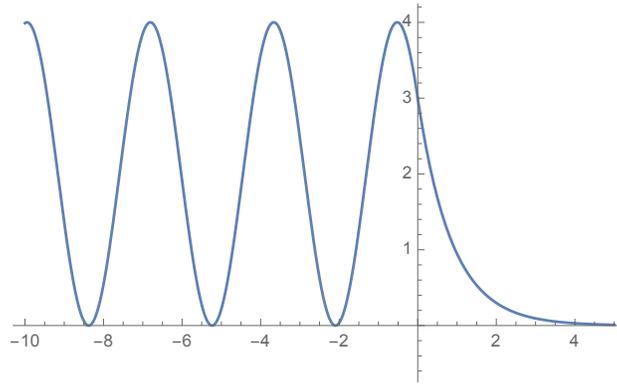


Abbildung 8: Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktion für ein Teilchen mit einer Energie oberhalb der Potentialschwelle.

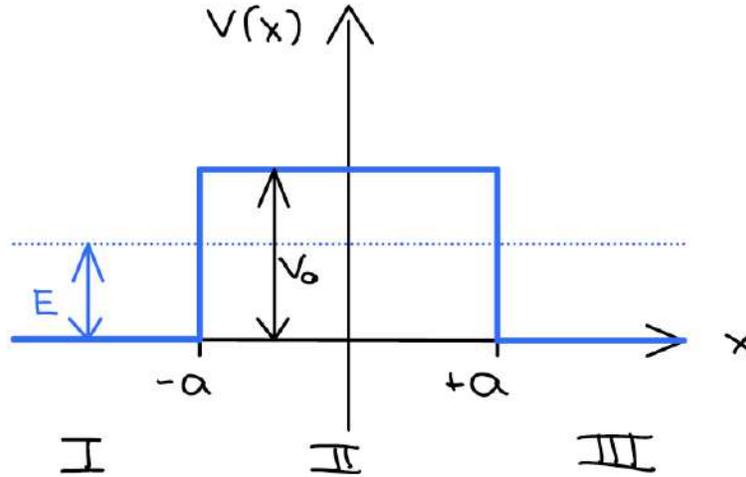
6.3 Tunneleffekt

6.3.1 Potentialschwelle

Als nächstes betrachten wir die Potentialbarriere

$$V(x) = V_0\theta(a - |x|). \quad (342)$$

Wir betrachten hier nur den Fall $E < V_0$. Klassische würde ein von links kommendes Teilchen lediglich reflektiert werden. In der Quantenmechanik, kann das Teilchen auch in die Potentialschwelle eindringen. Wir setzen daher



als Lösung an

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a, \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} & -a < x < a, \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & x > a, \end{cases} \quad (343)$$

mit den Wellenzahlen $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.
Steitigkeit bei $x = -a$ ergibt

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{+ika} &= Ce^{+\kappa a} + De^{-\kappa a}, \\ ik(Ae^{-ika} - Be^{+ika}) &= -\kappa(Ce^{+\kappa a} + De^{-\kappa a}). \end{aligned} \quad (344)$$

In Matrixschreibweise lautet dies

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{+ika} \\ e^{-ika} & -e^{+ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k}e^{+\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k}e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (345)$$

Aufgelöst nach (A, B) ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{+ika} & e^{+ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k}e^{+\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k}e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\ &= M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (346)$$

mit der Matrix

$$\begin{aligned}
M(a) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} \\ \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a - ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} pe^{ima} & me^{ipa} \\ me^{-ipa} & pe^{-ima} \end{pmatrix}, \tag{347}
\end{aligned}$$

mit $p = k + i\kappa$ und $m = k - i\kappa$. Steitigkeit bei $x = +a$ ergibt

$$\begin{aligned}
Fe^{+ika} + Ge^{-ika} &= Ce^{-\kappa a} + De^{+\kappa a}, \\
ik(Fe^{+ika} - Ge^{-ika}) &= -\kappa(Ce^{-\kappa a} + De^{+\kappa a}). \tag{348}
\end{aligned}$$

Vergleichen wir das mit dem obigen Ergebnis dann sehen wir

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \tag{349}$$

Somit kann (A, B) durch (F, G) ausgedrückt werden

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(a)M(-a)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \tag{350}$$

Für die invertierte Matrix an der Stelle $-a$ erhält man mit der Formel

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}. \tag{351}$$

die folgende Matrix

$$\begin{aligned}
M(-a)^{-1} &= \frac{2}{(1 + i\frac{\kappa}{k})^2 - (1 - i\frac{\kappa}{k})^2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & -\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{+\kappa a - ika} \\ -\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix} \\
&= \frac{k}{2i\kappa} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & -\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{+\kappa a - ika} \\ -\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{+\kappa a - ika} \\ \left(1 + \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{-\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix} \\
&= \frac{i}{2\kappa} \begin{pmatrix} -pe^{ima} & me^{-ipa} \\ me^{ipa} & -pe^{-ima} \end{pmatrix}. \tag{352}
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir als Endergebnis

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \sinh 2\kappa a \begin{pmatrix} (\coth 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2}) e^{2ika} & +\frac{i\eta}{2} \\ -\frac{i\eta}{2} & (\coth 2\kappa a - \frac{i\epsilon}{2} e^{-2ika}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad (353)$$

mit den Abkürzungen

$$\epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}. \quad (354)$$

Betrachten wir ein von links einfallendes Teilchen, dann ergibt sich $G = 0$ und wir erhalten die vereinfachten Gleichungen

$$A = \left(\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\kappa a \right) e^{2ika} F, \quad (355)$$

$$B = -\frac{i\eta}{2} \sinh 2\kappa a F. \quad (356)$$

Wir definieren als **Transmissionsamplitude**

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\kappa a} \quad (357)$$

und als **Durchlässigkeitskoeffizient**

$$\begin{aligned} |S(E)|^2 &= \frac{1}{\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\kappa a} \frac{1}{\cosh 2\kappa a - \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\kappa a} \\ &= \frac{1}{\cosh^2 2\kappa a + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2 2\kappa a} \\ &= \frac{1}{1 + \sinh^2 2\kappa a + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2 2\kappa a} \\ &= \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right) \sinh^2 2\kappa a}. \end{aligned} \quad (358)$$

$|S(E)|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass das Teilchen die Schwelle durchdringt.

Im Bereich $\kappa a = a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \gg 1$, d.h. eine sehr hohe und breite

Barriere, ergibt sich $\sinh^2 2\kappa a \approx 1/2e^{2\kappa a} \gg 1$

$$\begin{aligned} |S(E)|^2 &\approx \frac{4}{\left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right) e^{4\kappa a}} = \frac{16}{(4 + \epsilon^2)} e^{-4\kappa a} = \frac{16}{\left(4 + \left(\frac{\kappa^2 - k^2}{\kappa k}\right)^2\right)} e^{-4\kappa a} \\ &= \frac{16k^2\kappa^2}{(4k^2\kappa^2 + (\kappa^2 - k^2)^2)} e^{-4\kappa a} = \frac{16k^2\kappa^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a}. \end{aligned} \quad (359)$$

Setzen wir nun noch die Ausdrücke für k und κ ein, so finden wir

$$|S(E)|^2 \approx \frac{16E(V_0 - E)}{(V_0 - E + E)^2} e^{-4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar}} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar}}. \quad (360)$$

Um die dominante Energieabhängigkeit zu erhalten, schreiben wir auch den Vorfaktor in die Exponentialfunktion

$$|S(E)|^2 \approx = \exp \left[-4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar} + \log \left(\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \right) \right]. \quad (361)$$

Im Exponenten kann man den logarithmischen Term im Vergleich zum Wurzelterm vernachlässigen und man erhält dann als finale Näherung

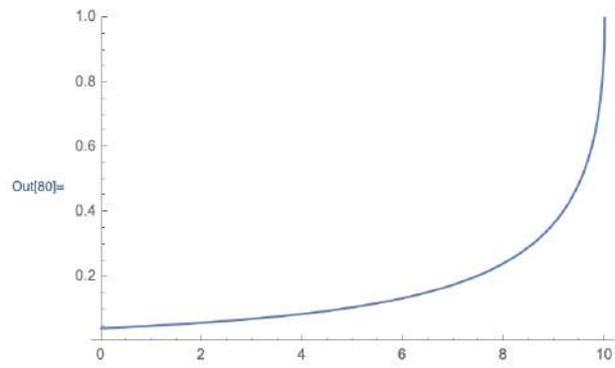
$$|S(E)|^2 \approx \exp \left[-4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar} \right]. \quad (362)$$

Abhängigkeit von der Energie

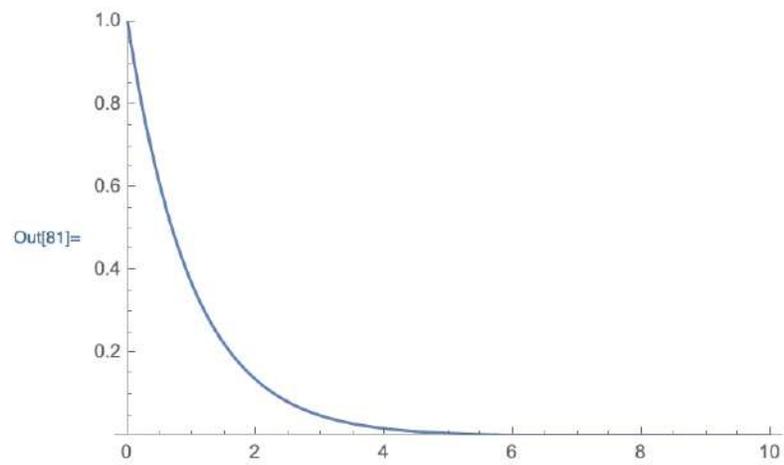
Abhängigkeit von der Schwellenbreite

Die nichtverschwindenden Werte von $S(E)$ beschreiben den quantenmechanischen **Tunneleffekt**. Beispiel dafür sind z.B. der α -Zerfall von Atomkernen oder die Energieerzeugung in der Sonne.

```
In[80]:= Plot[Exp[-Sqrt[10 - En]], {En, 0, 10}, PlotRange -> {0, 1}]
```



```
In[81]:= Plot[Exp[- a], {a, 0, 10}, PlotRange -> {0, 1}]
```



11. Vorlesung: Dienstag 14.11.2023
3, Schwabl;

Wie sieht die Funktion im Inneren der Potentialschwelle aus?
Oben haben wir hergeleitet:

$$C = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{ik}{\kappa} \right) e^{(\kappa+ik)a} F, \quad D = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik}{\kappa} \right) e^{(-\kappa+ik)a} F. \quad (363)$$

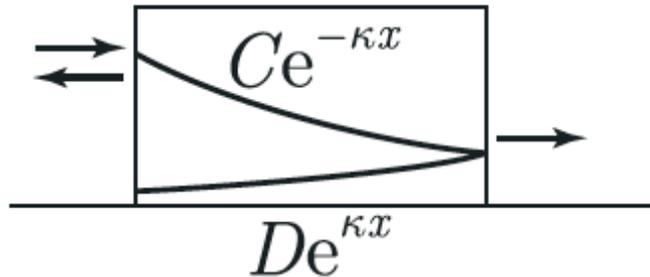
Für $\kappa a = a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \gg 1$, erhielten wir $S(E) \propto e^{-2\kappa a} e^{-2ika}$ und damit gilt

$$C \propto e^{(-\kappa-ik)a} A, \quad D \propto e^{(-3\kappa-ik)a} A. \quad (364)$$

Multiplizieren wir die mit den Wellenfunktionen so ergibt sich

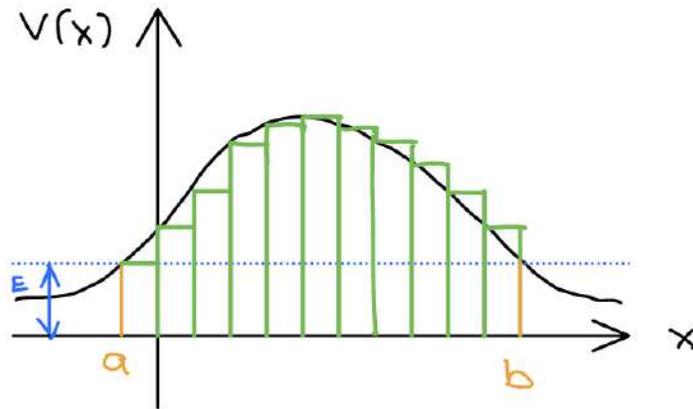
$$C e^{-\kappa x} \Big|_{x=a} \propto e^{-2\kappa a} A, \quad D e^{+\kappa x} \Big|_{x=a} \propto e^{-2\kappa a} A. \quad (365)$$

Beide Beiträge zeigen dieselbe Asymptotik. Die x -abhängigen Wellenfunktionen spalten sich in einen exponentiell steigenden und einen exponentiell fallenden Term auf. Die Amplitude vom exponentiell steigenden Term ist allerdings so gestaltet, das wir asymptotischen immer den extremen $e^{-2\kappa a}$ Abfall finden.



6.3.2 Kontinuierliche Potentialberg

Realistische Potentiale kann man durch N Teilschwellen der Breite $dx = 2a$ approximieren. Für die Gesamttransmissionswahrscheinlichkeit erhält man



das Produkt

$$\begin{aligned} |S(E)|^2 &= \prod_{i=1}^N \exp \left[-2 \frac{\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar} dx \right] \\ &= \exp \left[-2 \sum_{i=1}^N \frac{\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar} dx \right]. \end{aligned} \quad (366)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ wird die Summe zum Integral

$$|S(E)|^2 = \exp \left[-2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} dx \right]. \quad (367)$$

6.3.3 α -Zerfall

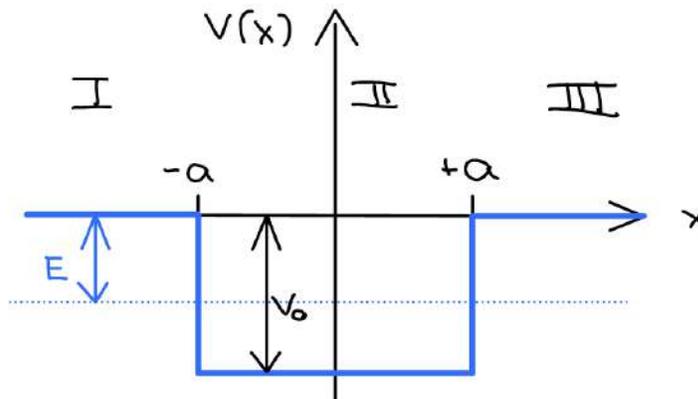
siehe Übungsblatt

6.4 Der endlich tiefe Potentialtopf

Wir untersuchen nun gebundene Zustände im Potentialtopf

$$V(x) = -V_0\theta(a - |x|). \quad (368)$$

Der Potentialtopf dient als Modell für kurzreichweitige Kräfte, wie z.B. in der Kern- oder Festkörperphysik. Um gebundene Zustände zu finden betrachten



wir Energien im Bereich

$$-V_0 \leq E \leq 0. \quad (369)$$

Die Schrödinger-Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} \psi'' &= \kappa^2\psi \text{ mit } \kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \text{ für } |x| > a, \\ \psi'' &= -q^2\psi \text{ mit } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \text{ für } |x| < a. \end{aligned} \quad (370)$$

Für $|x| > a$ muss jeweils die Fundamentallösung gewählt werden, die exponentiell abfällt, während innerhalb des Topfes Sinus und Cosinus-Lösungen auftreten. Wegen der Spiegelsymmetrie des Potentials bei $x = 0$ unterteilen wir die Lösungen in gerade und ungerade.

Gerade: $\psi(x) = \psi(-x)$

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \cos qx & |x| < a, \\ e^{\mp \kappa x} & x \gtrless \pm a. \end{cases} \quad (371)$$

Ungerade: $\psi(x) = -\psi(-x)$

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin qx & |x| < a, \\ \pm e^{\mp \kappa x} & x \gtrless \pm a. \end{cases} \quad (372)$$

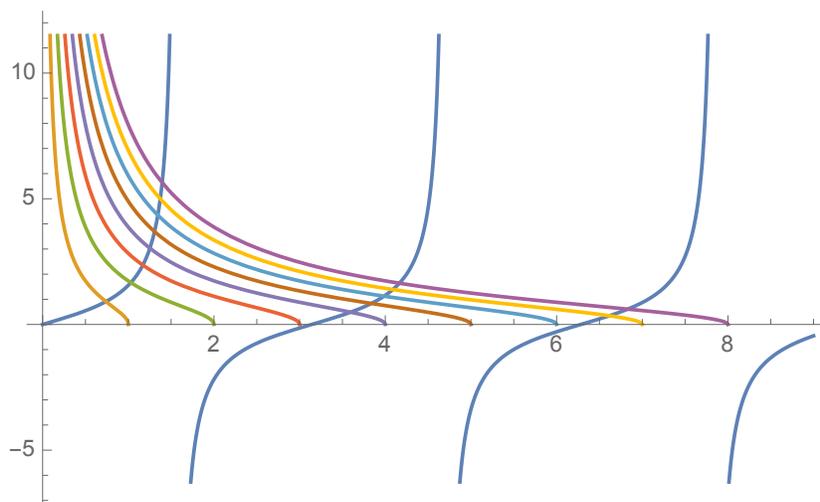
6.4.1 Gerade Symmetrie

Hier lauten die Stetigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned} A \cos qa &= e^{-\kappa a}, \\ qA \sin qa &= \kappa e^{-\kappa a}. \end{aligned} \quad (373)$$

Durch Division erhält man

$$\tan qa = \frac{\kappa}{q} = \dots = \frac{\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} - q^2a^2}}{qa} =: \frac{\sqrt{\zeta^2 - q^2a^2}}{qa}, \quad (374)$$



mit dem dimensionslosen Parameter ζ . Es gilt

$$0 \leq qa \leq \zeta.$$

Gleichung (374) ist eine transzendente Gleichung für die Wellenzahl q , die wir graphisch lösen können, wenn wir $\tan z$ und $\sqrt{\zeta^2 - z^2}/z$ darstellen und dann deren Schnittpunkte suchen.

Bemerkungen:

- Für die Werte q der Schnittpunkte, ergibt sich (aus der Definitionsgleichung von q) die Energie:

$$E = -V_0 + \frac{(q\hbar)^2}{2m} = -V_0 \left(1 - \left(\frac{aq}{\zeta} \right)^2 \right). \quad (375)$$

- Da $\sqrt{\zeta^2 - z^2}/z$ bei $z = \zeta$ verschwindet, kann man die Zahl der Schnittpunkte n_g wie folgt bestimmen:

$$n_g = [\zeta/\pi], \quad (376)$$

wobei $[\alpha]$ die nächstgrößere natürliche Zahl zu α ist.

- Mit der Definition von ζ

$$\zeta := \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \quad (377)$$

finden wir, dass es für $\zeta > 0$ mindestens einen geraden, gebundenen Zustand gibt. Mit wachsendem ζ - d.h. tieferer und/oder breiterer Topf - gibt es mehr gebundene Zustände.

6.4.2 Ungerade Symmetrie

Hier lauten die Stetigkeitsbedingungen

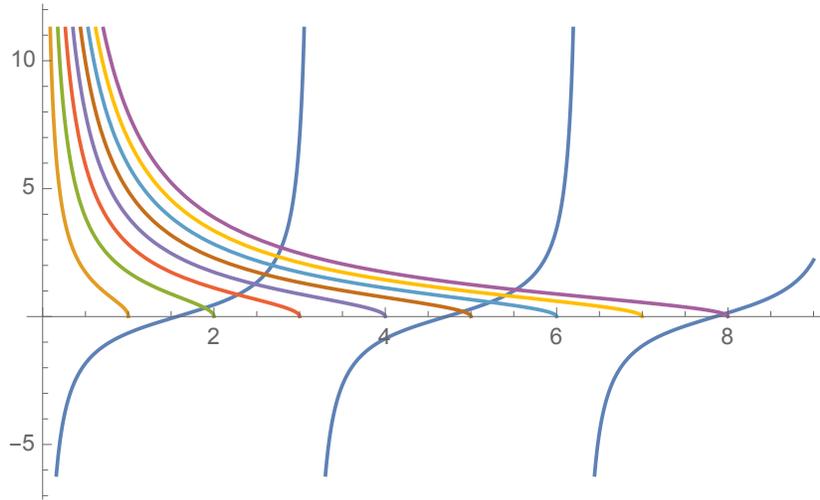
$$\begin{aligned} A \sin qa &= e^{-\kappa a}, \\ qA \cos qa &= -\kappa e^{-\kappa a}. \end{aligned} \quad (378)$$

Durch Division erhält man

$$-\cot qa = \frac{\kappa}{q} = \dots = \frac{\sqrt{\zeta^2 - q^2 a^2}}{qa}. \quad (379)$$

Die graphische Lösung lautet

Bemerkungen:



- Wenn ζ im Intervall

$$\frac{\pi}{2}(2n_u - 1) < \zeta < \frac{\pi}{2}(2n_u + 1)$$

liegt, dann gibt es genau n_u Schnittpunkte, d.h. n_u Lösungen.

- Es gibt nur eine ungerade Lösung, wenn

$$\begin{aligned} \zeta &> \frac{\pi}{2}, \\ 2mV_0 \frac{a^2}{\hbar^2} &> \frac{\pi^2}{4}. \end{aligned} \quad (380)$$

Das Potential muss also eine Mindeststärke besitzen, damit es eine ungerade Lösung gibt.

6.4.3 Allgemeine Lösung

Die Knotenzahl gibt dabei die Anzahl der Nullstellen der Wellenfunktion an.

Beispiel: $\zeta = 5$, in diesem Fall gibt es zwei gerade und zwei ungerade Funktionen. Wir finden folgende möglichen Werte für qa :

Die Bedingung

$$\tan qa = \frac{\sqrt{5^2 - q^2 a^2}}{qa}, \quad (381)$$

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

Tabelle 1: Caption

ergibt die beiden geraden Lösungen

$$\begin{aligned} q_0 a &= 1.30644, \\ q_2 a &= 3.83747. \end{aligned} \tag{382}$$

Die Bedingung

$$-\cot qa = \frac{\sqrt{5^2 - q^2 a^2}}{qa}, \tag{383}$$

ergibt die beiden ungeraden Lösungen

$$\begin{aligned} q_1 a &= 2.59574, \\ q_3 a &= 4.90629. \end{aligned} \tag{384}$$

Die κ Werte werden wie folgt bestimmt

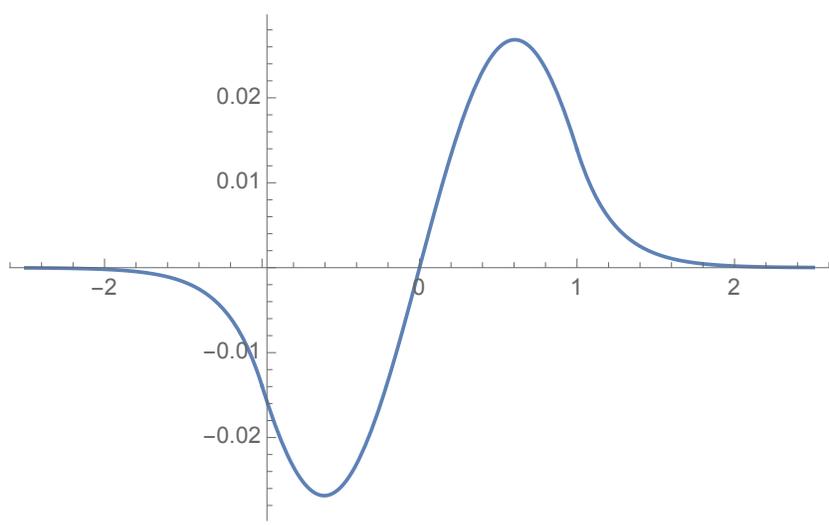
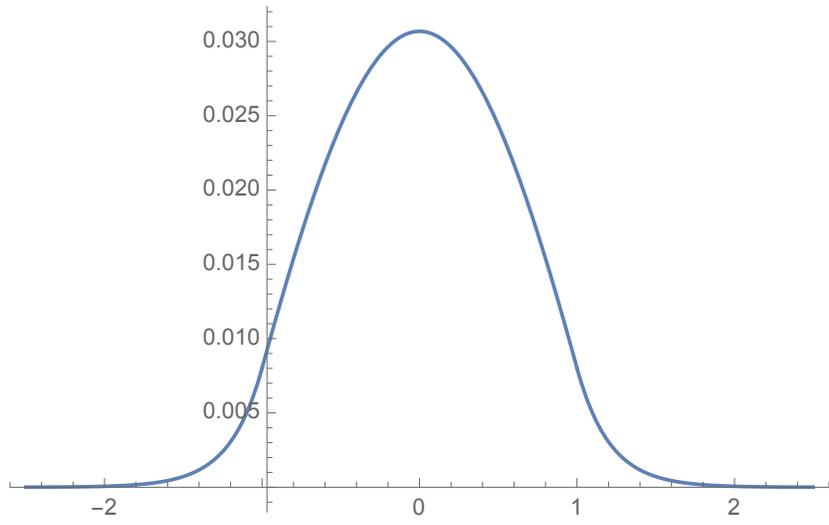
$$\begin{aligned} \kappa a &= qa \tan qa = \begin{cases} 4.8263 & \text{für } q_0, \\ 3.20531 & \text{für } q_2, \end{cases} \\ \kappa a &= -qa \cot qa = \begin{cases} 4.27343 & \text{für } q_1, \\ 0.963439 & \text{für } q_3 \end{cases} \end{aligned} \tag{385}$$

und für die Amplitude A erhält man

$$\begin{aligned} A &= \frac{e^{-\kappa a}}{\cos qa} = \begin{cases} 0.0306793 & \text{für } q_0, \\ -0.0528297 & \text{für } q_2, \end{cases} \\ A &= \frac{e^{-\kappa a}}{\sin qa} qa = \begin{cases} 0.02684 & \text{für } q_1, \\ -0.388866 & \text{für } q_3. \end{cases} \end{aligned} \tag{386}$$

6.4.4 Grenzfall: ∞ -tiefer Potentialtopf

Im Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ erhalten wir die Randbedingung an der unendlich hohen Schwelle $\psi = 0$ und damit die Ergebnisse aus Kapitel 4.2.



6.5 Symmetrieeigenschaften

Der **Paritätsoperator (Spiegelungsoperator)** \hat{P} ist definiert als

$$\hat{P}f(x) = f(-x). \quad (387)$$

Wir nehmen nun an, dass das Potential spiegelungssymmetrisch ist, d.h.

$$\hat{P}V(x) = V(-x) = V(x). \quad (388)$$

Die kinetische Energie im Hamiltonoperator enthält nur eine zweite Ortsableitung, damit gilt für jede komplexe Funktion $f(x)$

$$\hat{P}\hat{H}f(x) = \hat{H}f(-x) = \hat{H}\hat{P}f(x), \quad (389)$$

d.h. \hat{P} und \hat{H} kommutieren, d.h.

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (390)$$

Betrachten wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (391)$$

Wenden wir links und rechts den Paritätsoperator an, so finden wir

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\psi(x) &= \hat{P}E\psi(x), \\ \hat{H}\hat{P}\psi(x) &= E\hat{P}\psi(x), \\ \hat{H}\psi(-x) &= E\psi(-x), \end{aligned} \quad (392)$$

d.h. ist $\psi(x)$ Lösung zum Eigenwert E , so ist $\psi(-x)$ ebenfalls Lösung zum selben Eigenwert E . Die Linearkombinationen $\psi_{g/u}$

$$\psi_{g/u} = \psi(x) \pm \psi(-x) \quad (393)$$

sind dann ebenfalls Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator mit dem Eigenwert E . $\psi_{g/u}$ sind auch Eigenwerte zum Paritätsoperator

$$\hat{P}\psi_{g/u} = \hat{P}\psi(x) \pm \hat{P}\psi(-x) = \psi(-x) \pm \psi(x) = \pm(\psi(x) \pm \psi(-x)) = \pm\psi_{g/u}. \quad (394)$$

D.h. für symmetrische Potentiale können wir ein Basissystem von stationären Zuständen finden, das nur aus geraden und ungeraden Zuständen besteht. Sind Energiewerte nicht entartet, dann ist der Zustand automatisch entweder gerade oder ungerade. In unserem obigen Beispiel ist

$$\psi_0(x) + \psi_0(-x) = 2\psi_0(x), \quad (395)$$

$$\psi_0(x) - \psi_0(-x) = 0 = \psi_1(x) + \psi_1(-x), \quad (396)$$

$$\psi_1(x) - \psi_1(-x) = 2\psi_1(x), \quad (397)$$

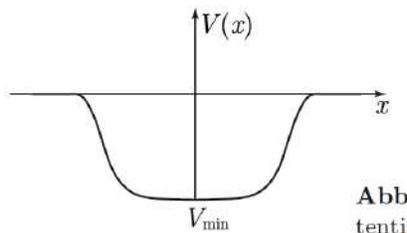
Aus $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ folgt auch

$$\begin{aligned} \hat{H}^*\psi^*(x) &= E^*\psi^*(x), \\ \hat{H}\psi^*(x) &= E\psi^*(x). \end{aligned} \quad (398)$$

Damit folgt, dass auch $\psi(x) + \psi^*(x) = 2\Re(\psi(x))$ und $(\psi(x) - \psi^*(x))/i = 2\Im(\psi(x))$ Eigenfunktionen von \hat{H} zum Eigenwert E sind. Nichtentartete Eigenfunktionen sind automatisch reell.

6.6 Allgemeine Eigenschaften der 1-dimensionalen Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten ein allgemeines Potential

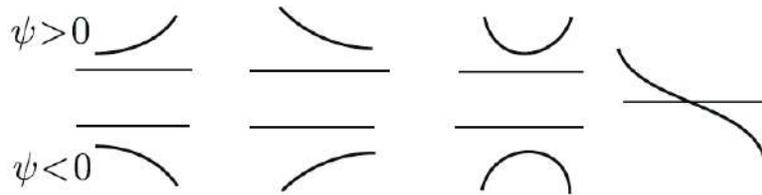


Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi(x). \quad (399)$$

Hier kann es nun Regionen geben in denen die Energie grösser oder kleiner als das Potential ist.

Ist die Energie kleiner als das Potential, dann ist $V(x) - E > 0$, d.h. ψ und ψ'' haben dasselbe Vorzeichen, das bedeutet ψ ist konvex zur x -Achse, d.h. von der x -Achse weggekrümmt.



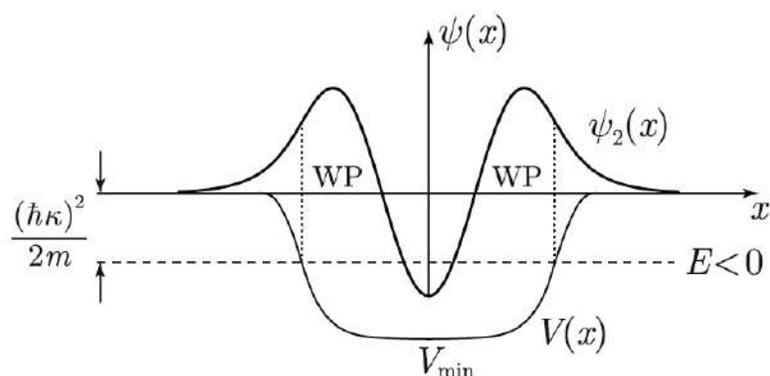
Ist die Energie größer als das Potential, dann ist $V(x) - E < 0$, d.h. ψ und ψ'' haben entgegengesetztes Vorzeichen, das bedeutet ψ ist konkav zur x -Achse, d.h. zur x -Achse hingekrümmt.



Aus diesen Lösungselementen setzt sich nun jede Lösung stetig und stetig differenzierbar zusammen.

Für das Beispielpotential können wir folgende Energiebereiche unterscheiden:

- I) $E < V_{min.}$: dann ist überall der Fall $V(x) - E > 0$ realisiert und die Wellenfunktion ist immer konvex, d.h. die Lösung divergiert in das Unendliche. Für $E < V_{min.}$ gibt es daher keine akzeptable Lösung.
- II) $V_{min.} < E < 0$: Hier sind wir im Bereich der Bindungszustände.



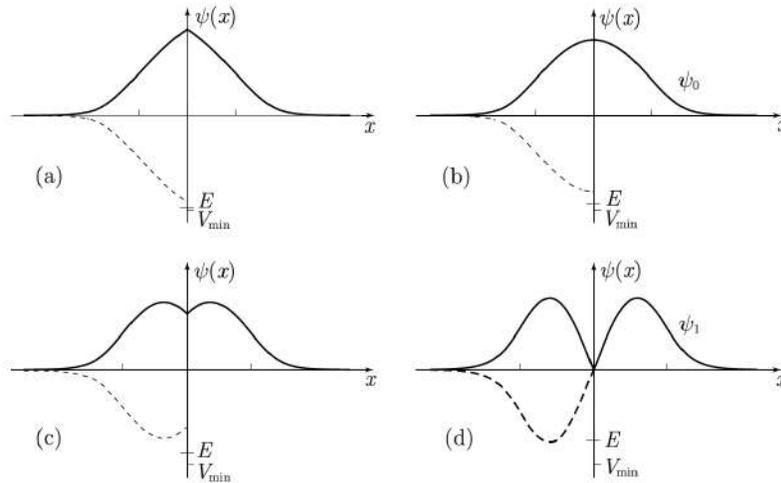
An den Punkten, an denen die Energielinie das Potential schneidet ($E = V(x)$) gilt $\psi'' = 0$, d.h. die Wellenfunktion besitzt einen Wendepunkt. Erhöhen wir die Energie so verschieben sich die Wendepunkte nach aussen.

Ausserhalb der Wendepunkte ist die Wellenfunktion konvex und muss bei Unendlich zur x -Achse hin abfallen. Innerhalb der Wendepunkte ist der Fall $V(x) - E < 0$ realisiert und die Wellenfunktion ist konkav.

Etwas quantitativer und mit der Annahme von stückweise konstanten Potentialen erwarten wir ausserhalb der Wendepunkte eine Wellenfunktion der Form $e^{\pm\kappa x}$ mit $\kappa = \sqrt{2m(V(x) - E)}/\hbar$. Innerhalb der Wendepunkte erwarten wir eine Wellenfunktion der Form $\cos qx$ mit $q = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar$.

Bindungszustände müssen also bei grossen Abständen exponentiell abfallen und dann so zusammengesetzt werden, dass ψ und ψ' stetig sind.

a) Wir starten nun bei der Energie $E = V_{min.}$. In diesem Fall fallen die beiden Wendepunkte zusammen und liegen bei $x = 0$. Die Stetigkeitsbedingung ist nicht erfüllt.



b) Wir erhöhen E nun leicht, solange, bis bei $x = 0$ die Ableitung stetig ist. Dies liefert den geraden Grundzustand. ?Warum gibt es den immer?

c) Wir erhöhen die Energie weiter, so dass die Ableitungen bei $x = 0$ nach unten zeigen. Dies liefert zunächst wieder unetige Ableitungen.

d) Bei einer weiteren Mindestenergie erhalten wir dann denselben Betrag der Ableitung links und rechts von $x = 0$. Dies liefert den 1. angeregten Zustand.

III) $E > 0$: Ausserhalb des Potentials sind die Lösungen wieder ebene Wellen. Innerhalb des Potentials wird die Lösung komplizierter.

6.7 Potentialtopf, Resonanzen

Übungsblatt 7

7 Unschärferelation

13. Vorlesung: Dienstag 21.11.2023
4, Schwabl;

7.1 Heisenbergsche Unschärferelation

7.1.1 Schwarzsche Ungleichung

Satz 1: Für das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen gilt die Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle \phi, \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi, \phi \rangle \langle \psi, \psi \rangle \quad (400)$$

Beweis:

- i) Für $\phi = 0$ ist die Ungleichung offensichtlich erfüllt.
- ii) Für $\phi \neq 0$ zerlegen wir ψ in einen Anteil parallel zu ϕ und einen Anteil senkrecht zu ϕ :

$$\psi = z\phi + \chi,$$

mit $z \in \mathbb{C}$ und $\langle \phi, \chi \rangle = 0$.

Damit folgt

$$\begin{aligned} |\langle \phi, \psi \rangle|^2 &= |\langle \phi, z\phi \rangle|^2 = |z|^2 |\langle \phi, \phi \rangle|^2 \\ &\leq |z|^2 |\langle \phi, \phi \rangle|^2 + \langle \chi, \chi \rangle \langle \phi, \phi \rangle \\ &= \langle \phi, \phi \rangle \langle \psi, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (401)$$

Bemerkungen:

1. Das Gleichheitszeichen gilt für $\chi = 0$.
2. Sind ϕ und ψ quadratintegabel, dann ist das Skalarprodukt $\langle \phi, \psi \rangle$ endlich.

7.1.2 Allgemeine Unschärferelationen

Wir betrachten zwei hermitesche Operatoren \hat{H}_1 und \hat{H}_2 und einen beliebigen Zustand ψ . Wir definieren den Zustand $\hat{\hat{H}}_i$ indem wir von \hat{H}_i den Mittelwert im Zustand ψ abziehen

$$\hat{\hat{H}}_i = \hat{H}_i - \langle \psi | \hat{H}_i | \psi \rangle. \quad (402)$$

Nun setzen wir $\hat{\hat{H}}_1\psi$ und $\hat{\hat{H}}_2\psi$ in die Schwarzsche Ungleichung ein

$$|\langle \hat{\hat{H}}_1\psi, \hat{\hat{H}}_2\psi \rangle|^2 \leq \langle \hat{\hat{H}}_1\psi, \hat{\hat{H}}_1\psi \rangle \langle \hat{\hat{H}}_2\psi, \hat{\hat{H}}_2\psi \rangle. \quad (403)$$

Unter Verwendung der Hermitizität erhalten wir

$$|\langle \psi, \hat{\hat{H}}_1\hat{\hat{H}}_2\psi \rangle|^2 \leq \langle \psi, \hat{\hat{H}}_1^2\psi \rangle \langle \psi, \hat{\hat{H}}_2^2\psi \rangle. \quad (404)$$

Mit dem **Antikommutator**

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}, \quad (405)$$

kann das Produkt $\hat{\hat{H}}_1\hat{\hat{H}}_2$ in einen hermiteschen und anti-hermiteschen Anteil zerlegt werden

$$\hat{\hat{H}}_1\hat{\hat{H}}_2 = \frac{1}{2} \{\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2\} + \frac{1}{2} [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2], \quad (406)$$

mit

$$\begin{aligned} \{\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2\}^\dagger &= + \{\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2\}, \\ [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2]^\dagger &= - [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2]. \end{aligned} \quad (407)$$

Der Mittelwert eines hermiteschen Operators ist reell, der Mittelwert eines anti-hermiteschen Operators ist imaginär, damit entspricht die Aufspaltung des Mittelwerts in Antikommutator und Kommutator einer Zerlegung in Real- und Imaginärteil

$$\begin{aligned} |\langle \psi, \hat{\hat{H}}_1\hat{\hat{H}}_2\psi \rangle|^2 &= \frac{1}{4} \left| \langle \psi, \{\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2\} \psi \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi, [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2] \psi \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} \left| \langle \psi, \{\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2\} \psi \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi, [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2] \psi \rangle \right|^2 \\ &\geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi, [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2] \psi \rangle \right|^2 \\ \Rightarrow \langle \psi, \hat{\hat{H}}_1^2\psi \rangle \langle \psi, \hat{\hat{H}}_2^2\psi \rangle &\geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi, [\hat{\hat{H}}_1, \hat{\hat{H}}_2] \psi \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (408)$$

Definition: Die **Unschärfe** ist die positive Wurzel des Schwankungquadrates

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi, (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi \rangle. \quad (409)$$

Somit haben wir oben hergeleitet

$$\begin{aligned} (\Delta H_1)^2 (\Delta H_2)^2 &\geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi, [\hat{H}_1, \hat{H}_2] \psi \rangle \right|^2 \\ \Delta H_1 \Delta H_2 &\geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi, [\hat{H}_1, \hat{H}_2] \psi \rangle \right|. \end{aligned} \quad (410)$$

Dies ist die allgemeine Formulierung der **Heisenbergschen Unschärferelation** für nicht kommutierende Operatoren.

7.1.3 Ort-Impuls Unschärferelation

Mit $\hat{H}_1 = x_i$ und $\hat{H}_2 = \hat{p}_j$ erhalten wir

$$\Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}. \quad (411)$$

Bemerkung: das Gleichheitszeichen gilt im Falle eines Gaußschen Wellenpaketes.

7.2 Energie-Zeit Unschärferelation

Bisher haben wir Schwankungen zu einem bestimmt Zeitpunkt betrachtet. Es gibt in der Quantenmechanik aber auch Unschärfen, die die Zeit miteinbeziehen:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar. \quad (412)$$

Im Folgenden werden drei Beispiel vorgestellt.

7.2.1 Durchgangsdauer und Energieunschärfe

Die Energieunschärfe eines Wellenpaketes ist

$$\Delta E = p_0 \frac{\Delta p}{m}.$$

Zeitunschärfe ist die Zeit, währenddessen das Teilchen an der Stelle x gefunden werden, d.h. die Zeit die ein Wellenpaket mit der linearen Ausdehnung Δx für den Durchgang durch den Ort x braucht.

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_0} = \frac{m\Delta x}{p_0}.$$

Damit finden wir

$$\Delta E \Delta t = p_0 \frac{\Delta p}{m} \frac{m\Delta x}{p_0} = \Delta p \Delta x \leq \hbar. \quad (413)$$

Beachte: die Bedeutung dieser Unschärfe ist eine andere als bei Ort und Impuls, da die Zeit ein Parameter in der Quantenmechanik ist, und ihr kein Operator zugeordnet ist.

7.2.2 Dauer einer Energiemessung und Energieunschärfe

Eine Energiemessung mit der Genauigkeit ΔE benötigt mindestens die Zeit Δt .

$$\Delta E \Delta t = \leq \hbar. \quad (414)$$

7.2.3 Lebensdauer und Energieunschärfe

Es gibt einen analogen Zusammenhang zwischen der Lebensdauer τ eines angeregten Zustandes und der Energiebreite ΔE des beim Übergang emittierten Teilchens:

$$\Delta E \tau = \leq \hbar. \quad (415)$$

7.3 Gemeinsame Eigenfunktionen von kommutierenden Operatoren

Wir betrachten zwei hermitesche Operatoren \hat{A} und \hat{B} . ψ_n seien Eigenfunktionen zu \hat{A} mit den Eigenwerten a_n .

Bemerkungen:

1. Determinierte Zustände (jede Messung ergibt immer denselben Wert) sind Eigenzustände.

2. Das System der Eigenfunktionen ψ_n heisst **vollständig**, wenn jede beliebige Funktion als eine Linearkombination der ψ_n dargestellt werden kann.
3. Die Menge aller Eigenwerte eines Operators wird dessen **Spektrum** genannt. Besitzen linear unabhängige Eigenfunktionen denselben Eigenwert, dann nennt man das Spektrum **entartet**.
4. Ist das Spektrum **diskret** dann sind die Eigenfunktionen physikalisch realisierbar.
5. Ist das Spektrum **kontinuierlich**, dann sind die Eigenfunktionen nicht normierbar und damit nicht physikalisch realisierbar. Linearkombinationen der Eigenfunktionen hingegen können physikalisch sein.
6. **Axiom:** Die Eigenfunktionen des Operators einer Observablen sind **vollständig**. (kann nicht allgemein bewiesen werden...)

Das System werde nun durch einen Zustand ψ beschrieben, der eine Linearkombination von Eigenfunktionen von \hat{A} ist

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (416)$$

Satz 2: Ist $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dann haben \hat{A} und \hat{B} ein gemeinsames System von Eigenfunktionen.

Beweis:

- i) ψ sei eine nicht-entartete Eigenfunktion von \hat{A}

$$\hat{A}\psi = a\psi. \quad (417)$$

Da \hat{A} und \hat{B} kommutieren gilt

$$\hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}a\psi = a(\hat{B}\psi). \quad (418)$$

Da ψ die einzige Eigenfunktion von \hat{A} mit Eigenwert a ist, muss $\hat{B}\psi$ proportional zu ψ sein. Nennen wir den Proportionalitätsfaktor b , so ergibt sich

$$\hat{B}\psi = b\psi, \quad (419)$$

also die Eigenwert-Gleichung des Operators \hat{B} .

ii) Der Eigenwert a von \hat{A} sei m -fach entartet, mit den Eigenfunktionen ψ_j

$$\hat{A}\psi_j = a\psi_j, j = 1, \dots, m, \quad (420)$$

wobei $\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \delta_{ij}$. Da \hat{A} und \hat{B} kommutieren gilt

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_j) = \hat{B}\hat{A}\psi_j = \hat{B}a\psi_j = a(\hat{B}\psi_j). \quad (421)$$

$\hat{B}\psi_j$ ist also auch eine Eigenfunktion von \hat{A} mit Eigenwert a , daher muss $\hat{B}\psi_j$ eine Linarkombination der ψ_k sein.

$$\hat{B}\psi_j = \sum_k C_{jk}\psi_k, \quad (422)$$

mit $C_{jk} = \langle \psi_k, \hat{B}\psi_j \rangle = C_{kj}^*$.

D.h. die Matrix C_{jk} ist hermitesch und kann daher durch eine unitäre Transformation U auf Diagonalgestalt gebracht werden:

$$\begin{aligned} U^\dagger C U &= C_D \\ C U &= U C_D \\ \sum_j C_{ij} U_{jk} &= U_{ik} C_{Dk} \\ \sum_j U_{jk}^* C_{ji} &= C_{Dk} U_{ik}^*. \end{aligned} \quad (423)$$

D.h. der k -te Spaltenvektor der Matrix U

$$\begin{pmatrix} U_{1k} \\ \vdots \\ U_{mk} \end{pmatrix}$$

ist Eigenvektor der Matrix C zum Eigenwert C_{Dk} .

Damit gilt

$$\begin{aligned} \hat{B}\psi_j &= \sum_k C_{jk}\psi_k \\ U_{jr}^* \hat{B}\psi_j &= \sum_k U_{jr}^* C_{jk}\psi_k \\ \sum_j \hat{B} U_{jr}^* \psi_j &= \sum_{k,j} U_{jr}^* C_{jk}\psi_k \\ &= \sum_k C_{Dr} U_{kr}^* \psi_k. \end{aligned} \quad (424)$$

Für die Linearkombination

$$\phi_r = \sum_k U_{kr}^* \psi_k \quad (425)$$

gilt also

$$\hat{B}\phi_r = C_{Dr}\phi_r. \quad (426)$$

Die ϕ_r stellen somit sowohl Eigenfunktionen von \hat{A} und \hat{B} dar. Die Eigenwerte von \hat{B} sind durch die Diagonalwerte der Matrix C_D gegeben.

Satz 3: gegeben sei ein vollständiges System von Eigenfunktionen $\psi_n(x)$, $n = 1, 2, \dots$ zu den Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit den Eigenwerten a_n und b_n . Dann kommutieren \hat{A} und \hat{B} .

Beweis:

Da $[\hat{A}, \hat{B}]\psi_n = \hat{A}\hat{B}\psi_n - \hat{B}\hat{A}\psi_n = (a_n b_n - b_n a_n)\psi_n = 0$. Damit folgt für einen beliebigen Zustand $\psi = \sum_m c_m \psi_m$

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi = 0$$

und damit $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

D.h. Observablen, die durch kommutierende Operatoren dargestellt werden können, können gleichzeitig scharfe Messungen (=Eigenwerte dieser Operatoren) haben. Also z.B. die Operatormengen $\{\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3\}$ oder $\{\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3\}$ oder $\{\hat{x}_1, \hat{p}_2, \hat{x}_3\}$ aber nicht $\{\hat{x}_1, \hat{p}_1, \hat{x}_3\}$.

Definition 1: Ein vollständiges System von Eigenfunktionen des Operators \hat{A} , heisst **Basis** von \hat{A} .

Definition 2: Vollständiger Satz von Operatoren (Observablen)

Die Menge der hermiteschen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{M}$ heisst **vollständiger Satz** von Operatoren, wenn diese Operatoren alle miteinander kommutieren und das gemeinsame System von Eigenfunktionen nicht mehr entartet ist. Diese Eigenfunktionen können durch die zugehörigen Eigenwerte a, b, \dots, m charakterisiert werden: $\psi_{a,b,\dots,m}$.

Bemerkung: Sind bei einer gegebenen Menge von Operatoren die Eigenzustände noch entartet, so gibt es noch eine Symmetrie dieser Operatoren und die Erzeugende (Generator) dieser Symmetrie kommutiert ebenfalls mit der Menge der Operatoren.

Beispiele für vollständige Sätze von Operatoren:

- Für 1-dimensionale Potentiale: \hat{x} oder \hat{p} .
- Für 3-dimensionale Potentiale: $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ oder $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$.
- Für 3-dimensionale, sphärisch-symmetrische Potentiale: $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ oder $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ oder $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$.
- Für 1-dimensionale, spiegelsymmetrische Potentiale: \hat{x} oder \hat{p} oder \hat{H}, \hat{P} .

Satz 4: Ist O eine Funktion der Operatoren \hat{A}, \hat{B}, \dots eines vollständigen Satzes, so hat O die Basis des vollständigen Satzes, ebenfalls als Basis.

Satz 5: Ein Operator \hat{O} der mit einem vollständigen Satz von Operatoren kommutiert, ist eine Funktion von diesen Operatoren.

Beweis: Da \hat{O} mit dem vollständigen Satz kommutiert, hat er ebenfalls deren Basis.

$$\hat{O}\Psi_{a,b,\dots} = o(a,b,\dots)\Psi_{a,b,\dots}. \quad (427)$$

Die Operatorfunktion $o(\hat{A}, \hat{B}, \dots)$ hat ebenfalls den Eigenwert $o(a,b,\dots)$. Daher ist $\hat{O} = o(\hat{A}, \hat{B}, \dots)$.

Nur wenn \hat{A} und \hat{B} kommutieren, können beide Observablen gleichzeitig scharfe, eindeutige Messwerte ergeben.

7.4 Dirac-Notation

7.4.1 Zustände, Vektoren

Wir betrachten einen gewöhnlichen Vektor \vec{A} im \mathbb{R}^2 . In den Basen \vec{e}_x, \vec{e}_y bzw. \vec{e}'_x, \vec{e}'_y kann dieser Vektor durch seine Komponenten A_x, A_y bzw. A'_x, A'_y dargestellt werden.

$$\begin{aligned}
 \vec{A} &= A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y = A'_x \vec{e}'_x + A'_y \vec{e}'_y \\
 &= \langle \vec{e}_x | \vec{A} \rangle \vec{e}_x + \langle \vec{e}_y | \vec{A} \rangle \vec{e}_y = \langle \vec{e}'_x | \vec{A} \rangle \vec{e}'_x + \langle \vec{e}'_y | \vec{A} \rangle \vec{e}'_y.
 \end{aligned} \tag{428}$$

In Analogie betrachten wir Wellenfunktionen als Vektoren im **Hilbertraum** (Raum der quadratintegriblen Funktionen). Operatoren sind lineare Transformationen in diesem Raum. Das Skalarprodukt im Hilbertraum wurde als Integral definiert und besitzt die üblichen Eigenschaften eines Skalarproduktes.

Wir wollen nun einen beliebigen Zustand im Hilbertraum durch $|\zeta(t)\rangle$ bezeichnen. Dieser Zustand kann nun in verschiedenen Basen ausgedrückt werden.

1. Die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ ist der Koeffizient der Entwicklung von $|\zeta(t)\rangle$ in der Basis der Ortseigenfunktionen $|x\rangle$ des Operators \hat{x} mit dem Eigenwert x :

$$\psi(x, t) = \langle x | \zeta(t) \rangle. \tag{429}$$

2. Die Wellenfunktion $\phi(p, t)$ im Impulsraum ist der Koeffizient der Entwicklung von $|\zeta(t)\rangle$ in der Basis der Impulseigenfunktionen $|p\rangle$ des Operators \hat{p} mit dem Eigenwert p :

$$\phi(p, t) = \langle p | \zeta(t) \rangle. \tag{430}$$

3. $|\zeta(t)\rangle$ kann auch durch die Basis der Energieeigenfunktionen $|n\rangle$ des Operators \hat{H} mit dem Eigenwert E_n beschrieben werden

$$c_n(t) = \langle n | \zeta(t) \rangle. \tag{431}$$

Ein und derselbe Zustand kann also durch verschieden äquivalente Formulierungen beschrieben werden

$$\psi(x, t) = \int \phi(p, t) \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(x). \quad (432)$$

7.4.2 Operatoren

Operatoren sind lineare Transformationen, die einen Vektor in einen anderen überführen

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle \quad (433)$$

In Komponentenschreibweise

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_n a_n |e_n\rangle \\ |\beta\rangle &= \sum_n b_n |e_n\rangle \end{aligned} \quad (434)$$

lautet die Transformationsgleichung

$$\begin{aligned} \sum_n b_n |e_n\rangle &= \hat{Q} \sum_n a_n |e_n\rangle \\ \sum_n b_n \langle e_m | e_n \rangle &= \sum_n a_n \underbrace{\langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle}_{Q_{mn}} \end{aligned} \quad (435)$$

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n. \quad (436)$$

Dies ist die Standardmatrizenmultiplikation mit den Matrixelementen des Operators.

7.4.3 Skalarprodukt

Nach Dirac wird das Skalarprodukt als Klammer (bracket = bra - ket) geschrieben $\langle \alpha | \beta \rangle$.

Der Ausdruck $|\beta\rangle$ bezeichnet gewöhnliche Vektoren in einem Vektorraum und wird **ket** genannt. Was genau ist dann **bra**: $\langle \alpha |$?

Sobald bra auf ein ket angewandt wird, ergibt sich das Skalarprodukt.

1. In einem Funktionenraum ist bra eine Anweisung zum Integrieren

$$\langle \alpha | \dots = \int f^*[\dots] dx. \quad (437)$$

2. In einem endlich dimensionalen Vektorraum \mathbb{R}^n mit Spaltenvektoren

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (438)$$

ist bra ein Zeilenvektor

$$\langle \alpha | = (a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*) \quad (439)$$

Die Menge aller bras bildet einen weiteren Vektorraum, den **Dualraum**.

7.4.4 Projektionsoperatoren

Ist $|\alpha\rangle$ ein normierter Vektor, dann pickt der Operator

$$\hat{P} = |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (440)$$

den Anteil eines beliebigen Operators entlang von $|\alpha\rangle$ heraus.

$$\hat{P}|\beta\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle. \quad (441)$$

\hat{P} wird **Projektionsoperator** genannt.

Ist $|e_n\rangle$ eine orthonormierte Basis, dann gilt

$$\hat{1} = \sum_n |e_n\rangle\langle e_n|. \quad (442)$$

Ist $|e_z\rangle$ eine orthonormierte kontinuierliche Basis, dann gilt

$$\hat{1} = \int |e_z\rangle\langle e_z|. \quad (443)$$

8 Drehimpuls

8.1 Vertauschungsrelationen, Drehungen

Wir definieren den Bahndrehimpulsoperator in Analogie zur klassischen Mechanik

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}, \\ \hat{L}_i &= \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k,\end{aligned}\quad (444)$$

mit dem total antisymmetrischen Tensor ϵ_{ijk} .

Durch Nachrechnen kann man folgende Vertauschungsrelationen zeigen

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (445)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{x}_k, \quad (446)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{p}_k. \quad (447)$$

8.2 $\mathfrak{su}(2)$ Lie-Algebra

Die $\mathfrak{su}(2)$ Lie-Algebra lautet

$$[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk} T_k, \quad (448)$$

mit dem total antisymmetrischen Tensor ϵ_{ijk} .

Folgende Objekte sind Beispiele für Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ -Algebra:

1. 3-dimensionale Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$:

Die Generatoren von Drehungen im 3-dimensionalen Raum lauten:

$$T_i := \frac{1}{\hbar} L_i, \quad (449)$$

$$L_1 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_3 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (450)$$

$\Rightarrow e^3$ dim. Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$ -Algebra = 3-dim. Darstellung der $\mathfrak{SO}(3)$.
Das deutet auf eine enge Verbindung von $\mathfrak{SO}(3)$ und $\mathfrak{SU}(2)$ hin!

2. 2-dimensionale Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$:

Die **Pauli-Matrizen** lauten

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (451)$$

$T_i = \frac{\sigma_i}{2}$ erfüllt die $\mathfrak{su}(2)$ -algebra in Eq.(448).

Es gilt: $e^{\mathfrak{su}(2)}$ -dim. Darstellung der $\mathfrak{su}(2) = SU(2)$: d.h. spezielle, unitäre 2×2 Matrizen

$$SU(2) = \{U : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2 \text{ linear} \mid \det U = 1, U^\dagger U = 1\}. \quad (452)$$

3. Drehimpuls in der klassischen Mechanik:

In der klassischen Mechanik haben wir die Poissonklammern wie folgt definiert

$$\{f, g\} := \sum_{k=1}^s \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial q_k} \right). \quad (453)$$

Damit erhielten wir für die Drehimpulse

$$\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k. \quad (454)$$

4. ∞ -dimensionale Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$:

In der Quantenmechanik beschreiben wir den Drehimpuls durch einen Drehimpulsoperator, welcher wie folgt definiert ist:

$$\hat{\vec{L}} := \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{\nabla}} \equiv \hat{L}_i = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{\partial}_k. \quad (455)$$

Die Drehimpulsoperatoren \hat{L}_i erfüllen

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar L_k.$$

$T_i = L_i/\hbar$ erfüllt damit die $\mathfrak{su}(2)$ Algebra.

Es sieht also wieder so aus, als ob der Übergang 'klassische Mechanik' \Rightarrow 'Quantenmechanik' durch das Ersetzen der Poisson-Klammern mit dem Kommutator erfolgt (und einem zusätzlichen Faktor $i\hbar$).

8.3 Drehungen

Satz: Der Drehimpulsoperator \hat{L} ist die Erzeugende von Drehungen, d.h. der unitäre Operator

$$U_{\delta\vec{\varphi}} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right] \approx 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L} \quad (456)$$

erzeugt Drehungen.

Beweis:

i) Die Unitarität ist wegen der Hermitizität von \hat{L} offensichtlich.

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\hat{L}_i\phi) &= \epsilon_{ijk} \int \psi^*(\hat{x}_j\hat{p}_k\phi) = \epsilon_{ijk} \int (x_j\psi)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \phi \\ &= -\frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} \int \frac{\partial}{\partial x_k} (x_j\psi)^* \phi = -\frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijk} \int (\delta_{kj} + x_j \frac{\partial}{\partial x_k}) \psi^* \phi \\ &= + \int (x_j \epsilon_{ijk} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi)^* \phi = \int (\hat{L}_i\psi)^* \phi. \end{aligned} \quad (457)$$

ii) U angewendet auf eine Wellenfunktion ergibt die Wellenfunktion am gedrehten Ort.

$$U_{\delta\vec{\varphi}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} + \delta\vec{\varphi} \times \vec{x}) = \psi(\vec{x}'). \quad (458)$$

Wie sehen nun Operatoren im gedrehten System aus?

Ausgehend von

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi(x) &= \phi(x), \\ U\hat{A}U^\dagger U\psi(x) &= U\phi(x), \\ \hat{A}'\psi(x') &= \phi(x'), \end{aligned} \quad (459)$$

finden wir den rotierten Operator

$$\hat{A}' = U\hat{A}U^\dagger. \quad (460)$$

Entwickeln wir diese Relation bis zur ersten Ordnung in $\delta\varphi$ so finden wir

$$\hat{A}' = \hat{A} + \frac{i}{\hbar}\delta\varphi_l[\hat{L}_l, \hat{A}]. \quad (461)$$

Spezialfälle:

- i) \hat{A} ist ein **skalarer** (drehinvarianter) Operator.
Dann ist $\hat{A}' = \hat{A}$ und somit

$$[\hat{L}_i, \hat{A}] = 0, i = 1, 2, 3. \quad (462)$$

Beispiele: drehinvarianter Hamilton-Operator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$, \hat{L}^2 und \hat{p}^2 .

- ii) \hat{A} ist ein **Vektoroperator**.

Dann transformiert \hat{A} unter Rotationen genauso wie der Ortsvektor, d.h.

$$\hat{A}' = \hat{A} + \delta\vec{\varphi} \times \hat{A} \quad (463)$$

und somit

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{A}_k, i = 1, 2, 3. \quad (464)$$

Beispiele: \hat{L} , \hat{p} und \hat{x} .

8.4 Eigenwerte des Drehimpulsoperators

Im folgenden benutzen wir nur die algebraischen Eigenschaften der Drehimpulsoperatoren, daher gelten die folgenden Aussagen nicht nur für Drehimpuls sondern auch für Spin.

Da die einzelnen Komponenten des Drehimpulses nicht kommutieren, kann auch kein gemeinsames Basissystem gefunden werden.

Man kann aber zeigen, dass

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\ &= 0 + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\ &= i\epsilon_{yxz}(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y) + i\epsilon_{zxy}(\hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) \\ &= i(\epsilon_{yxz} + \epsilon_{zxy})(\hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) = 0. \end{aligned} \quad (465)$$

Allgemein gilt

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad (466)$$

und damit kann man z.B. gemeinsame Eigenfunktionen von \hat{L}^2 und \hat{L}_z bestimmen.

Zunächst definieren wir wieder zwei Leiteroperatoren

$$\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \quad (467)$$

Die Leiteroperatoren besitzen folgende Eigenschaften:

•

$$\hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp. \quad (468)$$

•

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = i\hbar\hat{L}_y \pm \hbar\hat{L}_x = \pm\hbar\hat{L}_\pm. \quad (469)$$

•

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = -2i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = 2\hbar\hat{L}_z. \quad (470)$$

•

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0. \quad (471)$$

•

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar\hat{L}_z. \quad (472)$$

•

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \\ &= \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_z + \hat{L}_z^2. \end{aligned} \quad (473)$$

Nun sei ψ_{l_z} eine Eigenfunktion von \hat{L}_z

$$\hat{L}_z\psi_{l_z} = l_z\psi_{l_z}. \quad (474)$$

Mit obigen Eigenschaften folgt daraus

$$\begin{aligned} \hat{L}_z\hat{L}_\pm\psi_{l_z} &= \hat{L}_\pm\hat{L}_z\psi_{l_z} \pm \hbar\hat{L}_\pm\psi_{l_z} \\ &= (l_z \pm \hbar)\hat{L}_\pm\psi_{l_z}. \end{aligned} \quad (475)$$

D.h. wenn ψ_{l_z} eine Eigenfunktion von \hat{L}_z zum Eigenwert l_z ist, dann ist $\hat{L}_\pm\psi_{l_z}$ auch eine Eigenfunktion von \hat{L}_z zum Eigenwert $(l_z \pm \hbar)$. Mit anderen Worten

\hat{L}_\pm erhöht/erniedrigt den Eigenwert l_z um \hbar , daher werden diese Operatoren auch als **Leiteroperatoren** bezeichnet.

Von nun an bezeichnen wir die gemeinsamen Eigenfunktionen von \hat{L}^2 und \hat{L}_z mit ψ_{lm} und wir führen folgende allgemeine Notation ein:

$$\hat{L}^2 \psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm}, l \geq 0, \quad (476)$$

$$\hat{L}_z \psi_{lm} = \hbar m \psi_{lm}. \quad (477)$$

Im folgenden bestimmen wir die möglichen Werte von l und m .

- Wir haben bereits gesehen: \hat{L}_\pm erhöht/erniedrigt m um 1.
- $(\hat{L}_\pm \psi_{lm})$ ist Eigenfunktion von \hat{L}^2 zumselben Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ wie ψ_{lm} :

$$\hat{L}^2(\hat{L}_\pm \psi_{lm}) = \hat{L}_\pm(\hat{L}^2 \psi_{lm}) = \hbar^2 l(l+1) \hat{L}_\pm \psi_{lm}, \quad (478)$$

- Normierung:

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_\pm \psi_{lm}, \hat{L}_\pm \psi_{lm} \rangle &= \langle \psi_{lm}, \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm \psi_{lm} \rangle \\ &= \langle \psi_{lm}, (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z) \psi_{lm} \rangle \\ &= \hbar^2 (l(l+1) - m^2 \mp m) \langle \psi_{lm}, \psi_{lm} \rangle. \end{aligned} \quad (479)$$

Nehmen wir an, dass ψ_{lm} normiert ist, dann folgt daraus

$$\hat{L}_\pm \psi_{lm} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{l, m \pm 1} \quad (480)$$

- Da die Norm nicht negativ sein kann, gilt

$$l(l+1) - m^2 \mp m \geq 0. \quad (481)$$

D.h.

$$\text{für } m > 0 : l(l+1) \geq m(m+1),$$

$$\text{für } m < 0 : l(l+1) \geq m(m-1) = -m(-m+1) = |m|(|m|+1),$$

oder zusammenfassend $l(l+1) \geq |m|(|m|+1)$, d.h. $l \geq |m|$.

15. Vorlesung: Dienstag 28.11.2023
Schwabl;

- Nun sei l fest und M der maximale Wert von m . Dann muss gelten

$$\hat{L}_+ \psi_{lM} = 0. \quad (482)$$

Aus obiger Normierung Bedingung folgt dann

$$0 = \langle \hat{L}_+ \psi_{lM}, \hat{L}_+ \psi_{lM} \rangle = \hbar^2(l(l+1) - M(M+1)) \langle \psi_{lM}, \psi_{lM} \rangle \quad (483)$$

und damit $M = l$.

- Nun sei l fest und μ der minimale Wert von m . Dann muss gelten

$$\hat{L}_- \psi_{l\mu} = 0. \quad (484)$$

Aus obiger Normierung Bedingung folgt dann

$$0 = \langle \hat{L}_- \psi_{l\mu}, \hat{L}_- \psi_{l\mu} \rangle = \hbar^2(l(l+1) - \mu(\mu-1)) \langle \psi_{l\mu}, \psi_{l\mu} \rangle. \quad (485)$$

und damit $\mu = -l$.

- Ausgehend von ψ_l kann man rekursiv alle Werte von m gewinnen:

$$\psi_l, \hat{L}_- \psi_l, \hat{L}_-^2 \psi_l, \dots \quad (486)$$

Um von l durch k ganzzahlige Schritte auf $-l$ zu gelangen, muss

$$\begin{aligned} l - k &= -l \\ l &= \frac{k}{2}. \end{aligned} \quad (487)$$

Es gibt also folgende Möglichkeiten für l

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad , \quad l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (488)$$

und für m

$$m = l, l-1, \dots, -l+1, -l. \quad (489)$$

8.5 Kugelkoordinaten

In drei Dimensionen lautet die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t) \quad (490)$$

mit dem Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (491)$$

Ist das Potential von der Zeit unabhängig, dann kann die Zeitabhängigkeit wieder absepariert werden und man findet

$$\Psi_n(\vec{x}, t) = \psi_n(\vec{x}) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}, \quad (492)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right] \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x}). \quad (493)$$

Aus der Elektrodynamik kennen wir die Darstellung des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (494)$$

Für die Drehimpuls-Operatoren erhalten wir in Kugelkoordinaten

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (495)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (496)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (497)$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (498)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (499)$$

Damit lautet der Laplace-Operator

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (500)$$

8.6 Drehimpulseigenfunktionen

Die Eigenwertgleichungen der Drehimpulseigenfunktionen lauten

$$\frac{i}{\hbar} L_z \psi_{lm} = \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{lm} = im \psi_{lm}, \quad (501)$$

$$-\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 \psi_{lm} = \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi_{lm} = -l(l+1) \psi_{lm}. \quad (502)$$

Wir starten mit einem Separationsansatz

$$\psi_{lm}(\theta, \phi) = \Phi(\phi) \Theta(\theta). \quad (503)$$

Damit finden wir aus \hat{L}_z -Eigenwert-Gleichung

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}. \quad (504)$$

Die Stetigkeit der Wellenfunktion verlangt $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, d.h. $e^{2im\pi} = 1$ und somit muss m und damit auch l ganzzahlig sein.⁴

Damit vereinfacht sich die \hat{L}^2 -Eigenwert-Gleichung zu

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] \Theta(\theta) = 0. \quad (505)$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind die **Kugelfunktionen**

$$\psi_{lm} = Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (506)$$

Die **assozierten Legendre-Funktionen** sind dabei wie folgt definiert

$$P_{lm}(x) := (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad (507)$$

mit den **Legendre-Polynomen**

$$P_l(x) := \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l. \quad (508)$$

Eigenschaften der Kugelfunktionen

⁴Aus der algebraischen Struktur der Drehimpulsoperatoren folgt, dass l ganz- oder halbzahlig sein muss. Stellt man den Drehimpulsoperator als Differentialoperator im 3-dimensionalen Raum dar (mit anderen Worten als Bahndrehimpuls), dann findet man, dass für die Lösungen nur ganzzahlige l erlaubt sind. Später werden wir sehen, dass die halbzahligen Werte für l im **Spin** realisiert sind.

1. Orthogonalität

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}(\theta, \phi)^* Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (509)$$

2. Vollständigkeit

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta', \phi')^* Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi'). \quad (510)$$

3. Additionstheorem

$$\sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\theta', \phi')^* Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \Theta). \quad (511)$$

mit $\cos \Theta := \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi')$.

4. Symmetrie in m

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}(\theta, \phi)^*. \quad (512)$$

5. Verhalten unter Paritätstransformationen

$$\hat{P} Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (513)$$

Die Y_{lm} sind also Eigenfunktionen des Paritätsoperators.

6. Beispiele

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}, \quad Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}, \end{aligned} \quad (514)$$

9 Zentralpotential

Schwabl, Kapitel 6

Wir betrachten ein radialsymmetrisches Potential in 3 Raum-Dimensionen und müssen nun folgendes Problem lösen

$$\Psi_n(\vec{x}, t) = \psi_n(\vec{x})e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}, \quad (515)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right] \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x}), \quad (516)$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (517)$$

Äquivalent dazu ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_n(r, \theta, \phi) = E_n \psi_n(r, \theta, \phi). \quad (518)$$

Wir machen wieder einen Separationsansatz

$$\psi_n(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (519)$$

und erhalten damit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E_n R(r). \quad (520)$$

Bemerkungen:

1. Das sieht fast wie eine 1-dimensionale Schrödinger-Gleichung aus - bis auf den Term linear in der partiellen Ableitung.

Wir definieren

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (521)$$

und erhalten damit

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad (522)$$

und somit für die radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} \right) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)}_{V_{eff}(r)} \right] u(r) = E_n u(r). \quad (523)$$

Dies ist nun die Form der 1-dimensionalen Schrödinger-Gleichung mit einem effektiven Potential - analog zur klassischen Mechanik.

2. Aus der Normierbarkeit der Zustände folgt

$$\int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 \propto \int_0^\infty dr r^2 \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty \quad (524)$$

und damit

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u(r)| \leq \frac{a}{r^{\frac{1}{2} + \epsilon}} \quad (525)$$

mit $\epsilon > 0$. $u(r)$ muss also im Unendlichen stärker als $1/\sqrt{r}$ abfallen.

3. Verhalten bei $r = 0$: es gilt

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta^3(\vec{x}) \quad (526)$$

Damit kann $u(r)/r$ nur eine Lösung sein, wenn $u(r)$ bei $r = 0$ verschwindet. Verschwindet $u(r)$ dann entsteht in der Schrödinger-Gleichung eine delta-Funktion, die nur durch delta-förmiges Potential kompensiert werden könnte.

4. \hat{H} ist als Skalar invariant unter Drehungen, d.h. $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 = [\hat{H}, \hat{L}_2]$, d.h. \hat{H} , \hat{L}_z und \hat{L}_2 sind gleichzeitig diagonalisierbar. Damit funktioniert der Separationsansatz

5. Dominiert bei abnehmenden Abständen ($r \rightarrow 0$) der Zentrifugalterm gegenüber $(V(r) - E)$, z.B. beim Coulompotential oder Kastenpotential, so lautet die Schrödinger-Gleichung näherungsweise

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u(r) = 0. \quad (527)$$

Diese Differentialgleichung 2. Ordnung besitzt die allgemeine Lösung

$$u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}. \quad (528)$$

Aufgrund $u(0) = 0$ muss $B = 0$ sein.

Für den gesamten r -Bereich kann man daher allgemein

$$u(r) = r^{l+1}(a_0 + a_1 r + \dots) \quad (529)$$

ansetzen.

6. Für den Fall $r \rightarrow \infty$ kann man V_{eff} in der Schrödinger-Gleichung vernachlässigen und man erhält

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} &= Eu(r) \\ \frac{d^2 u}{dr^2} &= \frac{2m(-E)}{\hbar^2} u(r), \end{aligned} \quad (530)$$

welches durch $\exp(\pm \kappa r)$ gelöst wird, mit

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}. \quad (531)$$

Damit die Wellenfunktion normierbar ist, kommt nur der exponentiell abfallende Term in Frage

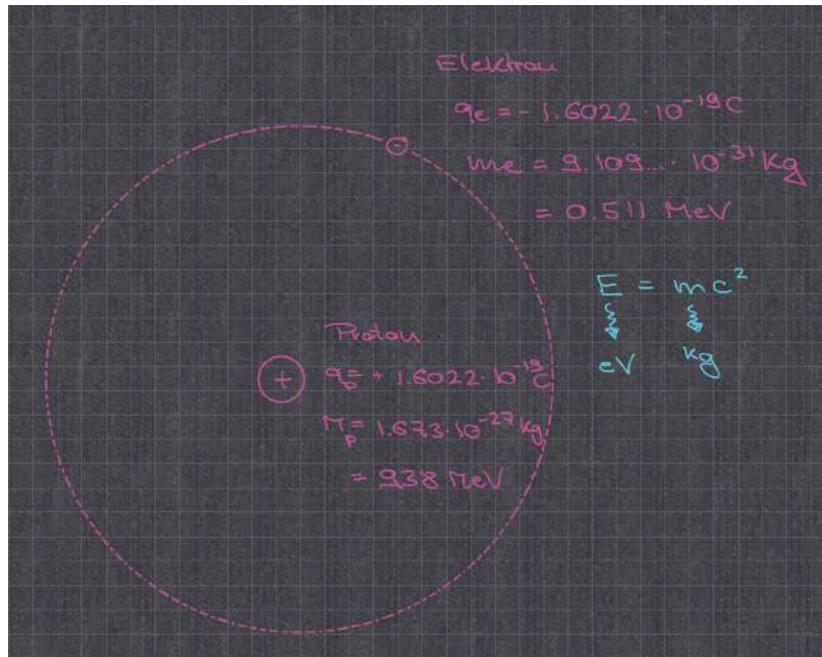
$$u(r) = Ce^{-\kappa r} \text{ für } r \rightarrow \infty. \quad (532)$$

Diese Ergebnis legt nahe in der Schrödinger-Gleichung die dimensionslose Variable $\rho = \kappa r$ einzuführen.

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} \right) + \frac{\kappa^2 \hbar^2 l(l+1)}{2m\rho^2} + V(\rho/\kappa) \right] u(\rho/\kappa) &= Eu(\rho/\kappa) \\ \left[E \left(\frac{d^2}{d\rho^2} \right) + \frac{-El(l+1)}{\rho^2} + V(\rho/\kappa) \right] u(\rho/\kappa) &= Eu(\rho/\kappa) \\ \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{V(\rho/\kappa)}{|E|} - 1 \right] u(\rho/\kappa) &= 0. \end{aligned} \quad (533)$$

10 Das Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Proton als Kern und einem Elektron in der Hülle.



- Wasserstoff ist das häufigste Element im Universum (70% Massenanteil - auf der Erde nur ca. 1% Massenanteil)
- Das Elektron befindet sich im elektrostatischen Potential des Kernes (Coulomb-Potential)

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e q_p Z}{r}, \quad (534)$$

mit der elektronladung $q_e = -e$, der Protonenladung $q_p = +e$ und der Kernladungszahl Z . Diese Gleichung gilt im SI-System.

Im weiter ersetzen wir $e^2/(4\pi\epsilon_0)$ durch e_0^2 - das entspricht dem Gaußschen CGSSystem oder den Elektrostatischen Einheiten

Wir betrachten also folgendes Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{e_0^2 Z}{r} \quad (535)$$

und wir definieren weiter

$$\frac{V}{|E|} =: -\frac{\rho_0}{\rho} \quad (536)$$

mit

$$\rho_0 = -\frac{V}{|E|}\rho = \frac{e_0^2 Z}{|E|}\kappa = \frac{e_0^2 Z}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{|E|}} \quad (537)$$

Damit lautet die eindimensionale Schrödinger-Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u(\rho) = 0. \quad (538)$$

Nach obigen Überlegungen zur Asymptotik machen wir für $u(\rho)$ folgenden Ansatz:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho). \quad (539)$$

Die erste Ableitung ergibt

$$\begin{aligned}\frac{du(\rho)}{d\rho} &= (l+1)\rho^l e^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}e^{-\rho}\omega(\rho) + \rho^{l+1}e^{-\rho}\frac{d\omega(\rho)}{d\rho} \\ &= e^{-\rho}\rho^{l+1}\left[\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\omega(\rho) + \frac{d\omega(\rho)}{d\rho}\right].\end{aligned}\quad (26)$$

Die zweite Ableitung ergibt

$$\begin{aligned}\frac{d^2u(\rho)}{d^2\rho} &= -e^{-\rho}\rho^{l+1}\left[\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\omega(\rho) + \frac{d\omega(\rho)}{d\rho}\right] \\ &\quad + e^{-\rho}\rho^{l+1}\frac{l+1}{\rho}\left[\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\omega(\rho) + \frac{d\omega(\rho)}{d\rho}\right] \\ &\quad + e^{-\rho}\rho^{l+1}\left[-\frac{l+1}{\rho^2}\omega(\rho) + \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{d\omega(\rho)}{d\rho} + \frac{d^2\omega(\rho)}{d^2\rho}\right] \\ &= e^{-\rho}\rho^{l+1}\left[\frac{d^2\omega(\rho)}{d^2\rho} + \frac{d\omega(\rho)}{d\rho}\left\{\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right) + \frac{l+1}{\rho} - 1\right\}\right. \\ &\quad \left. - \left\{-\frac{l+1}{\rho^2} + \left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)^2\right\}\omega(\rho)\right].\end{aligned}\quad (27)$$

Damit kann die Schrödingergleichung in Gleichung (24) weiter umgeformt werden in

$$\begin{aligned}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2(l+1-\rho)}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l+1}{\rho^2} + \frac{(l+1-\rho)^2}{\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right]\omega(\rho) &= 0, \\ \left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{(l+1-\rho)^2}{\rho} - \frac{(l+1)^2}{\rho} + \rho_0 - \rho\right]\omega(\rho) &= 0, \\ \left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} + \frac{(l+1)^2 - 2(l+1)\rho + \rho^2}{\rho} - \frac{(l+1)^2}{\rho} + \rho_0 - \frac{\rho^2}{\rho}\right]\omega(\rho) &= 0.\end{aligned}\quad (28)$$

Wir erhalten schließlich

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d}{d\rho} - 2(l+1) + \rho_0\right]\omega(\rho) = 0.\quad (29)$$

2.3 Lösungsansatz I

Für $\omega(\rho)$ setzen wir eine Potenzreihe an

$$\omega(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k.\quad (30)$$

Eingesetzt in Gleichung (29) ergibt das

$$\begin{aligned}0 &= \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)a_k \rho^{k-1} + 2(l+1-\rho)ka_k \rho^{k-1} - 2(l+1)a_k \rho^k + \rho_0 a_k \rho^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} [(k-1) + 2(l+1)]ka_k \rho^{k-1} + [-2k - 2(l+1) + \rho_0]a_k \rho^k.\end{aligned}\quad (31)$$

Wegen linearer Unabhängigkeit müssen die Koeffizienten von jeder Potenz von ρ^k verschwinden,

$$0 = [(k) + 2(l+1)](k+1)a_{k+1} + [-2k - 2(l+1) + \rho_0]a_k.\quad (32)$$

Was zu folgender Rekursionsrelation führt

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+2l+2)(k+1)}a_k.\quad (33)$$

17. Vorlesung: Dienstag 5.12.2023 - STREIK
17. Vorlesung: Donnerstag 7.12.2023
Schwabl;
Start after Eq. 38

Für große k lautet das Verhältnis aufeinanderfolgender Koeffizienten

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2}{k} \quad k \rightarrow \infty. \quad (34)$$

Vergleicht man dies mit der Taylorentwicklung von $e^{2\rho}$

$$e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2\rho)^k \quad (35)$$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2^{k+1}}{(k+1)!} \frac{k!}{2^k} = \frac{2}{k+1} \rightarrow \frac{2}{k} \quad k \rightarrow \infty. \quad (36)$$

So findet man, dass $\omega(\rho)$ sich wie $e^{2\rho}$ verhält. Damit würde $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho)$ sich wie e^ρ verhalten, also divergieren. Damit das nicht passieren kann muss die Reihe in Gleichung (30) bei endlichem N abbrechen, d.h. $a_{N+1} = 0$. Dies kann dann der Fall sein, wenn

$$\rho_0 = 2(N+l+1) = 2n. \quad (37)$$

Der Wert $N = 0, 1, 2, \dots$ wird als radiale Quantenzahl bezeichnet, $n = 1, 2, \dots$ wird als Hauptquantenzahl bezeichnet. Löst man Gleichung (23) nach der Energie auf (beachte $E < 0$ wegen Bindungszustand), so ergibt sich

$$E = -\frac{2me_0^4 Z^2}{\rho_0^2 \hbar^2} = -\frac{me_0^4 Z^2}{2n^2 \hbar^2} = E_n. \quad (38)$$

Damit haben wir aus der Nichtdivergenz der radialen Wellenfunktion die Quantisierung der Energie abgeleitet!

Mathematische Spielerei oder Realität?

Welches Spektrum sagt Gleichung (39) vorher?

- Für den Grundzustand des Wasserstoffatoms ($Z = 1$ und $n = 1$) ergibt sich

$$E_0 = -\frac{me_0^4}{2\hbar^2} = -13.6eV. \quad (39)$$

- Die Sommerfeld Feinstrukturkonstante ist definiert als

$$\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (40)$$

Damit kann Gleichung (39) umgeschrieben werden in

$$E_n = -\underbrace{\frac{me^2}{2}}_{511 \text{ keV}} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}. \quad (41)$$

- Der niedrigste mögliche Wert von n ist gleich 1. Hierzu müssen N und l gleich Null sein. Für $l = 0$ gibt es auch nur einen möglichen Wert von der L_z -Quantenzahl m , nämlich $m = 0$. D.h. es gibt genau einen Grundzustand.

Für $n = 2$ gibt es zwei Möglichkeiten für N :

- $N=2, l = 0, m = 0$ - 1 Zustand
- $N=1, l = 1, m = -1, 0, +1$ - 3 Zustände

also insgesamt 4 Zustände.

Für $n = 3$ gibt es drei Möglichkeiten für N :

- $N=3, l = 0, m = 0$ - 1 Zustand
- $N=2, l = 1, m = -1, 0, +1$ - 3 Zustände
- $N=1, l = 2, m = -2, -1, 0, +1, +2$ - 5 Zustände

also insgesamt 9 Zustände...

- Allgemein kann die Entartung wie folgt bestimmt werden: bei gegebenen n , kann l folgende Werte annehmen: $l = 0, 1, \dots, n - 1$. Weiter gehören zu jedem Wert von l $2l + 1$ verschiedene Werte von m . Wir erhalten also

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (42)$$

verschiedene Zustände zur Energie E_n .

- Experiment: Mit Gleichung (39) können die experimentell beobachteten Spektrallinien der Lyman-Reihe ($E_n \rightarrow E_1$, 91 - 121 nm), der Balmer-Reihe ($E_n \rightarrow E_2$, 656 - 383 nm), der Paschen-Reihe ($E_n \rightarrow E_3$, 1875 - 820 nm),... erklärt werden.



Figure 1: Balmer Reihe - Bild von WIKIPEDIA

Balmer Formel 1885 vom Schweizer Physiker Johann Jakob Balmer entdeckt.

- In den Argumenten der radialen Wellenfunktion taucht weiterhin der Parameter κ auf, was in der letzten Vorlesung wie folgt definiert wurde

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)}. \quad (43)$$

Setzen wir darin die eben bestimmte Energie aus Gleichung (39) ein so erhalten wir

$$\kappa = \frac{mZe_0^2}{\hbar^2 n} = \frac{Z}{na_B}, \quad (44)$$

mit dem Bohrradius

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me_0^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad (45)$$

der als Indiz für die Ausdehnung eines Wasserstoffatoms angesehen werden kann.

2.4 Radiale Wellenfunktion

Die radiale Wellenfunktion $\omega(\rho)$ kann nun rekursiv bestimmt werden.

1. Start: $N = 0 \rightarrow \rho_0 = 2(l + 1)$, d.h. wir erhalten für $k = 0$

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{2(0 + l + 1) - 2(l + 1)}{(0 + 2l + 2)(0 + 1)} a_0 = 0. \\ \omega(\rho) &= a_0. \end{aligned} \quad (46)$$

2. $N = 1 \rightarrow \rho_0 = 2(l + 2)$, d.h. wir erhalten für $k = 0$

$$a_1 = \frac{2(0 + l + 1) - 2(l + 2)}{(0 + 2l + 2)(0 + 1)} a_0 = \frac{-1}{l + 1} a_0. \quad (47)$$

und für $k = 1$

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{2(1 + l + 1) - 2(l + 2)}{(1 + 2l + 2)(1 + 1)} a_0 = 0. \\ \omega(\rho) &= a_0 \left(1 - \frac{1}{l + 1} \rho \right). \end{aligned} \quad (48)$$

3.

Alternativ können Ergebnisse aus der Mathematik benutzt werden: **Laguerre Polynome** lösen die 1-dimensionale Schrödingergleichungen und sie sind eingehend studiert worden. *Siehe Übungen.* Die volle radiale Wellenfunktion kann dann geschrieben werden als

$$R(r) = R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3}} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r). \quad (49)$$

Die niedrigsten Anregungen der radialen Wellenfunktion lauten

$n = 1$ K-Schale

$l = 0$ s-orbital

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_B}} \quad (50)$$

$n = 2$ L-Schale

$l = 0$ s-orbital

$$R_{20}(r) = 2 \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_B} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_B}} \quad (51)$$

$l = 1$ p-orbital

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_B} e^{-\frac{Zr}{2a_B}} \quad (52)$$

$n = 3$ M-Schale

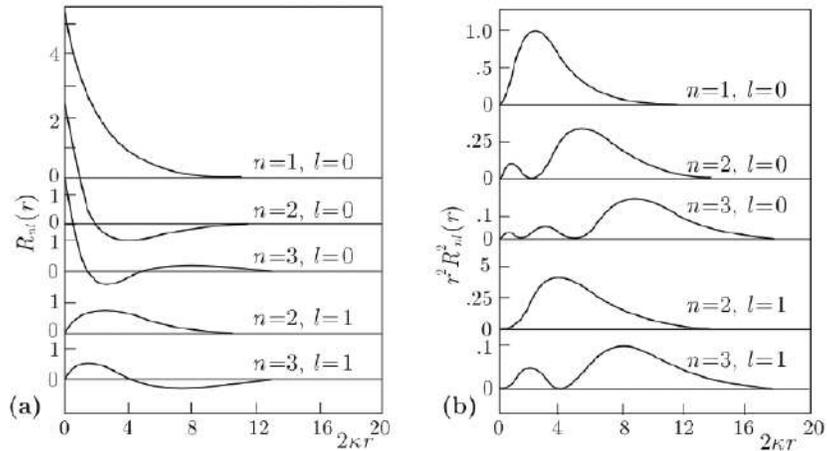


Fig. 6.3a,b. The radial wave function $R_{nl}(r)$ for the attractive Coulomb potential ($Z = 1$). (a) The radial wave function R_{nl} . (b) The radial probability density $r^2 R_{nl}^2$

Figure 2: Radialwellenfunktion - Bild aus Schwabl, QM

2.5 Zusammenfassung

$$\begin{aligned}
 \Psi(r, \theta, \phi) &= R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 &= \frac{\tilde{u}(r)}{r}Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 &= \frac{u(\rho)\kappa}{\rho}Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 &= \kappa\rho^l e^{-\rho}\omega(\rho)Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 &= \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3}}(2\kappa r)^l e^{-\kappa r}L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r)Y_{lm}(\theta, \phi).
 \end{aligned} \tag{53}$$

Energieniveaus

$$E_n = -\underbrace{\frac{mc^2}{2}}_{511 \text{ keV}} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \tag{54}$$

mit $n = N + l + 1$.

- a) $V = V(r)$, i.e. sphärisch symmetrisch \Rightarrow Energie unabhängig von m
 Rotationssymmetrischer Hamiltonian: $[H, L_i] = 0$, d.h. auch $[H, L_+]$ = 0.

$$H\psi_{lm} = E\psi_{lm}, \tag{55}$$

$$L_+ H\psi_{lm} = H L_+ \psi_{lm} = L_+ E\psi_{lm}, \tag{56}$$

d.h. $\psi_{lm+1} \propto L_+ \psi_{lm}$ ist Eigenfunktion zum selben Energieeigenwert wie ψ_{lm} .

- b) $V(r) \propto 1/r \Rightarrow$ Energie unabhängig von l - Lenz-Runge Vektor ist erhalten

$$\vec{A} = \frac{1}{2m} (\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{e_0^2}{r} \vec{x}. \tag{57}$$

Man findet Maxima der radialen Wellenfunktion bei $r_0 = n^2 a_B / Z$, d.h. der Grundzustand hat das Maximum bei a_B !

10.1 Realistisches Wasserstoffatom

Wir werden später sehen, dass unsere Behandlung noch wie folgt abgewandelt werden muss

1. Zweikörpersystem: Das Zweikörpersystem Proton-Elektron kann auf Schwerpunkt und Relativkoordinaten umgewandelt werden (siehe Kapitel 10.2) und somit auf ein Ein-Körperproblem mit der reduzierten Masse

$$\mu = \frac{m_e m_P}{m_e + m_P} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_P}} \approx 1.0005 m_e. \quad (540)$$

Beim H-Atom beträgt die Abweichung also nur ca. 0.5 Promille. Beim Bindungszustand Positronium (Elektron und Positron) findet man hingegen $\mu = 0.5 m_e$.

2. Relativistische Effekte: die Schrödinger-Gleichung ist eine nicht-relativistische Gleichung: ausgehend von der nicht-relativistischen Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (541)$$

erhält man mit den Ersetzungen

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{aligned} \quad (542)$$

und angewendet auf eine Wellenfunktion ψ die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) \right] \psi. \quad (543)$$

Wir sehen, dass in der Schrödinger-Gleichung Ort und Zeit prinzipiell unterschiedlich behandelt werden: erste Ableitung in der Zeit und

zweite Ableitung im Ort, d.h. diese Gleichung widerspricht klar dem Relativitätsprinzip.

In Kapitel 10.3 skizzieren wir, wie man relativistische Einteilchen-Gleichungen herleitet. Relativistische Korrekturen im Vergleich zur nicht-relativistischen Schrödinger-gleichung werden zu relativen Veränderungen der Energie von der Größenordnung α^2 führen - der sogenannten **Feinstruktur**. Insbesondere werden wir drei Effekte finden: **relativistische Korrektur der Elektronmasse**, **Darwin-Term** und die **Spin-Bahn-Kopplung**.

3. **Lamb-Verschiebung**: die ist eine Korrektur die aus der Quantenfeldtheorie entstammt, sie liefert eine relative Veränderung der Energie von der Größenordnung $\alpha^3 \ln \alpha$.
4. **Hyperfineinstruktur**: dieser Effekt entstammt der Wechselwirkung zwischen Elektron und dem Kernspin und ist um einen Faktor $m_e/m_p \approx 1/2000$ kleiner als die Feinstruktur.

10.2 Zweikörper-Problem

Der Hamiltonoperator eines 2-Körper-Problems lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2). \quad (544)$$

Wie in der klassischen Mechanik führen wir Schwerpunkts und Relativ koordinaten ein

$$\vec{x}_r = \vec{x}_1 - \vec{x}_2, \quad (545)$$

$$\vec{x}_S = \frac{m_1 \vec{x}_1 - m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}. \quad (546)$$

Die Schrödinger-Gleichung in Relativ-koordinaten lautet dann

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_S^2}{2M} + V(\vec{x}_r) \right] \psi(\vec{x}_r, \vec{x}_S) = E\psi(\vec{x}_r, \vec{x}_S), \quad (547)$$

mit der reduzierten Masse μ und der Gesamtmasse M

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (548)$$

$$M = m_1 + m_2. \quad (549)$$

Da das Potential nur von den Relativkoordinaten abhängt führen wir den Separationsansatz

$$\psi(\vec{x}_r, \vec{x}_S) = e^{i\vec{k}_S \vec{x}_S} \psi(\vec{x}_r), \quad (550)$$

durch und erhalten

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + V(\vec{x}_r) \right] \psi(\vec{x}_r) = \left(E - \frac{\hbar^2 \vec{k}_S^2}{2M} \right) \psi(\vec{x}_r), \quad (551)$$

also wieder ein Einkörper-Problem, wobei die Energie um einen trivialen Faktor E_S verschoben wird, und die Masse nicht-trivial zu μ geändert wird.

10.3 Relativistische Wellengleichungen

10.3.1 Klein-Gordon-Gleichung

Ausgehend von der relativistischen Energie-Impuls Beziehung

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (552)$$

erhält man mit den Ersetzungen

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{aligned} \quad (553)$$

und angewendet auf eine Wellenfunktion Φ die **Klein-Gordon-Gleichung**, die von Schrödinger (1925), Gordon (1926) und Klein (1927) gefunden wurde:

$$\Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi(t, \vec{x}) = (-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4) \Phi(t, \vec{x}). \quad (554)$$

Diese Gleichung kann umgeschrieben werden in

$$\boxed{\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \Phi = \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \Phi = 0}. \quad (555)$$

Nun werden Ort und Zeit symmetrisch behandelt. In der Quantenfeldtheorie-Vorlesung werden wir feststellen, dass die Klein-Gordon-Gleichung relativistische Teilchen mit Spin 0 beschreibt. Die Wellenfunktion Φ transformiert unter Lorentztransformationen, wie ein Lorentz-Skalar.

10.3.2 Maxwell-Gleichung

Die Wellen-Gleichung der relativistische Teilchen mit Spin 1 sind die bekannten Maxwell-Gleichungen die das masselose Photon beschreiben. Sie haben die gleiche Form wie die Klein-Gordon-Gleichung

$$\boxed{\square A^\mu = 0} . \quad (556)$$

Die Wellenfunktion A^μ transformiert unter Lorentztransformationen, wie ein Lorentz-Vektor.

10.3.3 Dirac-Gleichung

Dirac stürte sich sehr daran, dass die Klein-Gordon-Gleichung in der Zeit eine Differential-Gleichung zweiter Ordnung ist und somit sowohl $\psi(t_0)$ als auch $\dot{\psi}(t_0)$ als Anfangsbedingung benötigt. Daher machte er folgenden linearen Ansatz

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta m c^2 \right) \Psi = H \Psi} . \quad (557)$$

Diese Gleichung muss die relativistische Energie-Impuls-Beziehung erfüllen. Um dies zu testen, bestimmen wir $H^2 \Psi$:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha^i \partial_i + \beta m c^2 \right) \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha^j \partial_j + \beta m c^2 \right) \Psi \quad (558)$$

$$= \left[-\hbar^2 c^2 \alpha^i \alpha^j \partial_i \partial_j + \frac{\hbar m c^3}{i} (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i + m^2 c^4 \beta^2 \right] \Psi \quad (559)$$

$$= \left[-\hbar^2 c^2 \frac{\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i}{2} \partial_i \partial_j + \frac{\hbar m c^3}{i} (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i + m^2 c^4 \beta^2 \right] \Psi \quad (560)$$

$$\stackrel{!}{=} \left[-\hbar^2 c^2 \delta^{ij} \partial_i \partial_j + m^2 c^4 \right] \Psi . \quad (561)$$

D.h. α^i und β müssen folgende Relativen erfüllen

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij} , \quad (562)$$

$$\alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0 , \quad (563)$$

$$\beta^2 = 1 . \quad (564)$$

Für einfache Zahlen ist dies nicht möglich, aber Matrizen können diese Gleichungen erfüllen und man nennt α_i und β **Dirac-Matrizen**.

Beispiel: **Dirac Darstellung**; folgende Matrizen erfüllen Gl.(562-564):

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (565)$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (566)$$

Für die Pauli-Matrizen gilt

$$[\sigma^i, \sigma^j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma^k, \quad (567)$$

$$\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta^{ij}I_2. \quad (568)$$

From this we immediately see

$$(\sigma^i)^2 = I_2, \quad (569)$$

$$\sigma^i\sigma^j = i\epsilon^{ijk}\sigma^k \quad \text{for } i \neq j, \quad (570)$$

$$\text{Tr}(\sigma^i) = 0, \quad (571)$$

$$\det(\sigma^i) = -1. \quad (572)$$

und damit folgen Gl.(562-564).

Um die Dirac-Gleichung in einer Form zu schreiben, in der die Lorentzinvarianz offensichtlicher wird, multiplizieren wir Gl.(557) mit $-\beta/(\hbar c)$ von der rechten Seite

$$-i\beta\frac{\partial\Psi}{\partial ct} + \left(\frac{1}{i}\beta\alpha^k\partial_k + \frac{mc}{\hbar}\right)\Psi = 0. \quad (573)$$

Mit $\partial_0 = \partial/\partial(ct)$ und der Definition der **γ -Matrizen**

$$\gamma^0 := \beta, \quad (574)$$

$$\gamma^k := \beta\alpha^k, \quad (575)$$

wird die Dirac-Gleichung zu

$$\left(-i\gamma^\mu\partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right)\Psi = 0. \quad (576)$$

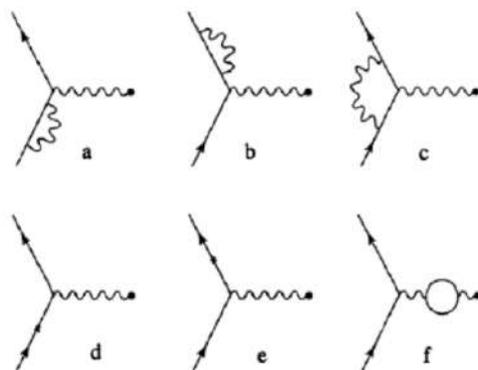
Wir werden finden, dass die Dirac-Gleichung relativistische Teilchen mit Spin $1/2$ beschreibt, und weiter, dass die Wellenfunktion ψ unter Lorentztransformationen wie ein Lorentz-Spinor transformiert. Dies ist ein neues Objekt, das mit den halbzahligen Darstellungen der Drehimpulsalgebra zusammenhängt. Objekte wie Lorentz-Skalar oder Lorentz-Vektor hängen mit den ganzzahligen Darstellungen der Drehimpulsalgebra zusammen.

10.3.4 Quantenfeldtheorie

Die drei behandelten, relativistischen Wellengleichungen (Klein-Gordon, Maxwell, Dirac) sind alles Ein-Teilchen-Gleichung, d.h. sie beschreiben nur ein einziges Teilchen. Bei hohen Energie werden alle diese Gleichungen unsinnige Ergebnisse liefern, weil dann Paarerzeugung möglich ist: hat man z.B. Photonen mit einer Energie von mehr als 2 mal 511 keV, dann kann sich das Photon in ein Elektron-Positron-Paar aufspalten.

Daher werden wir den Formalismus von Ein-Teilchen-Gleichungen auf Vielteilchen-Theorien erweitern müssen, den sogenannten **Quantenfeldtheorien**. Die Quantenfeldtheorie die Elektronen und Photonen beschreibt, heisst **Quantenelektrodynamik (QED)**.

Im H-Atom ist die Lamb-shift der erste QED Effekt der gemessen und erklärt wurde. Dieser Effekt wird durch folgende Diagramme beschrieben



The various higher-order graphs that contribute to the Lamb shift: (a) and (b) the electron self-energy graphs; (c) the vertex correction; (d) and (e) the electron mass counterterm; (f) the photon self-energy correction.

Jetzt erst mal wieder zur Schrödinger-Gleichung - nun mit Kopplung an das elektro-magnetische Feld.

11 Bewegung im elektro-magnetischen Feld

18. Vorlesung: Dienstag 12.12.2023
7, Schwabl;

11.1 Fundamentale Wechselwirkungen

Im Prinzip kennen wir 2 fundamentale Wechselwirkungen: die Gravitation und die elektromagnetische Wechselwirkung. Letztere beschreibt auch alle chemischen Reaktionen und Festkörperkräfte.

Wir werden zunächst zeigen, dass die Gravitation in der mikroskopischen Welt meist irrelevant ist

- j) Gravity is by far the weakest known force: the electric force between two protons is a factor of 10^{36} stronger than the gravitational force.

$$\frac{F_{electric}}{F_{gravity}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 G} \frac{q_1 q_2}{m_1 m_2} \quad (132)$$

$$= \frac{1}{4\pi \cdot 8.854187817 \cdot 10^{-12} C^2 N^{-1} m^{-2} \cdot 6.67408 \cdot 10^{-11} m^3 kg^{-1} s^{-2} \cdot \frac{(1.6021766208(98) \cdot 10^{-19} C)^2}{(1.672621898(21) \cdot 10^{-27} kg)^2}} \quad (133)$$

$$= 1.23559 \cdot 10^{36} \frac{Ns^2}{mkg} = 1.23559 \cdot 10^{36}. \quad (134)$$

If we consider electrons instead of protons (the mass of the electron is a factor of 1836 smaller) then we get for the ratio

$$\frac{F_{electric}}{F_{gravity}} = (1836)^2 \cdot 1.23559 \cdot 10^{36} = 4.16505 \cdot 10^{42}. \quad (135)$$

But macroscopic bodies are electrically neutral, while gravitational effects are always summing up.

In astrophysics one has many times gravity as the only relevant force.

In der mikroskopischen Welt gibt es noch zwei weitere fundamentale Kräfte. Die **starke Kraft** und die **schwache Kraft**, allerdings hat erstere eine Reichweite von $10^{-15}m$ und letztere von $10^{-18}m$, d.h. auf atomaren

Skalen sind diese nicht sichtbar und somit ist die elektro-magnetische Kraft die einzige relevante Kraft.

11.2 Hamilton-Operator

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Feld \vec{E} und \vec{B} .

Aus der Elektrodynamik kennen wir, dass \vec{E} und \vec{B} durch das Vektorpotential \vec{A} und das Skalarpotential Φ ausgedrückt werden kann.

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \Phi, \quad (577)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (578)$$

In der theoretischen Mechanik lautet die Hamilton-Funktion für das Teilchen

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right]^2 + e\Phi(\vec{x}, t) \quad (579)$$

Die Ersetzung des kanonischen Impulses \vec{p} durch $\vec{p} - e/c\vec{A}$ wird auch **minimale Kopplung** genannt.

Den Übergang zur Quantenmechanik machen wir, indem wir den Impuls durch den Impulsoperator ersetzen und den daraus entstehenden Hamilton-Operator auf eine Wellenfunktion anwenden. Die Felder \vec{A} und Φ behandeln wir erstmal als klassische Felder

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\Phi(\vec{x}, t) \right] \psi. \quad (580)$$

Multipliziert man das Quadrat aus, so ergibt sich der Mischterm

$$-\frac{\hbar e}{2imc} (\vec{\nabla} \vec{A} + \vec{A} \vec{\nabla}) \psi = \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A}(\vec{\nabla} \psi),$$

wenn wir Coulomb-Eichung ($\vec{\nabla} \vec{A} = 0$) benutzen. Damit lautet die Schrödinger-Gleichung in dieser Eichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi + \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A}(\vec{\nabla} \psi) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \psi + e\Phi(\vec{x}, t) \psi. \quad (581)$$

11.3 Konstantes Magnetfeld \vec{B}

Für ein Konstantes Magnetfeld $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$, lässt sich das Vektorpotential schreiben als

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x} \times \vec{B} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} yB_z - zB_y \\ zB_x - xB_z \\ xB_y - yB_x \end{pmatrix}.$$

Beweis!

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann das Koordinatensystem so gewählt werden, dass die z -Achse parallel zum Magnetfeld ist

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} yB_z \\ -xB_z \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{B}{2} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nun betrachten wir die beiden Anteile der Schrödinger-Gleichung in Gl.(581), die vom Vektorpotential abhängen genauer:

- 2. Term:

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A}(\vec{\nabla}\psi) &= -\frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{B})(\vec{\nabla}\psi) \\ &= \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{x} \times \vec{\nabla})(\vec{B}\psi) \\ &= -\frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B}\psi = -\frac{e}{2mc} BL_z\psi. \end{aligned} \quad (582)$$

- 3. Term:

$$\frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2\psi = \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2)\psi. \quad (583)$$

Bemerkungen:

1. Der zweite Term liefert einen Beitrag zum **Paramagnetismus** (negativer Beitrag zu H , wenn B zunimmt), der dritte Term einen Beitrag zum **Diamagnetismus** (positiver Beitrag zu H , wenn B zunimmt).

2. Größenordnungen: vergleichen wir beide Terme mit $\langle L_z \rangle \approx \hbar$ und $x^2 + y^2 \approx a_B^2$

$$\frac{(x^2 + y^2)e^2 B^2 / (8mc^2)}{B \langle L_z \rangle e / (2mc)} \approx \frac{a_B^2 e B}{4\hbar c} = \frac{\alpha}{4} \frac{B}{e/a_B^2} \approx 10^{-10} B[G]. \quad (584)$$

Das Verhältnis ist also gegeben aus der Feinstrukturkonstante und dem Verhältnis von Magnetfeld und atomaren elektrischen Feldstärken. Für experimentell erreichbare Werte von $10^{-5}G$ ergibt sich ein relatives Verhältnis von 10^{-5} .

Der diamagnetische Beitrag ist also meist vernachlässigbar, außer: $L_z = 0$, Elektronen im Metall, Neutronensterne (B bis zu $10^{12}G$)

3. Vergleiche den paramagnetischen Term mit dem Coulombterm

$$\frac{B \langle L_z \rangle e / (2mc)}{e^2 / a_B} \approx \frac{\hbar a_B B}{2mce} = \frac{\alpha a_B^2 B}{2e} \approx 2 \cdot 10^{-10} B[G]. \quad (585)$$

Hier haben wir $\alpha a_B = \hbar / (mc)$ benutzt. Das bedeutet, dass die Auswirkung von magnetischen Feldern im Labor, sehr gering auf die Energieniveaus sind.

11.4 Normaler Zeeman Effekt

Aufgrund obiger Überlegungen, lautet der Hamilton-Operator für das Wasserstoffatom in einem konstanten Magnetfeld

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2mc} B L_z, \quad (586)$$

wobei \hat{H}_0 der Coulomb-Hamilton operator ist, denn wir in den letzten Vorlesungen gelöst hatten:

$$\hat{H}_0 \psi_{n,l,m_l} = E_n \psi_{n,l,m_l}, \quad (587)$$

mit $E_n = -E_{Ry} / n^2$ und $E_{Ry} = me^4 / (2\hbar) = 13.6eV$. Weiter gilt

$$\hat{L}_z \psi_{n,l,m_l} = \hbar m_l \psi_{n,l,m_l}. \quad (588)$$

Damit sind also die Eigenfunktionen vom Wasserstoffatoms auch Eigenfunktionen im Falle eines konstanten Magnetfeldes und wir finden

$$\hat{H}\psi_{n,l,m_l} = \left(-\frac{E_{Ry}}{n^2} - \frac{\hbar m_l B}{2mc} \right) \psi_{n,l,m_l} = \left(-\frac{E_{Ry}}{n^2} - \hbar\omega_L m_l \right) \psi_{n,l,m_l}, \quad (589)$$

mit der Larmor-Frequenz $\omega_L = eB/(2mc)$.

Das konstante Magnetfeld hebt also die $2l+1$ -fache Entartung ($m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$) auf, und ein Energieniveau E_{Ry}/n^2 wird in $2l+1$ äquidistante Niveaus aufgespalten. Die Größe der Aufspaltung beträgt $\hbar\omega_L \approx E_{Ry} \cdot 4 \cdot 10^{-10} B[G]$.

11.5 Eichtransformation

In der klassischen Mechanik unterscheiden wir zwischen **kanonischen Impuls** \vec{p} (aus der Hamilton-Funktion mittels kanonischer Gleichungen gefunden) und dem **kinetischen Impuls** $m\dot{\vec{x}}$. Es gilt

$$m\dot{\vec{x}} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}. \quad (590)$$

In der Quantenmechanik ist der kanonische Impuls durch $\hbar/i\vec{\nabla}$ gegeben und der kinetische Impuls durch die Relation (590). Es gelten folgende Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij}, \\ [\hat{x}_i, m\hat{x}_j] &= i\hbar\delta_{ij}, \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] &= 0, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] &= 0, \\ [m\hat{x}_i, m\hat{x}_j] &= i\hbar\frac{e}{c}\epsilon_{ijk}B_k. \end{aligned} \quad (591)$$

die Tatsache, dass die kinetischen Impulse nicht miteinander vertauschen, wird wichtige Konsequenzen für die Bewegung im Magnetfeld haben.

Die Lorentzkraft hängt nur von \vec{E} und \vec{B} ab, während die Schrödinger-Gleichung von \vec{A} abhängt. Was passiert mit der Wellenfunktion, wenn wir \vec{A} einer **Eichtransformation** unterwerfen?

Die allgemeinen Eichtransformationen welche die \vec{E} und \vec{B} Felder invariant lassen, lauten

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{x}, t), \\ \Phi &\rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{x}, t),\end{aligned}\quad (592)$$

wobei $\Lambda(\vec{x}, t)$ eine beliebige skalare Funktion ist. Ausgehend von der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\Phi(\vec{x}, t) \right] \psi(\vec{x}, t) \quad (593)$$

wollen wir zeigen, dass die Schrödinger-Gleichung mit den transformierten Eichfeldern, durch die Wellenfunktion

$$\psi'(\vec{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x}, t) \quad (594)$$

gelöst wird. Dazu multiplizieren wir Gleichung (593) von links mit $e^{ie/(hc)\Lambda(\vec{x},t)}$ und benutzen mehrfach die Identität

$$e^{f(y)} \frac{\partial}{\partial y} = \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y} \right) e^{f(y)}$$

und erhalten damit

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{\nabla} \Lambda \right) - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\Phi \right] e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} (\vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda) \right)^2 + e \left(\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) \right] \psi' \quad (595)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 + e\Phi' \right] \psi'. \quad (596)$$

Es gilt $|\psi'|^2 = |\psi|^2$ und damit hat die Umeichung keinen beobachtbaren physikalischen Effekt.

11.6 Aharonov-Bohm-Effekt

11.6.1 Bewegung im magnetfeldfreien Raum

Betrachten wir zunächst einen feldfreien Raum, dann sehen wir ausgehend von

$$\vec{0} = \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (597)$$

dass das Vektorpotential als Gradient eines Skalarfeldes Σ darstellbar ist

$$\vec{A} = \vec{\nabla} \Sigma \quad (598)$$

und somit

$$\Sigma(\vec{x}) = \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}). \quad (599)$$

Die Wellenfunktion findet man entweder aus der *ursprünglichen* Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + e\Phi \psi \quad (600)$$

oder aus der eichtransformierten

$$\begin{aligned} \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda(\vec{x}, t) = \vec{A} - \vec{\nabla} \Sigma(\vec{x}) = 0, \\ \Phi &\rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{x}, t) = \Phi, \end{aligned} \quad (601)$$

(mit $\Lambda(\vec{x}, t) = -\Sigma(\vec{x})$) Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \psi' + e\Phi \psi', \quad (602)$$

mit

$$\begin{aligned}\psi'(\vec{x}, t) &= e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x}, t)}\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Sigma(\vec{x})}\psi(\vec{x}, t) \\ &= e^{-\frac{ie}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} d\vec{s}\vec{A}(\vec{s})}\psi(\vec{x}, t).\end{aligned}\tag{603}$$

ψ' beschreibt hier die Situation bei $\vec{A} = 0$ und ψ bei $\vec{A} \neq 0$. In der Elektrodynamik wurde gezeigt, dass das Integral nicht vom Weg abhängt, sondern nur von Anfangs- und Endpunkt.

11.6.2 Aharonov-Bohm-Interferenz

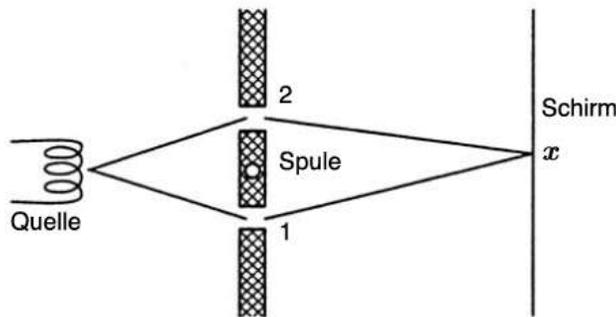


Abb. 7.3. Aharonov-Bohm-Interferenzexperiment. Die Elektronen können nicht in den Bereich des Feldes (Spule) gelangen

1. Elektronen werden links in einer Quelle erzeugt und treffen dann auf einen Doppelspalt. Zwischen den beiden Spalten ist eine abgeschirmte Spule, deren Magnetfeld ausserhalb der Spule verschwindet.
2. Wird nur der Spalt 1 geöffnet, so findet man die Wellenfunktion $\psi_{1,B}(x)$. Schaltet man das Magnetfeld ab (\vec{A} wird dann auch Null), so findet man die Wellenfunktion $\psi_{1,0}(x)$. Deren Zusammenhang lautet

$$\psi_{1,B}(\vec{x}) = \psi_{1,0}(\vec{x})e^{+\frac{ie}{\hbar c}\int_1 d\vec{s}\vec{A}(\vec{s})},\tag{604}$$

wobei nun das Wegintegral durch den Spalt 1 verläuft.

3. Wird nur der Spalt 2 geöffnet, so findet man

$$\psi_{2,B}(\vec{x}) = \psi_{2,0}(\vec{x}) e^{+\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})}. \quad (605)$$

4. Werden beide Spalten geöffnet, so erwartet man die lineare Superposition

$$\begin{aligned} \psi_B(\vec{x}) &= \psi_{1,B}(\vec{x}) + \psi_{2,B}(\vec{x}) \\ &= \psi_{1,0}(\vec{x}) e^{+\frac{ie}{\hbar c} \int_1 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})} + \psi_{2,0}(\vec{x}) e^{+\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})}. \end{aligned} \quad (606)$$

Die relative Phase dieser beiden Summanden ist

$$\begin{aligned} \int_1 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) - \int_2 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) &= \oint d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) = \int d\vec{F} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} \\ &= \int d\vec{F} \cdot \vec{B} = \Phi_B. \end{aligned} \quad (607)$$

Die relative Phase ist also der magnetische Fluss Φ_B .

Damit erhalten wir

$$\psi_B(\vec{x}) = \left(\psi_{1,0}(\vec{x}) e^{+\frac{ie}{\hbar c} \Phi_B} + \psi_{2,0}(\vec{x}) \right) e^{+\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})} \quad (608)$$

und somit eine Verschiebung der Interferenz durch das Magnetfeld. Betrachten wir Zylinderwellen die von Spalt 1 und Spalt 2 ausgehen

$$\begin{aligned} \psi_{1,0} &= \frac{e^{ikr_1}}{\sqrt{r_1}}, & r_1 &= |\vec{x} - \vec{x}_{\text{Spalt 1}}|, \\ \psi_{2,0} &= \frac{e^{ikr_2}}{\sqrt{r_2}}, & r_2 &= |\vec{x} - \vec{x}_{\text{Spalt 2}}|, \end{aligned} \quad (609)$$

so lautet die Bedingung für das Auftreten eines Interferenzmaximas

$$\begin{aligned} kr_1 + \frac{e}{\hbar c} \Phi_B - kr_2 &= 2\pi n, \\ r_1 - r_2 &= \frac{2\pi}{k} \left(n - \frac{e}{2\pi\hbar c} \Phi_B \right). \end{aligned} \quad (610)$$

D.h. die Positionen der Interferenzmaxima werden durch eine Veränderung des magnetischen Flusses verschoben, obwohl sich das Elektron nur im \vec{B} -Feld freien Raum bewegt. Dies ist der experimentell beobachtete (Anfang der

1960er Jahre u. a. von Möllenstedt und Robert G. Chambers) **Aharonov-Bohm-Effekt** (<https://arxiv.org/pdf/1304.4736.pdf>)

Die charakteristische Flusseinheit ist dabei

$$\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{e} \approx 4.135 \cdot 10^{-7} \text{Gcm}^2 \quad (611)$$

Zusammenfassung:

- In der klassischen Physik sind \vec{E} und \vec{B} die physikalisch relevanten Felder, da diese die Lorentzkraft festlegen. Die Potentiale \vec{A} und Φ sind nur Hilfsfelder. Verschiedene Werte von \vec{A} und Φ können zu denselben Werten von \vec{E} und \vec{B} führen.
- In der Quantenmechanik ist hingegen \vec{A} das physikalisch relevante Feld, wobei die Wellenfunktion aber so beschaffen ist, dass physikalische Größen und Effekte nur von eichinvarianten Größen abhängen.

11.7 Supraleiter

Viele Metalle und andere Verbindungen (z.B. oxidische Halbleiter) werden unterhalb einer charakteristischen Sprungtemperatur T_c supraleitend. Die Elektronen bilden dabei **Cooper-Paare** die sich wie Bosonen verhalten. Wir betrachten einen Supraleiter in der Form eines Hohlzylinders. Befindet sich

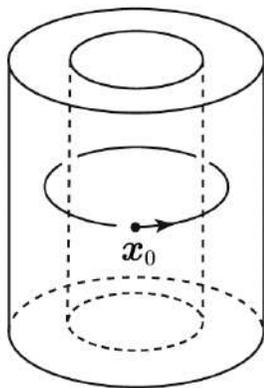


Abb. 7.6. Zur Flußquantisierung

der Supraleiter in einem äußeren Magnetfeld \vec{B} (in unserem Fall parallel zur Zylinderachse). Gemäße dem **Meißner-Ochsenfeld-Effekt** wird das Magnetfeld aus dem Inneren des Zylinders verdrängt, d.h. im Inneren ist $\vec{B} = 0$, bis auf eine dünne Randschicht.

Die doppelt geladenen Cooper-Paare bewegen sich also in einem feldfreien Gebiet und wir verwenden (mit der zweifachen Elektronenladung!)

$$\psi_B(\vec{x}, t) = e^{\frac{2ie}{\hbar c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})} \psi_0(\vec{x}, t) \quad (612)$$

zur Beschreibung, wobei ψ_0 die Wellenfunktion ohne Feld ($\vec{A} = 0$) angibt. Im Inneren des Supraleiters gilt $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$ und somit $\oint d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) = 0$, d.h. bei einem geschlossenen Wegintegral ist $\psi_0(\vec{x}_0) = \psi_B(\vec{x}_0)$. Auf der anderen Seite gibt $\oint d\vec{s} \vec{A}(\vec{s}) = \Phi_B$ den eingeschlossenen magnetischen Fluss an. Ein geschlossener Weg um den Zylinder, ausgehend vom Punkt \vec{x}_0 ergibt

$$\begin{aligned} \psi_B(\vec{x}_0) &= e^{\frac{2ie}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A}(\vec{s})} \psi_0(\vec{x}_0) \\ &= e^{2i \frac{\Phi_B}{\Phi_0}} \psi_0(\vec{x}_0) = \psi_0(\vec{x}_0) \end{aligned} \quad (613)$$

Die Eindeutigkeit der Wellenfunktion bedingt dann folgende Quantisierungsbedingung

$$\Phi_B = \Phi_0 n, \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (614)$$

Diese Quantisierung wurde experimentell beobachtet und das Auftreten der doppelten Elektronenladung stellt einen wichtigen Test der **Bardeen-Cooper-Schrieffer-Theorie** der Supraleitung dar.

11.8 Freie Elektronen im Magnetfeld

Wir betrachten Elektronen in einem Magnetfeld \vec{B} das in z Richtung orientiert ist. Das Vektorpotential \vec{A} hat dann nur Komponenten in x und y -Richtung, d.h. der p_z -Anteil verhält sich wie ein freies Teilchen. Der Hamilton-Operator kann also wie folgt geschrieben werden

$$\hat{H} = \hat{H}_\perp + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \quad (615)$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{H}_\perp &= \frac{(\hat{p}_x - \frac{e}{c}A_x)^2 + (\hat{p}_y - \frac{e}{c}A_y)^2}{2m} \\ &= \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) .\end{aligned}\quad (616)$$

Die Bewegung in z -Richtung entkoppelt von der in x und y -Richtung (p_z vertauscht mit $m\dot{x}$ und $m\dot{y}$) und kann mit einer ebenen Welle der Form $\exp(ip_z z/\hbar)$ beschrieben werden.

Für Elektronen (negative Ladung) gelten folgende Vertauschungsrelationen in den transversalen Richtungen (x und y)

$$\begin{aligned}[m\dot{x}, m\dot{y}] &= i\hbar \frac{eB}{c}, \\ [\dot{x}, \dot{x}] &= 0, \\ [\dot{y}, \dot{y}] &= 0.\end{aligned}\quad (617)$$

Mit der Einführung von

$$\hat{\pi}_i := m\dot{x}_i \sqrt{\frac{c}{eB}} \quad (618)$$

bekommen die Vertauschungsrelationen die einfache Form

$$[\hat{\pi}_y, \hat{\pi}_x] = i\hbar, \quad [\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_x] = 0 = [\hat{\pi}_y, \hat{\pi}_y]. \quad (619)$$

$\hat{\pi}_x$ und $\hat{\pi}_y$ bilden in Analogie zu Ort und Impuls kanonisch konjugierte Variablen mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2} \frac{eB}{mc} (\hat{\pi}_1^2 + \hat{\pi}_2^2). \quad (620)$$

Dieser hat algebraisch exakt die gleiche Struktur und er kann mittels

$$\hat{a} = \frac{\hat{\pi}_2 + i\hat{\pi}_1}{\sqrt{2\hbar}} \quad (621)$$

auf die Standardform

$$\hat{H}_\perp = \hbar\omega_c \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (622)$$

gebracht werden, mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{mc}. \quad (623)$$

Die Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (624)$$

werden auch **Landau-Niveaus** genannt.

12 Spin

20. Vorlesung: Dienstag 19.12.2023
9, Schwabl;

12.1 Experimentelle Entdeckung de Spins

Für Elektronen in einem Magnetfeld hatten wir folgenden Wechselwirkungsterm hergeleitet

$$\hat{H}_{WW} = -\frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (625)$$

mit dem **magnetischen Moment**

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} =: g \vec{L} \quad (626)$$

und dem **gyromagnetischen Verhältnis** g . Für ein Magnetfeld in z -Richtung und einer Eigenfunktion von \hat{L}_z gilt

$$\hat{H}_{WW} Y_{lm} = -\frac{e}{2mc} B \hat{L}_z Y_{lm} = -\frac{e}{2mc} B \hbar m_l Y_{lm} =: \mu_B B m_l Y_{lm}, \quad (627)$$

mit dem **Bohrschen Magenton** μ_B . Man erwartet also im Magnetfeld eine Aufspaltung in $2l + 1$ ($m_l = -l, \dots, +l$) unterschiedliche Energien mit äquidistanten Abständen.

Im **Stern-Gerlach-Experiment** durchläuft ein Atomstrahl in inhomogenes Magnetfeld. Die Kraft auf ein Atom ist gegeben durch

$$\vec{K} = -\vec{\nabla} \hat{H}_{WW} = \vec{\nabla} (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{e}_z. \quad (628)$$

Nach unseren Überlegungen erwarten wir eine Aufspaltung in $2l + 1$ Strahlen. Das Experiment wurde von O. Stern und W. Gerlach im Jahre 1922 mit Silberatom (47 Elektronen, 61 Neutronen, 46 Kugelsymmetrische verteilte Elektronen und 47. in 5s Zustand). 5s Zustand entspricht $l = 0$. Wir erwarten also keine Aufspaltung! Wäre das Elektron im 5p Zustand so würden wir eine Aufspaltung in 3 Strahlen erwarten.

Experimentell finden wir jedoch eine Aufspaltung in 2 Strahlen. Dies deutet

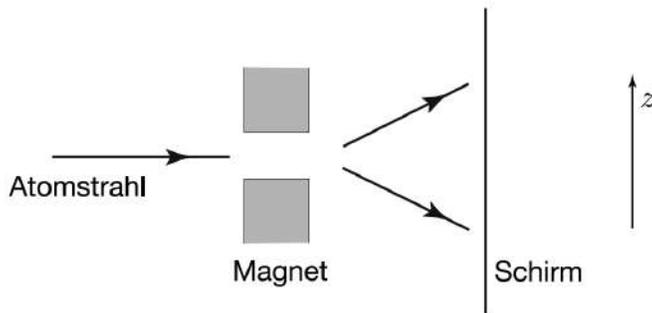


Abb. 9.1. Stern-Gerlach-Experiment

auf einen **inneren Drehimpuls (Spin)** hin. Aus der Größe der Ablenkung folgt das gyromagnetische Verhältnis $e/(mc)$.

Das Elektron besitzen einen inneren Spin, der in einer vorgegebenen Richtung die beiden Werte $\pm\hbar/2$ annehmen kann.

Auch alle anderen Elementarteilchen haben einen Spin. **Fermionen** einen halbzahligen, **Bosonen** einen ganzzahligen, inklusive Null.

12.2 Mathematische Formulierung

Bei der Behandlung des algebraischen Drehimpuls-Struktur, hatten wir festgestellt, dass im Prinzip die Möglichkeit ganz- und halbzahliger Werte für l gibt.

Werden die allgemeinen Algebra-Elemente durch Bahndrehimpuls-Operatoren dargestellt, dann kommen wegen der Stetigkeit der Wellenfunktion nur ganzzahlige Werte für l in Frage.

Die Drehimpulsdarstellung die zu halbzahligen Werten von l gehört werden wir also Spinoperatoren $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ bezeichnen.

Sei \vec{e} ein Einheitsvektor, dann $\hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}$ die beiden Eigenwerte $\pm\hbar/2$, die Eigenfunktionen bezeichnen wir mit $|\vec{e}, \pm\rangle$

$$(\hat{\vec{S}} \cdot \vec{e})|\vec{e}, \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\vec{e}, \pm\rangle. \quad (629)$$

O. B. d. A. wählen wir $\vec{e} = \vec{e}_z$ und führen folgenden Notation ein

$$|\vec{e}_z, \pm\rangle = \begin{cases} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{cases}. \quad (630)$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +|\uparrow\rangle \\ -|\downarrow\rangle \end{pmatrix}. \quad (631)$$

Da der Spin eine Observable ist, ist \hat{S}_z ein hermitescher Operator und die zu verschiedenen Eigenwerten gehörigen Zustände sind orthogonal

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0. \quad (632)$$

Weiter sollen die Zustände normiert sein

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = 1 = \langle \downarrow | \downarrow \rangle. \quad (633)$$

Die Spinoperatoren \hat{S}_i sollen der Drehimpuls-Algebra gehorchen

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k. \quad (634)$$

Mit

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (635)$$

gilt ferner

$$\begin{aligned} [\hat{S}_z, \hat{S}_{\pm}] &= \pm\hbar\hat{S}_{\pm}, \\ [\hat{S}_+, \hat{S}_-] &= 2\hbar\hat{S}_z. \end{aligned} \quad (636)$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \hat{S}^2|\uparrow\rangle &= s(s+1)\hbar^2|\uparrow\rangle \rightarrow \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle, \\ \hat{S}^2|\downarrow\rangle &= s(s+1)\hbar^2|\downarrow\rangle \rightarrow \frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle, \\ \hat{S}_+|\uparrow\rangle &= 0, \\ \hat{S}_+|\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ \hat{S}_-|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, \\ \hat{S}_-|\downarrow\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (637)$$

Die Spinoperatoren \hat{S}_i können in der Basis ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) auch als Matrix dargestellt werden - die ich leider auch mit \hat{S}_i bezeichne -

$$\hat{S}_i \rightarrow \hat{S}_i = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{S}_i | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{S}_i | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \hat{S}_i | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \hat{S}_i | \downarrow \rangle \end{pmatrix} \quad (638)$$

Damit finden wir

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (639)$$

Asgedrückt durch die Paulimatrizen $\vec{\sigma}$ können wir auch schreiben

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad (640)$$

mit

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (641)$$

Die Pauli-Matrizen hatten wir schon früher als eine Darstellung der SU(2) Algebra eingeführt.

12.3 Eigenschaften der Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 &= \mathbb{1}_2, \\ [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \\ \{\sigma_x, \sigma_y\} &= 0 \text{ und zyklisch,} \\ \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x &= i\sigma_z \text{ und zyklisch,} \\ \sigma_x\sigma_y\sigma_z &= i\mathbb{1}_2, \\ \text{Sp}\sigma_x = \text{Sp}\sigma_y = \text{Sp}\sigma_z &= 0, \\ \text{Det}\sigma_x = \text{Det}\sigma_y = \text{Det}\sigma_z &= -1 \end{aligned} \quad (642)$$

Die Beweise dieser Relationen können ohne Bezug zur expliziten Darstellung durchgeführt werden.

12.4 Zustände, Spinoren

Ein allgemeiner Spinzustand kann daher wie folgt geschrieben werden

$$|\rangle = \alpha_+ |\uparrow\rangle + \alpha_- |\downarrow\rangle, \quad (643)$$

mit komplexen Koeffizienten α_{\pm} ($\alpha^+ = \langle \uparrow | \rangle$ und $\alpha^- = \langle \downarrow | \rangle$). Aus der Normierung folgt

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1. \quad (644)$$

Der allgemeine Zustand $|\rangle$ kann auch durch ein zwei-komponentiges Objekt χ dargestellt werden

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad (645)$$

welches wir als **Spinor** bezeichnen.

Die Basis-Spinoren, die den Zuständen $(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle)$ entsprechen, lauten

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (646)$$

Die Vollständigkeitsrelation für die Basis des Spin 1/2 Raumes läßt sich schreiben als

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| &= \mathbb{1}, \\ \chi_+ \chi_+^\dagger + \chi_- \chi_-^\dagger &= \mathbb{1}_2. \end{aligned} \quad (647)$$

Dieses Zweizustandssystem bildet auch eine Grundlage für Quantencumputing.

12.5 Magnetisches Moment

Mit dem Bahndrehimpuls \vec{L} des Elektrons ist ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ verbunden:

$$\vec{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc} \vec{L}. \quad (648)$$

Wir ordnen nun dem Spin ebenfalls ein magnetisches Moment zu:

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = g \frac{e}{2mc} \vec{S}, \quad (649)$$

wobei g den **Lande-Faktor** bzw. den **gyromagnetischen Faktor** bezeichnet.

Aus dem Zeemann-Effekt werden wir $g \approx 2$ erhalten.

Das gesamte magnetische Moment des Elektrons lautet somit

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) = \frac{e}{2mc} (\vec{L} + \hbar\vec{\sigma}). \quad (650)$$

Die gesamte Wechselwirkungsenergie mit dem Magnetfeld wird damit zu

$$H_{\text{WW}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \mu_B \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \quad (651)$$

Bemerkungen:

1. In der Schrödinger-Theorie ist g ein freier Parameter.
2. Mit der Dirac-Gleichung wird $g = 2$ vorhergesagt.
3. In der Quantenelektrodynamik wird eine kleine Abweichung von g von 2 vorhergesagt, die experimentell bestätigt wurde

$$\begin{aligned} g_{\text{Theorie}} &= 2.00231930436322(46), \\ g_{\text{Exp.}} &= 2.00231930436256(35). \end{aligned} \quad (652)$$

Dies ist einer der größten Erfolge der Quantenfeldtheorie.

4. Beim Myon wich das Experiment lange Zeit von der QED und QCD Vorhersage ab, was zu vielen Spekulationen über Physik jenseits vom Standardmodell führte. Hier gibt es nun aber neuere Vorhersagen, die mit dem Experiment übereinstimmen:

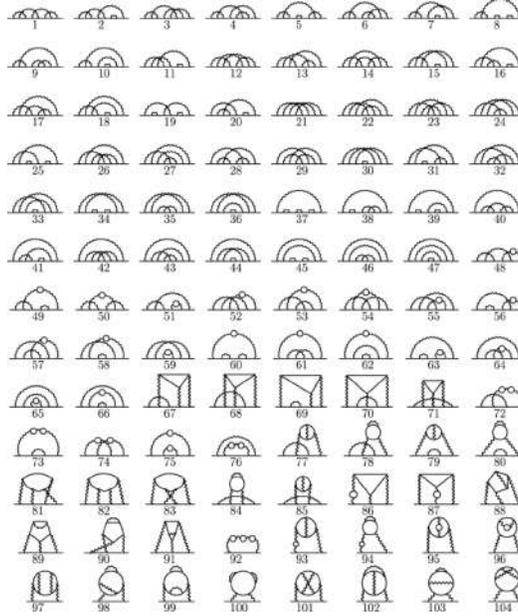
$$\begin{aligned} g_{\text{Theorie,alt}} &= 2.00233183620(86), \\ g_{\text{Exp.}} &= 2.00233184110(48), \\ g_{\text{Theorie,neu}} &= 2.00233183908(100). \end{aligned} \quad (653)$$

5. Andere Elementarteilchen wie z.B. das Proton besitzen auch ein magnetisches Moment. Das Kernmagneton ist z.B. durch

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p c} \quad (654)$$

gegeben und es ist einen Faktor 1836 mal kleiner als das Bohr-Magneton. Das Proton ist ein zusammengesetztes Teilchen und das gyromagnetische Verhältnis weicht von dem eines elementaren Fermion deutlich ab:

$$g_{\text{Proton}} = 5.59.$$



12.6 Räumliche Freiheitsgrade und Spin

Der Spin ist ein zusätzlicher neuer Freiheitsgrad, der unabhängig von den räumlichen Freiheitsgraden wie Ort und Impuls ist. Daher kommutieren die entsprechenden Operatoren:

$$[\hat{S}, \hat{x}] = 0, [\hat{S}, \hat{p}] = 0, [\hat{S}, \hat{L}] = 0. \quad (655)$$

Der Gesamtzustand besteht aus einem direkten Produkt von Orts- und Sineigenzuständen. Ein allgemeiner Zustand kann dann wie folgt dargestellt werden

$$|\Psi\rangle = \int d^3x (\psi_+(\vec{x}) \cdot |\vec{x}\rangle |\uparrow\rangle + \psi_-(\vec{x}) \cdot |\vec{x}\rangle |\downarrow\rangle). \quad (656)$$

Die Normierungsbedingung für diesen Zustand lautet

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int d^3x (|\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2) = 1. \quad (657)$$

Der Zustand Ψ kann auch als Spinor geschrieben werden

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}) \\ \Psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (658)$$

Zwei-komponentige Spinoren werden auch als Pauli-Spinoren bezeichnet.

Der Hamilton-Operator für ein Elektron im Magnetfeld lautet damit

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) + \mu_B \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \quad (659)$$

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (660)$$

lautet dann in Komponenten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) + \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} \right) \mathbb{1} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (661)$$

Die Gleichung heisst **Pauli-Gleichung**.

Allgemeiner lautet die Pauli-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \left[\left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\Phi(\vec{x}, t) \right) \mathbb{1} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (662)$$

13 Heisenberg-Darstellung

Schwabl, Kapitel 8

21. Vorlesung: Dienstag 9.1.2024
7, Schwabl;

Warming up after Christmas break and review the formalism....

13.1 Matrizen, Vektoren und unitäre Transformationen

Geg.: Operator \hat{A} mit vollständigem Orthonormalsystem $\{\psi_n(x)\}$.

Definition: Die **Matrizendarstellung** von \hat{A} ist gegeben durch

$$A_{nm} = \langle \psi_n, \hat{A}\psi_m \rangle \tag{663}$$

Bemerkungen:

- i) Die Matrix A_{nm} ist endlich- oder unendlich dimensional.
- ii) Ist \hat{A} hermitesch, d.h. $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, dann ist die Matrix A_{nm} hermitesch, d.h. $A_{nm}^* = A_{mn}$.

Beweis:

$$A_{nm}^* = \langle \psi_n, \hat{A}\psi_m \rangle^* = \langle \hat{A}\psi_m, \psi_n \rangle = \langle \psi_m, \hat{A}\psi_n \rangle = A_{mn} \text{ Box} \tag{664}$$

- iii) Ist $\{\psi_n(x)\}$ eine Basis von \hat{A} , mit $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$, dann gilt

$$A_{nm} = a_n\delta_{nm}, \tag{665}$$

wobei in der letzten Gleichung keine Summenkonvention verwendet wird!

- iv) Da $\{\psi_n(x)\}$ ein vollständiges System ist, kann jede beliebige Wellenfunktion $\Psi(x)$ danach entwickelt werden

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \sum_n c_n \psi_n(x), \\ c_n &= \langle \psi_n, \Psi \rangle. \end{aligned} \tag{666}$$

Betrachten wir nun ein zweites vollständiges Orthonormalsystem $\{\psi'_n(x)\}$, so können \hat{A} und Ψ auch in diesem Basissystem entwickelt werden

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \langle \psi'_n, \hat{A}\psi'_m \rangle \\ \Psi(x) &= \sum_n c'_n \psi'_n(x), \\ c'_n &= \langle \psi'_n, \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (667)$$

Ebenso können wir die zweite Basis $\{\psi'_n(x)\}$ nach der ersten Basis $\{\psi_n(x)\}$ entwickeln

$$\begin{aligned} \psi'_n(x) &= \sum_m S_{mn} \psi_m(x), \\ S_{mn} &= \langle \psi_m, \psi'_n \rangle = \int \psi_m^*(x) \psi'_n(x) dx. \end{aligned} \quad (668)$$

Die Transformationsmatrix S_{mn} ist dann **unitär**, d.h.

$$\begin{aligned} \hat{S}\hat{S}^\dagger &= \hat{S}^\dagger\hat{S} = \mathbb{1}, \\ \sum_n S_{ln} S_{mn}^* &= \sum_n S_{nl}^* S_{nm} = \delta_{lm} \end{aligned} \quad (669)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \sum_n S_{ln} S_{mn}^* &= \sum_n \int \psi_l^*(x) \psi'_n(x) dx \int \psi_m(y) (\psi'_n)^*(y) dy \\ &= \int dx \int dy \left(\sum_n \psi'_n(x) (\psi'_n)^*(y) \right) \psi_l^*(x) \psi_m(y) \\ &= \int dx \int dy \delta(x-y) \psi_l^*(x) \psi_m(y) = \delta_{lm}. \quad \square \end{aligned} \quad (670)$$

v) Damit ergeben sich folgende Transformationsgesetze

$$c'_n = \langle \psi'_n, \Psi \rangle = \left\langle \sum_m S_{mn} \psi_m, \Psi \right\rangle = \sum_m S_{nm}^\dagger \langle \psi_m, \Psi \rangle = \sum_m S_{nm}^\dagger c_m \quad (671)$$

und weil \hat{S} unitär ist

$$c_m = \sum_n S_{mn} c'_n. \quad (672)$$

Dies kann auch in Matrixschreibweise dargestellt werden

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \dots \end{pmatrix} = \hat{S}^\dagger \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (673)$$

vi) Für die Matrix-Darstellung der Operatoren gilt

$$\begin{aligned} A'_{nm} &= \sum_{l,k} S_{ln}^* A_{lk} S_{km}, \\ \hat{A}' &= \hat{S}^\dagger \hat{A} \hat{S}. \end{aligned} \quad (674)$$

Beweis:

$$A'_{nm} = \langle \psi'_n, \hat{A} \psi'_m \rangle = \sum_{l,k} S_{ln}^* \langle \psi_l, \hat{A} \psi_k \rangle S_{km} = \sum_{l,k} S_{ln}^* A_{lk} S_{km}. \quad \square \quad (675)$$

Operatoren können durch Matrizen dargestellt werden und Zustände durch Vektoren. Beispiele:

i) Energieeigenfunktionen des harmonischen Oszillators

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} x_0} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad (676)$$

mit $\langle \psi_n, \psi_m \rangle = \delta_{nm}$.

In dieser Basis hat der Ortsoperator \hat{x} die Form

$$x_{nm} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n} \delta_{n,m+1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,m-1} \right). \quad (677)$$

ii) Impulseigenfunktionen.

Die Eigenfunktionen ψ_p des Impulsoperators $\hbar/i\partial/\partial x$ sind

$$\begin{aligned} \psi_p &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}, \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_p &= p \psi_p. \end{aligned} \quad (678)$$

Das Eigenwertspektrum des Impulsoperators ist kontinuierlich, damit lautet die Orthonormalitätsrelation

$$\langle \psi_p, \psi_q \rangle = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{i\frac{(p-q)x}{\hbar}} = \delta(p - q). \quad (679)$$

Der Operator \hat{A} lautet in der Impulsdarstellung

$$A_{pq} = \langle \psi_p, \hat{A}\psi_q \rangle. \quad (680)$$

Speziell ergibt sich dann für den Orts- und Impulsoperator

$$\begin{aligned} x_{pq} &= \langle \psi_p, \hat{x}\psi_q \rangle \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{qx}{\hbar}} dx \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \int \frac{e^{i\frac{(q-p)x}{\hbar}}}{2\pi\hbar} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \delta(q - p). \end{aligned} \quad (681)$$

$$\begin{aligned} p_{pq} &= \langle \psi_p, \hat{p}\psi_q \rangle \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}} p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{qx}{\hbar}} d\xi \\ &= p \int \frac{e^{i\frac{(q-p)x}{\hbar}}}{2\pi\hbar} = p\delta(q - p). \end{aligned} \quad (682)$$

Entwickeln wir eine Wellenfunktion $\Psi(x)$ nach Impulseigenfunktionen $\psi_p(x)$, so finden wir

$$\Psi(x) = \int c_p \psi_p(x) dp = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \phi(p) e^{i\frac{px}{\hbar}}, \quad (683)$$

wobei das 2. Gleichheitszeichen unsere am Anfang der Vorlesung benutzte Form des Wellenpaketes - inklusive Fouriertransformation - benutzt. Der Vergleich beider Ausdrücke liefert die Entwicklungskoeffizienten als

$$c_p = \langle \psi_p, \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \phi(p). \quad (684)$$

iii) Ortseigenfunktionen

Die Eigenfunktionen ψ_x des Ortsoperators \hat{x} sind

$$\begin{aligned} \psi_x(\xi) &= \delta(\xi - x), \\ \hat{x}\psi_x &= x\psi_x. \end{aligned} \quad (685)$$

Das Eigenwertspektrum des Ortsoperators ist wieder kontinuierlich, damit lautet die Orthonormalitätsrelation

$$\langle \psi_x, \psi_y \rangle = \int \delta(\xi - x) \delta(\xi - y) d\xi = \delta(x - y). \quad (686)$$

Der Operator \hat{A} lautet in der Ortsdarstellung

$$A_{xy} = \langle \psi_x, \hat{A} \psi_y \rangle. \quad (687)$$

Speziell ergibt sich dann für den Orts- und Impulsoperator

$$\begin{aligned} x_{xy} &= \langle \psi_x, \hat{x} \psi_y \rangle \\ &= \int \delta(x - \xi) x \delta(y - \xi) d\xi = x \delta(x - y). \end{aligned} \quad (688)$$

$$\begin{aligned} p_{xy} &= \langle \psi_x, \hat{p} \psi_y \rangle \\ &= \int \delta(x - \xi) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi} \delta(y - \xi) d\xi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(y - x). \end{aligned} \quad (689)$$

Entwickeln wir eine Wellenfunktion $\Psi(x)$ nach Ortseigenfunktionen $\psi_\xi(x)$, so finden wir

$$\Psi(x) = \int c_\xi \psi_\xi(x) d\xi = \int \Psi(\xi) \psi_\xi(x) d\xi, \quad (690)$$

Die Entwicklungskoeffizienten sind nun die Ortswellenfunktionen

$$c_\xi = \langle \psi_\xi, \Psi \rangle = \Psi(\xi). \quad (691)$$

13.2 Zustandsvektoren in Dirac-Notation

Oft ist es sinnvoll eine Theorie unabhängig von einem bestimmten Basissystem zu definieren.

In der Quantenmechanik kann man eine Zustand $\Psi(x)$ in verschiedenen Basissystemen darstellen

$$\Psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) = \int d\xi c_\xi \psi_\xi(x) = \int dp c_p \psi_p(x) = \dots \quad (692)$$

Energie-, Orts-, Impuls-Darstellung.

Anstelle eine bestimmten Basis kann man auch eine Basisunabhängige Vektornotation, die **Dirac-Notation** einführen

$$\Psi(x) \rightarrow |\Psi\rangle. \quad (693)$$

$|\Psi\rangle$ ist ein Vektor in einem unendlich-dimensionalen Vektorraum. Für spezielle Zustände verwenden wir

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &\rightarrow |n\rangle, \\ \psi_\xi(x) &\rightarrow |\xi\rangle, \\ \psi_p(x) &\rightarrow |p\rangle, \\ \psi_\alpha(x) &\rightarrow |\alpha\rangle.\end{aligned}\tag{694}$$

Die allgemeinen Vektoren $|\rangle$ bilden einen linearen Raum L , d.h.

1. $|a\rangle, |b\rangle \in L \Rightarrow |a\rangle + |b\rangle \in L$.
2. $|a\rangle \in L, \alpha \in \mathbb{C} \Rightarrow \alpha|a\rangle \in L$.
3. $\exists |0\rangle \in L \ni |a\rangle + |0\rangle = |0\rangle + |a\rangle = |a\rangle \forall |a\rangle \in L$.
4. $\forall |a\rangle \in L \exists |a'\rangle \in L \ni |a\rangle + |a'\rangle = |0\rangle$.

Das **Skalarprodukt** zweier Zustände lautet

$$\langle a|b\rangle\tag{695}$$

13.3 Axiome der Quantenmechanik

- I) Der Zustand eines Systems wird durch den Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ beschrieben.
- II) Die Observablen werden durch hermitesche Operatoren \hat{A} dargestellt, wobei Funktionen von Observablen durch die entsprechenden Funktionen von Operatoren dargestellt werden.
- III) Die Mittelwerte der Observablen sind gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle.$$

- IV) Die Zeitentwicklung wird durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi, t\rangle = \hat{H} |\Psi, t\rangle.$$

- V) Wird bei der Messung von \hat{A} der Eigenwert a_n gefunden, dann geht das System in den Zustand $|n\rangle$ über.

13.4 Mehrdimensional System und Vielteilchensysteme

Ein Mehrteilchenzustand bestehend aus den verschiedenen Einteilchenzuständen $|\xi_i\rangle$ mit $i = 1, 2, \dots, N$ wird beschrieben durch

$$|\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N\rangle = |\xi_1\rangle|\xi_2\rangle\dots|\xi_N\rangle \quad (696)$$

Die Orthonormalitätsrelation lautet dann

$$\langle \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N | \xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_N \rangle = \delta(\xi_1 - \xi'_1)\delta(\xi_2 - \xi'_2)\dots\delta(\xi_N - \xi'_N) \quad (697)$$

13.5 Schrödinger- und Heisenberg-Darstellung

13.5.1 Schrödinger-Darstellung

Zustand $|\psi, t\rangle$ ist zeitabhängig, Operatoren $\hat{H}, \hat{x}, \hat{p}, \hat{L}, \dots$ sind zeitunabhängig. Zeitentwicklung des Zustandes ist gegeben durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = \hat{H} |\psi, t\rangle, \quad (698)$$

welche die formale Lösung

$$|\psi, t\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi, 0\rangle \quad (699)$$

hat.

Diese uns gewohnte Darstellung nennt man **Schrödinger-Darstellung** oder **Schrödinger-Bild**

13.5.2 Heisenberg-Darstellung

Im **Heisenberg-Bild** steckt die Zeitabhängigkeit in den Operatoren! Ausgehend von einem Operator \hat{A} im Schrödinger-Bild definieren wir den zugehörigen Operator \hat{A}_H im Heisenberg-Bild durch

$$\hat{A}_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}. \quad (700)$$

Durch Einsetzen findet man die Zeitentwicklung des Heisenberg-Operators

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{A}_H &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\right) + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H] + \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)_H. \end{aligned} \quad (701)$$

Diese Gleichung nennt man die **Heisenberg-Gleichung**.
 Der Zustandsvektor im Heisenberg-Bild ist definiert als

$$|\psi\rangle_H = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\psi, t\rangle = |\psi, 0\rangle, \quad (702)$$

er ist also gleich dem Anfangswert im Schrödinger-Bild.
 Die beiden Bilder hängen durch eine unitäre Transformation zusammen und ergeben dieselben Messwerte, insbesondere gilt

$$\langle\psi, t|\hat{A}|\psi, t\rangle = \langle\psi|_H\hat{A}_H|\psi\rangle_H. \quad (703)$$

Bemerkungen:

1. Es gilt

$$\hat{H}_H = \hat{H}. \quad (704)$$

2. Es gilt

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H, \hat{A}_H] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H. \quad (705)$$

3. Es gilt

$$\hat{H}_H = \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{H}(\hat{x}_H, \hat{p}_H). \quad (706)$$

Beispiel: Harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad (707)$$

In diesem Fall lauten die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{x}_H &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H, \hat{x}_H] = \frac{1}{m}\hat{p}_H, \\ \frac{d}{dt}\hat{p}_H &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H, \hat{p}_H] = -m\omega^2\hat{x}_H. \end{aligned} \quad (708)$$

13.6 Freies Elektron im Magnetfeld

im Heisenberg-Bild

14 Addition von Drehimpulsen

22. Vorlesung: Donnerstag 11.1.2024
10, Schwabl;

14.1 Problemstellung

Einzelne Spins \hat{S}_1 und \hat{S}_2 können zu einem Gesamtspin koppeln

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2.$$

Ebenso können Bahndrehimpuls \hat{L} und Spin \hat{S} zu einem Gesamtdrehimpuls koppeln

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}.$$

Im allgemeinen haben wir das Problem, dass zwei Drehimpulsoperatoren \hat{J}_1 und \hat{J}_2 zu einem Gesamtdrehimpuls koppeln

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2.$$

Falls \hat{J}_1 und \hat{J}_2 zu verschiedenen Freiheitsgraden gehören, dann kommutieren sie untereinander

$$[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = 0.$$

Für die Raumkomponenten des Gesamtspins gilt

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= [(\hat{J}_1 + \hat{J}_2)_i, (\hat{J}_1 + \hat{J}_2)_j] \\ &= [(\hat{J}_1)_i, (\hat{J}_1)_j] + [(\hat{J}_2)_i, (\hat{J}_2)_j] \\ &= i\epsilon_{ijk}(\hat{J}_1)_k + i\epsilon_{ijk}(\hat{J}_2)_k = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \end{aligned} \quad (709)$$

Für den Gesamtdrehimpuls gilt also dieselbe Algebra, wie ursprünglich für den Bahndrehimpuls. Damit folgen auch dieselben Eigenschaften, die wir für den Bahndrehimpuls hergeleitet hatten.

Wir beginnen mit den Zuständen $|j_1, m_1\rangle$ und $|j_2, m_2\rangle$, wobei j_1 und j_2 fest sind und die m_i Werte $-j_i, \dots, j_i$ annehmen.

Aus diesen Zuständen können wir folgende Produktzustände bilden

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \quad (710)$$

Diese Zustände sind Eigenzustände der Operatoren

$$\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2,z},$$

mit den Eigenwerten

$$\hbar^2 j_1(j_1 + 1), \hbar m_1, \hbar^2 j_2(j_2 + 1), \hbar m_2.$$

Die Produktzustände sind auch Eigenwerte von der z -Komponente des Gesamtdrehimpulses

$$\begin{aligned} \hat{J}_z |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= (\hat{J}_{1,z} + \hat{J}_{2,z}) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (711)$$

Sie sind aber nicht Eigenfunktionen von \hat{J}^2

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= (\hat{J}_1^2 + 2\hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_2^2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ &= \hbar^2 (j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1)) |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \\ &\quad + 2\hat{J}_1\hat{J}_2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (712)$$

Man kann dies auch sehen, indem man

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad (713)$$

berechnet.

Wir suchen nun Eigenfunktionen

$$|j, m_j, j_1, j_2\rangle \quad (714)$$

der 4 miteinander kommutierenden Operatoren

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2,$$

mit den Eigenwerten

$$\hbar^2 j(j + 1), \hbar m_j, \hbar^2 j_1(j_1 + 1), \hbar^2 j_2(j_2 + 1).$$

14.2 Addition von Spin 1/2 Operatoren

Im einfachsten Fall koppeln wir zwei Spin 1/2 Operatoren \hat{S}_1 und \hat{S}_2 zum Gesamtspin \hat{S}

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2. \quad (715)$$

Insgesamt gibt es vier Möglichkeiten für die z -Komponenten der beiden Spins

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \\ |\uparrow\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, \\ |\downarrow\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle, \\ |\downarrow\downarrow\rangle &= |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (716)$$

Die Produktzustände auf der rechten Seite sind Eigenfunktionen von \hat{S}_1^2 , $\hat{S}_{1,z}$, \hat{S}_2^2 und $\hat{S}_{2,z}$.

$$\begin{aligned} \hat{S}_1^2 |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle &= \hbar^2 \frac{3}{4} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, \\ \hat{S}_{1,z} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle &= +\hbar \frac{1}{2} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, \\ \hat{S}_{2,z} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle &= -\hbar \frac{1}{2} |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (717)$$

Sie sind auch Eigenfunktionen von der z -Komponente des Gesamtspins $\hat{S}_z = \hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z}$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle &= +\hbar 1 |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \\ \hat{S}_z |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle &= 0, \\ \hat{S}_z |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle &= 0, \\ \hat{S}_z |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle &= -\hbar 1 |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (718)$$

Dies legt die Vermutung nahe, dass der Gesamtspin den Wert 1 besitzt.

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + 2\hat{S}_{1,x}\hat{S}_{2,x} + 2\hat{S}_{1,y}\hat{S}_{2,y} \\ &= \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+}. \end{aligned} \quad (719)$$

Wenden wir nun \hat{S}^2 auf die Zustände $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ an, so ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+}\right)|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + 0 + 0\right)|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \hbar^2 1(1+1)|\uparrow\uparrow\rangle,\end{aligned}\tag{720}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}^2|\downarrow\downarrow\rangle &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+}\right)|\downarrow\downarrow\rangle \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2 + 0 + 0\right)|\downarrow\downarrow\rangle \\ &= \hbar^2 1(1+1)|\downarrow\downarrow\rangle.\end{aligned}\tag{721}$$

Diese beiden Zustände besitzen also den Gesamtspin 1, der erste mit z -Komponente +1 und der zweite mit z -Komponenten -1 . Der fehlende Zustand mit Gesamtspin 1 und mit z -Komponente 0 kann wie folgt bestimmt werden:

$$\begin{aligned}\hat{S}_-|\uparrow\uparrow\rangle &= (\hat{S}_{1,-} + \hat{S}_{2,-})|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle.\end{aligned}\tag{722}$$

Normieren wir diesen Zustand, so erhalten wir

$$\frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

Die z -Komponente dieses Zustandes ist offensichtlich 0. Wir überprüfen nun den Gesamtspin

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+}\right) \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 - 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \hbar^2\right) \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \hbar^2 1(1+1) \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}.\end{aligned}\tag{723}$$

Wir haben dabei

$$\hat{L}_{\pm}\psi_{lm} = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\psi_{l,m\pm 1} \quad (724)$$

benutzt.

Der Orthogonale Zustand zur $z = 0$ Komponente lautet

$$\frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

Die z -Komponente dieses Zustandes ist offensichtlich 0. Wir überprüfen nun den Gesamtspin

$$\begin{aligned} \hat{S}_z^2 \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z} + \hat{S}_{1,+}\hat{S}_{2,-} + \hat{S}_{1,-}\hat{S}_{2,+} \right) \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^2 - 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 - \hbar^2 \right) \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (725)$$

Damit definieren wir die Tripletzustände

$$\begin{aligned} |1, +1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (726)$$

und den Singlettzustand

$$|0, 0\rangle = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (727)$$

14.3 Addition von Bahndrehimpuls und Spin 1/2 Operatoren

Nun koppeln wir einen Spin 1/2 Operator \hat{S} mit einem Bahndrehimpuls \hat{L} zum Gesamtspin \hat{J}

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (728)$$

Wir betrachten wieder Produkte der Eigenzustände von \hat{L} und \hat{S} . Insgesamt gibt es $2(2l + 1)$ Möglichkeiten

$$|l, m_l\rangle |\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad |l, m_l\rangle |\downarrow\rangle. \quad (729)$$

Die Produktzustände auf der rechten Seite sind Eigenfunktionen von \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 und \hat{S}_z .

Wir suchen die Eigenzustände von \hat{J}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 und \hat{J}_z .

Vermutlich hat j , die Quantenzahl von \hat{J}^2 die möglichen beiden Werte

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad j = l - \frac{1}{2}. \quad (730)$$

Das gäbe dann

$$2 \left(l + \frac{1}{2} \right) + 1 + 2 \left(l - \frac{1}{2} \right) + 1 = 2(2l + 1)$$

Möglichkeiten.

Wir benutzen wieder

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\pm} |l, m_l\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)} |l, m_l \pm 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{l^2 + l - m_l^2 \mp m_l} |l, m_l \pm 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{(l \pm m_l + 1)(l \mp m_l)} |l, m_l \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (731)$$

sowie

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} \\ &= l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+\end{aligned}\quad (732)$$

und bezeichnen die Eigenzustände von \hat{J}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 und \hat{J}_z als

$$|j, m_j, l\rangle,$$

d.h. die Quantenzahl $s = 1/2$ wird nicht explizit aufgeführt.

Behauptung:

$$\left|l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, l\right\rangle = |l, l\rangle |\uparrow\rangle \quad (733)$$

Beweis:

1. z -Komponente vom Gesamtspin:

$$\hat{J}_z |l, l\rangle |\uparrow\rangle = (\hat{L}_z + \hat{S}_z) |l, l\rangle |\uparrow\rangle = \hbar \left(l + \frac{1}{2}\right) |l, l\rangle |\uparrow\rangle. \quad \square \quad (734)$$

2. Gesamtspin:

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |l, l\rangle |\uparrow\rangle &= \hbar^2 \left(l(l+1) + \frac{3}{4} + 2l\frac{1}{2} + 0 + 0 \right) |l, l\rangle |\uparrow\rangle \\ &= \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) |l, l\rangle |\uparrow\rangle. \quad \square\end{aligned}\quad (735)$$

Wir haben nun den Zustand mit $j = l + 1/2$ und $m_j = +(l + 1/2)$ bestimmt. Um alle weiteren Zustände mit $j = l + 1/2$ und den kleineren Werten von m_j zu finden, wenden wir \hat{J}_- an

$$\begin{aligned}\hat{J}_- |l, l\rangle |\uparrow\rangle &= \hat{L}_- |l, l\rangle |\uparrow\rangle + \hat{S}_z |l, l\rangle |\uparrow\rangle \\ &= \hbar\sqrt{2} |l, l-1\rangle |\uparrow\rangle + \hbar |l, l\rangle |\downarrow\rangle.\end{aligned}\quad (736)$$

Normieren wir diesen Zustand, so finden wir

$$\left|l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, l\right\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, l-1\rangle |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, l\rangle |\downarrow\rangle. \quad (737)$$

Weiter Anwendungen von \hat{J}_z führen auf das allgemeine Ergebnis

$$\left| l + \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j - \frac{1}{2} \right\rangle |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j + \frac{1}{2} \right\rangle |\downarrow\rangle. \quad (738)$$

Dies kann mit vollständiger Induktion bewiesen werden.

Somit haben wir alle Zustände mit $j = l + 1/2$ bestimmt.

Für die Zustände mit $j = l - 1/2$ betrachten wir die orthogonalen Zustände und behaupten

$$\left| l - \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle = -\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j - \frac{1}{2} \right\rangle |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j + \frac{1}{2} \right\rangle |\downarrow\rangle. \quad (739)$$

Unsere Behauptung können wir beweisen, indem wir \hat{J}^2 und \hat{J}_z auf diese Zustände anwenden und finden

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \left| l - \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle &= \hbar \left| l - \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle, \\ \hat{J}^2 \left| l - \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle &= \hbar^2 \left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) \left| l - \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle. \end{aligned} \quad (740)$$

14.4 Allgemeiner Fall

Nun koppeln wir einen beliebigen Drehimpuls \hat{J}_1 mit einem weiteren beliebigen Drehimpuls \hat{J}_2 zum Gesamtdrehimpuls \hat{J}

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2. \quad (741)$$

Wir betrachten wieder Produkte der Eigenzustände von \hat{J}_1 und \hat{J}_2 . Insgesamt gibt es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Möglichkeiten

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \quad (742)$$

Die Produktzustände auf der rechten Seite sind Eigenfunktionen von \hat{J}_1^2 , $\hat{J}_{1,z}$, \hat{J}_2^2 und $\hat{J}_{2,z}$.

Wir suchen die Eigenzustände von \hat{J}^2 , \hat{J}_1^2 , \hat{J}_2^2 und \hat{J}_z , die wir wie folgt bezeichnen

$$|j, m_j, j_1, j_2\rangle. \quad (743)$$

Die Systeme $\{|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle\}$ und $\{|j, m_j, j_1 j_2\rangle\}$ sind beides vollständige Orthonormalsysteme und können daher ineinander entwickelt werden.

$$\begin{aligned} |j, m_j, j_1, j_2\rangle &= \sum c |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ &= \sum \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \end{aligned} \quad (744)$$

Zunächst können wir zeigen, dass $j'_i = j_i$ gilt. Wegen der Hermitizität von \hat{J}_i^2 gilt

$$\begin{aligned} \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | \left(\hat{J}_i^2 |j, m_j, j_1, j_2\rangle \right) &= \left(\langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | \hat{J}_i^2 \right) |j, m_j, j_1, j_2\rangle \\ j'_i(j'_i + 1) \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle &= j_i(j_i + 1) \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle \\ \Leftrightarrow j'_i &= j_i. \end{aligned} \quad (745)$$

Ebenso gilt $m = m_1 + m_2$

$$\begin{aligned} \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | \left(\hat{J}_{z,i} |j, m_j, j_1, j_2\rangle \right) &= \left(\langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | \hat{J}_{z,i} \right) |j, m_j, j_1, j_2\rangle \\ (m_1 + m_2) \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle &= m_j \langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2\rangle \\ \Leftrightarrow m_1 + m_2 &= m_j. \end{aligned} \quad (746)$$

Damit kennen wir die Summationsvariablen

$$|j, m_j, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2 = m_j - m_1} \underbrace{\langle j'_1 m_1 j'_2 m_2 | j, m_j, j_1, j_2 \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizient}} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \quad (747)$$

Tabelle 10.1. Werte von m

m	(m_1, m_2)	Entartung von m
$j_1 + j_2$	(j_1, j_2)	1
$j_1 + j_2 - 1$	$(j_1 - 1, j_2), (j_1, j_2 - 1)$	2
$j_1 + j_2 - 2$	$(j_1 - 2, j_2), (j_1 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2 - 2)$	3
\vdots	\vdots	\vdots
$j_1 - j_2$	$(j_1 - 2j_2, j_2), \dots, (j_1, j_2 - 2j_2)$	$2j_2 + 1$
$j_1 - j_2 - 1$	$(j_1 - 2j_2 - 1, j_2), \dots, (j_1 - 1, -j_2)$	$2j_2 + 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$-(j_1 - j_2)$	$(-j_1, j_2), \dots, (-j_1 + 2j_2, -j_2)$	$2j_2 + 1$
$-(j_1 - j_2) - 1$	$(-j_1, j_2 - 1), \dots, (-j_1 + 2j_2 - 1, -j_2)$	$2j_2$
\vdots	\vdots	\vdots
$-(j_1 + j_2)$	$(-j_1, -j_2)$	1

Tabelle 10.2. Entartung von m

m	Entartungsgrad
$m \geq j_1 - j_2 $	$j_1 + j_2 - m + 1$
$- j_1 - j_2 < m < j_1 - j_2 $	$j_1 + j_2 - j_1 - j_2 + 1$
$m \leq - j_1 - j_2 $	$j_1 + j_2 - m + 1$

Tabelle 10.3. Multipletts von j

Werte von j	Zugehörige m -Werte
$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2, \dots, -(j_1 + j_2)$
$j_1 + j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1, \dots, -(j_1 + j_2 - 1)$
\vdots	\vdots
$ j_1 - j_2 $	$ j_1 - j_2 , \dots, - j_1 - j_2 $

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 ,$$

15 Näherungsmethoden

Schwabl, Kapitel 11.

In der Quantenmechanik können wir nur sehr wenig Systeme allgemein analytisch lösen und wir müssen dann auf Näherungsmethoden zurückgreifen:

1. Störungstheorie: wenn sich das Problem nur wenig von einem exakt lösbaren (meist eine freie Theorie) unterscheidet.
2. Variationsmethode: zur Berechnung der Grundzustandsenergie, wenn man eine qualitative Vorstellung von der Form der Wellenfunktion hat.
3. WKB Methode: im nahezu klassischen Grenzfall

15.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

oder **Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie**.

Der Hamilton-Operator \hat{H} bestehe aus zwei Anteilen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad (748)$$

Der Hamilton-Operator \hat{H}_0 ist exakt lösbar, d.h.

$$\hat{H}_0 |n\rangle_0 = E_n^0 |n\rangle_0 \quad (749)$$

und die Eigenwerte E_n^0 und Eigenfunktionen $|n\rangle_0$ sind bekannt.

Gesucht sind die stationären Zustände $|n\rangle$ und die zugehörigen Eigenwerte E_n von \hat{H} , mit

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (750)$$

Nehmen wir an, der Störterm $\lambda \hat{H}_1$ sei klein im Vergleich zu \hat{H}_0 , dann können wir sowohl E_n also auch $|n\rangle$ in eine Taylorreihe in λ entwickeln

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \\ |n\rangle &= |n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \dots, \end{aligned} \quad (751)$$

wobei jeweils der erste Term der ungestörte ist.

Bemerkungen:

1. Häufig konvergiert diese Reihe nicht. Oft ist sie aber noch eine **asymptotische Reihe**, bei der die ersten Terme der Reihe den wirklichen Wert gut abschätzen und erst bei höheren Ordnungen eine Divergenz auftritt, z.B. in der Quantenfeldtheorie: **Renormalonen**. Es kann aber dennoch gelten: $\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = E_n^0$ und $\lim_{\lambda \rightarrow 0} |n\rangle = |n\rangle_0$.
2. Manchmal können die Energien und die Zustände nicht nach λ Taylorentwickelt werden. So ist z.B. die Bindungsenergie von Cooper-Paaren $\Delta \propto \exp(-1/V)$ - alle Terme der Taylor-Entwicklung dieser Funktion verschwinden.
3. Die Kleinheit des Störterms muss nicht immer an λ ersichtlich sein, sie kann auch in \hat{H}_1 versteckt sein.

15.1.1 Nicht entartete Störungstheorie

Wir setzen nun die Entwicklungen von \hat{H} , E_n und $|n\rangle$ in

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (752)$$

ein und erhalten

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1) (|n\rangle_0 + \lambda|n\rangle_1 + \lambda^2|n\rangle_2 + \dots) &= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) \\ &(|n\rangle_0 + \lambda|n\rangle_1 + \lambda^2|n\rangle_2 + \dots) \end{aligned} \quad (753)$$

Sortieren wir dies nach Potenzen von λ so finden wir

$$\hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^0|n\rangle_0, \quad (754)$$

$$\hat{H}_0|n\rangle_1 + \hat{H}_1|n\rangle_0 = E_n^1|n\rangle_0 + E_n^0|n\rangle_1, \quad (755)$$

$$\hat{H}_0|n\rangle_2 + \hat{H}_1|n\rangle_1 = E_n^2|n\rangle_0 + E_n^1|n\rangle_1 + E_n^0|n\rangle_2, \quad (756)$$

$$\dots = \dots \quad (757)$$

Die erste Gleichung hiervon ist trivial, in diesem Falle gleich der Voraussetzung, die weiteren Gleichungen werden neue Beiträge liefern.

Wir normieren den Zustand $|n\rangle$ so, dass gilt

$${}_0\langle n|n\rangle = 1, \quad (758)$$

d.h. alle Beiträge von $|n\rangle$, die parallel zu $|n\rangle_0$ sind, werden in den führenden Term $|n\rangle_0$ gesteckt.

Es folgt dann

$$\lambda_1 \langle n|n\rangle + \lambda_2^2 \langle n|n\rangle + \lambda_3^3 \langle n|n\rangle + \dots = 0, \quad (759)$$

woraus wiederum folgt

$$\lambda_1 \langle n|n\rangle = \lambda_2^2 \langle n|n\rangle = \lambda_3^3 \langle n|n\rangle = \dots = 0, \quad (760)$$

Multiplizieren wir Gleichung (755) von links mit ${}_0\langle n|$, so finden wir Die erste Korrektur zur Energie

$$\begin{aligned} {}_0\langle n|\hat{H}_0|n\rangle_1 + {}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0 &= E_n^1 \\ E_{n0}^0 \langle n|n\rangle_1 + {}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0 &= E_n^1 \\ E_n^1 &= {}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0. \end{aligned} \quad (761)$$

Ebenso erhalten wir aus Gleichung (756)

$$\begin{aligned} {}_0\langle n|\hat{H}_0|n\rangle_2 + {}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_1 &= E_n^2 \\ E_n^2 &= {}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_1. \end{aligned} \quad (762)$$

Hier muss also noch die erste Korrektur $|n\rangle_1$ zum Zustand $|n\rangle$ bestimmt werden.

Weil die ungestörten Zustände $\{|n\rangle_0\}$ ein vollständiges System bilden, kann die erste Korrektur $|n\rangle_1$ danach entwickeln

$$|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} c_m |m\rangle_0, \quad (763)$$

mit $c_m = {}_0\langle m|n\rangle_1$.

Multiplizieren wir Gleichung (755) von links mit ${}_0\langle m|$ ($m \neq n$), so finden wir die Koeffizienten c_m

$$\begin{aligned} {}_0\langle m|\hat{H}_0|n\rangle_1 + {}_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0 &= E_{n0}^0 \langle m|n\rangle_1 \\ E_{m0}^0 \langle m|n\rangle_1 + {}_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0 &= E_{n0}^0 \langle m|n\rangle_1 \\ E_n^0 c_m + {}_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0 &= E_n^0 c_m \\ c_m &= \frac{{}_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_n^0 - E_m^0}. \end{aligned} \quad (764)$$

Damit können wir nun die erste Korrektur zum Zustand $|n\rangle$ bestimmen

$$|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} \frac{{}_0\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle_0}{E_n^0 - E_m^0} |m\rangle_0 \quad (765)$$

Und damit die zweite Korrektur zur Energie

$$\begin{aligned} E_n^2 = {}_0\langle n | \hat{H}_1 | n \rangle_1 &= \sum_{m \neq n} \frac{{}_0\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle_0}{E_n^0 - E_m^0} {}_0\langle n | \hat{H}_1 | m \rangle_0 \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|{}_0\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle_0|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \end{aligned} \quad (766)$$

Bemerkungen:

1. Für den Grundzustand ist die Verschiebung 2.ter Ordnung E_0^2 immer negativ.
2. Falls die Matrixelemente von \hat{H}_1 von vergleichbarer Größe sind, dann liefern benachbarte Zustände den größten Beitrag zur Korrektur 2.ter Ordnung.

15.1.2 Entartete Störungstheorie

Nächstes Übungsblatt

15.2 Variationsmethode

Für einen Hamilton-Operator \hat{H} mit einer Basis $|n\rangle$ gilt für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n E_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle \\ &\geq E_0 \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle = E_0 \langle\psi|\psi\rangle \end{aligned} \quad (767)$$

Und somit

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (768)$$

Die Grundzustandsenergie ist also immer kleiner gleich dem Skalarprodukt eines beliebigen Zustandes ψ mit dem Hamilton-Operator, normiert auf die Norm dieses Zustandes. Das **Ritzsche Variationsprinzip** besteht nun darin, diesen beliebigen Zustand als Funktion eines oder mehrerer Parameter μ zu wählen $|\psi(\mu)\rangle$ und dann das Minimum von

$$E(\mu) \leq \frac{\langle\psi(\mu)|\hat{H}|\psi(\mu)\rangle}{\langle\psi(\mu)|\psi(\mu)\rangle}. \quad (769)$$

zu finden. Diese Minimum ist dann eine Obergrenze für die Grundzustandsenergie.

Ein Fehler in der Testwellenfunktion äußert sich dann nur in quadratischer Ordnung in der Energie:

$$|\psi\rangle = |n\rangle + |\epsilon\rangle \quad (770)$$

mit $\langle n|\epsilon\rangle =$ führt zu

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} &= \frac{\langle n|\hat{H}|n\rangle + \langle n|\hat{H}|\epsilon\rangle + \langle\epsilon|\hat{H}|n\rangle + \langle\epsilon|\hat{H}|\epsilon\rangle}{\langle n|n\rangle + \langle n|\epsilon\rangle + \langle\epsilon|n\rangle + \langle\epsilon|\epsilon\rangle} \\
 &= \frac{E_n\langle n|n\rangle + E_n\langle n|\epsilon\rangle + E_n\langle\epsilon|n\rangle + \langle\epsilon|\hat{H}|\epsilon\rangle}{1 + 0 + 0 + \langle\epsilon|\epsilon\rangle} \\
 &= \frac{E_n + \langle\epsilon|\hat{H}|\epsilon\rangle}{1 + \langle\epsilon|\epsilon\rangle} = E_n + \mathcal{O}(\epsilon^2). \tag{771}
 \end{aligned}$$

Die Energie wird beim Variationsprinzip also genauer bestimmt, als der Zustand.

15.3 WKB Methode

Dies wurde im Übungsblatt Nr. 6 eingeführt, ohne jedoch WKB Verfahren genannt zu werden.

16 Relativistische Korrekturen zum H-Atom

Schwabl, Kapitel 12

Wie bereits mehrfach erwähnt ist die Schrödinger-Gleichung eine nicht-relativische Gleichung. In der ersten Vorlesung hatten wir naiv die Geschwindigkeit des gebundenen Elektrons im H-Atom zu $0.0073c$, also etwas 1% der Lichtgeschwindigkeit abgeschätzt. Bei einer sehr hohen Messgenauigkeit ist also zu erwarten, dass wir relativistische Korrekturen im Spektrum sehen. Die Korrekturen wurden gefunden und werden auch **Feinstrukturkorrekturen** genannt, sie setzen sich aus folgenden drei Beiträgen zusammen:

1. Relativistische kinetische Energie
2. Spin-Bahn-Kopplung
3. Darwin-Term

Formal können diese drei Beiträge hergeleitet werden, wenn man die Dirac-Gleichung nach $(v/c)^2$ entwickelt. Wir werden hier heuristische Ableitungen dieser Terme benutzen.

16.1 Relativistische kinetische Energie

Die relativistische Energie-Impuls Beziehung kann für kleine Werte von p/m Taylor-entwickelt werden.

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^2c^2} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2c^2}} \\ &\approx mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m^3c^2} + \dots \end{aligned} \quad (772)$$

Diese Korrektur der relativistischen kinetischen Energie kann im ungestörten Hamiltonian des H-Atoms

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad (773)$$

durch den Störterm

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m^3c^2} \quad (774)$$

berücksichtigt werden. Dieser Störterm kann auch wie folgt dargestellt werden

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2mc^2} \left(\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2. \quad (775)$$

Damit können wir nun die erste Korrektur in Störungstheorie für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms ausrechnen:

$$\begin{aligned} \Delta E_{nlm} &= \langle nlm | \hat{H}_1 | nlm \rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left\langle nlm \left| \left(\hat{H}_0 \right)^2 + 2\hat{H}_0 \left(\frac{Ze^2}{r} \right) + \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right| nlm \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 + 2E_n \left\langle nlm \left| \frac{Ze^2}{r} \right| nlm \right\rangle + \left\langle nlm \left| \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right| nlm \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (776)$$

Erinnerung: die Lösungen des H-Atoms bestanden aus Radialfunktionen $R_{nl}(r)$, die von den Quantenzahlen n und l abhängen, und aus Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$, die von den Quantenzahlen l und m abhängen. Das Matrixelement eines Operators der Form $1/r^k$ hängt nicht von den Winkel Variablen ab und damit gilt

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 + 2E_n \left\langle \frac{Ze^2}{r} \right\rangle_{nl} + \left\langle \frac{Z^2 e^4}{r^2} \right\rangle_{nl} \right), \quad (777)$$

wobei hier das Matrix-Element nur zwischen den Radialfunktionen genommen wird.

Die ungestörte Energie hatten wir zu

$$E_n = -\frac{mc^2}{2} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (778)$$

bestimmt mit $\alpha = e^2/(\hbar c)$ und die Mittelwerte von $1/r$ und $1/r^2$ müssen wir noch berechnen. Für Letzteres können wir entweder direkt die Laguerre-Polynome einsetzen und dann die Definition des Skalarproduktes als Integral ausrechnen. Wir benutzen hier eine algebraische Methode und beweisen dazu den **Virialsatz** für den Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V(\vec{x})$:

1. Sei $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{H} und \hat{O} ein beliebiger Operator, dann gilt

$$\begin{aligned}\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{O}\right]|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{H}\hat{O}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{O}\hat{H}|\psi\rangle \\ &= E\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle - E\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = 0.\end{aligned}\quad (779)$$

2. Nun betrachten wir $\hat{O} = \hat{x} \cdot \hat{p}$ und bestimmen den Kommutator

$$\left[\hat{H}, \hat{x} \cdot \hat{p}\right] = -i\hbar \left(\frac{\vec{p}^2}{m} - \vec{x} \cdot \vec{\nabla}V(\vec{x}) \right). \quad (780)$$

3. Aus $\langle\psi|\left[\hat{H}, \hat{x} \cdot \hat{p}\right]|\psi\rangle = 0$ folgt damit

$$\left\langle\psi\left|\frac{\vec{p}^2}{m}\right|\psi\right\rangle = \langle\psi|\vec{x} \cdot \vec{\nabla}V(\vec{x})|\psi\rangle \quad (781)$$

4. Für das Coulomb-Potential wird dies zu

5. Wir erhalten mit $a = \hbar^2/(me^2) = \hbar/(m\alpha c)$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nl} = \frac{Z}{an^2}, \quad (782)$$

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl} = \frac{Z^2}{a^2n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}, \quad (783)$$

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl} = \frac{Z^3}{a^3n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \quad (784)$$

Setzen wir die ungestörte Energie (Gleichung (778)) und Gleichungen (782) und (782) in Gleichung (776) ein so erhalten wir

$$\begin{aligned}\Delta E_{nlm} &= -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{m^2c^4}{4} \alpha^4 \frac{Z^4}{n^4} - 2 \frac{mc^2}{2} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} Z e^2 \frac{Zm\alpha c}{\hbar n^2} + (Ze^2)^2 \frac{Z^2 m^2 \alpha^2 c^2}{\hbar^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \right) \\ &= -\frac{\alpha^4 m Z^4 c^2}{2} \left(\frac{1}{4n^4} - \frac{1}{n^4} + \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \right) \\ &= E_n \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(-\frac{3}{4} + \frac{n}{\left(l + \frac{1}{2}\right)} \right).\end{aligned}\quad (785)$$

Man erhält also eine Korrektur von der relativen Grössenordnung α^2 .

16.2 Spin-Bahn-Kopplung

Aus der Dirac-Gleichung folgt auch die Spin-Bahn-Kopplung, die durch folgenden Störterm beschrieben werden kann

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m^2c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r), \quad (786)$$

mit der potentiellen Energie $V(r) = e\Phi(r)$ im elektrostatischen Potential $\Phi(r)$.

Für das Wasserstoff-Atom wird dies zu

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m^2c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \frac{Ze^2}{r^3}. \quad (787)$$

Wegen des Spin-Bahn Terms kommutiert der Hamilton-Operator nicht mit \hat{L}_z , damit sind die ursprünglichen Eigenfunktionen von \hat{H}_0 (H-Atom ohne relativische Korrekturen), keine Eigenfunktionen von \hat{H} .

Daher betrachten wir nun den Gesamtdrehimpuls

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (788)$$

und benutzen

$$\hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (789)$$

Die Eigenzustände $|l \pm 1/2, m_j, l\rangle$ diagonalisieren dann den Operator $\hat{S} \cdot \hat{L}$

$$\hat{S} \cdot \hat{L} \left| l \pm \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix} \left| l \pm \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle. \quad (790)$$

Dies sind dann also Eigenfunktionen vom vollen Hamilton-Operator!

Die Ortsdarstellung dieser Eigenfunktionen lautet

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \rangle &= R_{nl}(r) \left(\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j - \frac{1}{2} \right\rangle | \uparrow \right) \\ &\quad + \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left| l, m_j + \frac{1}{2} \right\rangle | \downarrow \rangle \end{aligned} \quad (791)$$

Mit diesen Zuständen können wir nun die Korrektur zur Energie im H-Atom in Störungstheorie bestimmen

$$\begin{aligned}
\Delta E_{nlm} &= \left\langle n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \left| \hat{H}_2 \right| n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle \\
&= \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \left\langle n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \left| \frac{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}}{r^3} \right| n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle \\
&= \frac{Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2} \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix} \left\langle n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \left| \frac{1}{r^3} \right| n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l \right\rangle \\
&= \frac{Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2} \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}. \tag{792}
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich dann für die Summe der beiden relativistischen Korrekturen

$$\Delta E_{nlm} = -E_n \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{(j + \frac{1}{2})} \right), s \neq 0. \tag{793}$$

Hier sieht man also nochmal, dass der kombinierte Drehimpuls j die relevante Größe ist.

16.3 Darwin-Term

Das Matrix-Element von $1/r^3$ divergiert bei $l = 0$, also dem s -Zustand. Diese Divergenz wird durch den Darwin-Term, der nur für den s -Zustand auftritt aufgehoben

$$\Delta E_{nlm} = -E_n \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{(j + \frac{1}{2})} \right). \tag{794}$$

16.4 Weitere Korrekturen

- Lamb-Shift: durch Quantenelektrodynamik (1947)
- Hyperfeinstruktur: Kern-Spin (magnetisches Moment des Kernes) erzeugt Magnetfeld. Wechselwirkung von diesem Magnetfeld mit dem Elektron führt zur Hyperfein-Wechselwirkung.

17 Vielteilchensysteme

25. Vorlesung: Dienstag 23.1.2024

xxx, Kapitel xx

17.1 Identische Teilchen

17.1.1 Fermionen und Bosonen

Wir betrachten N identische Teilchen (z.B. Elektronen und Neutronen). Der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \hat{H}(1, 2, \dots, N) \quad (795)$$

ist symmetrisch in den Variablen $1, 2, \dots, N$ (weil identisch), welche Orts- und Spin-Freiheitsgrade beinhalten. Ebenso schreiben wir die Wellenfunktion als

$$\Psi = \Psi(1, 2, \dots, N). \quad (796)$$

Nun definieren wir einen Permutationsoperator \hat{P}_{ij} der das Teilchen i mit dem Teilchen j vertauscht.

$$\hat{P}_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N). \quad (797)$$

Es gilt offensichtlich $\hat{P}_{ij}^2 = \mathbb{1}$ und damit hat \hat{P}_{ij} die möglichen Eigenwerte ± 1 . Damit gilt für jedes Element \hat{P} der Permutationsgruppe (entweder einzelne Permutationen \hat{P}_{ij} oder Produkte daraus):

$$\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P} \quad (798)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij} & \left(\hat{H}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \right) \\ & = \hat{H}(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \\ & = \hat{H}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \\ & = \hat{H}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)\hat{P}_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N). \quad \square \end{aligned} \quad (799)$$

Weiter gilt: Sei $\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$ eine Eigenfunktion von \hat{H} mit Eigenwert E , dann gilt dies auch für $\hat{P}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$

Beweis:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \Rightarrow \hat{H}\hat{P}\Psi = \hat{P}\hat{H}\Psi = \hat{P}E\Psi = E\hat{P}\Psi. \quad \square \quad (800)$$

Für jeden symmetrischen Operator $\hat{S}(1, \dots, N)$ gilt entsprechend

$$\hat{P}\hat{S} = \hat{S}\hat{P}, \text{ i.e. } [\hat{P}, \hat{S}] = 0, \quad (801)$$

$$\langle \hat{P}\psi | \hat{S} | \hat{P}\psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}^T \hat{S} \hat{P} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}^T \hat{P} \hat{S} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle. \quad (802)$$

D.h. die Erwartungswerte symmetrischer Operatoren sind bezüglich der Zustände Ψ und $\hat{P}\Psi$ gleich. Da identische Teilchen von physikalischen Einwirkung gleich beeinflusst werden, sind alle physikalischen Operatoren symmetrisch. Somit sind die Zustände

$$\Psi(1, \dots, N) \quad \text{und} \quad \hat{P}\Psi(1, \dots, N) \quad (803)$$

nicht voneinander zu unterscheiden.

Welche Zustände sind in der Natur realisiert? Alle? Nur vollkommen symmetrische oder anti-symmetrische? Letztere sind definiert durch

$$\hat{P}_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \pm \Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N). \quad (804)$$

Bei zwei Teilchen sehen die total symmetrischen und antisymmetrischen Zustände wie folgt aus

$$\Psi_s(1, 2) := \frac{\Psi(1, 2) + \Psi(2, 1)}{\sqrt{2}}, \quad (805)$$

$$\Psi_a(1, 2) := \frac{\Psi(1, 2) - \Psi(2, 1)}{\sqrt{2}}. \quad (806)$$

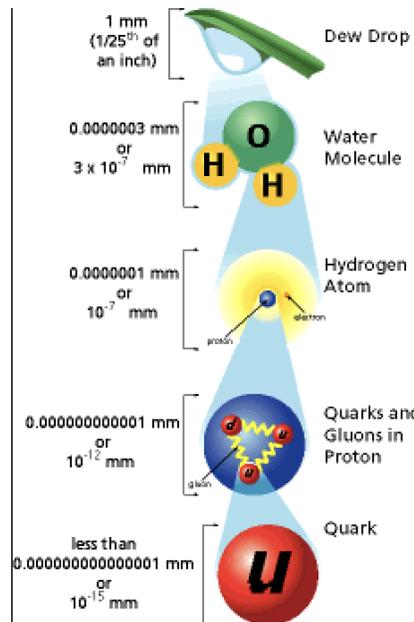
Ein vollkommen (anti-)symmetrischer Zustand bleibt dies für alle Zeiten, weil jede physikalische Störung symmetrisch ist.

Experimentell ergibt sich, dass alle elementaren Teilchen entweder total symmetrische (**Bosonen**) oder anti-symmetrische (**Fermionen**) Wellenfunktionen besitzen.

Weiter stellt ich experimentell fest, dass Bosonen ganzzahligen Spin besitzen und Fermion halbzahligen.

17.1.2 Elementarteilchen

Aus **Streuexperimenten** hat man den fundamentalem Aufbau der Materie gelernt:



Atome bestehen aus Elektronen und dem Atomkern. Nach heutigem Kenntnisstand sind Elektronen elementare Teilchen und besitzen den Spin $1/2$. Der Atomkern besteht aus Nukleonen, i.e. Protonen und Neutronen, welche ebenfalls Spin $1/2$ besitzen. Protonen und Neutronen bestehen in erster Näherung aus drei Quarks mit je Spin $1/2$, die nach heutigem Kenntnisstand ebenfalls elementar sind.

Gegenwärtig sind folgende elementaren Kräfte und Teilchen bekannt:

- **Spin 1: Fundamentale Kräfte (Wechselwirkungen)** werden durch Eichbosonen vermittelt:
 - Elektromagnetische Kraft: Photon γ mit Spin 1 und Masse 0.
 - Starke Kraft: 8 Gluonen mit Spin 1 und Masse 0.
 - Schwache Kraft: W^\pm , Z -Bosonen mit Spin 1 und einer Masse von fast 100 Protonmassen.
 - Schwerkraft: hypothetisches Graviton mit Spin 2 und Masse 0.
- **Spin 1/2: Materiebestandteile**

Quarks

Leptonen

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} q = +2/3 \\ q = -1/3 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} q = 0 \\ q = -1 \end{pmatrix}$$

- Quarks und Leptons besitzen Spin 1/2.
- Quarks nehmen an allen Wechselwirkung teil, Leptonen nehmen nicht an der starken Wechselwirkung und Neutrinos nehmen nur an der schwachen Wechselwirkung und evtl. der Gravitation teil.
- Quarks kommen in der Natur nicht isoliert vor, sie werden durch die starke Kraft in **Hadronen** gebunden.
- Ein Proton besteht aus 3 Quarks: $p = |uud\rangle$ und besitzt Spin 1/2 sowie die Masse $1.627 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \equiv 938 \text{ MeV}$. Bindungszustände aus drei Quarks werden als **Baryonen** bezeichnet.
- Bindungszustände aus einem Quark und einem Antiquark werden als **Meson** bezeichnet und sie besitzen ganzzahligen Spin, z.B. Pion $\pi^+ = |u\bar{d}\rangle$ mit Spin 0 und Masse 140 MeV oder das B_s -Meson $B_s = |s\bar{b}\rangle$ mit Spin 0 und Masse 5.4 GeV.
- Lange Zeit kannte man nur Mesonen und Baryonen als Bindungszustände, mittlerweile hat man auch **exotische Hadronen** gefunden: **Tetraquarks** = 2 Quarks und 2 Antiquarks, **Pentaquarks** = 5 Quarks.
- Die Massen der elementaren Materiebausteine lauten:
 $m_u \approx 2 \text{ MeV}$, $m_d \approx 5 \text{ MeV}$, $m_s \approx 93 \text{ MeV}$, $m_c \approx 1.3 \text{ GeV}$,
 $m_b \approx 4.2 \text{ GeV}$, $m_t \approx 173 \text{ GeV}$,
 $m_{e^-} = 511 \text{ keV}$, $m_{\mu^-} = 106 \text{ MeV}$, $m_{\tau^-} = 1.8 \text{ GeV}$, $0 < m_\nu < 0.8 \text{ eV}$.

• Spin 0: Massenerzeugung

Massen von Elementarteilchen widersprechen der Eichinvarianz der zugrundeliegenden Theorie. In der Quantenfeldtheorie wird Eichinvarianz jedoch also notwendig angesehen. Theoretisch sollte es also nur masselose Teilchen geben. Experimentell findet man hingegen nichtverschwindende Massen der Fermionen und der schwachen Eichbosonen. Der Higgs-Mechanismus ist ein Trick um dieses Problem zu lösen - also nichtverschwindende Teilchenmassen mit der Eichinvarianz in Einklang

zu bringen. Der Preis hierfür war die Postulierung eines neuen Teilchen, dem Higgs-boson H , mit Spin 0 und der Masse 125 GeV, welche 2012 am Large Hadron Collider (LHC) am CERN entdeckt wurde. Der LHC ist im Prinzip ein riesiges Mikroskop.

Diese Teilchenaufstellung wird im **Standardmodell der Teilchenphysik** zusammengefasst, welches durch Tausende von Experimenten mit einer sehr hohen Genauigkeit bestätigt wurde.

17.1.3 Pauli-Verbot

Für Fermionen gilt

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &= \Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \\ &= -\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N).\end{aligned}\quad (807)$$

Beschreiben nun i und j denselben Spinzustand $\vec{\sigma}$ und denselben Ort \vec{x} , dann gilt

$$\Psi(1, \dots, \vec{\sigma}\vec{x}, \dots, \vec{\sigma}\vec{x}, \dots, N) = -\Psi(1, \dots, \vec{\sigma}\vec{x}, \dots, \vec{\sigma}\vec{x}, \dots, N), \quad (808)$$

was nur erfüllt sein kann, wenn die Wellenfunktion verschwindet. D.h. zwei Fermionen können nicht im selben Spinzustand und am selben Ort sein. Dies ist das Pauli-Verbot. Im Falle von Bosonen können beliebig viele Teilchen im selben Zustand sein,

17.1.4 Nicht wechselwirkende Teilchen

Für N identische nicht wechselwirkende Teilchen kann der Hamilton-Operator \hat{H} als Summe von N identischen Einteilchen-Hamilton-Operatoren $\hat{H}(i)$ geschrieben werden:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i). \quad (809)$$

Die Lösungen der Einteilchen-Hamilton-Operatoren lauten

$$\hat{H}(i)\phi_{\alpha_i}(i) = E_{\alpha_i}\phi_{\alpha_i}(i), \quad (810)$$

wobei α_i die verschiedenen Einteilchenzustände numeriert.
Die Produktwellenfunktion

$$\phi_{\alpha_1}(1)\phi_{\alpha_2}(2)\dots\phi_{\alpha_N}(N) \quad (811)$$

ist eine Eigenfunktion von \hat{H} zum Eigenwert

$$E_{\alpha_1} + E_{\alpha_2} \dots + E_{\alpha_N}, \quad (812)$$

aber sie ist im Allgemeinen weder symmetrisch, noch antisymmetrisch.
Wir konstruieren im Folgenden (anti)symmetrische Wellenfunktionen aus diesen Produktfunktionen.

- **Fermionen:**

Für 2 Teilchen lautet der antisymmetrische Zustand

$$\Psi_a(1, 2) := \frac{\phi_{\alpha_1}(1)\phi_{\alpha_2}(2) - \phi_{\alpha_2}(1)\phi_{\alpha_1}(2)}{\sqrt{2}}. \quad (813)$$

Für N Teilchen lautet der antisymmetrische Zustand

$$\begin{aligned} \Psi_a(1, \dots, N) &:= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \phi_{\alpha_1}(1) \cdot \dots \cdot \phi_{\alpha_N}(N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_1}(1) & \dots & \phi_{\alpha_1}(N) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(1) & \dots & \phi_{\alpha_N}(N) \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (814)$$

Diese Determinante wird auch **Slater-Determinante** genannt. Da die Vertauschung von 2 Spalten bei der Determinante einen Faktor -1 ergibt, ist die Antisymmetrie der Wellenfunktion offensichtlich. Es gibt $N!$ zueinander orthogonale Summanden. $(-1)^P = \pm 1$ gibt an ob es sich um eine gerade oder ungerade Permutation handelt. Und es gilt das Pauli-Verbot: $\Psi_a(1, \dots, N) = 0$ für $\phi_{\alpha_i} = \phi_{\alpha_j}$, d.h. kein Zustand darf mehrfach besetzt sein.

- **Bosonen:**

Für 2 Teilchen lautet der symmetrische Zustand

$$\Psi_a(1, 2) := \frac{\phi_{\alpha_1}(1)\phi_{\alpha_2}(2) + \phi_{\alpha_2}(1)\phi_{\alpha_1}(2)}{\sqrt{2}}. \quad (815)$$

Für N Teilchen lautet der symmetrische Zustand

$$\Psi_a(1, \dots, N) := \frac{\sqrt{N_1!} \sqrt{N_2!} \dots}{\sqrt{N!}} \sum_{P'} \hat{P}' \phi_{\alpha_1}(1) \cdot \dots \cdot \phi_{\alpha_N}(N). \quad (816)$$

N_1 ist die Vielfachheit von α_1, \dots . Es werden nur Permutationen ausgeführt, die zu unterschiedlichen Termen führen. Es gibt $N!/(N_1!N_2!\dots)$ zueinander orthogonale Summanden. Jeder Zustand darf nun mehrfach besetzt sein.

Freie Teilchen in einem Volumen:

N wechselwirkungsfreie Teilchen seien in einem Volumen $V = L^3$ eingeschlossen. Die 1-Teilchenwellenfunktionen für freie Teilchen sind ebene Wellen

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{p}_i} &\propto e^{i\frac{\vec{p}_i \cdot \vec{x}_i}{\hbar}}, \\ E_{\vec{p}_i} &= \frac{\vec{p}_i^2}{2m}, \\ E &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}. \end{aligned} \quad (817)$$

Wählt man periodische Randbedingungen, so erhält man folgende diskrete Impulswerte

$$\vec{p}_i = \frac{2\pi\hbar}{L} \begin{pmatrix} n_{i,x} \\ n_{i,y} \\ n_{i,z} \end{pmatrix}, \quad (818)$$

mit $n_{i,j} \in \mathbb{Z}$.

- **Bosonen:** In diesem Fall ist der Grundzustand gegeben durch $\vec{p}_i = 0$, d.h. alle Teilchen sind im selben Zustand. Für die Gesamtenergie gilt dann $E = 0$. (**Bose-Einstein-Kondensation**)
- **Fermionen:** Nun unterliegen die Teilchen dem Pauli-Verbot und können nicht alle im selben Zustand sein. Jeder Impulszustand kann zweifach besetzt werden $s_z = \pm\hbar/2$. Den Grundzustand erhält wenn man die N Teilchen nacheinander jeweils auf die niedrigsten Zustände setzt. Im Impulsraum liegen diese Zustände wegen Gleichung (817) innerhalb einer Kugel

$$|\vec{p}_i| \leq \vec{p}_F \quad (819)$$

mit dem Radius \vec{p}_F (**Fermi-Impuls**).

Die Zahl der Zustände innerhalb der Fermi-Kugel ist gegeben durch

$$N = 2 \frac{V_{\text{Fermi-Kugel}}}{V_{\text{Elementar-Zelle}}} = 2 \frac{\frac{4}{3} p_F^3 \pi}{\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3} = \frac{p_F^3 L^3}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (820)$$

Das kann auch als Verteilung im Impulsraum mit einer Dichte von $\rho_p = 2/V_{\text{Elementar-Zelle}}$ interpretiert werden. Und N kann dann bestimmt werden, in dem man über diese Dichte integriert

$$N = \int_0^{p_F} d^3 p \rho_p = 4\pi \rho_p \int_0^{p_F} dp p^2 = \frac{4}{3} p_F^3 \pi \rho_p. \quad (821)$$

Für die Teilchenzahldichte n (im Ortsraum) gilt damit

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N}{L^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (822)$$

Die Gesamtenergie bestimmt man dann via

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} = \int_0^{p_F} d^3 p \rho_p \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{4\pi \rho_p}{2m} \int_0^{p_F} dp p^4 = \frac{4\pi \rho_p}{10m} p_F^5 \\ &= \frac{4}{3} p_F^3 \pi \rho_p \cdot \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} = \frac{3}{5} N \epsilon_F, \end{aligned} \quad (823)$$

mit der **Fermi-Energie** $\epsilon_F = p_F^2/(2m)$.

18 Streuung

26. Vorlesung: Donnerstag 25.1.2024
xxx, Kapitel xx

18.1 Introduction and Motivation

Most of our knowledge about the microcosm comes from scattering-experiments, like the Rutherford experiment (Geiger and Marsden 1909, Rutherford 1911) or the LHC.

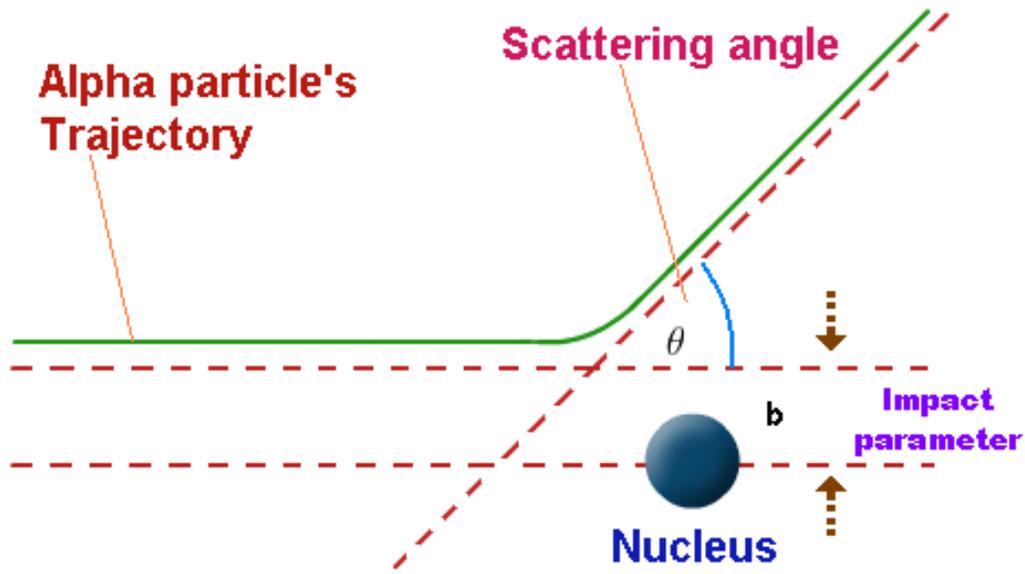
The scattering events take place on a microscopic level. Thus an understanding of the quantum mechanical foundations of scattering is the basis for a fundamental understanding of the building blocks of the Universe.



18.2 Basics in scattering

The basic idea of scattering is simple: we have a **target** and some **incident particles**, that are flying towards and interacting with the target. In the case

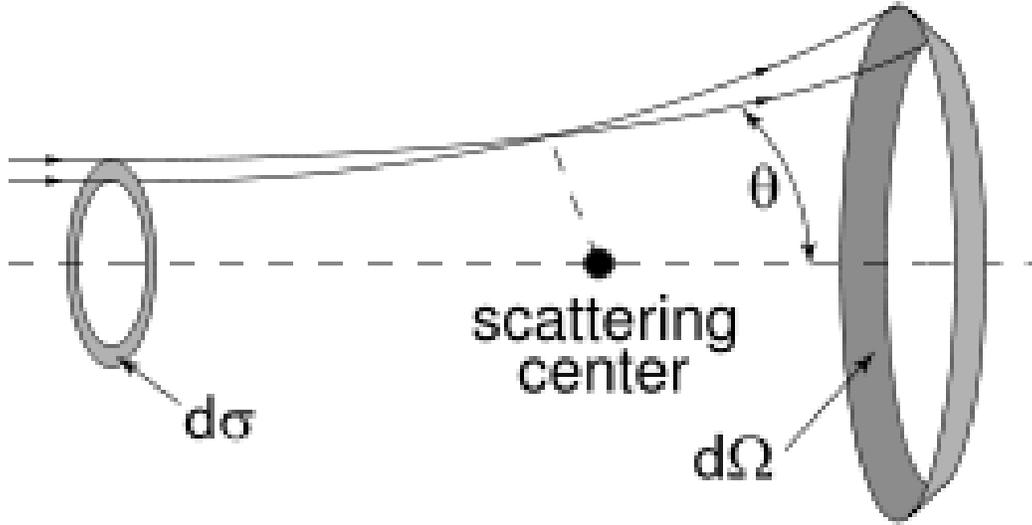
of Rutherford scattering the target was a gold foil and the incident particles were α particles (He^{++}), in the case of LHC both target and incident particles are protons.



The incident particle is described by its **energy** E and the **impact parameter** b . If the incident particles and the target stay intact during the scattering process, we speak about **elastic scattering**. In that case the position of the incoming particles after scattering is given by the scattering angle (θ, ϕ) and a radial variable r .

For simplicity we assume besides elastic scattering that the target is infinitely heavy and that there is an azimuthal symmetry of the interaction.

Now we denote by $\delta\sigma$ a small area of the incoming particle flux. All particle within $\delta\sigma$ will be scattered into the solid angle element $\delta\Omega$. If we normalise the solid angle element to a unit element $d\Omega$, then the corresponding area of the incoming particles reads $d\sigma$. Having an azimuthal symmetry, the problem looks like:



Integrating over the full solid angle $d\Omega$, will then give the effective area of the scattering target, called **total cross section** σ . Defining in addition the **differential cross-section** $d\sigma/d\Omega$ we get

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (824)$$

For classical scattering of a point-like particle on a hard sphere with radius R one gets e.g.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R^2}{4}, \quad (825)$$

$$\sigma = \pi R^2, \quad (826)$$

which coincides with our expectations above. The concept of (differential) cross sections can, however, also be applied to *soft* targets.

A beam of incoming particles can be described by the **luminosity** \mathcal{L} , which is defined as the number of incoming particles per unit area per time. The number of particles coming through the element $d\sigma$ per time is now called $d\dot{N}$ and we have

$$d\dot{N} = \mathcal{L}d\sigma = \mathcal{L} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (827)$$

Thus the differential cross section can also be defined as

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} := \frac{1}{\mathcal{L}} \frac{d\dot{N}}{d\Omega}, \quad (828)$$

which is many times used as the initial definition of the differential cross section. An elastic scattering event at LHC looks like

$$p + p \rightarrow p + p . \quad (829)$$

The total cross-section for this scattering at LHC with a proton energy of 7 TeV is

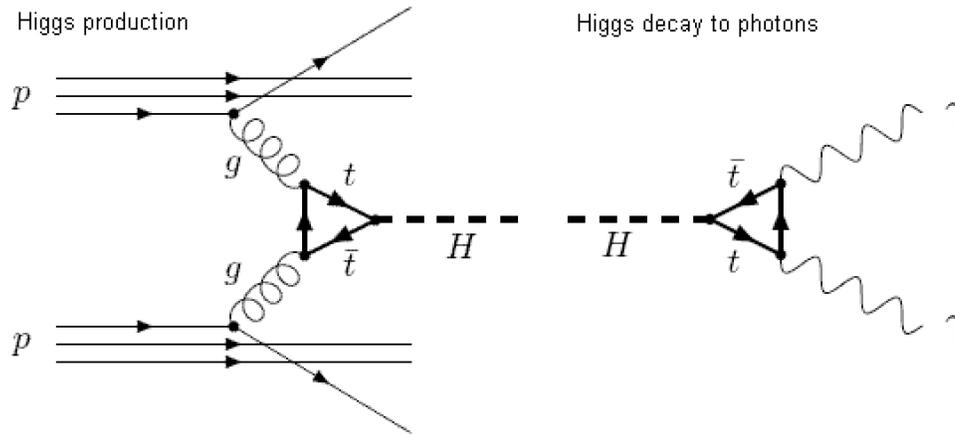
$$\sigma = (98.3 \pm 0.2(stat) \pm 2.8(syst)) \text{ mb}, \quad (830)$$

with the unit **barn** for measuring the cross section:

$$1\text{barn} = 1b = 10^{-28}m^2 = 100fm^2 . \quad (831)$$

The above concepts can also be generalised to **inelastic processes**, like the production of a Higgs particle

$$p + p \rightarrow X + H . \quad (832)$$



The cross section for this process is given by

$$\sigma \approx 20pb . \quad (833)$$

The number of events for an inelastic process can be determined from the **integrated luminosity**

$$\dot{N} = \mathcal{L}\sigma , \quad (834)$$

$$N = \int \mathcal{L}dt \cdot \sigma . \quad (835)$$

The LHC achieved until now an integrated luminosity of almost $150(fb)^{-1}$ per experiment (ATLAS and CMS), thus the following number of Higgs particles was produced at each experiment

$$N = 150fb^{-1}20pb = 3000\frac{pb}{10^{-3}pb} = 3 \cdot 10^6 . \quad (836)$$

To obtain the number of a certain Higgs decay like $H \rightarrow \gamma\gamma$ one has to multiply the overall number of produced Higgses with the corresponding branching ratio, in that case

$$N(H \rightarrow \gamma\gamma) = 3 \cdot 10^6 \cdot 2 \cdot 10^{-3} = 6000 . \quad (837)$$

The value of the differential cross section for two colliding particles A and B depends on the reference frame. Two commonly used ones are the laboratory frame (**L**), where particle B is in the beginning at rest and centre of mass frame (**CM**). One finds

$$\tan \theta_L = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \tau} , \quad (838)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = \frac{(1 + \tau^2 + 2\tau \cos \theta)^{\frac{3}{2}}}{|1 + \tau \cos \theta|} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} , \quad (839)$$

with $\tau = m_A/m_B$.

18.3 Potential scattering (general features)

— Chapter [13.2] of [?] —

18.3.1 The time-independent Schrödinger equation

Now we discuss a non-relativistic particle of mass m in a “fixed” potential, which is described by the 3-dimensional Schrödinger equation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}, t) , \quad (840)$$

where \vec{r} describes the distance of the particle from the origin of the potential. *The scattering of particle A with the mass m_A with a particle B with the mass m_B due to a force that is described by the potential is given by*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}, t) , \quad (841)$$

where μ is the reduced mass and $\vec{r} = \vec{r}_A - \vec{r}_B$ is the relative distance between the two particles. This is e.g. the case at LHC, where two protons scatter, but with relativistic energies. But here we concentrate first on the fixed potential case.

If the potential does not depend on time - as in our case - we can separate the time dependence and we look for **stationary solutions**:

$$\Psi(\vec{r}, t) =: \Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} . \quad (842)$$

The wave function $\Psi(\vec{r})$ has to satisfy the time-independent Schrödinger-equation

$$E\Psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) , \quad (843)$$

where the energy E of the particle can be written as

$$E =: \frac{\vec{p}^2}{2m} =: \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} =: \frac{1}{2}m\vec{v}^2 , \quad (844)$$

with

- the incident momentum of the particle $\vec{p} = \hbar\vec{k} = m\vec{v}$,
- the incident wave vector of the particle \vec{k} ,
- the incident velocity of the particle \vec{v} .

Now we can rewrite Eq.(843) as

$$\boxed{\left[\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 - U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = 0 ,} \quad (845)$$

with the redefined potential

$$U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r}) . \quad (846)$$

We will devote now some time to different solutions of Eq.(845)

18.3.2 The scattering amplitude

Now we derive a formula that directly relates the solution of the Schrödinger equation to a measurable cross section. In this subsection we do this by making several rough approximations in order to get fast to the desired result. Later on in this lecture course we will directly derive the formula.

For large distances \vec{r} we split up the wave function in an incoming part and a scattered part

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(\vec{r}) = (\vec{r}) + \Psi_{\text{scatt.}}(\vec{r}) . \quad (847)$$

For large distances we typically can neglect the potential term in Eq.(845) and we get the free equation

$$\left[\vec{\nabla}^2 + k^2 \right] \Psi(\vec{r}) = 0 , \quad (848)$$

Now we describe the incoming particle with a plane wave, i.e. all the incoming particles have the same momentum $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ and travel all in the same direction, which we choose to be the z -direction.

$$\Psi_{\text{inc.}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{ikz} . \quad (849)$$

This fulfils Eq.(848). With this normalisation we have for the particle density $\rho = |\Psi_{\text{inc.}}(\vec{r})|^2 = 1$, i.e. one particle per unit volume. Thus the incident flux reads

$$F = v \cdot \rho = \frac{p}{m} \rho , \quad (850)$$

$$\left[\frac{1}{m^2 s} \right] = \left[\frac{m}{s} \cdot \frac{1}{m^3} \right] . \quad (851)$$

The outgoing particle we want to describe by an outgoing wave

$$\Psi_{\text{scat.}}(\vec{r}) = f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} , \quad (852)$$

with the **scattering amplitude** $f(k, \theta, \phi)$. The factor $1/r$ is needed for the conservation of probability. This wave function also fulfils Eq.(848) for very large values of r .

Thus we get for the full asymptotic wave function:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} . \quad (853)$$

This ansatz can now be used to calculate the current density \vec{j}

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^* (\vec{\nabla} \Psi) - (\vec{\nabla} \Psi^*) \Psi \right] \quad (854)$$

and one gets

$$j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(k, \theta, \phi)|^2}{r^2} . \quad (855)$$

j_r represents the number of particles crossing a unit area per unit time and the detector presents a cross-sectional area $r^2 d\Omega$ to the scattered beam. The number of particles entering the detector per unit time, $d\dot{N}$ is

$$d\dot{N} = j_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega \quad (856)$$

$$= v |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega \quad (857)$$

$$= \frac{F}{\rho} |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega . \quad (858)$$

$d\dot{N}$ can also be described by the incoming flux F and the area $d\sigma$ these particles are crossing before the scattering:

$$d\dot{N} = F d\sigma = F \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega . \quad (859)$$

Equating the two expressions and using $\rho = 1$ we get our master formula

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta, \phi)|^2} . \quad (860)$$

The differential cross section is measured in the experiment, while the scattering amplitude is calculated in theory, by solving the Schrödinger equation.

18.4 Spherical Bessel functions

— Chapter [7.3/4] of [?] —

Before continuing with the scattering problems we make some mathematics interlude and introduce special functions that will be very helpful for the solution of the Schrödinger equation.

18.4.1 Separation of variables

This time we consider a spherical symmetric potential, i.e.

$$V(\vec{r}) = V(r = |\vec{r}|) . \quad (861)$$

To proceed we rewrite the Laplace operator in spherical coordinates

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} , \quad (862)$$

with the angular momentum operator \vec{L} . Next we separate the radial and the angular dependence of the solution

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{E,l,m} c_{Elm} \Psi_{Elm}(\vec{r}) \quad (863)$$

$$\Psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) , \quad (864)$$

with the radial function R_{El} that has to be determined and the well-known **spherical harmonics** Y_{lm} .

Coming back to the general case and using

$$\vec{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) , \quad (865)$$

we get for the time-independent Schrödinger equation in Eq.(845)

$$\left[\vec{\nabla}^2 - U(r) + \vec{k}^2 \right] \Psi_{Elm}(\vec{r}) = 0 \quad (866)$$

$$\left\{ \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] - U(r) + \vec{k}^2 \right\} R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = 0 \quad (867)$$

$$\left\{ \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - U(r) + \vec{k}^2 \right\} R_{El}(r) = 0 \quad (868)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + \vec{k}^2 \right] R_{El}(r) = 0 . \quad (869)$$

Eq.(869) is now the defining equation for the radial part of the Schrödinger equation - the only missing part.

18.4.2 The simplest Bessel function

To get an idea how the solutions of Eq.(869) might look like, we start by considering the free particle case, i.e. $U(r) = 0$ or the case of a constant potential

$$E - V_0 =: \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}. \quad (870)$$

Defining $u_{El}(r) := rR_{El}(r)$ we are left with

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \vec{k}^2 \right] \frac{u_{El}(r)}{r} = 0 \quad (871)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \vec{k}^2 \right] u_{El}(r) = 0. \quad (872)$$

Taking in addition $l = 0$ we get

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \vec{k}^2 \right] u_{E0}(r) = 0, \quad (873)$$

which is solved by

$$u_{E0}(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr). \quad (874)$$

Thus we finally get

$$R_{E0} = A \frac{\sin(kr)}{r} + B \frac{\cos(kr)}{r}. \quad (875)$$

The cosine part gives a divergent function R_{El} , at the origin, to avoid that one simply can set $B = 0$.

18.4.3 The spherical Bessel equation

Definition:

To solve Eq.(871) for general values of l we stay with the notion of the radial function R_{El} and make a change of variables to $\rho := kr$ to get

$$\boxed{\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] R_l(\rho) = 0,} \quad (876)$$

where we denoted $R_l(\rho) := R_{El}(\rho/k)$. Eq.(876) is called the **spherical Bessel differential equation**. We know the solution for $l = 0$ already

$$R_0(\rho) = Ak \frac{\sin(\rho)}{\rho} + Bk \frac{\cos(\rho)}{\rho} . \quad (877)$$

Deriving the solution:

Now we either look into some Mathbook or we use some tricks:

- Trick 1: For $l \neq 0$ we make the Ansatz $R_l(\rho) =: \rho^l \chi_l(\rho)$ and Eq.(876) turns into

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right] \chi_l(\rho) = 0 . \quad (878)$$

- Trick 2: Next we try to derive a recursion relation.
 - Assume that $\chi_l(\rho)$ is a solution of Eq.(878).
 - What equation holds for⁵

$$\chi(\rho) := \frac{1}{\rho} \frac{\partial \chi_l(\rho)}{\partial \rho} ? \quad (879)$$

To answer that we differentiate Eq.(878) once more

$$\left[\frac{\partial^3}{\partial \rho^3} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2(l+1)}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial}{\partial \rho} \right] \chi_l(\rho) = 0 \quad (880)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] (\rho \chi(\rho)) = 0 \quad (881)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2(l+2)}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + 1 \right] \chi(\rho) = 0 . \quad (882)$$

The last line is simply the defining equation for $\chi_{l+1}(\rho)$. Thus we have the desired recursion relation

$$\chi_{l+1}(\rho) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \chi_l(\rho)}{\partial \rho} \quad (883)$$

leading to

$$\chi_l(\rho) = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \chi_0(\rho) . \quad (884)$$

⁵Clearly, quite some trial and error was necessary to get this idea!

With $\chi_0(\rho)$ given in Eq.(875) we get two fundamental solutions of Eq.(876): the **spherical Bessel functions** (or **Spherical Bessel functions of the first kind**) $j_l(\rho)$ and the **spherical Neumann functions** (or **spherical Bessel functions of the second kind**) $n_l(\rho)$.⁶

$$R_l(\rho) = j_l(\rho) := (-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (885)$$

$$R_l(\rho) = n_l(\rho) := -(-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}. \quad (886)$$

The factors $\pm(-1)^l$ are just convention.

Eq.(871) is then solved by $R_{El}(r) = j_l(kr)$ and $R_{El}(r) = n_l(kr)$.

Properties of the solutions:

The first few functions read

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (887)$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \quad (888)$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho \quad (889)$$

and

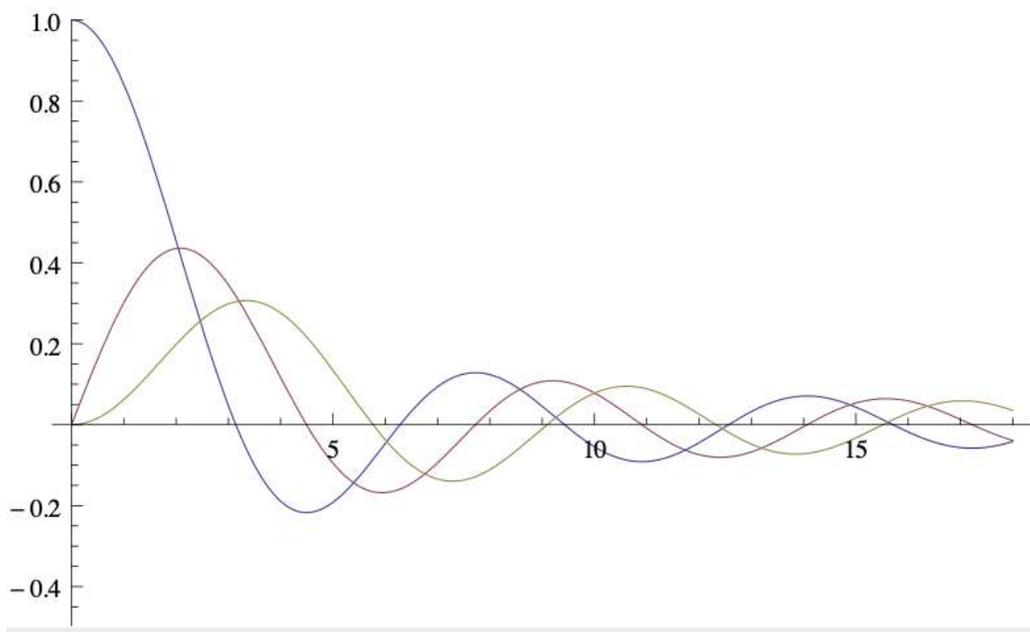
$$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} \quad (890)$$

$$n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (891)$$

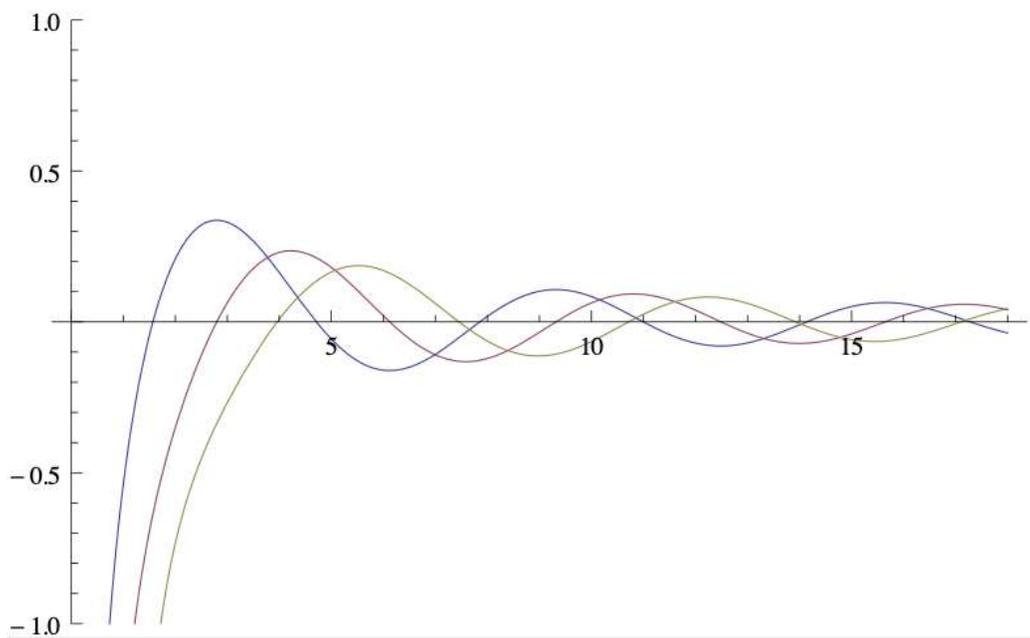
$$n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho \quad (892)$$

Spherical Bessel functions $j_0(x)$, $j_1(x)$ and $j_2(x)$

⁶The MATHEMATICA notation reads $j_l(x) = \text{SphericalBesselJ}[l, x]$ and $n_l(x) = \text{SphericalBesselY}[l, x]$.



Spherical Neumann functions $n_0(x)$, $n_1(x)$ and $n_2(x)$



For small values of ρ these functions can be expanded as

$$j_l(\rho) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \rho^l, \quad (893)$$

$$n_l(\rho) \approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} \rho^{-(l+1)}. \quad (894)$$

For large values of ρ the functions can be approximated by

$$j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right), \quad (895)$$

$$n_l(\rho) \approx -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (896)$$

Bessel functions J_ν :

The spherical Bessel functions $j_l(\rho)$ and the spherical Neumann functions $n_l(\rho)$, that can both be expressed in terms of **ordinary Bessel functions** $J_\nu(\rho)$ of order ν .

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (897)$$

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho) \quad (898)$$

Spherical Hankel functions $h_\nu^{(1,2)}$:

These functions are just linear combinations of the spherical Bessel and Neumann functions

$$h_\nu^{(1)}(\rho) = j_\nu(\rho) + in_\nu(\rho) \quad (899)$$

$$h_\nu^{(2)}(\rho) = j_\nu(\rho) - in_\nu(\rho) = [h_\nu^{(1)}(\rho)]^* \quad (900)$$

18.4.4 Summary of Bessel functions

Taking a vanishing potential in Eq.(869) we get

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \vec{k}^2 \right] R_{El}(r) = 0. \quad (901)$$

This equation is solved by

$$R_{El}(r) = A j_l(kr) + B n_l(kr). \quad (902)$$

Thus the whole 3-dimensional Schrödinger equation is solved by

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{E,l,m} c_{ELM} [A j_l(kr) + B n_l(kr)] Y_{lm}(\theta, \phi) . \quad (903)$$

This means that spherical harmonics in combination with spherical Bessel functions form a complete set of solutions for the free 3-dimensional Schrödinger equation.

18.4.5 Plane waves

Plane waves are a different complete set of solutions for the free 3-dimensional Schrödinger equation. Hence there is transformation between plane waves and spherical harmonics in combination with spherical Bessel functions.

We give here the expression of a plane wave in term of spherical Bessel functions and Legendre polynomials or spherical harmonics without derivation

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (904)$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\vec{k}) Y_{lm}(\vec{r}) . \quad (905)$$

18.5 The method of partial waves

18.5.1 Definition of partial waves

After our mathematics excursion we turn back to the ansatz for the general scattering solution, given in Eq.(853).

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} . \quad (906)$$

If we have a central potential $V = V(r)$, we have an azimuthal symmetry, i.e. there is no dependence on the angle ϕ . We choose the z -axis such, that the incoming particles fly along this axis. In that case the full wave function $\psi_{\vec{k}}$ and the scattering amplitude $f(k, \theta)$ can be expanded in terms of Legendre polynomials

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(k, r) P_l(\cos \theta) , \quad (907)$$

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k) P_l(\cos \theta) . \quad (908)$$

Each term in the sum in Eq.(907) is called a **partial wave** and it is simultaneously an eigenfunction of \vec{L}^2 and L_z with eigenvalues $l(l+1)\hbar^2$ and 0. Using the spectroscopic notation we denote the $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ wave by s, p, d, f, \dots wave.

The coefficients $f_l(k)$ in the expansion of the scattering amplitude are called **partial wave amplitudes**. According to our master formula for the cross

section, we get

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2 \quad (909)$$

$$= \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} f_{l'}^*(k) f_l(k) P_{l'}(\cos \theta) P_l(\cos \theta) . \quad (910)$$

$$\Rightarrow \sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_{-1}^{+1} \frac{d\sigma}{d\Omega} d \cos \theta \quad (911)$$

$$= 2\pi \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} f_{l'}^*(k) f_l(k) \int_{-1}^{+1} P_{l'}(x) P_l(x) dx \quad (912)$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} |f_l(k)|^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l . \quad (913)$$

Thus a knowledge of the partial wave amplitudes gives immediately the total cross section. The relation between the partial wave amplitudes and the radial function $R_l(k, r)$ in the partial wave can be derived as follows:

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (914)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} R_l(k, r) P_l(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k) P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (915)$$

$$\Rightarrow R_l(k, r) = (2l+1) i^l j_l(kr) + f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (916)$$

18.5.2 Structure of the solution - Phase shifts

Next we investigate a little more the general structure of the solution of the radial equation $R_l(k, r)$.

For large values of $r > d$ we neglect the contribution of the potential and get as a general solution

$$R_l(k, r) = B_l(k) j_l(kr) + C_l(k) n_l(kr) . \quad (917)$$

The coefficients B_l and C_l will be determined by matching with the region $r < d$, where the effects of the potential have to be taken into account. For

very large values of r we can use the asymptotic expression for the spherical Bessel and Neumann functions

$$R_l(k, r) = \frac{1}{kr} \left[B_l(k) \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) - C_l(k) \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right]. \quad (918)$$

By defining

$$A_l(k) := \sqrt{B_l(k)^2 + C_l(k)^2}, \quad (919)$$

$$\tan \delta_l(k) := -\frac{C_l(k)}{B_l(k)}, \sin \delta_l(k) := -\frac{C_l(k)}{A_l(k)}, \cos \delta_l(k) := \frac{B_l(k)}{A_l(k)}, \quad (920)$$

we get

$$R_l(k, r) = \frac{A_l(k)}{kr} \left[\cos \delta_l(k) \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) + \sin \delta_l(k) \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \quad (921)$$

$$= \frac{A_l(k)}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right). \quad (922)$$

The $\delta_l(k)$ are called **phase shifts** and they denote the strength of the scattering in the l -th partial wave.

If there is no potential at all acting, then the solution in Eq.(918) has to hold everywhere and in particular for $r = 0$. Since $n_l(r)$ is singular at $r = 0$, the corresponding coefficient has to be set to 0, $C_l(k) = 0$. In that case we get also a vanishing phase shift $\delta_l(k) = 0$.

Combing the asymptotic form of the radial function with our result from Eq.(916) we get

$$\frac{A_l(k)}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right) = (2l + 1) i^l \frac{\sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} + f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (923)$$

which can be solved by

$$A_l(k) = (2l + 1) i^l e^{i\delta_l(k)}, \quad (924)$$

$$f_l(k) = \frac{2l + 1}{2ik} [e^{2i\delta_l(k)} - 1]. \quad (925)$$

With this we get some final expressions for the scattering amplitude and for the differential cross section:

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l(k)} - 1] P_l(\cos \theta), \quad (926)$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{2l+1} |f_l(k)|^2, \quad (927)$$

$$= \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2 \delta_l(k). \quad (928)$$

Therefore the knowledge of the scattering phase is sufficient to solve a scattering problem.

Setting $\theta = 0$ in Eq.(926) we get

$$\Im [f(k, 0)] = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \Im \left[e^{i\delta_l(k)} \frac{e^{i\delta_l(k)} - e^{-i\delta_l(k)}}{2i} \right] \quad (929)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (930)$$

$$= \frac{k}{4\pi} \sigma. \quad (931)$$

This is the famous **Optical Theorem**: the total cross section is given by the forward ($\theta = 0$) scattering amplitude.

18.5.3 Convergence of the partial wave expansion

- For large values of l the term $l(l+1)/r^2$ will dominate over the potential $U(r)$ thus the latter one can be neglected and the solution is equal to the free solution, having no phase shift and thus no contribution to the cross section.
- An estimate gives that values of $l > ka$ can be neglected, if a being the extension of the potential.
- For $k \rightarrow 0$ only $l = 0$ contributes (**s-wave scattering**). Defining the **scattering length** l_s as

$$l_s := - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}, \quad (932)$$

one finds

$$f \xrightarrow{k \rightarrow 0} -l_s, \quad (933)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \xrightarrow{k \rightarrow 0} l_s^2, \quad (934)$$

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi l_s^2. \quad (935)$$

18.5.4 Resonances

According to Eq.(928) the l -th partial cross section reads

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_l(k)}. \quad (936)$$

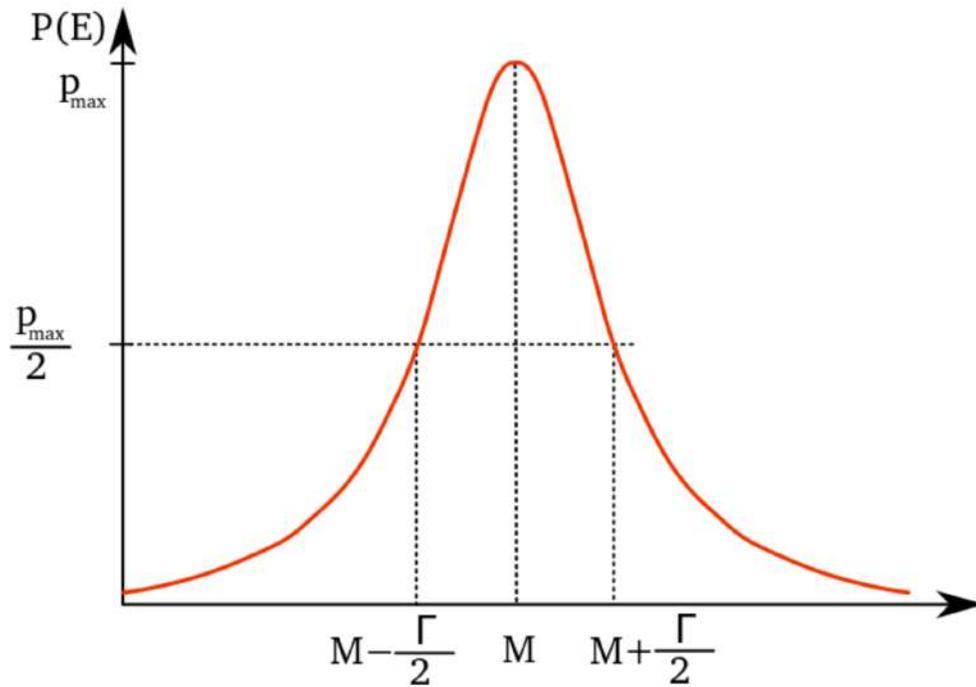
The energy where $\cot \delta_l(k)$ becomes zero is called **resonance energy** E_R . At the resonance one can write

$$\cot \delta_l(k) = \frac{E_R - E}{\Gamma(E_R)/2}, \quad (937)$$

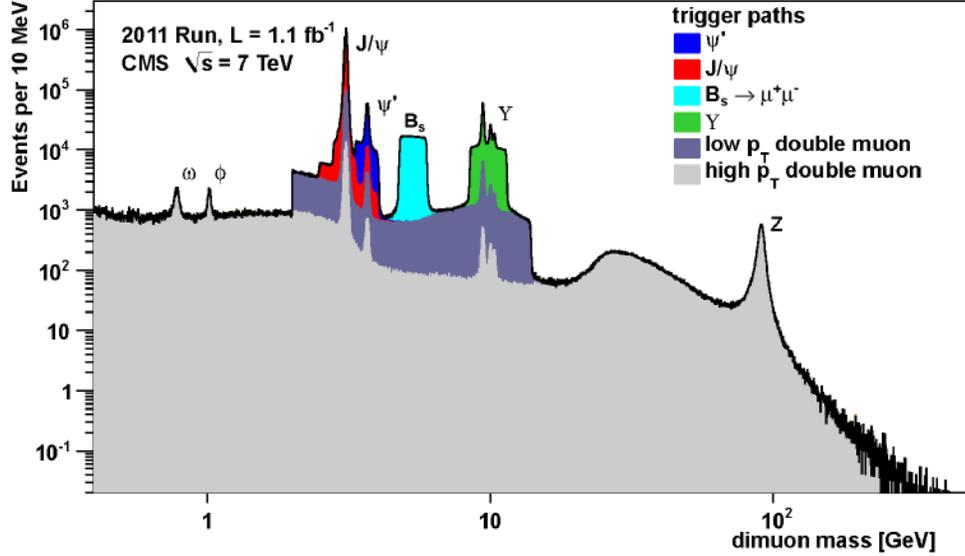
with the **resonance width** $\Gamma(E_R)$. This leads to the **Breit-Wigner resonance formula**

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\Gamma^2(E_R)/4}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2(E_R)/4}, \quad (938)$$

which is valid in the vicinity of a resonance. For $M \equiv E_R$ it looks like:



In practice the resonances are typically superimposed by background scattering, e.g. from other partial waves. Here we show an example for resonances found at the LHC, when looking for the dimuon final state in proton scattering: $p + p \rightarrow \mu^+ + \mu^-$.



18.6 The integral equation of potential scattering

— Chapter [13.5] of [?] —

In this lecture we start considering non-trivial potentials and we will re-express Eq.(845) by an integral equation.

18.6.1 Definition of the Green's function

Eq.(845) can be written as

$$\boxed{\left[\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 \right] \Psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\Psi(\vec{r}) .} \quad (939)$$

The general solution of this equation can be expressed as

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}' , \quad (940)$$

with $\Psi_0(\vec{r})$ being a solution of the homogeneous Schrödinger equation

$$\left[\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 \right] \Psi_0(\vec{r}) = 0 \quad (941)$$

and the **Green's function** $G_0(k, \vec{r} - \vec{r}')$, which is defined as

$$\left[\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 \right] G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (942)$$

If we choose the homogeneous solution to be a plane wave, we get

$$\Psi_{0, \vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} , \quad (943)$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}') d\vec{r}' . \quad (944)$$

18.6.2 Deriving the Green's function

In order to derive the Green's function, we consider the Fourier transformation of the definition of the Green's function, Eq.(942).

$$G_0(k, \vec{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \tilde{G}_0(k, \vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} , \quad (945)$$

$$(\Delta + k^2) G_0(k, \vec{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} (k^2 - q^2) \tilde{G}_0(k, \vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \stackrel{!}{=} \delta^{(3)}(\vec{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} , \quad (946)$$

$$\Rightarrow \tilde{G}_0(k, \vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2} . \quad (947)$$

Now we have a solution for the Fourier transform of the Green's function, so we are left with transforming $\tilde{G}_0(k, \vec{q})$ back to $G_0(k, \vec{r})$.

$$G_0(k, \vec{r}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{k^2 - q^2} \quad (948)$$

$$\stackrel{\text{Angular}}{=} \underset{\text{integr.}}{-\frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iqr}}{q^2 - k^2} dq} \quad (949)$$

$$\stackrel{\text{PFD}}{=} -\frac{1}{4\pi r} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{iqr}}{q+k} + \frac{e^{iqr}}{q-k} \right) dq \quad (950)$$

$$\stackrel{\text{Cauchy}}{=} -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} . \quad (951)$$

This is the final result for the Green's function!

18.6.3 Lippmann-Schwinger equation

Thus the general solution of Eq.(845) reads

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}') d\vec{r}' . \quad (952)$$

This integral equation is called the **Lippmann-Schwinger equation**.

For a potential with a finite extension, i.e. $U(r) = 0$ for $r > d$, we can investigate the limit $r \rightarrow \infty$ and $r' < d \ll r$ to get

$$|\vec{r}-\vec{r}'| \rightarrow r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}' + \dots , \quad (953)$$

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \rightarrow \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} + \dots , \quad (954)$$

with $\vec{k}' = \vec{r}/r k$. This leads to

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(k, \theta, \phi) , \quad (955)$$

with

$$\begin{aligned} f(k, \theta, \phi) &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ &= -\frac{1}{4\pi} \langle \Psi_{0,\vec{k}} | U | \Psi_{\vec{k}} \rangle . \end{aligned} \quad (956)$$

Remarks:

- This is now the promised derivation of Eq.(853).
- The **transition matrix element** $T_{\vec{k}'\vec{k}}$ is defined as

$$T_{\vec{k}'\vec{k}} := \langle \Psi_{0,\vec{k}} | V | \Psi_{\vec{k}} \rangle . \quad (957)$$

- The differential cross section can be expressed as

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |T_{\vec{k}'\vec{k}}|^2 . \quad (958)$$

18.7 The Born approximation

— Chapter [13.6] of [?] —

In this lecture we finally derive an approximation for the solution of the general scattering problem.

18.7.1 The Born series

Eq.(944) can be also written as

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}') = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} + \int G_0(k, \vec{r}' - \vec{r}'')U(\vec{r}'')\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}'')d\vec{r}'' . \quad (959)$$

Inserting Eq.(959) into Eq.(944) gives

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}') \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} + \int G_0(k, \vec{r}' - \vec{r}'')U(\vec{r}'')\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}'')d\vec{r}'' \right] d\vec{r}' . \quad (960)$$

In the next step we replace $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}'')$ by the whole integral solution and so on. In the end we get an expansion like

$$\Psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} , \quad (961)$$

$$\Psi_1(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} d\vec{r}' , \quad (962)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} d\vec{r}' \\ &\quad + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}') \int G_0(k, \vec{r}' - \vec{r}'')U(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''} d\vec{r}'' d\vec{r}' \quad (963) \\ \dots &= \dots \end{aligned}$$

If the potential U gives rise to a small perturbation of the system, then such an expansion might converge and the real result could be approximated by the first terms.

18.7.2 The first Born approximation

We get for the first Born approximation of the scattering amplitude

$$f^B(k, \theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}U(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}d\vec{r} \quad (964)$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{r}}U(\vec{r})d\vec{r} , \quad (965)$$

with the **momentum transfer** $\hbar\vec{\Delta}$.

$$\vec{\Delta} := \vec{k} - \vec{k}' . \quad (966)$$

Thus in Born approximation the scattering amplitude is simply the Fourier transform of the potential.

For elastic scattering $k = k'$ holds and thus $\vec{k} \cdot \vec{k}' = k^2 \cos \theta$. Hence we get

$$\begin{aligned} \Delta^2 &= |\vec{\Delta}|^2 = 2k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}' \\ &= 2k^2 (1 - \cos \theta) \\ &= 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} , \\ \Rightarrow \Delta &= 2k \sin \frac{\theta}{2} . \end{aligned} \quad (967)$$

Therefore the Born scattering amplitude for a central potential reads

$$f^B(k, \theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\phi' e^{i\Delta r \cos \theta'} \quad (968)$$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \int_{-1}^{+1} d \cos \theta' e^{i\Delta r \cos \theta'} \quad (969)$$

$$= -\frac{1}{\Delta} \int_0^\infty dr r \sin(\Delta r) U(r) . \quad (970)$$

18.7.3 The Coulomb potential

Taking the **Yukawa potential** as an example

$$U_Y(r) = U_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r} , \quad (971)$$

we get

$$f_Y^B = -\frac{U_0}{\alpha^2 + \Delta^2} \quad (972)$$

and thus

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \frac{U_0^2}{(\alpha^2 + \Delta^2)^2} . \quad (973)$$

The **Coulomb potential** can be considered as a special case of the Yukawa potential

$$U_C(r) = U_0 \frac{1}{r} \quad (974)$$

and we get

$$f_C^B = -\frac{U_0}{\Delta^2}, \quad (975)$$

leading to the famous Rutherford scattering formula

$$\frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \frac{U_0^2}{\Delta^4} \quad (976)$$

$$= \left(\frac{q_A q_B}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (977)$$

18.7.4 Propagator

The Green's function in

$$\begin{aligned} \Psi_n(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} d\vec{r}' \\ &+ \int G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \int G_0(k, \vec{r}' - \vec{r}'') U(\vec{r}'') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''} d\vec{r}'' d\vec{r}' \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (978)$$

is also called **propagator**. **Feynman diagrams** are a graphical display of the terms in Eq.(978). The first term corresponds to no interaction, the second term to an interaction at \vec{r}' and a propagation from \vec{r}' to \vec{r} . The third term to an interaction at \vec{r}'' , a propagation from \vec{r}'' to \vec{r}' , an interaction at \vec{r}' and a propagation from \vec{r}' to \vec{r} , a.s.o.

18.8 Advanced Topics in Scattering

18.8.1 Form factor

Assume that the potential is given by an extended distribution of electric charge. Considering the interaction of this distribution with another charge e we have the following potential

$$V(\vec{r}) = \int \frac{Ze^2}{s} \rho(r') d\vec{r}', \quad (979)$$

with $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$. For the scattering amplitude we obtain

$$f(k, \theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{r}} \int \frac{Ze^2}{s} \rho(r') d\vec{r}' d\vec{r} \quad (980)$$

$$= -\frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{\Delta}\cdot(\vec{r}'+\vec{s})} \int \frac{1}{s} \rho(r') d\vec{r}' d\vec{r} \quad (981)$$

$$= -\frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{r}'} \rho(r') d\vec{r}' \int e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{s}} \frac{1}{s} d\vec{r} \quad (982)$$

$$= -\frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \tilde{\rho}(\vec{k} - \vec{k}') \int e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{s}} \frac{1}{s} d\vec{s} \quad (983)$$

$$= \tilde{\rho}(\vec{k} - \vec{k}') f_{Rutherford}(k, \theta) . \quad (984)$$

The Fourier transform of the charge distribution, $\tilde{\rho}$, is called the **form factor** of the extended object. This is a very general result: the cross-section of an extended object is given by the cross-section of the corresponding point like object times the form factor squared.

$$\frac{d\sigma_{Extended}}{d\Omega} = |\tilde{\rho}|^2 \frac{d\sigma_{Point-like}}{d\Omega} . \quad (985)$$

The Fourier transformation of the charge distribution can now be obtained by comparing the measurement of the differential cross section with the calculation of the corresponding point-like cross section.

18.8.2 Electron scattering on nucleon

Thus information about the size of a nucleon or more generally about the charge distribution of a nucleon can be obtained by investigating the scattering of electrons and nucleon. For a realistic investigation, however, more effects have to be taken into account:

- a) Scattering of an electron at a static, fixed potential

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Rutherford} .}$$

- b) Electron has spin 1/2

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott}^* = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Rutherford} \left(1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right),$$

with $\beta = v/c$.

c) Finite mass of the nucleon

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott}^* \frac{E'}{E}.$$

Four momentum transfer: $q^2 = (p - p')^2 \approx \frac{4EE'}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$; $Q^2 := -q^2$.

d) The nucleon has a magnetic moment

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{s=1/2-Point} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott} \left[1 + 2\tau \tan^2 \frac{\theta}{2}\right],$$

with $\tau = Q^2/(4M^2c^2)$.

e) The nucleon has an anomalous magnetic moment ($g \neq 2$) and it is extended (form factor).

$$\mu_p = \frac{g_p}{2} \mu_N = +2.79 \mu_N = G_M^p(Q^2 = 0),$$

$$\mu_n = \frac{g_n}{2} \mu_N = -1.91 \mu_N = G_M^n(Q^2 = 0),$$

$$\text{nuclear magneton: } \mu_N = \frac{eh}{2m_p} = \frac{m_e}{m_p} \mu_B.$$

One would expect the following structure:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott} F^2(Q^2) \left[1 + 2\tau \tan^2 \frac{\theta}{2}\right],$$

with $F(0) = g/2$.

The electric charge and the magnetic current have, however, different distributions, thus we get two different form factors. Due to historic reasons one writes:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{Mott} \left[\frac{G_E^2(Q^2) + \tau G_M^2(Q^2)}{1 + \tau} + 2\tau G_M^2(Q^2) \tan^2 \frac{\theta}{2} \right].$$

Rosenbluth-formula (1955)

Experimental investigations have given the following results:

$$\begin{aligned} G_E^p(Q^2) &= \frac{G_M^p(Q^2)}{2.79} = \frac{G_M^n(Q^2)}{-1.91} = G^{Dipole}(Q^2), \\ G^{Dipole}(Q^2) &= \frac{1}{\left(1 + \frac{Q^2}{0.71 \text{GeV}^2}\right)^2}, \\ G_E^n(Q^2) &\approx 0. \end{aligned}$$

In the end one gets e.g. information about the structure and the size of a proton: it turns out that a good fit for the charge density of the nucleon is given by a Fermi distribution

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{r-R}{a}\right]}, \quad (986)$$

with $R \approx 1 \text{fm}$, $a \approx 0.5 \text{fm}$ and $\rho_0 \approx 3 \cdot 10^{17} \text{kg/m}^3$.

A state-of-the quantum field theoretical investigation of nucleon form factors can e.g. be found in [?].

18.8.3 Collisions between identical particles

— Chapter [13.7] of [?] —

If we consider the scattering of two identical particles, then an event with the angular coordinates (θ, ϕ) cannot be distinguished from an event with the

angular coordinates $(\pi - \theta, \pi + \phi)$. Thus interference can occur and the corresponding scattering amplitudes have to be added. We get for the differential cross section (for finding a particle at (θ, ϕ))

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \pi + \phi)|^2 \quad (987)$$

$$= |f(\theta, \phi)|^2 + |f(\pi - \theta, \pi + \phi)|^2 + 2\Re(f(\theta, \phi)f^*(\pi - \theta, \pi + \phi)) , \quad (988)$$

which differs from the classical expectation of

$$\frac{d\sigma_{\text{classic}}}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 + |f(\pi - \theta, \pi + \phi)|^2 . \quad (989)$$

19 Zeitabhängige Störungstheorie

26. Vorlesung: Donnerstag 25.1.2024

xxx, Kapitel xx

20 Quantencomputing

28. Vorlesung: Donnerstag 1.2.2024
Nielsen, Chuang; Kapitel 1

20.1 Grundlagen

20.1.1 Definition Q-Bit

Ein klassisches **Bit** kann in den beiden Zuständen **0** und **1** sein, entweder in **0** oder **1** und es gibt nichts dazwischen.

Für ein Quantum-Bit (**Qbit**) gibt es ebenso zwei Basis-Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$, aber der allgemeinste Qbit Zustand lautet

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (990)$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ und der Normierung $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Ein Q-bit kann als beliebiger Vektor in einem zwei-dimensionalen Vektorraum angesehen werden und hat unendlich viele Einstellungen.

Wenn man das Qbit hingegen misst, dann erhält man entweder den Zustand $|0\rangle$ oder den Zustand $|1\rangle$, jeweils mit der Wahrscheinlichkeit $|\alpha|^2$ oder $|\beta|^2$. Solange man das Qbit nicht misst, kann es in unendlich vielen Zuständen sein, während das klassische Bit immer nur in einem der beiden möglichen Zustände ist. Diese grosse Anzahl der möglichen Zuständen ist ein erstes Indiz auf das Potential von Quantencomputing.

Die Frage ist nun, ob man die unbeobachtbaren, unendlich vielen Einstellungen des allgemeinen Zustandes nutzen kann oder ob es nur bei den möglichen beiden Messwerten $|0\rangle$ und $|1\rangle$ bleibt und man keinen Vorteil im Vergleich zu klassischen Bits erhält.

20.1.2 Physikalische Realisation

Ein Q-bit mit den Einstellungen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ kann auf verschiedene Weisen physikalisch dargestellt werden, z.B.

- Spin-Projektion eines Teilchens entlang der z - Achse, mit der Vorschrift

$$\begin{aligned} |0\rangle &\equiv |\downarrow\rangle, \\ |1\rangle &\equiv |\uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (991)$$

- Energiezustände in einem Atom mit der Vorschrift

$$\begin{aligned} |0\rangle &\equiv |E_{n=0}\rangle, \\ |1\rangle &\equiv |E_{n>0}\rangle. \end{aligned} \tag{992}$$

- Die beiden Polarisationszustände eines Photons mit der Vorschrift

$$\begin{aligned} |0\rangle &\equiv |\text{links}\rangle, \\ |1\rangle &\equiv |\text{rechts}\rangle. \end{aligned} \tag{993}$$

- ...

Die Idee eines Quantencomputers besteht darin, einen quantenmechanischen Anfangszustand in eine präparierte physikalische Umgebung zu bringen, so dass die quantenmechanische Zeitentwicklung, effektiv eine Rechnung oder einen Algorithmus ausführt.

Komplexe Algorithmen werden erfordern, dass mehrere Qbits während der Rechnung miteinander verschränkt sind. Technisch wird daher Quantencomputing vom Aufbrechen der Verschränkung (**decoherence**), aber auch von Rauschen **Quantum noise** beschränkt werden.

Stand der Hardware:

1. Die Miniaturisierung klassischer Computer ist extrem vorangeschritten, so dass irgendwann das *klassische Limit* erreicht wird.
2. Es gibt erste Quantencomputer:
 - *Der zum Zeitpunkt der Veröffentlichung an der Anzahl der Qubits weltweit größte Quantencomputer, Osprey von IBM, hat 433 Qubits*
 - *Forscher*innen haben Googles Quantencomputer eine Aufgabe lösen lassen, für die ein Supercomputer 47 Jahre gebraucht hätte. Der verwendete Quantencomputer „Sycamore“ arbeitet mit 70 Qubits. Wie The Telegraph berichtet, ist er 241 Millionen Mal leistungstärker als die Vorgängerversion mit 53 Qubits.*
 - *Spiegel: Neuer Supercomputer in Betrieb Quantensprung in Jülich Am Forschungszentrum Jülich ist der erste Quantencomputer (Annealer von D-wave) mit mehr als 5000 Qubits außerhalb Nordamerikas in Betrieb. Die komplexe Rechenleistung soll unter anderem für die Klimaforschung genutzt werden.*

3. Es gibt in Siegen am Lehrstuhl Wunderlich einen Quantencomputer basierend auf Ionenfallen - Frimengründung EleQtron.
4. 12.4.2024: Physik im Apollo: Quantencomputing mit Dr. Heike Riel, IBM, Leiterin Quantencomuting Europe.

Quantencomputer sind nicht per Defintion schneller als klassische Computer. Um einen Vorteil gegenüber klassischen Computern zu erreichen, muss daher für jedes spezifische Problem ein **Quanten-Algorithmus** gefunden werden, der eine Beschleunigung gegenüber einem klassischen Algorithmus auf einem klassischen Rechner erreichen kann. Wird real ein Geschwindigkeitsvorteil auf einem Quantencomputer erreicht, sp spricht man von **Quantum supremacy**.

Einige wichtige Quanten-Algorithmen:

1. 1994: Shor's Algorithmus: Faktorisierung von Primzahlen - wichtig für Kryptographie
2. 1996: Grover's Algorithmus - Suchprobleme in Datenbanken
3. Quantum Fourier Transform
4. Simulation von Quantensystemen. Erste Schritte hierzu sind bereits gemacht worden.

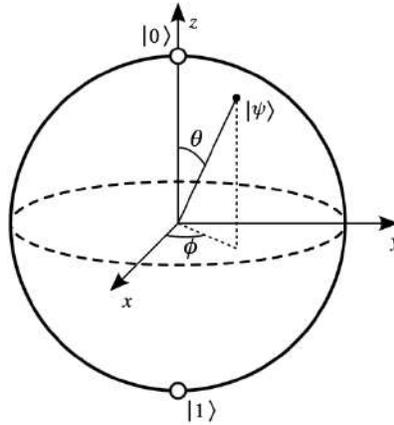
20.1.3 Bloch-Sphäre

Ausgehend von der Normierungsbedingung $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ kann man den allgemeinsten Zustand auch wie folgt darstellen

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (994)$$

Dies führt zur Darstellung des Zustandes auf der **Bloch-Sphäre**. Sonderfälle hierzu sind

$$\begin{aligned} \theta = 0, \phi = 0 &\Rightarrow |\psi\rangle = |0\rangle, \\ \theta = \pi, \phi = 0 &\Rightarrow |\psi\rangle = |1\rangle, \\ \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0 &\Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \equiv |+\rangle, \\ \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \pi &\Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \equiv |-\rangle. \end{aligned} \quad (995)$$



Die Werte $\phi = 0, \pi$ beschreiben reelle Koeffizienten α und β , während komplexe Werte dieser Koeffizienten mit den Werten $\phi \neq 0, \pi$ beschrieben werden.

20.1.4 Modifikation eines Qbits

Als nächstes stellen wir nun das Q-bit

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

durch einen Spaltenvektor dar

$$|\psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (996)$$

Quantenmechanische Operationen auf diesen Zustand werden durch lineare Operatoren, i.e. 2x2 Matrizen beschrieben. Damit die Norm des Zustandes erhalten bleibt, sind nur unitäre Transformationen \hat{U} erlaubt

$$\langle\psi|\psi\rangle \rightarrow \langle\hat{U}\psi|\hat{U}\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle. \quad (997)$$

Ebenso erinnern wir, dass quantenmechanische Zeitentwicklungsoperatoren immer unitär sind.

Eine komplexe 2x2 Matrix besitzt 8 Freiheitsgrade, die Unitaritätsbedingung liefert 4 Einschränkungen und daher besitzt eine unitäre 2x2 Matrix 4 unabhängige Parameter.

Klassisch ist die einzig mögliche, nicht-triviale Operation auf ein einzelnes

Bit, die **NOT**-Operation. Sie wandelt **0** in **1** und **1** in **0** um.
 Dies kann quantenmechanisch verallgemeinert werden auf

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \Rightarrow \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle.$$

Wir bezeichnen die quantenmechanische **NOT**-Operation mit \hat{X} und erhalten in Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{X} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}. \quad (998)$$

In der Quantenmechanik gibt es noch weitere nicht triviale Operation/Gates, die nur auf ein einzelnes Qbit wirken:

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (999)$$

Diese Operation lässt $|0\rangle$ unverändert und $|1\rangle$ erhält ein negatives Vorzeichen.

$$|0\rangle \rightarrow \hat{Z}|0\rangle = +|0\rangle, \quad (1000)$$

$$|1\rangle \rightarrow \hat{Z}|1\rangle = -|1\rangle. \quad (1001)$$

Weiterhin hat das sogenannte **Hadamard gate** eine große Bedeutung

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1002)$$

Die Operation wirkt wie folgt auf die Basiszustände

$$|0\rangle \rightarrow \hat{H}|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |+\rangle, \quad (1003)$$

$$|1\rangle \rightarrow \hat{H}|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = |-\rangle. \quad (1004)$$

Bemerkungen:

1. Graphisch werden diese Operationen/Gates wie folgt dargestellt
2. Für die bisher behandelten Single-Qbit-gates gilt:

$$\hat{X}^2 = \hat{Z}^2 = \hat{H}^2 = \mathbb{1}_2. \quad (1005)$$



3. Die Single Qbit Operationen können als Drehungen und Spiegelungen auf der Bloch-sphäre dargestellt werden.
4. Spezialfall: Das \hat{Z} -Gatter ist ein Spezialfall des Phasenverschiebungsgatters \hat{R}_ϕ :

$$\hat{R}_\phi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (1006)$$

5. Jede beliebige U(2) Matrix \hat{U} kann wie folgt zerlegt werden:

$$\hat{U} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\beta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{+i\frac{\beta}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{+i\frac{\delta}{2}} \end{pmatrix} \quad (1007)$$

6. Die Pauli-Matrizen bilden eine Basis von SU(2).
7. Messungen werden wie folgt dargestellt: Wird eine Messung durch-



geführt, dann kollabiert die Wellenfunktion. Die Koeffizienten der ursprünglichen Wellenfunktion bestimmen die Wahrscheinlichkeit des Messwertes.

20.2 2 Qbit Zustände

20.2.1 Basiszustände

Haben wir zwei Qbits, so gibt es folgende Basiszustände

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |0\rangle|0\rangle, \\ |01\rangle &= |0\rangle|1\rangle, \\ |10\rangle &= |1\rangle|0\rangle, \\ |11\rangle &= |1\rangle|1\rangle. \end{aligned} \tag{1008}$$

Der allgemeinste Zustand lautet dann

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle, \tag{1009}$$

mit der Normierungsbedingung

$$\sum_{i,j=0,1} |\alpha_{ij}|^2 = 1. \tag{1010}$$

Oft wird für das 2 Qbit System auch eine andere Basis benutzt

$$\begin{aligned} |\beta_{00}\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\beta_{10}\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\beta_{01}\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\beta_{11}\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{1011}$$

Diese Zustände werden auch **Bell-** oder **EPR Zustände** genannt.

20.2.2 Modifikation der 2-Qbit Zustände

Klassisch gibt es die 2-Bit Operationen: **AND**, **OR**, **XOR**, **NOR** und **NAND**-Gates. Man kann zeigen, dass das **NAND**-Gate ein **universelles Gate** ist. D.h. alle möglichen 2-bit Operationen können nur aus **NAND** gates aufgebaut werden.

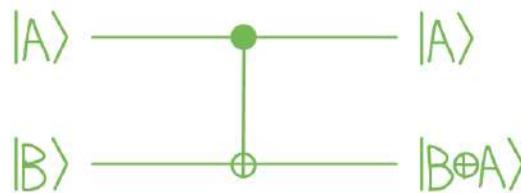
Bemerkungen:

1. Diese klassischen Gates sind nicht reversibel, d.h. aus dem Endergebnis kann nicht eindeutig auf die Werte der Eingangsbits geschlossen werden.
2. Quantenmechanische Zeitentwicklungsoperatoren sind immer unitär, und damit reversibel. Soll ein Quantecomputer auf quantenmechanischer Zeitentwicklung basieren, dann können wir nur reversible Gates erlauben.

Der Prototyp der 2Qbit Quantum Gates ist das **controlled-NOT** gate. Hier gibt es zwei Qbits als Eingang: $|A\rangle$ und $|B\rangle$ und ebenso zwei Ausgangs Qbits: $|A\rangle$ und $|C\rangle$. $|A\rangle$ wird hier auch als **Kontroll-Qbit** bezeichnet und es selbst, bleibt unverändert. Ist $|A\rangle = |0\rangle$ dann bleibt auch das **Target-Qbit** $|B\rangle$ unverändert, ist hingegen $|A\rangle = |1\rangle$, dann wird auf $|B\rangle$ eine NOT Operation angewendet.

$$\begin{aligned}
 |00\rangle &\rightarrow |00\rangle, \\
 |01\rangle &\rightarrow |01\rangle, \\
 |10\rangle &\rightarrow |11\rangle, \\
 |11\rangle &\rightarrow |10\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{1012}$$

Das CNOT Gatter wird wie folgt graphisch dargestellt: CNOT kann auch



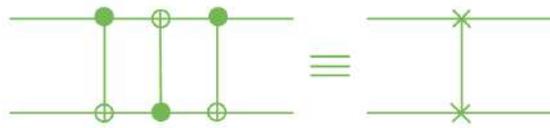
also Matrix dargestellt werden

$$\hat{U}_{\text{CN}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.
 \tag{1013}$$

Es gilt hier natürlich auch wieder $\hat{U}_{\text{CN}}^\dagger \hat{U}_{\text{CN}} = \mathbb{1}_4$. Es gibt natürlich wieder unendlich viel 2 QBit Operationen, aber man kann zeigen:

Universalität: Jedes Multi-Qbit Quantum Gate kann aus controlled-NOT und 1 Qbit Gates aufgebaut werden!

Baut man z.B. 3 CNOT Gatter hintereinander, so erhält man ein **SWAP** Gatter



AB	$A'B'$	$A''B''$	$A'''B'''$
00	00	00	00
01	01	11	10
10	11	01	01
11	10	10	11

20.2.3 Quanten Teleportation

Alice möchte das Qbit

$$\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle \quad (1014)$$

and Bob senden. Klassisch benötigt das unendlich viel Information, um die exakten Werte (unendlich viele Stellen) von α_0 und α_1 zu übertragen.

Wir nehmen nun weiter an, dass Alice und Bob einen EPR-Zustand teilen

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \quad (1015)$$

wobei Alice auf das erste Bit vom EPR-Zustand Zugriff hat und Bob auf das zweite.

Der Produktzustand aus diesen beiden Zuständen lautet dann

$$\begin{aligned} & (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle) \\ &= \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}}|000\rangle + \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}}|011\rangle + \frac{\alpha_1}{\sqrt{2}}|100\rangle + \frac{\alpha_1}{\sqrt{2}}|111\rangle. \end{aligned} \quad (1016)$$

Alice führt nun eine CNOT Operation auf ihre ersten beiden Qbits durch

$$\frac{\alpha_0}{\sqrt{2}}|000\rangle + \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}}|011\rangle + \frac{\alpha_1}{\sqrt{2}}|110\rangle + \frac{\alpha_1}{\sqrt{2}}|101\rangle \quad (1017)$$

und danach eine Hadamard Operation auf ihr erstes QBit.

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha_0}{2}|000\rangle + \frac{\alpha_0}{2}|011\rangle + \frac{\alpha_1}{2}|010\rangle + \frac{\alpha_1}{2}|001\rangle \\ & \frac{\alpha_0}{2}|100\rangle + \frac{\alpha_0}{2}|111\rangle - \frac{\alpha_1}{2}|110\rangle - \frac{\alpha_1}{2}|101\rangle \\ = & \frac{1}{2}|00\rangle (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle) \\ & + \frac{1}{2}|01\rangle (\alpha_0|1\rangle + \alpha_1|0\rangle) \\ & + \frac{1}{2}|10\rangle (\alpha_0|0\rangle - \alpha_1|1\rangle) \\ & + \frac{1}{2}|11\rangle (\alpha_0|1\rangle - \alpha_1|0\rangle) . \end{aligned} \quad (1018)$$

Nun misst Alice Ihren 2 QBit Zustand und sendet das Ergebnis (00,01,10 oder 11) an Bob.

Abhängig vom Inhalt von Alice's Nachricht, weiss Bob nun was er mit seinem Zustand machen muss, damit er den ursprünglichen Zustand von Alice erhält:

00: Bob macht nichts - er hat bereits den Zustand.

01: Bob wendet einen Swap an.

10: Bob wendet ein \hat{Z} Gatter an.

00: Bob wendet einen Swap und ein \hat{Z} Gatter an.

20.3 Physikalische Realisation

1. Supra-leitende Qbits
2. Ionenfallen

21 Pfadintegrale und Interpretationen der QM

29. Vorlesung: Donnerstag x.2.2024
xxx, Kapitel xx
Nachholtermin

21.1 Pfadintegral

Sakurai, Kapitel 2.6.

Wir betrachten einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator \hat{H} , sowie Eigenzustände $|\alpha, t_0\rangle$ eines Operator, der mit \hat{H} vertauscht.

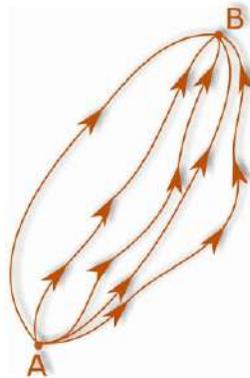
?Unterschied: $|\alpha\rangle$, $|\alpha, t_0\rangle$, $|\alpha, t_0; t\rangle$

Feynman Path Integral Formulation

A Step-by-step Derivation

Prepared by David Mueller

The motivation for the Feynman path integral comes from a desire to find a formulation of quantum mechanics that emphasizes the principle of least action and allows a more direct connection with classical mechanics. Richard Feynman introduced the path integral formulation as an alternative approach to quantum mechanics, and it has proven to be a powerful and intuitive tool in quantum field theory.



In the traditional wavefunction-based quantum mechanics, a particle is described by a wavefunction that evolves over time. Feynman's approach allows for a more intuitive interpretation by considering all possible paths a particle could take between two points. The probability amplitude for a particle to move from one point to another is given by summing over contributions from all possible paths.

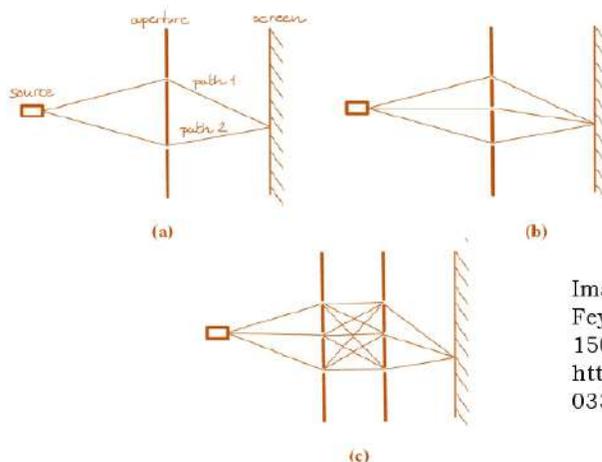


Image borrowed from Harlander, R. Feynman diagrams. *Synthese* 199, 15087–15111 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11229-021-03387-y>

Feynman Path Integral Formulation

A Step-by-step Derivation

Prepared by David Mueller

Transition Amplitude

Start with the transition amplitude K between two states q_i and q_f at times t_i and t_f :

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)} | q_i \rangle$$

Discretization of Time

Break the time interval (t_f, t_i) into N small intervals $\delta t = (t_f - t_i)/N$

Insert Completeness Relation

Insert the completeness relations for each intermediate time

$$\begin{aligned} 1 &= \int dq |q\rangle\langle q| \\ K(q_f, t_f; q_i, t_i) &= \int \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \langle q_f | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-2} \rangle \dots \\ &\quad \langle q_2 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_i \rangle \end{aligned}$$

Insert Momentum Completeness Relation

$$1 = \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle\langle p|$$

Let's insert this completeness relation to an individual factor $\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle$

$$\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \langle q_{j+1} | p \rangle \langle p | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle$$

Evaluate for a Free-Particle Case

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

Feynman Path Integral Formulation

A Step-by-step Derivation

Prepared by David Mueller

$$\begin{aligned}\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi} \langle q_{j+1} | p \rangle \langle p | e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\delta t} | q_j \rangle \\ &= \int \frac{dp}{2\pi} \langle q_{j+1} | p \rangle \langle p | q_j \rangle e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\delta t}\end{aligned}$$

and where

$$\langle q_{j+1} | p \rangle = e^{ipq_{j+1}}$$

$$\langle p | q_j \rangle = e^{-ipq_j}$$

So we have

$$\begin{aligned}\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi} e^{ipq_{j+1}} e^{-ipq_j} e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\delta t} \\ &= \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q_{j+1}-q_j)} e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\delta t}\end{aligned}$$

Use a Known Gaussian Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{1}{2}iax^2 + iJx} = \left(\frac{2\pi i}{a}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-iJ^2/2a}$$

We get

$$\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_j \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q_{j+1}-q_j)} e^{-i\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right)\delta t} = \left(\frac{-im}{2\pi\delta t}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\delta t\left(\frac{m}{2}\right)[q_{j+1}-q_j]/\delta t]^2}$$

Finishing Things Up!

Inserting this

$$\left(\frac{-im}{2\pi\delta t}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\delta t\left(\frac{m}{2}\right)[q_{j+1}-q_j]/\delta t]^2}$$

Feynman Path Integral Formulation

A Step-by-step Derivation

Prepared by David Mueller

to this

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \langle q_f | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_2 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_i \rangle$$

we get

$$\langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | q_i \rangle = \left(\frac{-im}{2\pi\delta t} \right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{k=1}^{N-1} dq_k e^{-i\delta t \left(\frac{m}{2} \sum_{j=0}^{N-1} [q_{j+1} - q_j]^2 \right)}$$

As $\delta t \rightarrow 0$ and replacing $[q_{j+1} - q_j]^2$ by \dot{q}^2 and $\sum_{j=0}^{N-1} \delta t$ by $\int_0^T dt$.

Finally, we define the integral over paths as

$$\int Dq(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-im}{2\pi\delta t} \right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{k=1}^{N-1} dq_k$$

We get the path integral representation

$$\langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | q_i \rangle = \int Dq(t) e^{-i \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 \right)}$$

We immediately recognize that $\frac{1}{2} m \dot{q}^2$ is just the Hamiltonian for a free particle.

And we know that

$$L(\dot{q}, q) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q)$$

is just the Lagrangian $L(\dot{q}, q)$. So, in general, our path integral is

$$\langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | q_i \rangle = \int Dq(t) e^{-i \int_0^T dt L(\dot{q}, q)}$$

21.2 Interpretationen der QM

Sakurai, Kapitel 2.6.

On the Interpretation and Philosophical Foundation of Quantum Mechanics http://fisica.ugto.mx/gniz/courses/mec_cuan_01_15/Zeilinger.pdf

21.3 Measurements and interpretation

21.4 Introduction

Quantum mechanics is one of the most successful concepts of physics. It is the foundation of many technical applications like semi-conductors, classical computer, laser,...

The theory is thoroughly tested by experiments and all the predictions agree perfectly with the measurements. In that sense **there is no doubt that quantum mechanics is the correct language to describe microscopic effects**, at least in the energy range, that is currently accessible to us.

The **inherent statistical nature** of quantum mechanical predictions as well as the quantum mechanical concept of **measurements** has, however, always raised fundamental questions about the **interpretation** of the theory. To some extent this is a **philosophical** question, depending also strongly on the definition of the meaning of the word **understanding**. Nevertheless, we would like to conclude this lecture course with a brief overview of different interpretations of quantum mechanics.

21.5 The basic question

According to what we learnt in the course, the predictions of quantum mechanics have an inherent probabilistic nature.

One arising question is now, if this probabilistic nature is a **real** feature of nature or just a failure of our current mathematical formulation.

A related question is: what is the nature of the measurement process in quantum mechanics?

Let us start by recapitulating the basics of quantum mechanics:

1. Observables are described by hermitian operators.

- An observable A is related to a hermitian operator \hat{A} .
- There is a complete set of eigenstates $|n\rangle$ with

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle . \quad (1019)$$

- The real numbers a_n are the possible outcomes of a measurement of the observable A .

- States, particles,... are described by wave functions (states vectors).
A general wave function Ψ can be written as a linear combination of the $|n\rangle$:

$$\Psi = \sum_n c_n |n\rangle . \quad (1020)$$

- The time evolution of the system is given by the Schrödinger-equation, the Dirac-equation, the Klein-Gordon-equation...
- The probability of finding Ψ in the state $|n\rangle$ is given by $|c_n|^2$. The average value of the observable A is given by

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n . \quad (1021)$$

- If we measure the observable A in a system described by Ψ and we get the result a_n then the wave function **collapses** to the state $|n\rangle$.

Here two concepts arise, that are not obvious to understand: the inherent probabilistic nature of quantum mechanics (point 4) and the nature of measurements (point 5), or in other words: what is actually the collapse of the wave function?

To become more concrete, let us assume that our concern is to measure the position of a particle.

- Quantum mechanics gives us only the probability for finding the particle at a certain location. The probability of finding the particle at time t_0 at the location \vec{x}_0 is given by $|\Psi(\vec{x} = \vec{x}_0, t = t_0)|^2$.
- To get a definite answer, we have to measure the position. Let us assume now, that the measurement of the position at time t_0 gave the result \vec{x}_0 . This means that the original wave function collapsed into a position eigenstate with the eigenvalue \vec{x}_0 .

Now we know for sure that the particle was at the time t_0 at the position \vec{x}_0 and we can ask ourselves next: where was the particle slightly before the measurement?⁷ This question is not governed by our general rules of quantum mechanics, some possible answers are:

1. at point \vec{x}_0 (realistic position);
2. nowhere (orthodox position);
3. there is no answer to this question (agnostic position),

Remarks:

1. If the particle was actually at the position \vec{x}_0 and we just cannot describe this with quantum mechanics, then this is a kind a failure of the current formulation. In that case there will be a more fundamental theory, that contains all the results from quantum mechanics and in addition knows, where the particle was before the measurement.

This was e.g. the position of Albert Einstein.

Since such a new theory is expected to contain more variables, they are also called **hidden variable theories**. They were e.g. investigated by Bohm

- D. Bohm,
A Suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables. 1.,
Phys. Rev. **85** (1952), 166-179; doi:10.1103/PhysRev.85.166
1526 citations counted in INSPIRE as of 12 Feb 2024.
- D. Bohm, A Suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables. 2.,
Phys. Rev. **85** (1952), 180-193, doi:10.1103/PhysRev.85.180
767 citations counted in INSPIRE as of 12 Feb 2024.

How does the fundamental theory look like?

2. This is somehow the basis of the famous and widespread **Copenhagen interpretation**, that was started by Max Born and worked out e.g. by Niels Bohr. The particle simply did not have the property of having a

⁷The question, where the particle is slightly afterwards, is trivial. Because of the collapse it is still at \vec{x}_0 . With time the collapsed wave function will, however, smear out again.

position before the actual measurement. The measurement itself forced the particle to *go* into a certain position, by the collapse of the wave function

What is actually the measurement process? What is the collapse of the wave function?

3. This is a practical attitude. We can not answer this hypothetical question, because the only way to answer it, would be to perform a measurement at time $t_0 - \delta t$ and then we still do not know what happened before that measurement. We have no access to information without doing a measurement.

Don't worry, be happy.

21.6 Einstein-Podolsky-Rosen paradox

The aim of the paper of Einstein, Podolsky and Rosen from 1935,

- A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen
Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?,
Phys. Rev. **47** (1935), 777-780, doi:10.1103/PhysRev.47.777
3453 citations counted in INSPIRE as of 12 Feb 2024

was to prove that the realistic position is the correct one.

To see their argument, consider the decay of a neutral pion (spin = 0) at time t_0 into an electron and a positron (each spin 1/2) ⁸

$$\pi^0 \rightarrow e^+ + e^- . \quad (1022)$$

If the pion is at rest then the electron-positron pair is described by the following wave function (spin = 0)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) . \quad (1023)$$

Next we assume that in some distance x_e of the former position of the pion, the spin of the electron will be measured at the time $t_e > t_0$.

⁸This example actually stems from D. Bohm and Y. Aharonov, Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen, and Podolsky, Phys. Rev. **108** (1957), 1070-1076 doi:10.1103/PhysRev.108.1070;178 citations counted in INSPIRE as of 12 Feb 2024.

Let us assume that the outcome is spin-up. Thus it is clear that any future measurement of the spin of the positron will give spin-down. How can this be interpreted?

1. According to the realistic interpretation, the spin of the electron, was always (starting from t_0 on) up and the spin of the positron was always down. This fact was just unknown to us, because we do not know the full theory.
2. According to the orthodox interpretation we have:
 - $t_0 < t < t_e$ The electron-positron state is completely described by the superposition given in Eq.(1023).
 - $t = t_e$ The wave function collapses.
 - $t > t_e$ The electron and positron are in pure spin states.

Remarks:

- Somehow it seems that the information about the collapse of the wave function is transported at the time t_e instantly from the location x_e to the position of the positron. Einstein and friends considered this to be obviously impossible, because this would violate **locality** (i.e. nothing can move/spread/be transported/extend faster than light). Einstein called this “*spukhafte Fernwirkung*” \approx “*ghost-like long-distance action*”.
- Thus people were seriously looking for extensions of quantum mechanics that include hidden variables, see e.g. the models of Bohm from 1951.
- A very fundamental and crucial point here is the **entangled** stated given in Eq.(1023). Schrödinger coined the name **verschränkte Zustände** = **entangled states**.
- But actually there is no real information transported, so the issue is still not settled.

21.7 Bell's equation

In 1964 Bell

- J. S. Bell,
On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox,
Physics Physique Fizika **1** (1964), 195-200,
doi:10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195
2395 citations counted in INSPIRE as of 12 Feb 2024.

was generalising the above experiment and has shown that there is a measurable difference between position 1 and 2 (this excludes by definition position 3). In addition he pointed out severe problems of theories with hidden variables, giving thus evidence for the orthodox position, albeit locality has to be given up to some extent and we are still left with a lack of understanding of the measurement process.

We take the same experimental setup as in the EPR case, with the generalisation that now the spin-detectors can be moved in arbitrary directions. In the EPR case both were measuring the z -component of the spin, while now the electron-spin component is measured relative to the vector \vec{a} and the positron-spin component is measured relative to the vector \vec{b} . In the end the relevant observable will be the quantum mechanical average of the product of the two spins $P(\vec{a}, \vec{b})$. The case $\vec{a} = \vec{b}$ gives the result of the EPR-case. In the EPR case quantum mechanics told us that the product will always give $-1 \cdot 1$. Thus we have

$$P(\vec{a}, \vec{a}) = -1 . \quad (1024)$$

If the vectors are anti-parallel $\vec{a} = -\vec{b}$, we will obviously get

$$P(\vec{a}, -\vec{a}) = +1 . \quad (1025)$$

For a general direction of the vectors quantum mechanics will give

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = -\vec{a} \cdot \vec{b} . \quad (1026)$$

It will turn out, however, that this simple result is incompatible with theories with hidden variables.

Problem 4.50

We may as well choose axes so that \hat{a} lies along the z axis and \hat{b} is in the xz plane. Then $S_a^{(1)} = S_z^{(1)}$, and $S_b^{(2)} = \cos \theta S_z^{(2)} + \sin \theta S_x^{(2)}$. $\langle 0\ 0 | S_a^{(1)} S_b^{(2)} | 0\ 0 \rangle$ is to be calculated.

$$\begin{aligned}
 S_a^{(1)} S_b^{(2)} | 0\ 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[S_z^{(1)} (\cos \theta S_z^{(2)} + \sin \theta S_x^{(2)}) \right] (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(S_z \uparrow)(\cos \theta S_z \downarrow + \sin \theta S_x \downarrow) - (S_z \downarrow)(\cos \theta S_z \uparrow + \sin \theta S_x \uparrow)] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow \right) \left[\cos \theta \left(-\frac{\hbar}{2} \downarrow \right) + \sin \theta \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow \right) \right] - \left(-\frac{\hbar}{2} \downarrow \right) \left[\cos \theta \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow \right) + \sin \theta \left(\frac{\hbar}{2} \downarrow \right) \right] \right\} \quad (\text{using Eq. 4.145}) \\
 &= \frac{\hbar^2}{4} \left[\cos \theta \frac{1}{\sqrt{2}} (-\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) + \sin \theta \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\uparrow + \downarrow\downarrow) \right] = \frac{\hbar^2}{4} \left[-\cos \theta |0\ 0\rangle + \sin \theta \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\ 1\rangle + |1\ -1\rangle) \right]. \\
 \text{so } \langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle &= \langle 0\ 0 | S_a^{(1)} S_b^{(2)} | 0\ 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \langle 0\ 0 | \left[-\cos \theta |0\ 0\rangle + \sin \theta \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\ 1\rangle + |1\ -1\rangle) \right] = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \theta \langle 0\ 0 | 0\ 0 \rangle \\
 & \quad (\text{by orthogonality}), \text{ and hence } \langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \theta. \quad \text{QED}
 \end{aligned}$$

To show that, we consider very general models with hidden variables, assuming only that reality is given by the quantum mechanical wave function Ψ and some hidden variable λ .

- $A(\vec{a}, \lambda)$ gives the result of the measurement of the electron spin relative to the vector \vec{a} . It can take the values ± 1 . Assume: $A(\vec{a}, \lambda)$ is independent from \vec{b} , i.e. locality.
- $B(\vec{b}, \lambda)$ gives the result of the measurement of the positron spin relative to the vector \vec{b} . It can take the values ± 1 and it is also independent from \vec{a} .

If $\vec{a} = \vec{b}$, we have the EPR case and this

$$A(\vec{a}, \lambda) = -B(\vec{a}, \lambda). \quad (1027)$$

In the general case $\vec{a} \neq$ or $= \vec{b}$ and the presence of hidden variables the average of the product of the two measurements is given by

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda) d\lambda, \quad (1028)$$

with $\rho(\lambda)$ being the unknown probability distribution of the hidden variable. We only demand

$$0 \leq \rho(\lambda) \leq 1, \quad (1029)$$

$$\int \rho(\lambda) d\lambda = 1. \quad (1030)$$

Because of $B(\vec{b}, \lambda) = -A(\vec{b}, \lambda)$ we get

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = - \int \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) d\lambda. \quad (1031)$$

Next we take an additional general unit vector \vec{c} to get

$$\begin{aligned} P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c}) &= - \int \rho(\lambda) \left[A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) - A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] d\lambda \\ &= - \int \rho(\lambda) \left[|A(\vec{b}, \lambda)|^2 A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) - |A(\vec{b}, \lambda)|^2 A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] d\lambda \\ &= - \int \rho(\lambda) \left[1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) d\lambda. \end{aligned} \quad (1032)$$

Here we used $|A(\vec{b}, \lambda)|^2 = 1$. Next we keep in mind

$$-1 \leq A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) \leq +1, \quad (1033)$$

$$\rho(\lambda) \left[1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] \geq 0, \quad (1034)$$

to get

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c})| \leq \int \rho(\lambda) \left[1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] d\lambda \quad (1035)$$

$$= 1 + P(\vec{b}, \vec{c}). \quad (1036)$$

This is the famous **inequality of Bell**.

Combing this with the quantum mechanical result for $P(\vec{a}, \vec{b})$ we get

$$|\vec{a} \cdot \vec{b} - \vec{a} \cdot \vec{c}| \leq 1 - \vec{b} \cdot \vec{c}. \quad (1037)$$

This relation can easily be violated, assume e.g. \vec{a} , \vec{b} and \vec{c} lie in a plane, \vec{a} and \vec{b} are perpendicular and \vec{c} lies in between them (with an angle of 45°). Then we get

$$|0 - 1/\sqrt{2}| = 0.707 \leq 1 - 1/\sqrt{2} = 0.29, \quad (1038)$$

which is obviously not correct.

Combing this result - hidden variable are not compatible with quantum mechanics⁹ - with the result from EPR have two possible resolutions:

1. Quantum mechanics is wrong.
2. Locality does not hold in general.

All experimental tests have shown that Quantum mechanics is correct and that Bell's inequality is violated. It seems that locality does not hold and that there is an instantaneous collapse of the wave function.

Bell's original approach actually turned to be difficult for experimental tests, a modification of his idea the suits better experimental requirements was worked out by 1969, by John Clauser, Michael Horne, Abner Shimony and Richard Holt (CHSH): they proposed a variation of the Bell inequality that was indeed possible to check by an experiment on entangled photons using existing technology.

Nobelprize 2022: The Nobel Prize in Physics 2022 was awarded jointly to Alain Aspect, John F. Clauser and Anton Zeilinger for experiments with entangled photons, establishing the violation of Bell inequalities and pioneering quantum information science.

We are still left with lack of understanding of the collapse of the wave function. Scientists tried to establish the collapse of the wave-function experimentally; this comes under the name of **quantum Zeno effect**, but there are currently no convincing hints.

21.8 More fancy interpretations

Many world theories from Hugh Everett in 1957 [?]. Everett was a PhD student of John Archibald Wheeler. The idea was later on worked out by Bruce de Witt and more recently by David Deutsch and Wojciech H. Zurek. This theory tries to explain the collapse of the wave function.

Wikipedia states Many-worlds implies that all possible alternative histories and futures are real, each representing an actual "world"(or "universe"). In lay terms, the hypothesis states there is a very large, perhaps infinite number of universes, and everything that could possibly have happened in our past, but did not, has occurred in the past of some other universe or universes. "

⁹One can, however, construct some fancy hidden variable models for which Bell's inequality is not applicable.

Ideas:

- Sakurai: neutrino oscillations as 2 state system...
- Townsend - a modern approach to QM
- McIntyre - QM a paradigms approach

Literatur

1. Weinberg:1989us S. Weinberg, Testing Quantum Mechanics, Annals Phys. **194** (1989), 336 doi:10.1016/0003-4916(89)90276-5