

16.04.08

Theoretische Physik I

Üb: =

11: 14.00

Abgabe Mo 12.00

Mo Nachmittags neues Blatt

1. Klausur

28. Mai

$\frac{1}{3}$

2. Klausur

16. Juli

$\frac{2}{3}$

Schein Erit:

Blätter: einzeln Abgabe

Inhalt

- I Einführung, einfache Probleme 1. Dim
- II Mathematische Hilfsmittel
- III Postulate der Quantenmechanik
- IV Harmonisches Oszillator
- V Zwei-Zustandssysteme
- VI Drehimpuls
- VII Zentralpotentiale / Wasserstoffatom
- VIII Störtheorie
- IX Störungstheorie

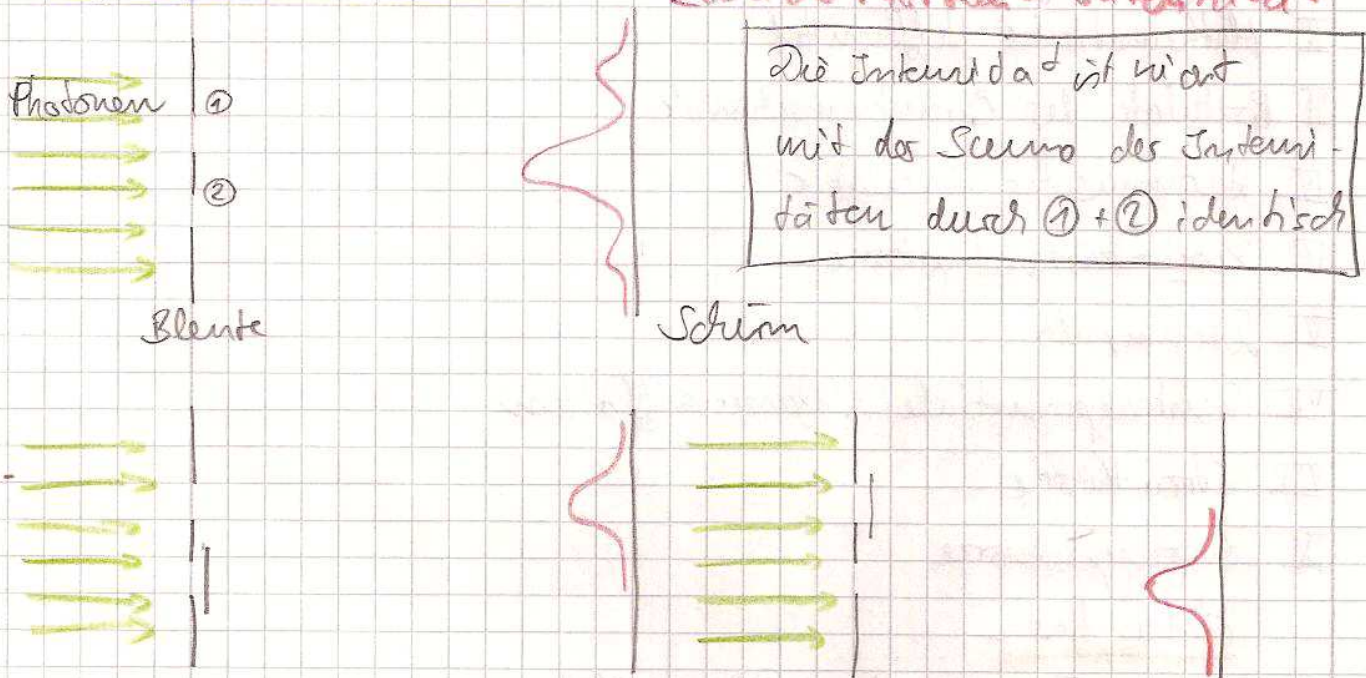
Literatur

- Cohen-Tannoudy, Dicke, Lalœ "Quantenmechanik I, II"
- Landau - Lifschitz "Quantenmechanik"
- Messiah: "Quantenmechanik"
- Davydov "QM" (siehe Anmerkungen)
- Nolting, Band 5
- Schwable

I Einführung

- Quantenmechanik $\approx 1900 - 1925/7$
- Plancksches Strahlungsgesetz \rightarrow Heisenberg / Schrödinger
- "Kopenhagener Interpretation" (Bohr)
- Dualität zwischen Welle und Teilchen
Photonen, dann für alle Teilchen
- Beschreibung der Bewegung eines Teilchens durch die klassische Bahn ist nicht beliebig genau gültig

Doppelspaltexperiment:



makroskopische Quantenmechanische Phänomene eher selten (Supraleitung)

Quantenmechanik: Halbleiterphysik / Bandmodell
Kernphysik, statistische Charakter des radioakt. Zerf.
Verschränkte Zustände
(Einstein-Podolski-Rosen Paradoxon (E-P-R-Parad.)

Verknüpfung von Quantenmechanik und Feldtheorie

\rightarrow Quantenfeldtheorie (QFT)

\rightarrow Elementarteilchen

A) Elektromagnetische Wellen und Photonen

1) Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz

Analyse der Strahlung eines schwarzen Körpers

Planck: Energie dicht pro Frequenzintervall pro Volumen

$$\frac{dE}{d\omega} \text{ pro Volumen}$$

Annahme: Strahlungsenergie bei Absorption und Emission ist quantisiert

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Joule-Sekunde}$$

"Wirkungsquantum" h

Erinnerung (Mechanik):

$$\text{Wirkung} \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt P(t) q(t), \text{ oder } \int dt L(t) \equiv \text{Wirkung}$$

später: Energie differenz von Atomniveaus = $\hbar\omega_{\text{photon}}$

Entsprechend: Impuls \leftrightarrow Wellenlänge

Compton-Strahlung: $\gamma + e \rightarrow e' + \gamma'$

Photon fällt auf e^- und liefert e' und γ'

Impuls erhaltung: (umse Wellenlänge von γ und γ' Energie von e und e')

$$\vec{p}_{\gamma} = \hbar \vec{k}_{\gamma}$$

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Impuls Wellenvektor

2) Ausbreitung

Intensität (= Energiedichte / Zeitdauer) für eine elektromagn. Welle

$$I(x) \sim |E(x)|^2$$

↑
Feldstärke

Der Beitrag der durch Spalt 1 bzw 2 fallenden Welle:

$$E_1(x) \text{ bzw } E_2(x) \quad I(x) = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = I_1(x) + I_2(x) + 2E_1(x)E_2(x)$$

Entsprechendes gilt für Wellenfunktion

Interferenzterm

$I(x)$ = Wahrscheinlichkeit bzw. Teilchen des Photons auf dem Schirm

Anwendungen:

i) Superpositionsprinzip:

Wenn $E_1(x)$ und $E_2(x)$ Lösungen des Maxwellgl. sind dann

auch $E(x) = \alpha_1 E_1(x) + \alpha_2 E_2(x)$ mit α_1, α_2 beliebig

E genügt einem linearen Dgl. (gilt auch für Ψ in der QM)

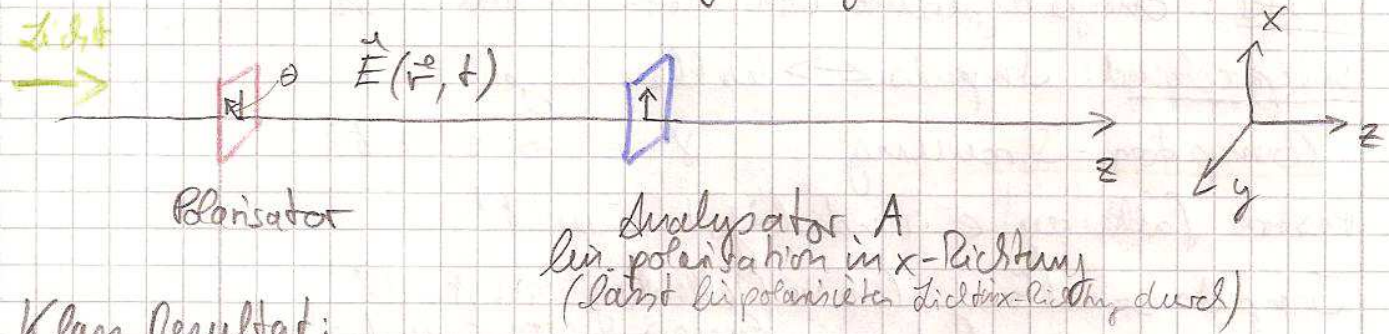
ii) $I(x)$ = Wahrscheinlichkeitsverteilung

Eine große Zahl von Photonen ist erforderlich um die Verteilung zu messen

iii) Unterschied zwischen quanten m. Welle und Feld:

\vec{E} ist reell: in der QM sind $\text{Re}(\Psi)$ und $\text{Im}(\Psi)$ wesenlich

3) Spektralzerlegung: z.B. polarisiertes Licht mit Ausbreitungsrichtung O_z fällt auf Analytator A



Polarisator

Analytator A
bei Polarisation in x -Richtung
(lässt bei polarisiertem Licht durch)

Klass. Resultat:

Polarisiertes Licht in \vec{e}_p Richtung

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_p e^{i(kz - \omega t)}$$

Intensität vor A ist

$$|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 = E_0^2$$

hinter A ist Stärke $\vec{E}'(\vec{r}, t) = E_0' \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$

wobei $E_0' = E_0 \vec{e}_p \cdot \vec{e}_x = E_0 \cos \theta$

Intensität: $E_0'^2 = E_0^2 \cos^2 \theta$

QM: Photon wird mit Wahrscheinlichkeit $\sin^2 \theta$ im Analytator gestoppt oder mit Wahrscheinlichkeit $\cos^2 \theta$ durchgelassen

\Rightarrow zwei mögliche Resultate

Nach A würde das Photon weiter durchlaufen (bzgl. x -Richtung eingestellt) durchlaufen.

Nach A ist es im Eigenzustand bzgl. A

Es gibt zwei Eigenzustände mit Polarisation in \hat{e}_x und \hat{e}_y für diese ist das Messresultat keuzgl. A sicher Durchgang (\hat{e}_x) oder Stoppen (\hat{e}_y)

Jeder Zustand mit Pol. \hat{e}_p kann in Eigenzustände von A zerlegt werden:

$\hat{e}_p = \cos \theta \hat{e}_x + \sin \theta \hat{e}_y$ "Spektrale Zerlegung" von \hat{e}_p nach Eigenzuständen von A.

(Wahl verschiedener Basen z.B. Koordinatensystem, Polarisation)

18.04.08

B) Materiewellen:

Übertragung der Dualität von Welle und Teilchen vom Photon auf Teilchen mit Masse (de Broglie)

i) Klassische Trajektorien \Rightarrow zeitlich veränderl.

Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ in QM

ii) Wahrscheinlichkeitsdichte $= |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ das Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t zu finden \Rightarrow Normierungsbedingung $\int dV |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$

iii) Klass. Bewegungsgleichung wird ersetzt durch die Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

Δ Laplace operator

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}$$

partielle Dgl, linear und homogen ist \Rightarrow es gilt das Überlagerungsprinzip

1. Ordnung in t ; Anfangswertproblem:

$\Psi(\vec{r}, t) |_{t=t_0}$ bestimmt $\Psi(\vec{r}, t) \forall t$

C) Wellenpakete

1) Freies Teilchen: $i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t)$, Dgl mit konst. Koeffiz

Lösung: $\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ ebene Welle

A, \vec{k} beliebig; $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \stackrel{!}{=} E = \frac{p^2}{2m}$

$|\Psi|^2 = |A|^2 = \text{konst}$, nicht integrierbar ($\int d\vec{r} |A|^2$ ist divergent!)

bei linearen Dgls ist jede Überlagerung von Lösungen mit verschiedenen \vec{k} ist wieder Lösung.

Normierbare Überlagerungen von ebenen Wellen = Wellenpaket

$$\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)} = \psi(\vec{r}, t) \quad (2) \text{ ist Lösung der Schröd. Gleichung}$$

mit $\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$

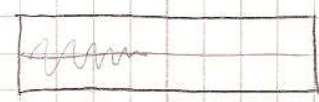
Bei fester Zeit t_0 (= Oper. Konvention) $\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} g(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \psi(\vec{r}, 0)$

Umkehrung: $g(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \psi(\vec{r}, t=0) \quad (3)$

Zu einer festen Zeit kann aus $\psi(\vec{r}, 0)$ immer $g(\vec{k})$ berechnet werden
Gleichung (2) legt dann $\psi(\vec{r}, t) \quad \forall t$ fest. [gilt nicht bei Anwesenheit eines Potentials]

Bei Halbleiter ist $\omega(k)$ eine nicht-lineare Funktion von \vec{k}

$v_{\text{Phase}} = \frac{\omega(k)}{k} \quad v_{\text{Grupp}} = \frac{d\omega}{dk}$ Wellenpaket wird verformt!



Wellen ausbreitung mit Gruppenschw. v_g

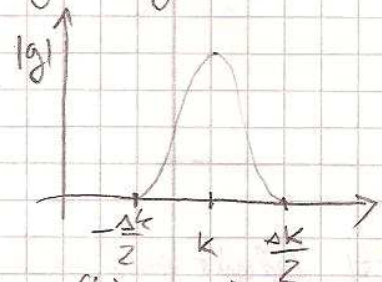
2) Zusammenhang zwischen $\psi(x, t=0)$ und $g(k)$ (eindimensional)

Breite von ψ und g distinktion $(\Rightarrow$ Unschärferelation)

Auswahl: $g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)}$
↑ Betrag ↑ Phase

Annahmen:

1. $|g|$ sei gleich in $[k - \frac{\Delta k}{2}, k + \frac{\Delta k}{2}]$ und nur dort wesentlich von 0 verschieden



2. $\alpha(k)$ variiert nur wenig in diesem Bereich.

Taylor: $\alpha(k) = \alpha(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{d\alpha}{dk} \right|_{k=k_0} + \dots$
 $:= -x_0$

$$\psi(x, t=0) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k) e^{i(kx - \omega_k \cdot 0)} = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i[\alpha(k_0) - (k - k_0)x_0 + (k - k_0)x]}$$

$$= e^{i(\alpha(k_0) + k_0 x)} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i(k - k_0)(x - x_0)}$$

Falls $x = x_0$: nur pos. Beiträge; $|\psi|$ ist maximal

Es gibt zwei Eigenzustände mit Polarisation in \hat{e}_x und \hat{e}_y für diese ist das Messresultat $\hbar \omega$. A sicher Durchgang (\hat{e}_x) oder Stoppen (\hat{e}_y)

Jeder Zustand mit Pol. \hat{e}_p kann in Eigenzustände von A zerlegt werden:

$\hat{e}_p = \cos \theta \hat{e}_x + \sin \theta \hat{e}_y$ "Spektrale Zerlegung" von \hat{e}_p nach Eigenzuständen von A.

(Wahl verschiedener Basen z.B. Koordinatensystem, Polarisation)

18.04.08 B) Materiewellen:

Übertragung der Dualität von Welle und Teilchen vom Photon auf Teilchen mit Masse (de Broglie)

i) Klassische Trajektorie $x(t) \Rightarrow$ zeitlich veränderl.

Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ in QM

ii) Wahrscheinlichkeitsdichte $= |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ das Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t zu finden \Rightarrow Normierungsbedingung $\int dV |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$

iii) Klass. Bewegungsgleichung wird ersetzt durch die Schrödinger Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

Δ Laplaceoperator

$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}$

partielle Dgl. linear und homogen \Rightarrow es gilt das Überlagerungsprinzip

1. Ordnung in t ; Anfangswertproblem:

$\Psi(\vec{r}, t) |_{t=t_0}$ bestimmt $\Psi(\vec{r}, t) \forall t$

C) Wellenpakete

1) Freies Teilchen: $i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t)$, Dgl mit konst. Koeffiz.

Lösung: $\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ ebene Welle

A, \vec{k} beliebig; $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \stackrel{!}{=} E = \frac{p^2}{2m}$

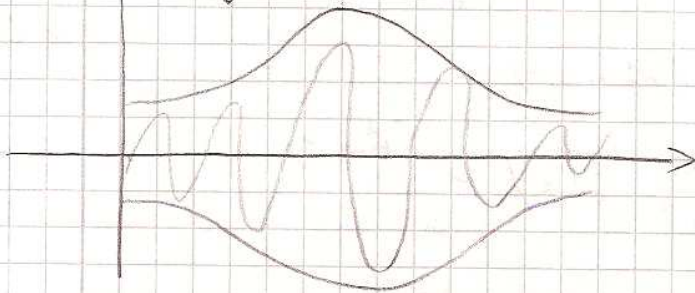
$|\Psi|^2 = |A|^2 = \text{konst}$, nicht integrierbar ($\int d\vec{r} |A|^2$ ist divergent!)

bei linearem Dgl. ist jede Überlagerung von Lösungen mit verschiedenen \vec{k} ist wieder Lösung.

Normierbare Überlagerungen von ebenen Wellen = Wellenpaket

falls $|x - x_0| \gg \frac{1}{\Delta k}$ viele Oszillationen innerhalb des Integrationsgebietes $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}] \Rightarrow |\psi|$ klein

$$\propto \operatorname{Re} g(k) e^{i(k - k_0)(x - x_0)}$$



Oszillation = klein

Das Maximum des Wellenpakets im Ortsraum:

$$x_0 = - \left[\frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0} \quad \text{"Stationäre" Phase bei } x_0$$

Breite im Ortsraum $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$

Mathematisch: Fouriertransformation $f(x) \Leftrightarrow \tilde{f}(k)$

physikalisch: $p = \hbar k$

$$\frac{dN}{dx} = |\psi(x, 0)|^2 \quad N = \text{Anzahl der Teilchen im Intervall}$$

$$\frac{dN}{dp} = |\tilde{\psi}(p, 0)|^2$$

ψ im Ortsraum, $\tilde{\psi}$ im Impulsraum / Breite im Ort Δx , Impuls Δp

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\psi}(p, 0) e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

$\Delta x \cdot \Delta p \geq 1$ Heisenbergsche Unschärferelation

Summary:

Impuls und Ort eines Teilchens kann nicht gleichzeitig beliebig genau gemessen werden.

3) Zeitliche Entwicklung eines freien Wellenpaketes

eine Welle: $\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ wobei $\omega = \omega(k)$

$\psi(x, t)$ von der Form $f(x - \frac{\omega}{k}t)$

Phasengeschwindigkeit: $v_f(k) = \frac{\omega}{\hbar k}$

Elektromagnetische Welle im Vakuum: $\omega = c|k|$ ($v \cdot \tau = c$)

Überlagerung von Wellen mit verschiedenen k , dann hat die Welle

immer noch die Form $\phi = f_1(x - ct) + f_2(x + ct)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{g}(k) e^{i(kx - \omega t)} = \int_0^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{g}(k) e^{i\hbar k(x - ct)} + \int_{-\infty}^0 \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{g}(k) e^{-i\hbar k(x + ct)}$$

Im Medium:

$$v_p(k) = \frac{c}{n(k)}$$

↑
Brechungsindex

⇒ Form des Wellenpaketes ändert sich, "Dispersion"

23.04.08

C.) Wellenpaket

1) freies Teilchen ($V=0$) $\psi \sim e^{i(kx - \omega t)}$

2) Wellenpakete $\psi(x,t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} g(k) e^{i(kx - \omega t)}$

$\Delta x \Delta k \geq 1$ Δx Breite von ψ im Ortsraum
Unschärferelation Δk Breite von g im Impulsraum

Anzahl Dimensionen

3) Zeitliche Entwicklung des freien Wellenpaketes

ebene Welle: $\psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)}$

wobei i.A. $\omega = \omega(k)$

$\psi(x,t)$ ist von der Form $f(x - \frac{\omega}{k}t)$

Phasengeschwindigkeit: $v_p = \frac{\omega}{k}$ (bei v_p Phase konst.)

Elektromagnetische Wellen im Vakuum.

v_p hängt nicht von k ab, $v_p = c$.

Überlagerung von Wellen mit verschiedenen k hat die Form

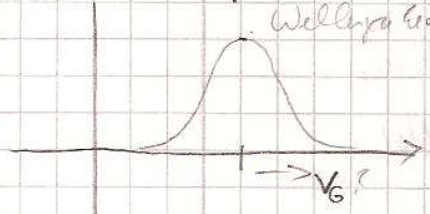
$$f_1(x - \frac{\omega}{k}t) + f_2(x + \frac{\omega}{k}t)$$

im Medium: $v_p(k) = \frac{c}{n(k)}$ Brechzahl n

⇒ Form der Welle ändert sich ⇒ Dispersion

QH $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \rightarrow v_p = \frac{\hbar k}{2m} = v_g(k)$

⇒ Wellenpaket verformt sich, läuft auseinander.



Mit welcher Geschwindigkeit bewegt sich das Maximum des Wellenpaketes?

$g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)}$ $\alpha = \text{Phase}$ $\omega = \omega(k)$

⇒ $\psi(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| e^{i(\alpha(k) - \omega t) + ikx}$

$t=0$: $\psi(x,0)$ hat Maximum bei $x = x_0 = - \frac{d\alpha(k)}{dk} \Big|_k$

hier: $\alpha(k) \rightarrow \alpha(k) - \omega t \Rightarrow x_{max}(t) = - \frac{d}{dk} (\alpha(k) - \omega t)$

$$\Rightarrow \text{Verdrübbung von Max: } x_{\text{max}}(t) - x_{\text{max}}(t=0) = \frac{d\omega}{d\epsilon} \cdot \epsilon$$

$$v_G(\epsilon_0) = \frac{d\omega}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon_0} \quad \text{Gruppengeschwindigkeit}$$

$$= \frac{\hbar k_0}{\hbar \omega} = \frac{v}{m}$$

D) zeitunabhängige Potentiale

1) Separation der Variablen \vec{r}, t

$$\text{Schwingungsgl: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{Ansatz: } \psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{\chi(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(t)}_{\text{nur von } t \text{ abhängig}} = \underbrace{\frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r})}_{\text{nur von } \vec{r} \text{ abhängig}} = \text{const} = \hbar\omega$$

(a) Lösung für $\chi(t)$:

$$\chi(t) = A \cdot e^{-i\omega t} \quad \text{mit } A=1 \quad E$$

$$(b) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = \hbar\omega \cdot \varphi(\vec{r})$$

$$\boxed{E = \hbar\omega}$$

Stationäre Schrödinger-Gleichung

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad \text{Hamilton Operator}$$

$$\rightarrow H \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad \text{Eigenwert } E \text{ von } H$$

E : Eigenwert = Energie

$\varphi(\vec{r})$: Eigenfunktion

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad \text{stationärer Zustand}$$

da $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$ ist zeitunabhängig

Schrödinger-Gl.: \rightarrow Zeitentwicklung der Wellenfkt

Zeitunabh. stationäre S. Gl.: \rightarrow stationäre Zustände + Energie

Überlagerungen von Zuständen: $H \varphi_n(\vec{r}) = E_n \varphi_n(\vec{r})$

$$\Rightarrow \varphi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$\text{Dann } \psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (*) \quad c_n \in \mathbb{C}$$

Lösung der Schrödinger-Gleichung

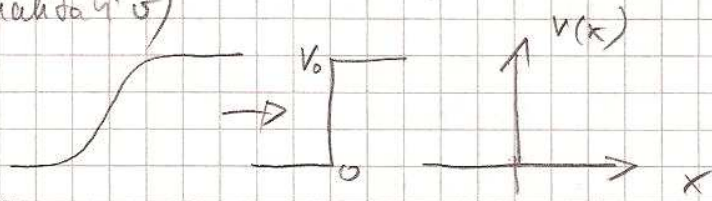
$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ist im Allgemeinen zeitabhängig

Später: Jede Lösung der Schrödinger-Gl. kann in der Form

(*) geschrieben werden

2) Stufenpotentiale (qualitativ)

- eindeutige Bewegung
- Idealisierung



Klassisches Teilchen läuft weiter, solange $E > V_0$

oder läuft zurück für $E < V_0$

QM: stationäre S-Gl. $\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\right)\psi(x) = 0$

Analogie zur Optik

Ansatz für elekt. Feld: $\vec{E}(x,t) = \vec{e} E(x) \cdot e^{-i\omega t}$

Wellengl. (im Medium): $\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{n^2}{c^2} \frac{d^2}{dt^2}\right) \vec{E}(x,t) = 0$

$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2 \omega^2}{c^2}\right) E(x) = 0$

QM $\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) \stackrel{!}{=} \frac{n^2 \omega^2}{c^2}$

abrupte Zunahme von $V \stackrel{!}{=} \text{abrupte Abnahme von } n^2$

$n^2 > 0$ transparent
 $n^2 < 0$ total refl.

Medium { Glas
 Metall

Ausbreitung: $\begin{cases} e^{+ikx} \\ e^{-ikx} \end{cases}$

$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2}$ $n^2 > 0$

$\rho = \frac{\omega}{c} \sqrt{-n^2}$ $n^2 < 0$

Beispiele



Brechungsindex: $n_1 = \frac{c}{\hbar \omega} \sqrt{2mE}$, $n_2 = \frac{c}{\hbar \omega} \sqrt{2m(E - V_0)}$

$E > V_0$: $n_1^2 > n_2^2 > 0$

Total reflexion an der Grenzschicht zwischen den beiden Medien

$0 < E < V_0 \Rightarrow n_2^2 < 0$

Total reflexion

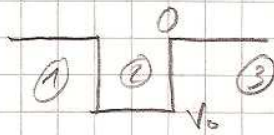
Aber Eindringen in Grenzschicht.

β) Potentialbarriere



für $0 < E < V_0$: Optik: Welle dringt von 1 in 2 ein und ein Teil läuft in 3 weiter, Teil wird reflektiert.

x) Potential Topf



für $-V_0 < E < 0$:

Klass: beliebige Energien sind zulässig

Optik: stehende Welle in ② nur für ganz best. (diskrete) Energien (Wellenlängen) möglich.

(Dämpfung in ① und ③)



3) Stufenpotentiale (quantitativ)

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \right) \psi(x) = 0$$

(i) $E > V$ (Obwohl Potential Sprung, stetig)

$$\Rightarrow \psi(x) = A \cdot e^{ikx} + A' \cdot e^{-ikx}$$

A, A' beliebig, komplex

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V$$

(ii) $E < V \Rightarrow \psi(x) = B \cdot e^{\beta x} + B' \cdot e^{-\beta x}$

$$\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = V - E$$

(iii) $E = V: \psi(x) = C + C'x$

Anschlussbed. bei Sprungstelle: Erneute Sprung durch glatten Übergang im Intervall $(-\epsilon, \epsilon)$

integriere Schr. Gln. $\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}$

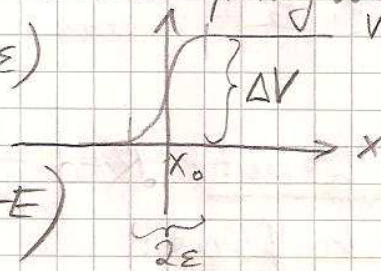
$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V_\epsilon(x) - E)$$

$$\frac{d\psi(x_0+\epsilon)}{dx} - \frac{d\psi(x_0-\epsilon)}{dx} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$$

(1) Ableitung muss stetig sein $\frac{d\psi(x_0+\epsilon)}{dx} = \frac{d\psi(x_0-\epsilon)}{dx}$

(2) $\psi(x)$ muss stetig sein

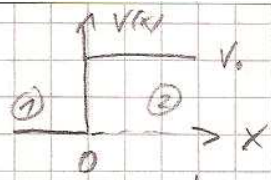
$$(3) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x_0+\epsilon) - \frac{d^2}{dx^2} \psi(x_0-\epsilon) = 2 \frac{m}{\hbar^2} \cdot \Delta V \psi(x_0)$$



Beispiel:

25.04.08

1) Stufe bei $x_0 = 0$, $E > V_0$



$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

(1) Stetigkeit bei $x=0$:

$$A_1 + A_1' = A_2 + A_2'$$

(2) Stetigkeit der Ableitung:

$$k_1(A_1 - A_1') = k_2(A_2 - A_2')$$

(3) Sprungbedingung folgt aus der Wahl von k_1 und k_2 :

• Normierung ist unbestimmt.

⇒ nur Verhältnisse $\frac{A_1'}{A_1}$, $\frac{A_2'}{A_2}$...

oder man setzt $A_1 = 1$.

• Wähle $A_2' = 0$ Randbedingungen: in ② gibt es nur auslaufende Welle (Transmission)
in ① gibt es einlaufende und reflektierte Welle.

$$\text{Aus (1), (2) und } A_2' = 0 \Rightarrow \frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

mit $A_1 = 1$ (= Konvention):

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & x > 0 \end{cases}$$

reflektiert
transmission

Bilanz:

Reflexionskoeffizient: $R = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2$

Transmissionskoeffizient: $T = \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 \left(\frac{k_2}{k_1} \right)$

$T \hat{=}$ dem Verhältnis der Impulse = Verhältnis der Geschwindigkeit

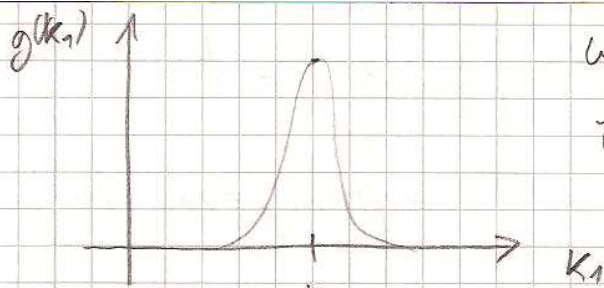
$\hat{=}$ Verhältnis der Flüsse. $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

$$\boxed{R + T = 1}$$

Zusammenhang mit Wellenpaketen und zeitabh. Beschreibung

Überlagerung von element. Wellen mit Verteilung $g(k_1)$:

$$\Rightarrow \text{zeitabhängige Lösung: } \int \frac{dk_1}{2\pi} g(k_1) \psi_{k_1}(x) e^{-i\omega_{k_1} t} := \psi(x, t)$$



wo bei $g(k_1)$ bei k_0 konzentriert ist.

$$f(x) = \begin{cases} e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & x > 0 \end{cases}$$

$$\omega_{k_1} = \frac{\hbar k_1^2}{2m} \quad k_2 = \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}$$

Verhalten von $f(x, t)$ für $t \rightarrow -\infty$:

$$f(x, t) \underset{t \rightarrow -\infty}{\approx} \int \frac{dk_1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_1 x - i\omega_{k_1} t} \cdot g(k_1)$$

Der zweite Term verschwindet (oszilliert nicht weg)

Es bleibt das Wellenpaket bei $x = \frac{\hbar k_0 t}{m}$ mit Amplitude 1.

Für $t \rightarrow +\infty$:

Wellenpaket bei neg $x = -\frac{\hbar k_0 t}{m}$ mit Amplitude: $\frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}}{k_0 + \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}}$
(Reflexion) = rücklaufendes Wellenpaket

und Wellenpaket bei pos $x = \frac{\hbar \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}}{m} \cdot t$ mit relativer Amplitude $\frac{2k_0}{k_0 + \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}}$ und $\sqrt{\quad}$ reduzierter Breite

Rechnung für den Transmissions - Anteil:

$$\int \frac{dk_1}{\sqrt{2\pi}} g(k_1) e^{ik_2 x}$$

$$k_2 = \sqrt{k_1^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0} \approx \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0} + (k_1 - k_0) \frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}}$$

Taylor entwickeln um k_0

$$\begin{aligned} \int \frac{dk_1}{\sqrt{2\pi}} g(k_1) e^{ik_2 x} &= \int \frac{dk_1}{\sqrt{2\pi}} g(k_1) e^{i \left[\sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0} + \frac{(k_1 - k_0) k_0}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}} \right] \cdot x} \\ &= \frac{e^{i \left(\sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0} \right) \cdot x}}{\sqrt{2\pi}} \int dk_1 g(k_1) e^{i k_1 \frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_0}} \cdot x} \end{aligned}$$

Änderung der Breite

b) Stufe $E < V_0$:

$$\Rightarrow k_2 \rightarrow i\beta_2 = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

$$\Psi_2 = \beta_2 e^{\beta_2 x} + \beta_2' e^{-\beta_2 x}$$

Forderung: exponentieller Abfall im verbotenen Bereich ②

$$\Rightarrow \beta_2 = 0$$

Lösung wie bei a) mit: $k_2 \rightarrow i\beta_2$, Transmissions $T = 0$

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\beta_2}{k_1 + i\beta_2}, \text{ Reflexion } R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - i\beta_2}{k_1 + i\beta_2} \right|^2 = 1$$

Totalreflexion, Änderung der Phase, Phasensprung \Rightarrow Laufzeitunterschied

8) Potential topf $-V_0 < E < 0$



1. quadr. Zustand
1. d. gest. Zustand

Lösung gedämpft

$$\begin{aligned} \psi_1 &= B_1 e^{\beta x} + B_1' e^{-\beta x} \\ \psi_3 &= B_3 e^{\beta x} + B_3' e^{-\beta x} \\ \psi_2 &= A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} \end{aligned}$$

$$\beta = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)} \quad (V_0 + E) > 0$$

quadratische Lösung: $\Rightarrow B_1' = B_3 = 0$

4 Konstanten: B_1, B_3', A_2, A_2', E

4 Anschlussbed: + Normierung

System überbestimmt: \Rightarrow keine Lösung für beliebige Energiewerte

Bindungsprobleme \rightarrow diskrete Energiewerte

$E > 0$: Streuzustände: Reflexion und Transmission 30.04.08

$E < 0$: $\psi_1 = B_1 e^{\beta x}, \psi_3 = B_3' e^{-\beta x}, \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$

$$\beta = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}$$

Anschlussbed: ψ bei $x = \pm \frac{a}{2}$ stetig und stetig ab.

$$\begin{aligned} \frac{A_2}{A_2'} &= \left(\frac{ik_2 + \beta}{ik_2 - \beta} \right) e^{ik_2 a} \text{ bei } x = \frac{a}{2} \\ \frac{A_2}{A_2'} &= \left(\frac{ik_2 - \beta}{ik_2 + \beta} \right) e^{-ik_2 a} \text{ bei } x = -\frac{a}{2} \end{aligned}$$

$\Rightarrow \left(\frac{ik_2 - \beta}{ik_2 + \beta} \right)^2 = e^{2ik_2 a}$ Eigenwertgleichung für k bzw E

Aus der Form $\left(\frac{k-p}{k+p}\right)^2 e^{-2ika} = 1$ nehmen wir $\frac{A_2}{A_1} = \pm 1$

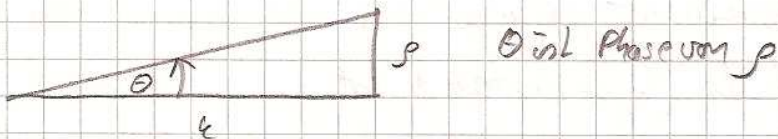
gerade oder ungerade Lösungen!

Fall 1: $\frac{k-p}{k+p} = e^{ika}$

Fall 2: $\frac{k-p}{k+p} = e^{-ika}$

"dickreichte Algebra"

$\frac{k+ip}{k-ip} = e^{2i\theta}$



wobei $\tan \theta = \frac{p}{k}$ $\theta = \arctan\left(\frac{p}{k}\right)$

$e^{ika} = e^{2i\theta}$ oder $e^{i\frac{ka}{2}} = e^{i\theta}$

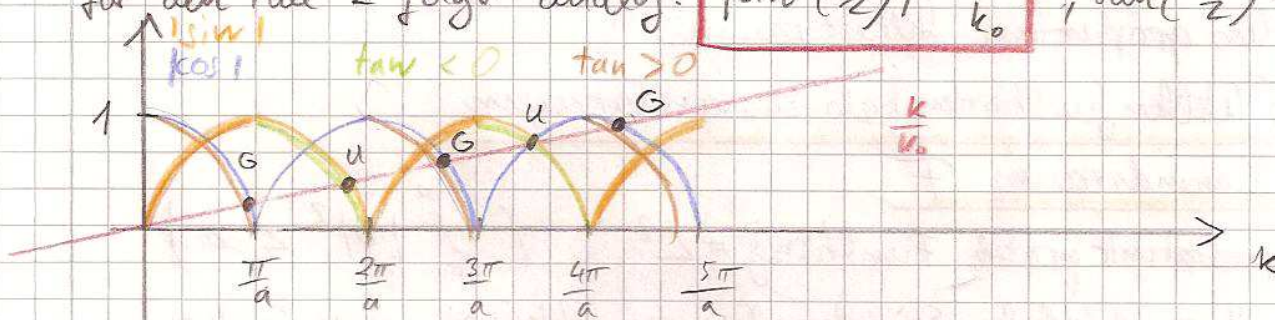
$\Rightarrow \frac{p}{k} = \tan \frac{ka}{2}$ grafische Lösung.

$1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \frac{p^2}{k^2} = \frac{2mV_0 \frac{1}{\hbar^2}}{k^2}$

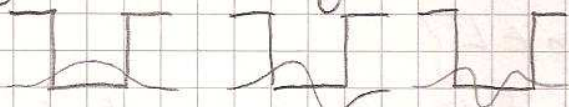
$\Rightarrow |\cos\left(\frac{ka}{2}\right)| = \frac{k}{k_0}$ mit $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$

$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0$

für den Fall 2 folgt analog: $|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)| = \frac{k}{k_0}$, $\tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0$



gerade und ungerade Lösungen wechseln sich ab.



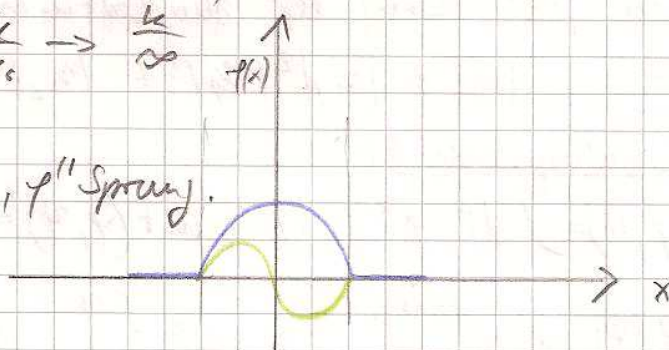
ausdrückende Berechnung von A_2, A_2', B_1, B_3'

Grenzfalle $V_0 \rightarrow \infty$, $\frac{k}{k_0} \rightarrow \frac{k}{\infty}$

Lösungen bei $n \cdot \frac{\pi}{a}$

Randbedingung: ψ stetig, ψ'' Sprung.

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



II Mathematische Hilfsmittel

Wellenfkt $\psi(x,t)$: relativ spezielle Beschreibung.

$|\psi|^2 \Rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsverteilung als Fkt. von x oder $|\tilde{\psi}|^2 \Rightarrow p$

Alternativ Angabe von der Energie des Systems: E_n .

falls E_n Eigenzustand ist.

(Analogie: klassisches System: Ort u. Geschw. bei $t=t_0$)

Messwert: „Erwartungswerte“ (\equiv Mittelwert)

z.B. $\langle p \rangle$ Mittelwert des Impulses:

$$\langle p \rangle = \int dp \tilde{\psi}^*(p) \psi(p) \cdot p = \int dx \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

Ziel: Abstrakte Beschreibung des Zustands eines QM Systems als Element in einem Zustandsraum.

(lineare Raum): Hilbertraum

Operatoren im Hilbertraum (bzw. Matrixelemente v. Operatoren):

$\hat{=}$ Messgrößen im Hilbertraum.

A) { Wellenfunktionen } als Zustandsraum

1) Zustandsraum \mathcal{F}

{ quadratintegrale Funktionen } = L^2 ($\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 < \infty$)

hier oft zusätzliche Einschränkungen, abhängig vom Problem

(stetig, diffbar, beschränkt, nur im Intervall $[a,b]$ ungleich Null)

$\mathcal{F} \equiv$ { genügend reguläre Funktionen $\in L^2$ }

• \mathcal{F} ist linearer Raum: $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F} \rightarrow \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 = \psi \in \mathcal{F}$

da $|\psi|^2$ ebenfalls quadratintegrierbar

Beweis: $|\psi|^2 = |\lambda_1 \psi_1|^2 + |\lambda_2 \psi_2|^2 + 2 \operatorname{Re} \lambda_1 \lambda_2^* \psi_1 \psi_2^*$

• Skalarprodukt

$(\psi, \varphi) = \int d^3 \vec{r} \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r})$ mit $(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi)$

Elektron $|\lambda_1 \lambda_2| (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$

$2 \lambda_1 \lambda_2^* < |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2$

$(\psi, \lambda \varphi)$ ist $\left\{ \begin{array}{l} \text{linear} \\ \text{antilinear} \end{array} \right\}$ bezüglich $\left\{ \begin{array}{l} \psi \\ \varphi \end{array} \right\} \Leftrightarrow$

$$(\psi, \lambda \varphi) = \lambda (\psi, \varphi)$$

$$(\lambda \psi, \varphi) = \lambda^* (\psi, \varphi)$$

2.05.08 II Mathematische Hilfsmittel

A) Wellenpaket als Zustandsraum

Skalarprodukt: $\langle \varphi | \psi \rangle = \int d\vec{r} \varphi^* \psi$

Es gilt: $\langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \psi, \varphi \rangle$

Norm: $\langle \varphi, \varphi \rangle^{\frac{1}{2}} = |\varphi|$

Schwarz'sche Ungleichung: $|\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle| \leq |\varphi_1| |\varphi_2|$

lineare Operatoren

— lineare Abbildung $A \quad \varphi = A\psi$ mit $\varphi, \psi \in \mathcal{T}$

$A(n_1 \varphi_1 + n_2 \varphi_2) = n_1 A\varphi_1 + n_2 A\varphi_2$

Beispiele:

Operator $X \hat{=}$ Multiplikation mit x

$X\varphi(x, y, z) = x \cdot \varphi$

Ableitungsoperator: $D_x \varphi = \frac{d}{dx} \varphi$

Paritätsoperator: $\Pi \varphi(x, y, z) = \varphi(-x, y, -z)$

Anmerkung: ein Operator A ist i.A. nicht für alle Zustände definiert

Beispiel:

$\varphi(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \frac{1}{a+|x|}$, $\int dx |\varphi|^2 = 1$ aber $\int |x| |\varphi|^2$ divergiert

2.05.2008 • Produkt AB ist def durch $(AB)\psi(\vec{r}) = A(B\psi(\vec{r}))$

in allg. gilt: $AB \neq BA$

$[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$ Kommutator

Beispiel: $[X, D_x]\psi(\vec{r}) = (x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x)\psi(x, y, z) = x(\frac{d}{dx}\psi(x, y, z))$

$- \frac{d}{dx}(x\psi(x, y, z)) = -\psi(x, y, z)$ für alle ψ

also $[X, D_x] = -1$ oder $[X, \frac{\hbar}{i} D_x] = i\hbar$
↓
Impulsoperator

2) Orthonormalbasis

Vektor wird charakterisiert durch seine Komponenten bezüglich einer orthonormierten Basis $\{u_i\}$

$u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ $i = 1 \dots n$ (eventuell bis ∞)

$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ \Leftrightarrow orthonormiert

$\{u_i\}$ ist „Basis“ wenn jedes $\psi \in \mathcal{F}$ geschrieben werden kann als

$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \cdot u_i(\vec{r})$

• Berechnung der c_i (vgl. Zustand, Basis, ges: c_i)

ausführliche Schreibweise für Wellenfunktion

Kurzschreibweise (allgemein)

$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \cdot u_i(\vec{r})$	$\psi = \sum_i c_i u_i$
$\int d\vec{r} (u_j^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})) = \sum_i c_i \int d\vec{r} (u_j^*(\vec{r}) u_i(\vec{r})) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$	$(u_j, \psi) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = c_j$

• Skalarprodukt in Komponenten Schreibweise

$\psi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r})$	$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\psi = \sum_i b_i u_i$	$\psi = \sum_i c_i u_i$
-------------------------------------------	-------------------------------------------	-------------------------	-------------------------

$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\psi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$
------------------------------------------------------------------	-----------------------------------

speziell: $(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$

• Vollständigkeitsrelation

Für jede Funktion $\psi(\vec{r})$ aus \mathcal{F} gilt:

$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \int d\vec{r}' u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') u_i(\vec{r})$	$\psi = \sum_i (u_i, \psi) u_i = c_i u_i$
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------

$= \int d\vec{r}' \psi(\vec{r}') \left(\sum_i u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r}) \right)$	$= \sum_i u_i (u_i, \psi)$
--------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------

$\sum_i u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$	$\sum_i u_i (u_i, \cdot) = \mathbb{1}$ (spadisches Produkt)
--------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------

Für Basis in 3D:

$\sum_i u_i(\vec{r}') u_i^*(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$
 = spadisches Produkt
 in 3D

3) Ebene Wellen und andere verallgemeinerte Basiszustände

Ein dimensionale Welle: $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$

nicht normierbar, aber als Idealisierung oft bequem.

$p \hat{=}$ Index (hier kontinuierlich)

Zerlegung eines Wellenpakets nach ebenen Wellen $\hat{=}$ Entwicklung nach der Basis $\{v_p\}$

Fouriertransformation $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ | $\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$

$$\psi(x) = \int dp \tilde{\psi}(p) v_p(x)$$

$$\hat{=} \sum_i c_i u_i$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int dx v_p^*(x) \psi(x)$$

$$\hat{=} c_i = (u_i, \psi)$$

Darstellung des Zustandsvektors

Berechnung der Koeffizienten

Parseval'sche Gleichung der Fouriertransformation

$$\int dx \psi^*(x) \psi(x) = \int dp \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p)$$

$$\hat{=} (\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$$

Vollständigkeit: $\sum_i u_i(x) u_i^*(x') = \delta(x-x')$

$$\int dp \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}} - e^{-\frac{ipx'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp(ip(x-x')) \cdot \frac{1}{\hbar} = \delta(x-x')$$

Orthogonalität:

$$(v_p, v_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \exp(-ip\frac{x}{\hbar} + ip'\frac{x}{\hbar}) = \delta(p-p')$$

Entsprechendes gilt für die verallgemeinerte Basis $\{\xi_{x_0}(x)\}$ mit $\xi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$

Für beliebige kontinuierliche Basis $\{\omega_\alpha\}$: $(\omega_\alpha, \omega_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$ (Orthogonalität)

$$\int dx \omega_\alpha(x) \omega_{\alpha'}^*(x) = \delta(\alpha - \alpha') \quad (\text{Vollständigkeitsrelation})$$

Häufig brauchen wir eine gemischte Basis: z.B. mit Bindungszuständen (u_i)

und Streuzuständen (ω_α)

$\{u_i, \omega_\alpha\}$

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij} \quad (\omega_\alpha, \omega_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha') \quad (u_i, \omega_\alpha) = 0 \quad (\text{Orthogonalität})$$

$$\sum_i u_i(x) u_i^*(x') + \int dx \omega_\alpha(x) \omega_\alpha^*(x') = \delta(x-x')$$

7.5.08

B) Dirac Notation

1) Einführung

Zustand eines Teilchens wird charakterisiert durch $\psi(\vec{r})$ oder allgemein durch die Komponenten bezüglich einer Basis.

Basis	Index	Komponenten	$\psi(\vec{r})$	Bezeichnung
$u_i(\vec{r})$	i	c_i	$\sum_i c_i u_i(\vec{r})$	allgemein
$v_p(\vec{r})$	p	$\tilde{\psi}(p)$	$\int dp \tilde{\psi}(p) v_p(\vec{r})$	Impulsdarstellung
$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	\vec{r}_0	$\psi(\vec{r}_0)$	$\int d\vec{r} \psi(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	Ortdarstellung
$W_{E_n}(\vec{r})$	n	c_n	$\sum_n c_n W_{E_n}(\vec{r})$	Energiedarstellung für gebundene Zustände
$W_E(\vec{r})$	E	$c(E)$	$\int dE W_E(\vec{r})$	Energiedarstellung für Streuzustände

Energie-Eigenfunktionen
Streu-zustände

Analogue zum Vektorraum mit \vec{a} in \mathbb{R}^3 .

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \sum_i a_i \vec{e}_i \text{ bezüglich der Basis } \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$$

Basiswechsel:

neue Basisvektoren \vec{e}'_i mit $\vec{e}'_i = O \vec{e}_i$

$$\vec{a} = \sum_j a'_j \vec{e}'_j \text{ wobei } a'_j = \sum_i a_i \vec{e}'_j \cdot \vec{e}_i = \sum_i a_i \underbrace{\vec{e}'_j \cdot \vec{e}_i}_{= O_{ji}} = \sum_i a_i O_{ji}$$

\vec{a} hat Bedeutung unabh. von Basis. $\vec{a} \cdot \vec{b}$ liefert das gleiche

Resultat in jeder Basis: $\sum_i a_i b_i = \sum_i a'_i b'_i$

2) "Ket" und "Bra" (-> Bracket)

Beschreibung eines Zustands ohne Bezug auf Ortsvariable.

a) "Ket" \equiv Element des Zustandsraumes, symbolisiert durch $|a\rangle$

[Analogie \vec{a} (ist ein Objekt mit Inhalt z.B. $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$)]

Für jedes $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{E} \Rightarrow |\psi\rangle$

$|\psi\rangle$ charakterisiert den Zustand ohne Bezug auf Koordinatensystem.

b) "Bra" Zu jedem "Ket" $|\psi\rangle$ gehört ein "Bra": $\langle \psi |$ das zusammen mit einem beliebigen "Ket" $|\varphi\rangle$ eine komplexe Zahl ergibt:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \text{komplexe Zahl, } \triangleq \text{Skalarprodukt wie in Abschnitt A)}$$

Gelegentlich lassen wir für ψ auch nicht normierbare Zustände zu.

Es gilt $\langle f | \psi \rangle^* = \langle \psi | f \rangle$

$\langle f | n_1 \psi_1 + n_2 \psi_2 \rangle = n_1 \langle f | \psi_1 \rangle + n_2 \langle f | \psi_2 \rangle$

$\langle n_1 f_1 + n_2 f_2 | \psi \rangle = n_1^* \langle f_1 | \psi \rangle + n_2^* \langle f_2 | \psi \rangle$

3) Lineare Operatoren

$A | \psi \rangle$ ist wieder "Ket" Dann ist $\langle f | (A \psi) \rangle$ einerseits Skalarprodukt von $\langle f$ mit $(A \psi)$. Andererseits ist es auch Matrixelement.

Beispiele für Operatoren:

gegeben sei $| \psi_1 \rangle$ und $\langle f_1 |$ fest. Dann definiert $| \psi_1 \rangle \langle f_1 |$ einen linearen Operator auf bel. $| \psi \rangle$ durch $| \psi_1 \rangle \langle f_1 | \psi \rangle$

Analogie zu Vektoren:	"Ket"	komplexe Zahl
$\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$	$a^T \cdot b = \sum_i a_i^T b_i$	$b \cdot a^T = \begin{pmatrix} b_1 a_1^T & b_1 a_2^T & \dots \\ b_2 a_1^T & \dots & \dots \\ \vdots & & \dots \end{pmatrix}$

Projektor: Es sei $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

$P_\psi \equiv | \psi \rangle \langle \psi |$ Operator

$P_\psi | \psi \rangle = | \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$ Projektion von ψ auf ψ

Es gilt $P_\psi^2 = P_\psi$ (quadrieren)

Analogie im \mathbb{R}^3 :	$a = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$P_a = a \cdot a^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
Es gilt:	$P_a^2 = P_a$	$P_a \cdot b = b_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Es seien $| \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle, \dots, | \psi_g \rangle$ orthonormierte Ket: das heißt $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$ für $1 \leq i, j \leq g$, dann ist $P = \sum_{i=1}^g | \psi_i \rangle \langle \psi_i |$ Projektor auf den durch $| \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle, \dots, | \psi_g \rangle$ aufgespannten Raum

Zeige dass $P^2 = P$: $P^2 = (\sum_j | \psi_j \rangle \langle \psi_j |) (\sum_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i |)$
 $= \sum_j | \psi_j \rangle \underbrace{\langle \psi_j | \psi_i \rangle}_{\delta_{ij}} \langle \psi_i | = \sum_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i | = P$

$(| u \rangle \langle v |)$ ist Operator $(| u \rangle \langle v |)^+ = | v \rangle \langle u |$

Beweis für beliebige f, ψ : $\langle f | (| u \rangle \langle v |)^+ | \psi \rangle = (\langle \psi | u \rangle \langle v | f \rangle)^+$
 $= \langle \psi | v \rangle \langle u | f \rangle$ also ist $(| u \rangle \langle u |)^+ = | u \rangle \langle u |$ hermitisch

Allgemein: Für hermitesche Operatoren gilt $A^+ = A$ d.h. $\forall f, \psi$: $\langle f | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^+ | f \rangle = \langle \psi | A | f \rangle$ (genau wie bei hermiteschen Matrizen)

Beachte den Unterschied zwischen hermitisch und selbstadjungiert.

(Adjungiert) $A^\dagger = (A^*)^T$ (transponiert) $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & \dots \end{pmatrix}$ $A^* = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & \dots \end{pmatrix}$ $A^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & \dots \end{pmatrix}$

4) Hermitesch konjugiert (= adjungiert) Operatoren

A angewendet auf ket $|\psi\rangle$ liefert $A|\psi\rangle$, (ket!)

Wirkung von A auf bra $\langle\psi|$ liefert bra: $\langle\psi|A$

ist festgelegt durch $\langle\psi|A\rangle = \langle\psi|(A|\psi\rangle)$

und wir schreiben in Analogie zur Matrix-Notation:

$\langle\psi|A|\psi\rangle$ „Matrix-Element“

Zu A adjungierte Operater A^\dagger ist def durch

$$\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \quad (\text{Matrizen: } (M^\dagger)_{ij} = M_{ji}^*)$$

Betrachte: im Allg. $|\psi\rangle \neq A|\psi\rangle$

$$\text{aber } \langle A\psi| = \langle\psi|A^\dagger$$

Es gilt: $A^{\dagger\dagger} = A$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (\text{Umkehrreihenfolge})$$

1) Darstellung im Zustandsraum

Wahl einer Darstellung $\hat{=}$ Wahl einer orthonormierten Basis

Zustände werden "dargestellt" durch die Komponenten bezüglich dieser Basis

Operatoren wie Matrizen:

Formelsammlung: (nur für diskreten Index)

$\{|u_i\rangle\}$ Basisvektoren $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$ jeder ket kann geschrieben

werden $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ $P_i = |u_i\rangle\langle u_i|$ ist Projektor auf den

durch $|u_i\rangle$ aufgespannten Teilraum. $\sum_i P_i = \mathbb{1}$ (Einheitsoperator)

Beispiel: $\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i||\psi\rangle$

$= \sum_i \langle\psi|u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle$
in einer Darstellung

"Ket" $|\psi\rangle$ in der durch die Menge $\{|u_i\rangle\}$ festgelegten Darstellung entspricht

der einspaltigen Matrix $\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$

"Bra" $\langle\psi|$ entspricht einzeiliger Matrix $(\langle\psi|u_1\rangle, \langle\psi|u_2\rangle, \dots) = (c_1^*, c_2^*, \dots)$

Operator A entspricht $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$

0.5.08

Matrix mit abzählbar unendlich vielen Indizes (oder kontinuierlich "Index")

$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ In dieser Darstellung gilt $| \psi \rangle = A | \psi \rangle$

$\langle u_i |$ auf gleich angewendet (von links):

$$\langle u_i | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} c_j$$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} c_j \quad (b \text{ Komponenten von } \psi)$$

ist eine komplexe Zahl.

Basis Wechsel: (Wechsel der Darstellung)

Übergang von Basis $\{|u_i\rangle\}$ zu Basis $\{|t_k\rangle\}$ ist festgelegt durch die Komponenten jedes neuen Basisvektors bezüglich der alten Basis

$$|t_k\rangle = \sum_i \langle u_i | t_k \rangle |u_i\rangle \quad (= \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | t_k \rangle)$$

Koeffizienten bezügl. der Basis $\{|u_i\rangle\}$

$$\text{Matrix } S_{ik} = \langle u_i | t_k \rangle$$

$$(S^+)_{ki} = S_{ik}^* = \langle t_k | u_i \rangle$$

$$S_{ik}^+ = (S_{ik}^*)^T$$

transponiert

$$\text{Sind unitar: } SS^+ = S^+S = \mathbb{1} \quad \text{oder } S^{-1} = S^+$$

Beweis: $(SS^+)_{ij} = \sum_k \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | u_j \rangle = \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$

D) Eigenwertgleichungen / Observablen

1) Eigenwerte / Eigenvektoren

$$A | \psi \rangle = \lambda | \psi \rangle$$

λ ist ein einfacher Eigenwert \Leftrightarrow der zu λ gehörige Eigenvektor ist

eindeutig festgelegt

λ ist g-fach entartet \Leftrightarrow

\exists g linear unabhängige Eigenvektoren

zu λ : $| \psi_i \rangle, i = 1, \dots, g$
Diese spannen einen g -dim Eigenraum auf (jede Linearkombination ist Eigenvektor)

Eigenwertgleichung in bestimmter Darstellung $\{|u_i\rangle\}$

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle; \quad A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$$

$$\langle u_i | A \sum_j | u_j \rangle c_j | \psi \rangle = \lambda \langle u_i | \psi \rangle$$

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i = \lambda \sum_j \delta_{ij} c_j \Rightarrow \sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0 \quad (*)$$

$c_j \neq 0$ nur dann, wenn

$$\text{Det}(A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) = 0$$

Säkulargleichung

Für $N \times N$ -Matrix ist dies Gleichung für n vom Grad N .

N Wurzeln: i.A. reell oder komplex, einfach oder vielfach. Vektor e_j ist dann Lösung der Gleichung (*)

Für hermitesche Operatoren gilt:

Falls n n -fach entartet (d.h. die Säkulargleichung hat n -mal die Wurzel n)

→ n linear unabh. Eigenvektoren zu n

2) Observablen

Im folgenden sei A hermitisch \Rightarrow Eigenwerte reell

Denn: $A|\psi\rangle = n|\psi\rangle$ für Eigenvektor $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = n \langle\psi|\psi\rangle$$

$$\underline{n^* \langle\psi|\psi\rangle} = \langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \underline{n \langle\psi|\psi\rangle}$$

Ferner gilt $\forall |\psi\rangle$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\psi\rangle^* = n^* \langle\psi|\psi\rangle^* = n \langle\psi|\psi\rangle$$

$\langle\psi|A = n \langle\psi|$ A wirkt auch nach links

2 Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal zueinander

$$A|\psi\rangle = n|\psi\rangle, \quad A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \begin{cases} n \langle\varphi|\psi\rangle \\ \mu \langle\varphi|\psi\rangle \end{cases} \text{ Wirkung nach } \begin{cases} \text{rechts} \\ \text{links} \end{cases} \text{ wenn } n \neq \mu \Rightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = 0$$

endlich dim. Raum, herm. Matrix:

$\{ \text{Eigenvektoren} \} = \text{Basis}$

Hier (unendlichdimensionaler Hilbertraum) zusätzliche Forderung

Hermitesche Operatoren O , deren Eigenvektoren eine Basis bilden = Observablen

d.h. jeder Zustand kann nach Eigenvektoren von O entwickelt werden.

Beispiele für hermitesche Operatoren:

1) Hamilton-Operator: Energie-Eigenzustände sind vollständig

2) Projektor $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

a) P_ψ ist hermitisch, ein Eigenwert $\stackrel{|\psi\rangle}{=} 1$, alle anderen $\stackrel{|\varphi\rangle}{=} 0$.

b) für jedes $|\varphi\rangle$ gilt: $|\varphi\rangle = \underbrace{P_\psi}_{|\psi\rangle} |\varphi\rangle + \underbrace{(1 - P_\psi)}_{|\varphi\rangle} |\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle$

$|1_1\rangle$ und $|1_2\rangle$ sind Eigenzustände zu P_y mit Eigenwert 1 bzw 0.

da $P_y |1_1\rangle = P_y^2 |1_1\rangle = P_y |1_1\rangle = |1_1\rangle$

$P_y |1_2\rangle = (P_y - P_y^2) |1_2\rangle = (P_y - P_y) |1_2\rangle = 0$

Vollständiger Satz von Observablen A, B, C, \dots

1) Alle Operatoren vertauschen untereinander

2) Das System der Eigenvektoren ist nicht mehr entartet, d. h. zwei Eigenvektoren zu A, B, C, \dots unterscheiden sich in wenigstens einem Eigenwert

Diese Eigenvektoren sind somit eindeutig durch die Eigenwerte charakterisiert.

Beispiel: Eindim Problem x oder P

dreidim Problem x, y, z oder P_x, P_y, P_z

oder bei dreidimensionalen Problem: H, L^2, L_z

Wiederholung

14.05'88

[1] Falls $[A, B] = 0 \Rightarrow \exists$ orthonormierte Basis mit Basisvektoren, die simultan Eigenvektoren zu A, B sind

Anmerkungen:

- Wenn ein Operator O mit allen Operatoren eines vollständigen Satzes kommutiert, dann ist er eine Funktion dieser Operatoren.

Beispiel: 1-D: O kommutiert mit X $[O, X] = 0 \rightarrow O$ ist eine Funktion von X .

- "Kat" oder "bra" werden oft durch die Eigenwerte eines vollständigen Satzes von Operatoren charakterisiert.

z.B. $|p\rangle \hat{=} ebene Welle$ mit Impuls p , $|E_0\rangle \hat{=} Grundzustand$ des Hamiltonop. mit E_0

$|n, l, m\rangle \hat{=} Energie \sim n^2$ Impuls $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ $L_z = m\hbar$

Observable Impuls: $\{ \text{Eigenzustände } |E\rangle \}$ Basis $\langle p_0, p'_0 \rangle = \delta(p_0 - p'_0)$

Impulsdarstellung von Wellenfkt: $\langle P | \psi \rangle = \tilde{\psi}(p)$

Observable Ort: $\{ \text{Eigenzustände } |X_n\rangle \}$ Basis $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$

$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

Observable Energie: $\{ \text{Eigenzustände } |E_i\rangle \}$ $\langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$ $\langle E_n | \psi \rangle$

Funktionen von Operatoren

$f(A)$

entweder: In einer Darstellung, in welcher A diagonal ist

$$\langle i | A | j \rangle = \langle i | a_j | j \rangle = a_j \delta_{ij}$$

Matrixschreibweise: $A = \begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_j & \\ 0 & & a_n \end{pmatrix}$ $f(A) = \begin{pmatrix} f(a_1) & & 0 \\ & & \\ 0 & & f(a_n) \end{pmatrix}$

$$\langle i | f(A) | j \rangle = f(a_j) \delta_{ij}$$

sonst: A nicht diagonal

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \quad f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n$$

wichtiges Beispiel:

$\exp\left(\frac{i a}{\hbar} P\right)$ P Impulsoperator, a Konstante $\in \mathbb{R}$

Impulsraum: $\langle p_0' | e^{i a \frac{P}{\hbar}} | p_0 \rangle = \langle p_0' | e^{i a \frac{P_0}{\hbar}} | p_0 \rangle = e^{i a \frac{p_0}{\hbar}} \langle p_0' | p_0 \rangle$

$$= e^{i a \frac{p_0}{\hbar}} \delta(p_0' - p_0)$$

$$\langle p_0 | e^{i a \frac{P}{\hbar}} | \psi \rangle = \int \langle p_0 | e^{i a \frac{P}{\hbar}} | p_0' \rangle \langle p_0' | \psi \rangle dp_0' \quad \text{Vollständigkeitsrelation}$$

$$= \int e^{i a \frac{p_0}{\hbar}} \delta(p_0 - p_0') \tilde{\psi}(p_0') dp_0'$$

$$= e^{i a \frac{p_0}{\hbar}} \tilde{\psi}(p_0)$$

Operator $e^{i a \frac{P}{\hbar}}$ im Ortsraum:

$$P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad e^{i a \frac{P}{\hbar}} = e^{a \frac{\partial}{\partial x}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(a \frac{\partial}{\partial x}\right)^n$$

$$\langle x | e^{i a \frac{P}{\hbar}} | \psi \rangle = \int \langle x | e^{a \frac{\partial}{\partial x}} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx'$$

$$= \int e^{a \frac{\partial}{\partial x}} \delta(x - x') \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \psi^{(n)}(x) = \psi(x+a)$$

Bemerkung: Impulsoperator quadriert Translation im Ortsraum!

Beispiel: Hamilton-Operator $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$

Ortdarstellung: $\langle x_0 | P^2 | x_0' \rangle = \left(i \hbar \frac{\partial}{\partial x_0}\right)^2 \delta(x_0 - x_0')$

$$\langle x_0 | V(x) | x_0' \rangle = V(x_0) \delta(x_0 - x_0')$$

$$\langle x_0 | H | x_0' \rangle = \int dx_0' \langle x_0 | H | x_0' \rangle \langle x_0' | \psi \rangle$$

$$= \int dx_0' \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_0'^2}\right) + V(x_0) \right] \delta(x_0 - x_0') \psi(x_0')$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + V(x_0) \right] \psi(x_0)$$

mit $\langle x_0 | H | \psi \rangle = E \langle x_0 | \psi \rangle$

\rightarrow Dgl für $\psi(x_0)$

Impulsraum: $\langle p_0 | P^2 | p_0' \rangle = p_0^2 \delta(p_0 - p_0')$

$$\begin{aligned} \langle p_0 | V(x) | p_0' \rangle &= \int dx_1 dx_2 \langle p_0 | x_1 \rangle \langle x_1 | V(x) | x_2 \rangle \langle x_2 | p_0' \rangle \\ &= \int dx_1 dx_2 \underbrace{V_{p_0}^*(x_1) V_{p_0'}(x_2)}_{\substack{= 1 \\ \text{mit } x_1 = x_2}} V(x_2)^{-1} \delta(x_1 - x_2) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx_2 e^{-i(p_0' x_2 - p_0 x_2)} \frac{1}{\hbar} \delta(x_1 - x_2) V(x_2) \\ &= \int dx_1 dx_2 \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-i(p_0' x_2 - p_0 x_2)} \delta(x_1 - x_2) V(x_2) = \int dx_1 \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\pm i(p_0' - p_0)x_1} V(x_1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{V}(p_0' - p_0) \end{aligned}$$

also: $\langle p_0 | H | \psi \rangle = \frac{p_0^2}{2m} \tilde{\psi}(p_0) + \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{V}(p_0' - p_0) \tilde{\psi}(p_0')$

⇒ Integralgleichung im Impulsraum

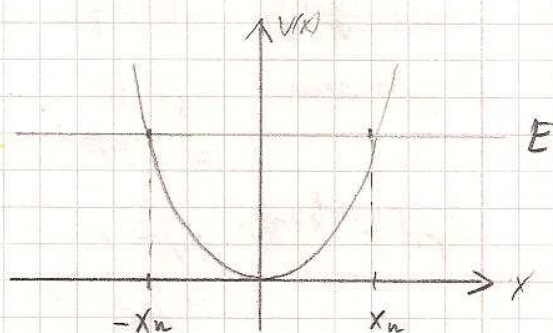
IV Der harmonische Oszillator

A) Einleitung: HO in der klass. Mechanik

- Teilchen mit Masse m in einem Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad \text{Bgl: } m^2 \frac{dx^2}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

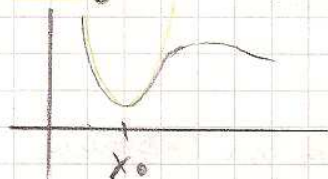
Lösung: $x(t) = x_m \cos(\omega t - t)$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$



kinet. Energie: $T = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{p^2}{2m}$

Gesamtenergie: $E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_m^2 = \text{const}$

Bemerkung: Die pot. Energie $U(x)$ vieler Systeme hat ein Minimum bei $x = x_0$



$$U(x) = \underbrace{U(x_0)}_{=0 \text{ o. b. d. A}} + \underbrace{U'(x_0)}_{=0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \underbrace{U''(x_0)}_{>0} (x - x_0)^2 + \dots$$

$E_m \omega^2$

Beispiele: • Oszillation von Atomen in Kristallen

• Quantisierung von Feldern z.B. ein E-Feld

B) HO in der Quantenmechanik

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \quad \text{klass. Größen} \rightarrow \text{Operatoren}$$

⇒ EW-Gleichung $\hat{H}\psi = E\psi \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x)$

1) Analytische Lösung $\hat{x} = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad E = \frac{E}{\hbar\omega}$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hat{x}^2 + 2\varepsilon \right) \psi(x) = 0$$

Verhalten von $\psi(x)$ für große \hat{x} ($\hat{x} \gg \varepsilon$) → löst $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hat{x}^2 + 1 \right) \psi_{\pm}(\hat{x}) = 0$

$$G_{\pm}(\hat{x}) = \exp\left(\pm \frac{\hat{x}^2}{2}\right) \quad \frac{d^2}{d\hat{x}^2} G_{\pm}(\hat{x}) = \hat{x}^2 \exp\left(\pm \frac{\hat{x}^2}{2}\right) \pm \exp\left(\pm \frac{\hat{x}^2}{2}\right)$$

Ansatz: $\psi(x) = h(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$

Einsetzen in Dgl: $(\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2\varepsilon - 1) h(x) = 0$

16.5.08 Lösung mit Potenzreihenansatz:

$h(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} x^{2m+p} \quad a_0 \neq 0$

$\Rightarrow (2m+p+2)(2m+p+1) a_{2m+2} = (4m+2p-2\varepsilon+1) a_{2m}$

normierbare Lösung nur falls Potenzreihe abbricht!

\Rightarrow Bed. $(4m+2p-2\varepsilon+1) = 0$

$(2m+p+2)(2m+p+1) = 0$ für $m = -1$

$\Rightarrow p(p-1) = 0 \quad \varepsilon_n = 2m+p + \frac{1}{2} \quad n = 2m+p$

$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$

Quantisierungsbedingung in Dgl:

$(\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n) h_n(x) = 0$

Hermite Differentialgleichung:

Lösung: Hermite Polynome $H_n(x)$

$h_n(x) = N_n H_n(x) \quad N_n = (\sqrt{\pi} n! 2^n)^{-\frac{1}{2}} \quad H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$

Stationäre Lösung des HO

$\psi_n(x) = N_n H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$

Zugehörige diskrete Energie EW: $E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$

$\Delta E = \text{const} = \hbar \omega$

Grundzustandsenergie $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$

Eigenschaft der $\psi_n(x)$: $\psi_n(x) = (-1)^n \psi_n(-x)$

ψ_n haben n Nullstellen.

2) HO: Algebraische Methode

$(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2) \varphi(x) = E \varphi(x)$

Dgl dynam. Größen: (dimensionlos)

$\hat{x} = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m \hbar \omega}} p \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i$

$\hat{H} = \frac{1}{2 \hbar \omega} \hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2) i \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega}$

$\hat{H} |\varphi_n\rangle = \varepsilon |\varphi_n\rangle$

Definition neue Operatoren:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}) \quad \text{invertieren: } \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a)$$

Ergibt:

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a)$$

$$1) [a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [(\hat{x} + i\hat{p}), \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{i}{2} [\hat{p}, \hat{x}] - \frac{i}{2} [\hat{x}, \hat{p}] = 1$$

$$2) N := a^\dagger a = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1) \quad \text{Berechnungszahloperator}$$

$$3) \hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$$

Eigenzustände von \hat{H} sind auch Eigenzustände von N !

$$\Rightarrow \text{Suche Lösung von } N|\psi\rangle = \nu|\psi\rangle$$

$$\rightarrow E_\nu = \left(\frac{E}{\hbar\omega}\right) = \nu + \frac{1}{2}$$

Eigenschaften von N, a, a^\dagger :

$$a) [N, a] = [a^\dagger a, a] \quad \text{mit } [A, B, C] = A[B, C] + [A, C]B \\ = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \quad \text{und} \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger$$

b) Eigenwert $\nu \geq 0$:

$$0 \leq \| \langle a | \psi_\nu \rangle \|^2 = \langle a \psi_\nu | a \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a^\dagger a | \psi_\nu \rangle \\ = \langle \psi_\nu | N | \psi_\nu \rangle = \nu \underbrace{\langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle}_{> 0}$$

$$\Rightarrow \nu \geq 0 \text{ und falls } \nu = 0 \quad a|\psi_0\rangle = 0$$

$$0 = a|\psi_0\rangle = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} p \right) |\psi_0\rangle = 0$$

$$\boxed{p = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$$

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0 \quad \psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right]$$

c) Sei $|\psi_\nu\rangle$ Eigenzustand zu N , $N|\psi_\nu\rangle = \nu|\psi_\nu\rangle$

$\Rightarrow a|\psi_\nu\rangle$ ist Eigenzustand zu $\nu-1$

a^\dagger ist Eigenzustand zu $\nu+1$

Bew: $N a^\dagger |\psi_\nu\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger) |\psi_\nu\rangle \quad \text{mit } [N, a^\dagger] = a^\dagger$

$$= a^\dagger (\nu + 1) |\psi_\nu\rangle = (\nu + 1) a^\dagger |\psi_\nu\rangle$$

$|\psi_\nu\rangle$ sei normiert! : $\langle a^\dagger \psi_\nu | a^\dagger \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | a a^\dagger | \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\nu | \underbrace{a^\dagger a + 1}_{N} | \psi_\nu \rangle$

$$= (\nu + 1) \langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = (\nu + 1)$$

$$\Rightarrow \boxed{a^\dagger |\psi_\nu\rangle = \sqrt{\nu+1} |\psi_{\nu+1}\rangle} \quad \text{d.h. durch Wiederholte Anwendung von } a^\dagger$$
$$\boxed{a |\psi_\nu\rangle = \sqrt{\nu} |\psi_{\nu-1}\rangle} \quad \text{auf dem Grundzustand lassen sich alle$$

Eigenzustände erzeugen.

$$|p_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |p_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |p_0\rangle$$

Beh: • alle Eigenwerte γ von N sind $\in \mathbb{N}_0$

• sei $\tilde{\gamma} \in \text{EW}$ $n < \tilde{\gamma} < n+1$ $N|p_{\tilde{\gamma}}\rangle = \tilde{\gamma}|p_{\tilde{\gamma}}\rangle$

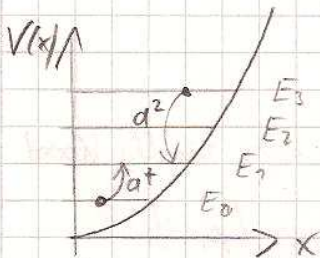
$$N(a^n |p_{\tilde{\gamma}}\rangle) = (\tilde{\gamma} - n)(a^n |p_{\tilde{\gamma}}\rangle)$$

$$N(a^{n+1} |p_{\tilde{\gamma}}\rangle) = \underbrace{(\tilde{\gamma} - n - 1)}_{< 0} (a^{n+1} |p_{\tilde{\gamma}}\rangle)$$

Widerspruch zu Beh. b) alle EW sind > 0

Interpretation:

a^\dagger : heißt Erzeugnisoperator } Leiteroperatoren
 a : Vernichtungsoperator }



Explizite Darstellung von N, H, a, a^\dagger, p, x in der Fockraumdarstellung

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad N = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (N + \frac{1}{2}) \quad H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (\text{Eigenenergien auf Diagg.})$$

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

$$\langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m, n+1} \quad (a^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$(a) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

← Hauptdiagonale

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$$

$$(\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a)$$

$$(\hat{p}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

D) Diskussion der Resultate

1) Erwartungswerte

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad \text{für alle } x$$

$\langle n | (\hat{x})^2 | n \rangle$ wächst mit n und

entspricht dem Ergebnis aus der klass. Mechanik für zeitliches Mittel.

2) Qualitative Betrachtung des Grundzustands

Klassisch: $x=0$ $p=0$ $E_{kin} = 0$

QM: $\langle x \rangle = 0$ $\langle p \rangle = 0$

Wellenfunktion ausgedehnt über Bereich $\sim \xi$

Potential Energie: $\langle V \rangle \approx \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$

Impuls: $\langle p^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\xi^2}$

E_{kin} : $\langle p \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$

H : $\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$

wird min für $\xi^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \Rightarrow \langle H \rangle \approx \hbar\omega$

III) Postulate der QM

21.05.08

A) Allgemeine Prinzipien (1925/26...)

Klass. System: zur Zeit t_0 werde Zustand festgelegt durch versch. Koord.

$q_i(t_0)$ und Impulse $p_i(t_0)$. \Rightarrow für beliebige Zeit $q_i(t)$ und $p_i(t)$

über die Hamilton Gleichungen. 2n Def. 1. Grades.

QM: zur Zeit t_0 Zustand festgelegt durch $|\psi(t_0)\rangle$ Element eines Hilbertraums

Jede Messung wird beschrieben durch einen Operator \hat{A} , der auf $|\psi(t_0)\rangle$ wirkt. „Observable“ $\hat{=}$ Messung

Messresultat liefert \rightarrow Eigenwert von \hat{A}

Wahrscheinlichkeit den Eigenwert a_n zu finden (a_n nicht entartet)

$W(a_n) = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$ wobei $|a_n\rangle$ der zugehörige Eigenwert ist
mit $\sum W(a_n) = 1$

(falls a_n g-fach entartet $\sum_{i=1}^g |\langle a_{ni} | \psi \rangle|^2$)

für A mit kontinuierlichem Spektrum: W sei Wahrscheinlichkeitsdichte

$W(\alpha) = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$

Beispiel: $\alpha W(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$

$\alpha W(p) = |\langle p | \psi \rangle|^2 dp = |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$

„Reduktion des Wellenpaketes“

Nach der Messung mit Resultat a_n ist das System sicher im Zustandsraum, der durch a_n festgelegt ist

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad ; \text{ wobei } P_n = |u_n\rangle\langle u_n| \text{ Projektor auf}$$

$$= \frac{|u_n\rangle\langle u_n | \psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | u_n\rangle\langle u_n | \psi\rangle}} \quad \text{Eigenzustat mit EW } a_n \text{ ist.}$$

⇒ Ist auf 1 Normiert (neuer Zustand)

Jede weitere Messung von A, unmittelbar danach ändert den Zustand nicht mehr und liefert das gleiche Resultat;

$$A \frac{|u_n\rangle\langle u_n | \psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | u_n\rangle\langle u_n | \psi\rangle}} = ?$$

Zeitentwicklung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{Schrödinger Gl.}$$

quantenmechanische Observablen werden aus klass. Größen gewonnen, z.B. in Ortsdarstellung:

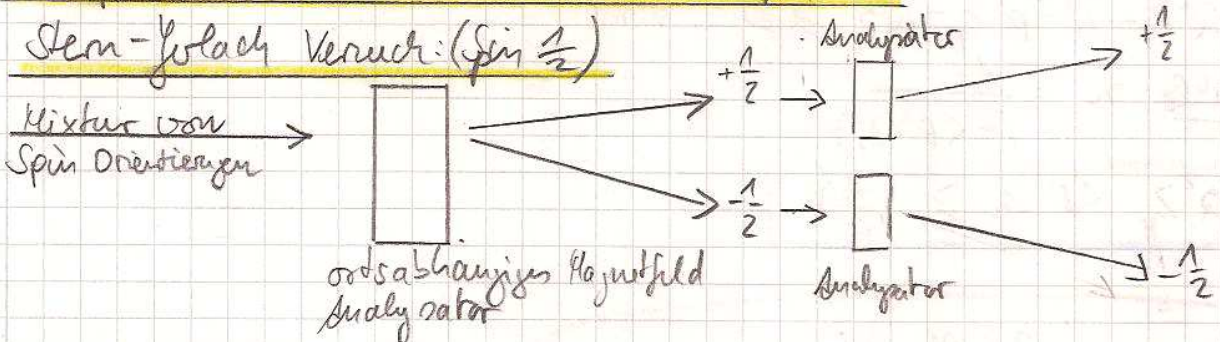
$$x \rightarrow X, \quad p \rightarrow P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Alle anderen Observablen, die klassisch Fkt von x und p sind, werden durch diese Substitution gewonnen "Korrespondenzprinzip"

Beispiele: Drehimpuls, Hamiltonoperator aus Hamiltonfunktion, kinetische Energie

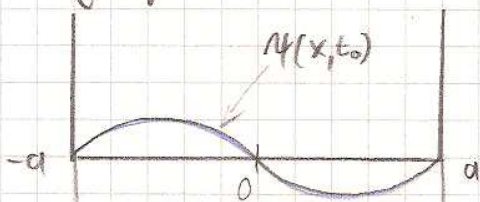
Es gibt Observablen, die kein klassisches Analogon haben, z.B. Spin

Beispiele zur Reduktion von Wellenpaketen:



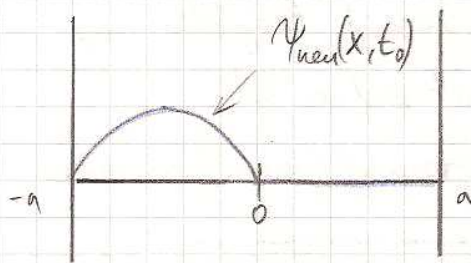
Ortsmessung: Teilchen zwischen unendlich hohen Wänden

Ausgangszustand: 1. angeregter Zustand.



Messung liefert: Teilchen ist nicht in dem Intervall 0 bis a.

(vorher Energie gemessen)



Wellenfunktion nach der Messung in
 im Intervall $-a, 0$ umgestört, im
 Intervall $a, 0 \Rightarrow$ Null
 wieder auf 1 normiert $\Rightarrow \cdot \sqrt{2}$

Anmerkung: Simultane Messung von Observablen aus einem vollst.
 Satz kommutierender Observablen führt auf einen Zustand,
 der Eigenwert von allen diesen Operatoren ist. Der Zustand ist
 dann durch die Eigenwerte eindeutig festgelegt.

Erwartungswerte: (diskretes, nicht entartetes Spektrum)

- einzelne Messung liefert einen der Eigenwerte mit Wahrscheinlichkeit $W_n = \langle \psi | u_n \rangle^2$
- viele Messungen als Mittelwert: $\sum_n a_n W_n = \sum_n \langle \psi | u_n \rangle a_n \langle u_n | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$

• Schwankung um den Mittelwert: $\text{Def: } \langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (A - \langle \psi | A | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle$
 $\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2$

Heisenbergsche Unschärfebeziehung

Es gelte $[Q, P] = i\hbar$ Betrachte: $H = (Q + \lambda P) | \psi \rangle$
 $0 \leq \langle H | H \rangle = \langle \psi | (Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P) | \psi \rangle$
 $(Q^2 + \lambda^2 P^2 + i\lambda [Q, P])$

$$\langle Q^2 \rangle_\psi + \lambda^2 \langle P^2 \rangle_\psi - \lambda \hbar \geq 0 \quad \forall \lambda$$

wähle: $\lambda = \frac{\hbar}{2\langle P^2 \rangle_\psi}$

$$\langle Q^2 \rangle_\psi \cdot \langle P^2 \rangle_\psi \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Klausur 22.05.08
 (A-P) \Rightarrow Jethsen (R-Z) \Rightarrow Gaede

23.05.08 Das gilt insbesondere auch für $Q = x - \langle \psi | x | \psi \rangle \equiv \Delta x$

$$P = p - \langle \psi | p | \psi \rangle \equiv \Delta p$$

triviale Werte $\langle \psi | \Delta x | \psi \rangle = 0$ und $\langle \psi | \Delta p | \psi \rangle = 0$

Vertauschungsrelationen für Δx und Δp wie für x, p

$$\Rightarrow \langle \psi | (\Delta x)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta p)^2 | \psi \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{oder} \quad \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Gleichheit gilt für Gaußpakete

B) Schrödingergleichung / allgemeine Resultate

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{Postulat!}$$

(H kann im allgemeinen auch $\vec{r}(t)$ der Zeit räum, z.B. äußeres Feld oder Potential zeitabh.)

für gegebenes $|\psi(t_0)\rangle$ liegt $|\psi(t)\rangle$ fest für alle t

• Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ ist zeitlich konstant

Norm des Zustands
Beweis:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) = 0$$

mit $\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t)$ H hermitisch

Ortdarstellung: $\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \text{konst}$

• Wahrscheinlichkeitsdichten und Ströme

$$\text{Dichte } \rho(\vec{r}, t) \equiv |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

$$\text{Stromdichte } \vec{j}(\vec{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

$$\text{Planckhilität } \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar}{i} \frac{\vec{\nabla}}{m}$$

Klass Stromdichte = Dichte \cdot Geschw.

Für ebene Welle $\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar}$

$$\rho = |A|^2 \quad \vec{j} = |A|^2 \frac{\vec{p}}{m}$$

Lokale Erhaltung:

(elektrodynamisch: $\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV + \int d\vec{F} \cdot \vec{j} = 0$)

$$\text{OH: } \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right] = \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \frac{\hbar}{2mi} \left[\vec{\nabla}^2 \psi^* \psi + \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - (\vec{\nabla} \psi \vec{\nabla} \psi^* + \psi \vec{\nabla}^2 \psi^*) \right]$$

mit Schrödingergleichung $\Rightarrow 0$

Zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left(\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) + \langle \psi(t) | \left(\frac{d}{dt} A \right) | \psi(t) \rangle$$

mit Schrödl. = $\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi(t) \rangle$

Inbesondere: Erwartungswert von A ist zeitlich konstant, falls

$$[A, H] = 0 \text{ und } \frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

Beispiele: Wähle $A = \vec{R}$ Ortsoperator, $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{R})$

$$[\vec{R}, H] = [\vec{R}, \frac{p^2}{2m}] = \frac{i\hbar \vec{p}}{m}$$

$$[\vec{p}, H] = [\vec{p}, V(\vec{R})] = -\vec{\nabla} V(\vec{R})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{p} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \vec{R} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle(t) = \langle \frac{\vec{p}}{m} \rangle(t), \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle(t) = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle$$

klass. Kraft

Ehrenfestsches Theorem

vgl. Hamilton Gleichungen:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q}$$

Klass. Analogen

Beachte: $\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle \neq \vec{\nabla} \langle V(\vec{R}) \rangle$

$\langle R \rangle$ = Schwerpunkt des Wellenpaketes.

$$\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle(t) \xrightarrow{\text{in klass. Grenzfall}} \vec{\nabla} V(\vec{r})|_{\vec{r} = \langle \vec{R} \rangle(t)}$$

Konservative Systeme: $\frac{\partial}{\partial t} H = 0$

Eigenzustände von H bei $t=t_0$: $H | \psi_n(t_0) \rangle = E_n | \psi_n(t_0) \rangle$ definiert Basis

Zeitliche Entwicklung eines beliebigen Zustandes

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n c_n(t) | \psi_n(t_0) \rangle$$

Dgl. für $c_n(t)$ aus der Schrödl. Gleichung ($i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n(t_0) \rangle = H | \psi_n(t_0) \rangle$)

$$\sum_n i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) | \psi_n(t_0) \rangle = \sum_n c_n(t) E_n | \psi_n(t_0) \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = E_n c_n(t) \quad (\text{lineare Dgl.})$$

$$c_n(t) = \exp\left[-iE_n \frac{(t-t_0)}{\hbar}\right] \cdot c_n(t_0)$$

Zerlegung

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} | \psi_n(t_0) \rangle$$

Zustand aller systeme zu t

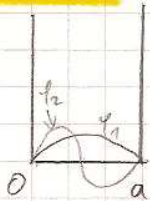
Wichtig Konsequenz:

Falls nur ein $c_n \neq 0$: mit $c_n = 1$

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi_n(t_0) | e^{iE_n(t-t_0)\frac{1}{\hbar}} A e^{-iE_n(t-t_0)\frac{1}{\hbar}} | \psi_n(t_0) \rangle$$
$$= A(t_0)$$

Für Energieeigenzustände ändern sich die Erwartungswerte nicht.

Beispiel: Teilchen in ∞ tiefem Topf



stationäre Lösung:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

Grundzustand $n=1$. $\langle x | 1 \rangle = \rho_1$

1. angeregter Zustand $\langle x | 2 \rangle = \rho_2(x)$

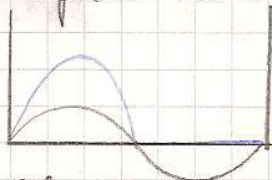
Betrachte: $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle)$

zeitl. Entwicklung: $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} (|1\rangle + e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} |2\rangle)$

Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(x,t) = |\langle x | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left[|\rho_1(x)|^2 + |\rho_2(x)|^2 + 2 \rho_1(x) \rho_2(x) \cos\left((E_2-E_1)\frac{t}{\hbar}\right) \right]$$

Wellenpaket oszilliert



nach Messprozess

c) Schrödinger - versus Heisenberg-Bild (Darstellung)

Schrödinger Bild: Zustände sind zeitabhängig ($|\psi(t)\rangle$)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left[-iE_n(t-t_0)\frac{1}{\hbar}\right] c_n(t_0) |\psi_n(t_0)\rangle$$

Schrödinger

$$= U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (U U^\dagger = 1)$$

unitärer Operator

mit $U(t,t_0) = \exp\left[-iH_S(t-t_0)\frac{1}{\hbar}\right]$

Observable $A_S(t)$, Messung $\langle \psi(t) | A_S(t) | \psi(t) \rangle_S$

Heisenberg Bild: Zustände sind zeitunabhängig ($|\psi\rangle$)

$$|\psi\rangle_H = U^\dagger(t,t_0) |\psi(t)\rangle_S = |\psi(t_0)\rangle_S$$

$$\text{Messung: } \langle \psi_H | \underbrace{U(t,t_0) U^\dagger(t,t_0)}_{A_H(t)} A \underbrace{U(t,t_0) U^\dagger(t,t_0)}_{|\psi_H\rangle} | \psi_H \rangle$$

Beweisung Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} A_S(t) \right)_H$$

IV Harmonischer Oszillator

(Darstellung durch Wellenpakete)

28.05.08

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad \hat{x} = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \underline{1) \text{ Dgl}}$$

$$\left(\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - \hat{x}^2 + 2\varepsilon \right) \psi(\hat{x}) = 0$$

Eigenlösungen: $T_n(\hat{x}) = N_n e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} H_n(\hat{x})$

$$H_n(\hat{x}) = (-1)^n e^{+\hat{x}^2} \frac{d^n}{d\hat{x}^n} e^{-\hat{x}^2}$$

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

Hermi-Polynome
Polynome von Grad n

Normierungsfaktor

2) Algebraische Methode

$$\hat{x} = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{\hbar m \omega}} p \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2), \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p})$$

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0$$

Annihilator

Erzeugnis

Beschäftigungszahloperator: $N = a a^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1)$

Für $|0\rangle = \text{Grundzustand}: a|0\rangle = 0$

Zusammenhang mit Ortsdarstellung: $0 = a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i p}{\sqrt{\hbar m \omega}} \right] |0\rangle$

Ortsdarstellung: $\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \langle x|0\rangle = 0$

Lösung: $\langle x|0\rangle = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega} \right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right]$

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

Rekursion: $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |n-1\rangle$

E) Dreidimensionaler harmonischer Oszillator in kart. Koordinaten

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{R}^2 \right) \psi(\vec{R}) = E \psi(\vec{R}) \quad \text{zeitunabhängige Schrödingergl.}$$

$$\psi(\vec{R}, t) = \psi(\vec{R}) \cdot T(t) \quad \text{mit } T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\vec{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, \quad \vec{R}^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$H = H_x + H_y + H_z \quad \text{mit } H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (H_y, H_z \text{ entsprechend})$$

Es gilt $[H_x, H_y] = 0, [H_x, H_z] = 0, [H_y, H_z] = 0$

$\Rightarrow H_x, H_y, H_z$ können gleichzeitig diagonalisiert werden

3 uncoupled harmon. Oszillatoren

Ansatz: Separation der Variablen $\psi(\vec{R}) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$

$$H\psi(\vec{r}) = (H_x + H_y + H_z)\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$$

$$= (H_x\psi_x(x))\psi_y(y)\psi_z(z) + (H_y\psi_y(y))\psi_x(x)\psi_z(z) + (H_z\psi_z(z))\psi_x(x)\psi_y(y)$$

$$H\psi = E\psi \quad | \cdot \frac{1}{\psi}$$

$$\underbrace{\frac{H_x\psi_x(x)}{\psi_x(x)}}_{T_x(x)} + \underbrace{\frac{H_y\psi_y(y)}{\psi_y(y)}}_{T_y(y)} + \underbrace{\frac{H_z\psi_z(z)}{\psi_z(z)}}_{T_z(z)} = E$$

$$:= E_x \quad := E_y \quad := E_z$$

$$E_x + E_y + E_z = E$$

3 Entkoppelte Dgl:

$$\begin{cases} H_x\psi_x(x) = E_x\psi_x(x) \\ H_y\psi_y(y) = E_y\psi_y(y) \\ H_z\psi_z(z) = E_z\psi_z(z) \end{cases}$$

Lösungen: $H_x\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})\psi_{n_x}(x)$

ψ_{n_x} ist Lösung der eindim Schrödgl mit Energie $E_{n_x} = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})$

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})$$

$E_0 = \hbar\omega \frac{3}{2}$ Grundzustand eindeutig

$E_1 = \hbar\omega(1 + \frac{3}{2})$ 1. angeregter Zustand (3-fach entartet)

$E_2 = \hbar\omega(2 + \frac{3}{2})$ 2. angeregter Zustand (6-fach entartet)

Grad der Entartung?

Welche Kombinationen von n_x, n_y, n_z gibt es, dass $n_x + n_y + n_z = n$

geg sei n : Wähle n_x einen der Werte $0, 1, \dots, n$ also $0 \leq n_x \leq n$

$$\Rightarrow n_y + n_z = n - n_x \quad \{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\} \text{ oder } \{1, n - n_x - 1\}$$

$$\text{oder } \{2, n - n_x - 2\} \dots \{n - n_x, \underbrace{(n - n_x) - (n - n_x)}_0\}$$

das sind $(n - n_x + 1)$ Möglichkeiten

für festes n_x

insgesamt $\sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$ Möglichkeiten

F) Kohärent oder "quasiklass" Zustände

$$\langle n | x | n \rangle = 0 \quad \forall t \text{ zeitlich konstant.}$$

Wie kann man Zustände konstruieren, die einem klass. Franzfall korrespondieren?

Überlagerung von verschiedenen Zuständen $|n\rangle$

Zur Zeit $t=0$ sei ψ ein Eigenzustand zum Vernichtungsoperator a .

$$a|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle \quad \text{Eigenwert } \alpha$$

entwickle $|\varphi_\alpha\rangle$ nach $|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle$

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \Rightarrow c_n = \langle n | \varphi_\alpha \rangle = \langle 0 | \frac{a^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_\alpha\rangle = \frac{a^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\langle 0 | \varphi_\alpha \rangle}_{c_0}$$

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \frac{a^n}{\sqrt{n!}} c_0 |n\rangle$$

Normierung: $1 = \langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle = \sum_n \frac{|a|^{2n}}{\sqrt{n!}} |c_0|^2$

$$c_0 = e^{-\frac{|a|^2}{2}}$$

$$|\varphi_\alpha\rangle = c_0 \sum_n \frac{(a a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = c_0 e^{a a^\dagger} |0\rangle$$

Zeitentwicklung: $|\varphi_\alpha\rangle \equiv |\varphi_\alpha(t=0)\rangle$

$$|n, t\rangle = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n, 0\rangle$$

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}$$

$$|\varphi_\alpha(t)\rangle = c_0 e^{-i\omega\frac{t}{2}} \sum_n \frac{(a a^\dagger e^{-i\omega t})^n}{n!} |0\rangle$$

$$\alpha(t) \equiv \alpha e^{-i\omega t}$$

$$|\varphi_\alpha(t)\rangle = |\varphi_{\alpha(t)}\rangle e^{-i\omega\frac{t}{2}}$$

$|\varphi_\alpha(t)\rangle$ ist und bleibt ein Eigenzustand zu a mit Eigenwert $\alpha(t)$

(Nur der Eigenwert ändert sich.)

Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|n\rangle$ zu finden

30.05.'08

$$\langle n | \varphi_\alpha \rangle|^2 = \frac{(\alpha^2)^n}{n!} e^{-|\alpha|^2} \quad \text{Poisson Verteilung}$$

$$X = \underbrace{\frac{\hbar}{m\omega}}_{X_0} \frac{(a+a^\dagger)}{\sqrt{2}}$$

$$\langle \varphi(t) | X | \varphi(t) \rangle = X_0 \sqrt{2} |a| \cos(\omega t - \delta) \quad \text{wobei } \alpha(t=0) = |a| e^{i\delta}$$

Erwartungswert
nach ... Rechnung:

$$\langle X | \varphi_\alpha(t) \rangle^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{X_0} \exp\left[-\frac{(X - X_0 \sqrt{2} |a| \cos(\omega t - \delta))^2}{X_0^2}\right]$$

Breite: X_0 Für $\alpha \gg 1$: klassisches Verhalten

g) Harmonischer Oszillator mit Ladung im konst. el. Feld

Ohne Feld: $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

zusätzlich: $\omega(x) = -q \epsilon x$ also $E_x = \epsilon q$

ϵ : Feldstärke

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - q \epsilon x$$

Schrödinger Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{qE}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \right] \psi(x) = E^1 \psi(x)$$

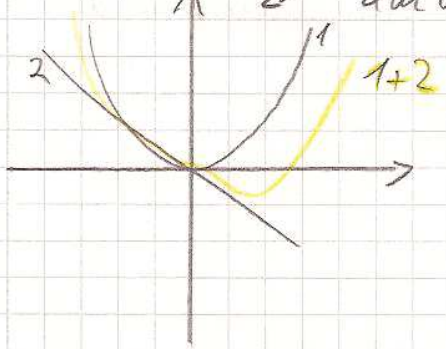
def: $u = x - \frac{qE}{m\omega^2}$, $\psi(u) = \psi(x)$, $E = E^1 + \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} u^2 \right] \psi(u) = E \psi(u)$$

$$E^1 = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}$$

$\psi_n(u)$ = harmonische Oszillationsfunktion

$$\psi(x) = \psi_n \left(x - \frac{qE}{m\omega^2} \right)$$

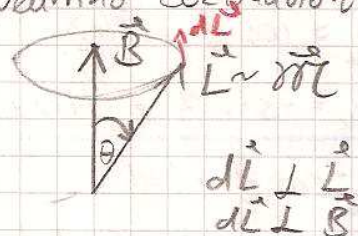


Zwei-Zustandssysteme

Beispiele: • Spin $\frac{1}{2}$ im Magnetfeld (Lamann Präzession)

- 2 dicht benachbarte Niveaus in der Atomphysik
- Elementarteilchenphysik: $K_0 - \bar{K}_0$ System Neutrino Oszillation

A) Spin $\frac{1}{2}$



1) Magnet. Moment, klass. Behandlung:

$$\vec{\mu}$$

i) Kraft auf Dipol: $\vec{K} = \vec{\nabla} (\vec{\mu} \cdot \vec{B})$, keine Kraft am homog. Feld

ii) Drehmoment: $\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \times \vec{B}$

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L} \quad \gamma: \text{gyromagnetisches Verhältnis}$$

Bewegungsgleichung für Drehimpuls: $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Gamma} = \gamma \vec{L} \times \vec{B}$

Präzession von \vec{L} (bzw. $\vec{\mu}$) um $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}$

$$\vec{L}(t) = L_0 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos(\omega t) \\ \sin \theta \sin(\omega t) \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \omega = -\gamma B_0$$

2) QM für Spin $\frac{1}{2}$ System

Postulat: klass. \vec{L} wird ersetzt durch $\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$, S_x, S_y, S_z sind Operatoren
zwei Zustände (2dim. Raum)

Konvention: Basis reingewählt, dass S_z diagonal ist

$$S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

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

$$S_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z}$$

$$|0\rangle = |+\rangle \quad |1\rangle = |-\rangle$$

allg. Zustand: $| \psi \rangle = \alpha | + \rangle + \beta | - \rangle$ mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Frage: Gibt es eine Linearkombination von S_x, S_y, S_z mit reellen Koeffizienten $(\sum_{i=x,y,z} u_i S_i)$ sodass $| \psi \rangle$ ein Eigenzustand dazu ist.

Ja: per Konstruktion:
Ansatz: $\hat{u} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$

$$\hat{S} \hat{u} = \frac{\hbar}{2} \left[\sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

zugehörige Eigenzustände

$$|1\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \quad \text{Eigenwert } \lambda = +\frac{\hbar}{2}$$

$$|2\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \quad \text{Eigenwert } \lambda = -\frac{\hbar}{2}$$

Wähle: $\cos \frac{\theta}{2} = |\alpha| \quad 0 < \theta < \pi$
 $\theta = 2 \arccos |\alpha| \quad \varphi = \varphi_\alpha - \varphi_\beta$
 $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi_\alpha} \quad \beta = |\beta| e^{i\varphi_\beta}$
 $\chi = \varphi_\alpha + \varphi_\beta$

Lösung: $| \psi \rangle = e^{i\chi} |1\rangle_u$

Zu jeder beliebigen Kombination $(\alpha | + \rangle + \beta | - \rangle)$ findet sich ein \hat{u} , so dass (\hat{u}) Eigenwert von \hat{S} ist. 4.06.02

3) Teilchen (Elektron, Proton, ...) mit Spin $\frac{1}{2}$ im Const. Magnetfeld

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H} = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma B_0 S_z \quad \text{Hamilton Operator } \mathcal{H} = -\gamma B_0 S_z = \omega_0 S_z$$

mit $\omega_0 = -\gamma B_0$

Schrödingers $\psi \Rightarrow$ Eigenwertgleichung $\mathcal{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle$

trivial da $\mathcal{H} = (2 \times 2)$ Matrix in diagonalform ist.

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar \omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{H|+\rangle = +\frac{\hbar\omega}{2}|+\rangle, \quad H|-\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}|-\rangle} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle$$

Zeitliche Entwicklung:

a) Zustand sei Eigenzustand von S_z bzw. H

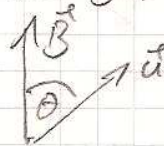
$$\text{falls } |\psi(t=0)\rangle = |+\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}t} |+\rangle$$

$$\text{wenn } |\psi(t=0)\rangle = |-\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{+i\frac{\omega}{2}t} |-\rangle$$

Eigenzustand von S_z bleibt Eigenzustand zu S_z

b) $|\psi(t=0)\rangle$ sei Eigenzustand zu \vec{S} mit Eigenwert $\frac{\hbar}{2}$.

Feld zeigt in z-Richtung.



zur Zeit $t=0$:

$$\boxed{|\psi(t=0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{t}{2}} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{+i\frac{t}{2}} |-\rangle}$$

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} |-\rangle$$

Zeitliche Änderung der relativen Phase von $|+\rangle$ und $|-\rangle$

$$= \alpha(t)|+\rangle + \beta(t)|-\rangle$$

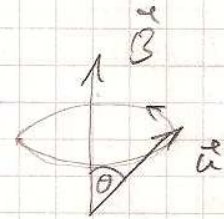
Zu jeder Zeit t können wir ein $\vec{u}(t)$ finden, so dass $|\psi(t)\rangle$

Eigenzustand von $\vec{u}(t) \cdot \vec{S}$ ist.

offensichtlich: $\theta(t) = \theta(t=0) = \text{const.}$

$$\varphi(t) = \varphi(t=0) + \omega t$$

Der Vektor \vec{u} präzediert um die z-Achse



Larmor-Präzession

S_z vertauscht mit H

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle S_z \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [S_z, H] \rangle(t) + \langle \frac{\partial S_z}{\partial t} \rangle(t) = 0$$

Erwartungswert der z-Komponente bleibt \neq ungleich \neq ungleich.

$$\text{Test: } \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\langle + | \cos\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} + \langle - | \sin\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} \right) \left(\cos\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} |+\rangle - \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega t)\frac{1}{2}} |-\rangle \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}) = \frac{\hbar}{2} \cos\theta$$

$\langle S_z \rangle$ ist zeitlich konstant

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit den Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ in \vec{u} -Richtung zu finden, wenn die Messung bei $t > t_0$ durchgeführt wird.

$$\begin{aligned} \langle - | - \rangle &= 1 \\ \langle + | - \rangle &= 0 \\ \langle + | + \rangle &= 1 \end{aligned}$$

$$P(t) = \left| \langle \psi(t_0) | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left| \underbrace{\cos^2 \frac{\theta}{2}}_{\frac{1}{2}(1+\cos\theta)} e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} + \underbrace{\sin^2 \frac{\theta}{2}}_{\frac{1}{2}(1-\cos\theta)} e^{+i\omega_0 \frac{t}{2}} \right|^2$$

$$= \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2}$$

Beispiel: $\theta = 0$, $P(t) = 1 = \text{const}$

$\vec{B} \perp \vec{a}$, $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\cos \theta = 0$, $P(t) = \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2}$ Maximale Schwankung

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $-\frac{\hbar}{2}$ in \vec{a} -Richtung zu finden?

$$P_{-}(t) = \dots = \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2}$$

$$P(t) + P_{-}(t) = 1$$

B) Allgemeines Zwei-Zustand-System

1) Stahmairs Fall

$H =$ allg. Herm. Matrix $\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$ H_{11}, H_{22} reell
 $H_{12} = H_{21}^*$

hat 4 reelle Parameter und kann geschrieben werden als:

$$H = A \cdot \mathbb{1} + \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

mit A, \vec{B} reell. (bei \vec{B} -Feld!!!)

Zunächst, H_0 sei diagonal: $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$

$$H_0 |1\rangle = E_1 |1\rangle, \quad H_0 |2\rangle = E_2 |2\rangle$$

addiere Wechselwirkung: $H = H_0 + W$ $W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$

Wir könnten $H = H_0 + W$ diagonalisieren und alles in der neuen Basis ausdrücken. Aber oft sind die Eigenzustände von H_0 für die Interpretation anschaulicher.

W_{12} : Mischungsterm, Eigenwerte von H (nach Rechnung)

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} (E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$E_{-} = \frac{1}{2} (\dots) - \frac{1}{2} \sqrt{ \dots }$$

$$|\psi_{+}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} |2\rangle$$

$$|\psi_{-}\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} |2\rangle$$

(*)

$$\theta, \varphi \text{ aus } \tan \theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad 0 \leq \theta < \pi$$

$$W_{21} = |W_{12}| e^{i\varphi}$$

Vereinfachungen: 1) W_{11} und W_{22} tauchen nur in der Kombination $E_1 + W_{11}, E_2 + W_{22}$ auf

W_{11} und W_{22} können in E_1, E_2 absorbiert werden

2) Energie-Nulldiagramm ist beliebig wähle $E=0$ $\begin{cases} E_1 \\ E_2 \end{cases} \Rightarrow E_1 + E_2 = 0$
 $(E_1 - E_2) = 2\Delta$

Neuer Hamiltonian:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & -\Delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \quad E_{\pm} = \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

$\tan \theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \quad , \quad e^{i\theta} = \frac{W_{12}}{|W_{12}|}$

$$H = \begin{pmatrix} \text{Re}(W_{12}) \\ -\text{Im}(W_{12}) \\ \Delta \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}$$

6.6 '08

Interpretation

Falls $|W_{12}| \ll \Delta$: kleine Störung $E_{\pm} \approx \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} = \pm \Delta \sqrt{1 + \frac{|W_{12}|^2}{\Delta^2}}$

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2) \quad E_{\pm} \approx \pm \left(\Delta + \frac{1}{2} \frac{|W_{12}|^2}{\Delta} \right)$$

$\tan \theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \quad \theta = \arctan \frac{|W_{12}|}{\Delta} \approx \frac{|W_{12}|}{\Delta} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{|W_{12}|}{\Delta}\right)^3\right)$

$|1_+ \rangle \approx |1 \rangle +$ (kleine Beimischung $|2 \rangle$)

$|1_-\rangle \approx |2 \rangle +$ " " $|1 \rangle$

Falls $|W_{12}| \gg \Delta$:

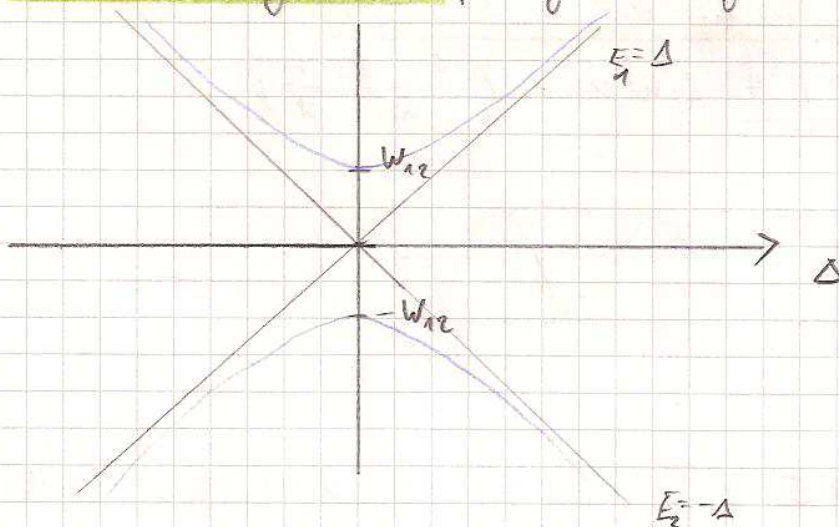
$$E_{\pm} = \pm \left(|W_{12}| + \frac{\Delta^2}{|W_{12}|} \right) + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\Delta^2}{|W_{12}|}\right)^2\right)$$

$\tan \theta \gg 1 \Rightarrow \theta \approx \frac{\pi}{2} \quad \sin \frac{\pi}{4} = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|1_+ \rangle = \left(e^{-i\frac{\pi}{4}} |1 \rangle + e^{i\frac{\pi}{4}} |2 \rangle \right) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|1_-\rangle = \left(-e^{-i\frac{\pi}{4}} |1 \rangle + e^{i\frac{\pi}{4}} |2 \rangle \right) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

maximale Mischung der ursprünglichen Eigenzustände $|1 \rangle$ und $|2 \rangle$!



Asymptotisch: $E_+ \rightarrow E_1 = \Delta \quad E_- \rightarrow E_2 = -\Delta$

Entartung wird aufgehoben!

2) Zeitentwicklung

in 1) werden die stationären Zustände $|\varphi_{\pm}\rangle$ berechnet. Zeitentwicklung
 lung in der Basis $|1\rangle, |2\rangle$:

$$|\varphi(t)\rangle = a_1(t)|1\rangle + a_2(t)|2\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{stat.} \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) &= E_1 a_1(t) + W_{12} a_2(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) &= W_{21} a_1(t) + E_2 a_2(t) \end{aligned}$$

gekoppeltes System von Dgl'n:

- Strategie:
- Drücke $|1\rangle$ und $|2\rangle$ durch $|\varphi_{\pm}\rangle$ aus
 - Zeitentwicklung $|\varphi_{\pm}\rangle$ mit $e^{-iE_{\pm}t/\hbar}$
 - Drücke $|\varphi_{\pm}(t)\rangle$ wieder durch $|1\rangle, |2\rangle$ aus

Beispiel:

$$|\varphi(0)\rangle = |1\rangle = e^{i\theta} \left(\cos \frac{\theta}{2} |\varphi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\varphi_-\rangle \right) \quad \left(\text{1D erwidert mit } \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} \right)$$

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{2} e^{i\theta} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} |\varphi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} |\varphi_-\rangle \right)$$

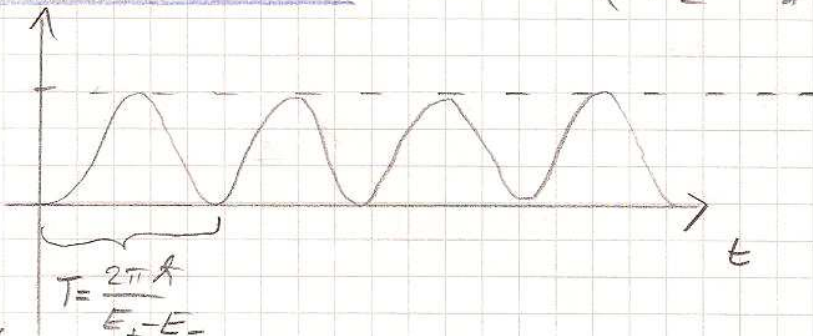
ersetze $|\varphi_+\rangle, |\varphi_-\rangle$ durch $|1\rangle, |2\rangle$

Wahrscheinlichkeitsamplitude des Zustands in $|2\rangle$ zu finden

$$\begin{aligned} \langle 2|\varphi(t)\rangle &= e^{i\theta} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{1}{2}} - \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{1}{2}} \right) \\ &= e^{i\theta} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \left(e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} - e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} \right) = e^{i\theta} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{(E_+ + E_-)}{2\hbar}t} \\ &\quad \cdot \left(e^{-i\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t} - e^{i\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t} \right) \\ &= -ie^{i\theta} e^{-i\frac{(E_+ + E_-)}{2\hbar}t} \sin \theta \sin \left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t \right) \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeit das System im Zustand $|2\rangle$ zu finden:

$$P_{21}(t) = |\langle 2|\varphi(t)\rangle|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t \right)$$



Grenzfälle:

- $|W_{12}| \ll E_1 - E_2$: $\theta \ll 1 \Rightarrow \sin \theta \approx 1$ kleine Oszillationsamplitude
- Entartung $E_1 = E_2$: $\theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \sin^2 \theta = 1$

Messung: Bei schlechter Zeitauflösung $t \gg T \Rightarrow$ nur zeitl. Mittel

$$\langle P_{21} \rangle = \frac{1}{2} \sin^2 \theta \text{ messbar. } \boxed{\text{Zeit um zu messen !!}}$$

VI Drehimpuls

Klassische Mechanik: • unter gewissen Umständen ist der Drehimpuls eine erhaltene Größe. $\hat{=}$ Rotationsinvarianz!

• Reduktion eines drei dim. Problems auf 1dim Problem

QM: \Rightarrow Entartung des Hamiltonoperators

• Kleine Störung: \Rightarrow Aufspaltung der Spektrallinien, z.B. H-Atom

• „Elementare“ Objekte besitzen Eigen Drehimpulse $\hat{=}$ Spin

• Addition von Drehimpulsen

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Gesamt Drehimpuls = Bahndrehimpuls + Spindrehimpuls

A) Vertauschungsrelationen

Klassisch:

$$\left. \begin{aligned} L_1 &= x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ L_2 &= x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ L_3 &= x_1 p_2 - x_2 p_1 \end{aligned} \right\} \vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \quad L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$$

Quantenmechanik: $x, p \rightarrow X, P$

Anordnung der Operatoren in \vec{L} ist beliebig, da $[x_i, p_j] = 0$ if $i \neq j$

aber: L_1, L_2, L_3 kommutieren nicht!

\Rightarrow Vertauschungsrelationen

$$(*) \left\{ \begin{aligned} [L_1, L_2] &= i \hbar L_3 \\ [L_2, L_3] &= i \hbar L_1 \\ [L_3, L_1] &= i \hbar L_2 \end{aligned} \right\} \boxed{[L_k, L_l] = i \hbar \epsilon_{klm} L_m}$$

Alle folgenden Überlegungen gelten für jeden Satz von 3 Operatoren, die (*) erfüllt!

Definiere: (Operator) $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$

J^2 kommutiert mit J_1, J_2, J_3

z.B. $[J^2, J_1] = [J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, J_1]$

mit $[J_1, J_1] = 0$

$$\begin{aligned} [J^2, J_1] &= J_2 [J_2, J_1] + [J_2, J_1] J_2 \\ &= -i \hbar (J_2 J_3 + J_3 J_2) \end{aligned}$$

$$[J^2, J_1] = i \hbar (J_2 J_3 + J_3 J_2) \Rightarrow \boxed{[J^2, J_1] = 0}$$

J^2 und J_z vertauschen, daher lassen sie sich gemeinsam diagonalisieren
 B) Eigenwerte, Eigenzustände algebraische Behandlung

Wir nutzen Wollst. Satz von kommutierenden Operatoren und die entsprechenden Eigenwerte und Eigenvektoren, welche den Zustandsraum von J aufspannen.

Wähle $J^2, J_z = J_z$

Def: $J_{\pm} = J_x \pm i J_y$

Vertauschungsrelation von J_{\pm} $[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x] \pm [J_z, J_y]$

$$= i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = i\hbar J_y \pm \hbar J_x = \pm \hbar J_{\pm}$$

$$[J_z^2, J_{\pm}] = 0 \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$J^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$$

$J^2 = \text{Quadratische Herm. Operatoren} \Rightarrow \langle \psi | J^2 | \psi \rangle = 0$
 $\Rightarrow \text{Eigenwerte} \geq 0$

Berechne Eigenwerte n von J^2 mit $j(j+1)\hbar^2$

Damit ist j eindeutig festgelegt

Eigenwerte von J_z : $m\hbar$

Notation: $|j, m\rangle$

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ ist eine quadratische hermitesche Operatoren 11.6.08

$$\Rightarrow \langle \psi | J^2 | \psi \rangle \geq 0, \text{ (denn } \langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \sum \langle \psi | J_x | n \rangle \langle n | J_x | \psi \rangle \geq 0)$$

\Rightarrow Eigenwerte ≥ 0 ; Eigenwert von J^2 ist n

$$n = j(j+1) \text{ mit } j = \left(\sqrt{n + \frac{1}{4}} - \frac{1}{4} \right) \geq 0$$

Eigenwerte von J_z : $m\hbar$

Wir wissen bis noch nicht, dass j, m ganzzahlig sind, und kennen noch nicht den Zusammenhang von j, m

2) Eigenwert zu J^z und J_z :

a) Es gilt $-j \leq m \leq j$

Beweis: $|J_+ |j, m\rangle|^2 \geq 0 \Leftrightarrow \langle j, m | J_+ J_- |j, m\rangle \geq 0$

$\Rightarrow j(j+1) - m^2 + m \geq 0 \quad (5)$

$\langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle \geq 0 \Rightarrow j(j+1) - m^2 - m \geq 0 \quad (5')$

$(5') \Rightarrow (j-m)(j+m+1) \geq 0 \quad (6)$

$\Rightarrow m \leq j$

$(5) \Rightarrow (j+m)(j-m+1) \geq 0$

$\Rightarrow m \geq -j$

b) • $J_- |j, m\rangle = 0$ falls $m = -j$ folgt aus (5)

• $J_+ |j, m\rangle = 0$ falls $m = +j$

• falls $J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle$; $m > -j$

Dann ist $J_- |j, m\rangle$ Eigenzustand zu J_z mit Eigenwert $(m-1)\hbar$

und der Zustand $J_- |j, m\rangle \neq 0$ wegen (5)

Beweis: $J_z (J_- |j, m\rangle) = J_- J_z |j, m\rangle - \hbar J_- |j, m\rangle$

$= (m-1)\hbar (J_- |j, m\rangle)$

entsprechend $J_z (J_+ |j, m\rangle) = (m+1)\hbar (J_+ |j, m\rangle)$

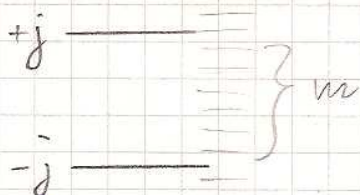
falls $m < j$

$J_+ J_-$ sind auf- bzw. abssteigende Operatoren bezüglich m
(j bleibt ungeändert, da $[J^2, J_\pm] = 0$)

Zwischenklare: $j(j+1) \geq 0$, $|m| \leq j$

J_+ auf- und abssteigend, $J_+ |j, m=j\rangle = 0$, $J_- |j, m=-j\rangle = 0$

Mögliche m -Werte



c) Spektrum von J_z

Für jedes j, m gibt es eine nicht negative ganze Zahl p ,

so dass $-j \leq m-p < -j+1$ und $m \geq -j$

p ist die größte ganze Zahl die man von m abziehen darf

Sodass $m-p$ noch im erlaubten Bereich liegt.

$ j, m\rangle$ Eigenvektor zu J_z mit E.W. m	
$J_- j, m\rangle$	$m-1$
$(J_-)^p j, m\rangle$	$m-p$

Norm $\neq 0$ wegen Gl. (8), iterativ angewendet

Betrachte $J_- (J_-)^p |j, m\rangle$

Falls $(m-p) > -j$, so wäre der Eigenwert von $(J_-)^{p+1} |j, m\rangle$ gleich

$(m-p-1)$ und somit $< -j$, dies ist im Widerspruch zu

$-j \leq m \Rightarrow (J_-)^{p+1} |j, m\rangle = 0; \Rightarrow -j = m-p$
 Entsprechendes gilt für J_+ $\Rightarrow +j = m+p$ } p, q ganzzahlig

$2j = p+q$ j ganzzahlig, positiv

$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ $|m| \leq j \Rightarrow 2j+1$ Hauptwert von m

3) Konstruieren einer Basis und der zugehörigen Operatoren zu j, m, j

$(2j+1)$ dim. Raum:

$|j, m\rangle$ mit $m = +j$ sei normiert.

iterativ: $|j, m-1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} J_- |j, m\rangle$

$|j, m-1\rangle$ ist normiert wegen $\textcircled{4}$

$|j, m\rangle$ und $|j, m'\rangle$ sind orthogonal für $m' \neq m$, da

$\langle j, m-1 | J_z = \hbar(m-1) \langle j, m-1 |$, $J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle$

$\langle j, m-1 | J_z |j, m\rangle = 0$

In dieser Basis gilt:

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

$\langle j, m | J_+ |j, m'\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1}$

$\langle j, m | J_- |j, m'\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1}$

4) Beispiele

a) $j=0, m=0$; Nur ein Zustand $\rightarrow m'$

b) $j = \frac{1}{2}, m = \pm \frac{1}{2}$; $J_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \downarrow m$

$\langle m | J_+ | m'\rangle \neq 0$ ($m = \frac{1}{2}, m' = -\frac{1}{2}$ für die) $\text{rand} = 0$

$$\langle u_1 | j_+ | u^1 \rangle = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{1}{2} \right)} = 1$$

$$\langle j_+ \frac{1}{2} | j_+ | j_-, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \quad j_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

entsprechend $j_- = (j_+)^{\dagger} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$j_x = (j_+ + j_-) \frac{1}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$j_y = (j_+ - j_-) \frac{1}{2i} = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

c) $j = 1, m = 1, 0, -1$

$$j_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \rightarrow m_1 \\ \downarrow m \end{matrix}$$

$j_+ \neq 0$ für $(m=0, m'=1)$ und $(m=1, m'=0)$

$$j_+(m=0; m'=1) = \sqrt{2-0}$$

$$j_+(m=1; m'=0) = \sqrt{2-0}$$

$$j_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad j_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$j_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad j_y =$$

d) $j = \frac{3}{2}$

c) Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten (Kugelcoord.)

Ausgangspunkt: $L_x = \frac{\hbar}{i} (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}), L_y, L_z$

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad \Rightarrow \quad L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$z = r \cos \theta \quad L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

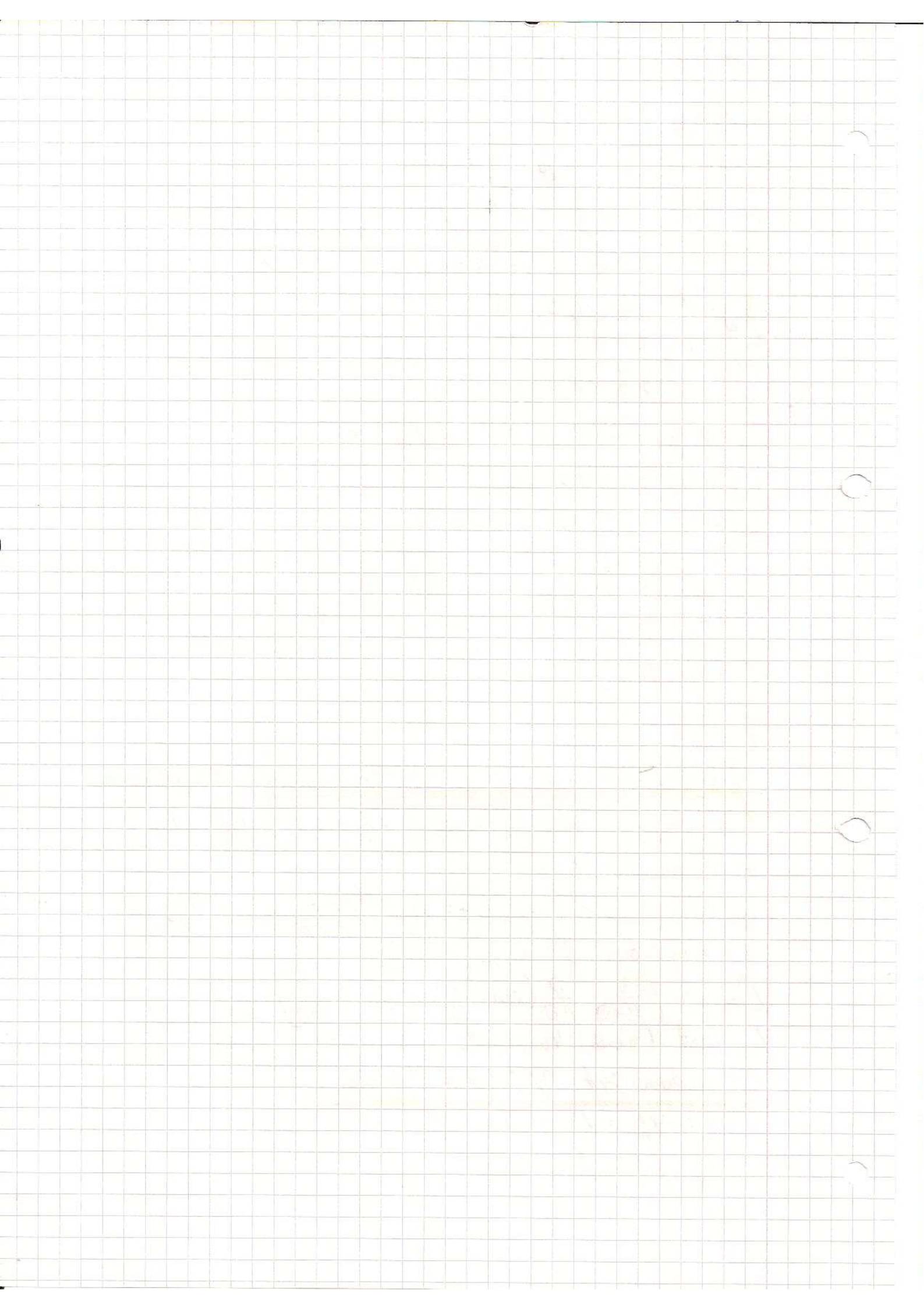
$$L^2 = \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

L_z und φ sind kanonisch konjugiert.

Wir machen jetzt $\psi_m^l(\theta, \varphi)$ sodass:

$$L^2 \psi_m^l = \hbar^2 l(l+1) \psi_m^l$$

$$L_z \psi_m^l = \hbar m \psi_m^l$$



c) Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten

Suche $\gamma_l^m(\theta, \varphi)$: mit $[L] = \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right]$
 $[L^2] = -\hbar^2 [L]$

① $-[L] \gamma_l^m = l(l+1) \gamma_l^m$ und $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \gamma_l^m = m \gamma_l^m$ ②

Separationsansatz:

$$\gamma_l^m = F_l^m(\theta) \phi_m(\varphi)$$

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \gamma = m \gamma \Rightarrow \phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$$

Forderung: ϕ eindeutig und stetig $\Rightarrow e^{im2\pi} = 1 = e^{im \cdot 0}$

① $\Rightarrow m$ ganzzahlig

$$\Rightarrow \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] F_l^m(\theta) = 0$$

Normierung:

$$1 = \int d\Omega |\gamma_l^m|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\cos \theta |\gamma_l^m|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{2\pi \int_{-1}^1 d\cos \theta |F_l^m|^2 = 1}$$

Konstruktion eines allgemeinen Lösung:

Für $m=l$ gilt: $L_+ \gamma_l^l = F_l^l e^{il\varphi} = 0$

also: $\left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) F_l^l = 0$

$$= \left(\frac{\sin \theta}{\cos \theta} - l \right) F_l^l = \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \sin \theta} - l \right) = 0$$

$$\Rightarrow F_l^l(\theta) = c_l \sin^l \theta$$

$$\boxed{\gamma_l^l = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi}} \quad \text{Normierung: } c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

Verwende: $|l, m-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \frac{L_-}{\hbar} |l, m\rangle$ (siehe B) 3)

Y_l^m kann aus Y_l^l durch $(l-m)$ -fachen differenzieren erhalten werden... (längere Rechnung)

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^l \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} (\sin\theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)$$

Alternativ Form:

$$Y_l^m = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

mit $P_l^{|m|}$ den assoziierten Legendre Polynomen:

$$P_l^{|m|}(u) = (1-u^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{du^{|m|}} P_l(u)$$

$P_l^0(u) = P_l(u)$ Legendre polynome:

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

Struktur:

$P_l(u)$ = Polynom l -ten Grades in u

für l $\left\{ \begin{array}{l} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{array} \right\}$ Potenzen in u

$P_l^m(\cos\theta) = [\text{Polynom } (l-m)\text{-ten Grades in } \cos\theta] \cdot \sin^m\theta$

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$$

Beispiele:

$$l=0: Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta; Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}$$

$$l=2: Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1); Y_2^1 = \sqrt{\frac{45}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{i\varphi}; Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\varphi}$$

Verhalten unter Paritätstransformation: $\hat{x} \Rightarrow -\hat{x}$

d.h.: $\theta \Rightarrow \pi - \theta$ und $\varphi \Rightarrow \varphi + \pi$

$$e^{im\varphi} \Rightarrow e^{im\varphi} e^{im\pi} = e^{im\varphi} (-1)^m$$

$$\left. \begin{array}{l} \cos\theta \Rightarrow -\cos\theta \\ \sin\theta \Rightarrow +\sin\theta \end{array} \right\} \Rightarrow P_l^m(-u) = (-1)^{l-m} P_l^m(u)$$

$$\Rightarrow \boxed{Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi)}$$

die Parität ist $(-1)^l$

Zusammenhang mit der bra-ket Schreibweise:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

Orthogonalität: $\int d\Omega Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)$
 $= \int d\Omega \langle l, m | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

Vollständigkeit:

$$\sum_{l, m} Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)^* = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

Beispiele: Kugelflächen ist als 1. Näherung zur Beschreibung der Kauligkeit der Erdkugelfläche.

Fourierreihe als Beschreibung eines Frequenzspektrums auf einem 1D Kreis.

1) Drehimpuls als Erzeugender (Generator) der Drehungen

im Polarkoordinaten: $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ kleine α
 $(1 + \frac{i}{\hbar} \alpha L_z) f(\theta, \varphi) = (1 + \alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}) f(\theta, \varphi) \approx f(\theta, \varphi + \alpha)$

für endliche α und analytische Funktion f :

$$e^{\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} f(\theta, \varphi) = e^{\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}} f = \sum \frac{1}{n!} (\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi})^n f(\theta, \varphi) = f(\theta, \varphi + \alpha)$$

allgemein: $\boxed{e^{i \vec{\varphi} \cdot \frac{L}{\hbar}} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}')$

wobei \vec{x}' aus \vec{x} durch Drehung in Richtung $\frac{\vec{\varphi}}{|\vec{\varphi}|}$ um den Betrag von $|\vec{\varphi}|$ hervorgeht.

E) Integrale für Bewegung und Symmetrieeigenschaften

- A ist Integral der Bewegung \Leftrightarrow alle Erwartungswerte von A sind zeitl. ∞
Falls $\frac{\partial}{\partial t} A = 0$ und $[A, H] = 0$:
dann ist A Integral der Bewegung (III B) Heisenberggleichung)

- Betrachte räumliche Verschiebungen oder Drehungen

Beispiel: Drehung: $\hat{x} \rightarrow \hat{x}' = S \hat{x}$; $\hat{x} = S^{-1} \hat{x}'$

Es gelte: $\psi(\hat{x}') = \psi(\hat{x})$ (Zustand Systemunabhängig)

Suche einen Operator R_S , so dass

$$\psi(\hat{x}') = R_S \psi(\hat{x}) = \psi(\hat{x})$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(S^{-1} \hat{x}') = R_S \psi(\hat{x}')} \quad \text{gilt auch für } \hat{x}$$

E Integrale der Bewegung

$$\frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

$$[A, H] = 0$$

Beispiele:

a Homogenität des Raumes

Eigenschaften eines Systems sei bei Parallelverschiebung
ungeändert

\Leftrightarrow H bei Verschiebung ungeändert.

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{a} \quad (\text{z.B. } H = \frac{p^2}{2m})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{R}_{\text{verschieb}} \Psi(\vec{x}) &= \Psi(\vec{x} - \delta \vec{a}) = 1 - \delta \vec{a} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}) \\ &= \left(1 - \left(\frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \right) \cdot \vec{p} \right) \Psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Invarianz von H bedeutet:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \underbrace{\langle \Psi | R_S^+}_{\text{Transform. Zustand}} H \underbrace{R_S | \Psi \rangle}_{\text{Transf. Zust.}} \quad \text{gilt für alle } \Psi$$

Inf. Transformant.

$$R_{\delta \vec{a}} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \cdot \vec{p} \right)$$

$$[H, -\frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \cdot \vec{p}] = 0 \quad \forall \delta \vec{a}$$

$$\Rightarrow [H, \vec{p}] = 0$$

Bleibt der Erwartungswert bei
Transformation ungeändert,
Kommutiert H mit dem Generator
der Transformation.

b) Isotropie des Raumes (Drehung)

Falls $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | R^\dagger H R | \psi \rangle \quad (\forall \psi)$

und infinit. $R_{Dn} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\varphi} \vec{L}$

$$\Rightarrow [H, \vec{L}] = 0$$

c) Homogenität der Zeit falls $\frac{dH}{dt} = 0$

$$\frac{d}{dt} H = \frac{1}{i\hbar} [H, H] + \frac{\partial}{\partial t} H = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \psi | H | \psi \rangle = 0 \quad \text{Energieerhaltung}$$

d) Allg. Unitärer Operator $U_\alpha = e^{-i \frac{\alpha}{\hbar} A}$

Wenn für alle $|\psi\rangle$ gilt:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger H U | \psi \rangle$$

$$\text{also } H = U^\dagger H U \Rightarrow [H, A] = 0$$

$$\text{und ferner } \frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

$\Rightarrow U$ bewirkt symmetrietransformation,

A wird Generator der Symmetrietransf.

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = 0$$

G Geladene Teilchen im konstanten Magnetfeld

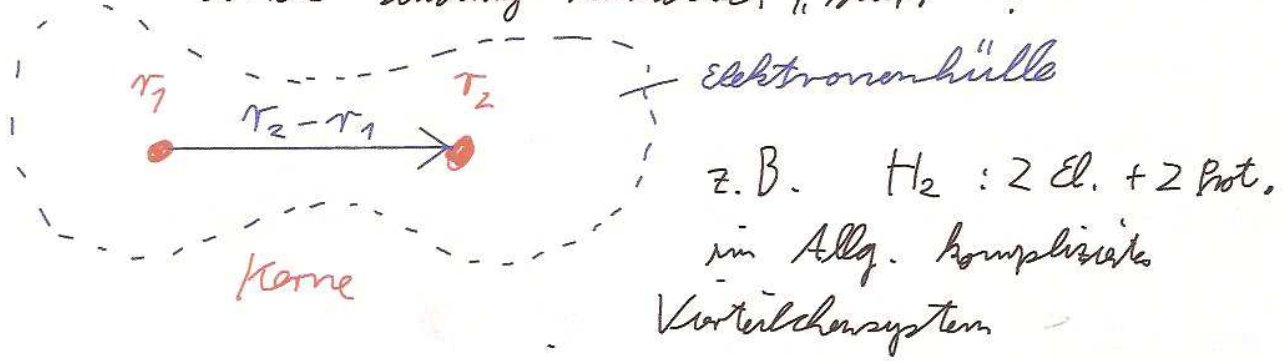
Landaу - Niveaus ausgelassen

Klass.: da Teilchen bewegt ist auf Kreisbahnen
 \Rightarrow Drehimpuls

QM: diese Drehimpuls ist quantisiert
 \Rightarrow Energiequantisierung
 $\hat{=}$ Landaу - Niveaus

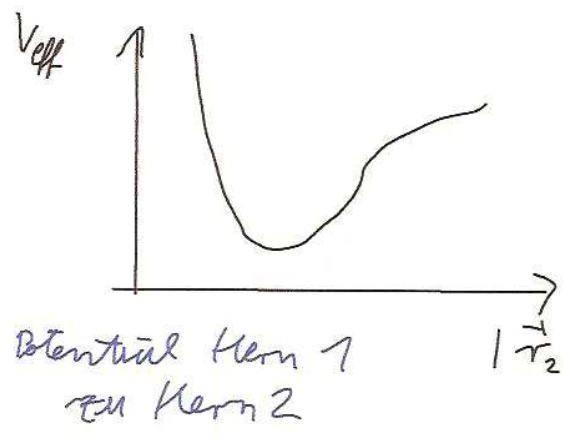
I Rotation eines 2-Atomigen Moleküls

- "Kugelmodell"  ist das sinnvoll?
 ist die Bindung tatsächlich "starr"?



die "Rechnung": Adiabatische Näherung
 Elektronen bewegen sich sehr schnell im Vergleich zu den Kernen.

Oszillation der Kerne



Für kleine Änderungen des Kernabstands wird die Auswertung durch ein Potential beschrieben, das durch einen H_0 genähert wird.

$E \sim (n+1) \hbar \omega$

Drehungen \Rightarrow Rot. Anregungen

Elektronische Anregungen (reorganisation der Elektronen)

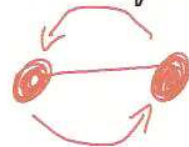
Char. Energien:

	H ₂	N ₂	O ₂	
$-U_e$	4,7	7,5	5,2	el. Anregungen
$h\nu$	0,54	0,29	0,2	Transverschwingungen
hB	$7,6 E^{-3}$	$0,25 E^{-3}$	$0,18 E^{-3}$	Rotationsanregungen

Das Molekül elektronisch Anzuregen benötigt wesentlich mehr Energie, als ein Rotationsanregung oder Schwingungsanregung.

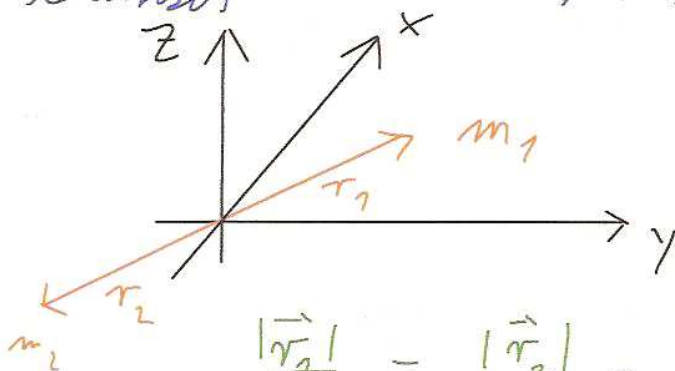
Unter "normalen" Bedingungen ist die Näherung durch ein "starres Molekül" also gerechtfertigt.

2 Der starre Rotator



klassisch

in Schwerpunktsystem



$$\frac{|\vec{r}_1|}{m_2} = \frac{|\vec{r}_2|}{m_1} = \frac{r_1 + r_2}{m_1 + m_2}$$

Reduz. Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Abstand $r = r_1 + r_2$

Trägheitsmoment: $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r^2$

Drehung um feste Achse \vec{L} mit Winkelgeschwindigkeit ω_{rot}

$$|\vec{L}| = I \omega_{\text{rot}}, \text{ Energie } H = \frac{1}{2} I \omega_{\text{rot}}^2 = \frac{L^2}{2I}$$

QM Quantisierung

Variall. Koordinaten $\theta, \varphi \hat{=} \text{Richtung von } \vec{r}$

Wellenfkt. $\Psi(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \Psi \rangle$

$$\int |\Psi|^2 d\Omega = 1$$

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I} \text{ in Ortsdarst.}$$

$$\langle \theta, \varphi | H | \Psi \rangle =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi(\theta, \varphi)$$

Eigenfkt

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle$$

$$H | \ell, m \rangle = \frac{\ell(\ell+1)}{2I} \hbar^2 | \ell, m \rangle$$

Konvention

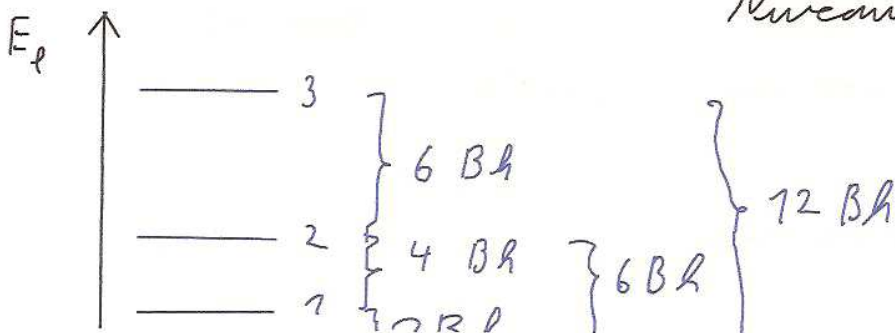
$$B = \frac{\hbar}{4\pi I} \left(= \frac{\hbar}{4\pi \mu r^2} \right) \text{ Rotationskonst. Einheit } \left[\frac{1}{\text{A}} \right]$$

$$E_{\ell} = B \hbar \ell(\ell+1)$$

($2\ell+1$) fach entartet

$$E_{\ell} - E_{\ell-1} = B \hbar 2\ell$$

Abstand zw benachbarten Niveaus wächst linear



3) Ausw\u00fcnkungen

Hermitel asymmetrisch \Rightarrow Dipol \Rightarrow Strahlung

f\u00fcr el mag. \u00dcberg\u00e4nge:

\u00dcbergangsamplitude = Dipolmatrixelement

$$\langle l' m' | Z | l m \rangle = \dots$$

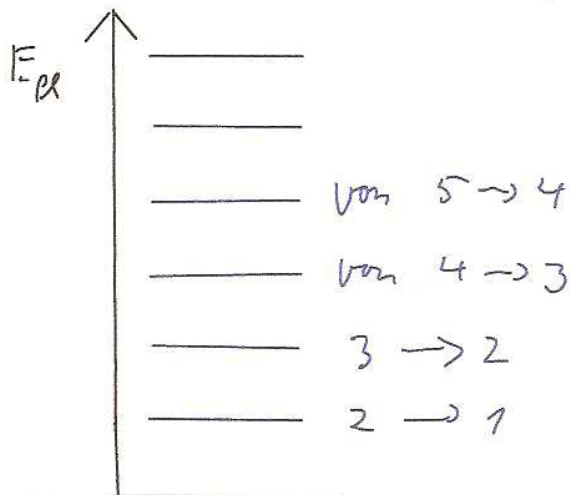
$$Z = r_2 \cos \theta$$

$$= r_2 \delta_{m m'} \left[\delta_{l', l-1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l', l+1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \right]$$

\u03b1) \u00dcberg\u00e4nge nur zw. benachbarten Niveaus. \uparrow ? (1)

\u03b2) Photonen - Energie $E_l - E_{l-1} = B h \omega$

man beobachtet: (Photonenergie)



im Gegensatz zum H0:
 dort nur Photonen
 mit $\hbar \omega$
 da Energieniveaus \u00e4quidist.
 und \u00dcberg\u00e4nge nur bei
 benachbarten Niveaus

Anwendungen:

(i) $2 B h$ wird gemessen $\Rightarrow I$

$\Rightarrow \tau$ (falls m_1, m_2 bekannt)

(ii) Isotope r_2 sind gleich, aber μ verschieden.

(Isotopentrennung)

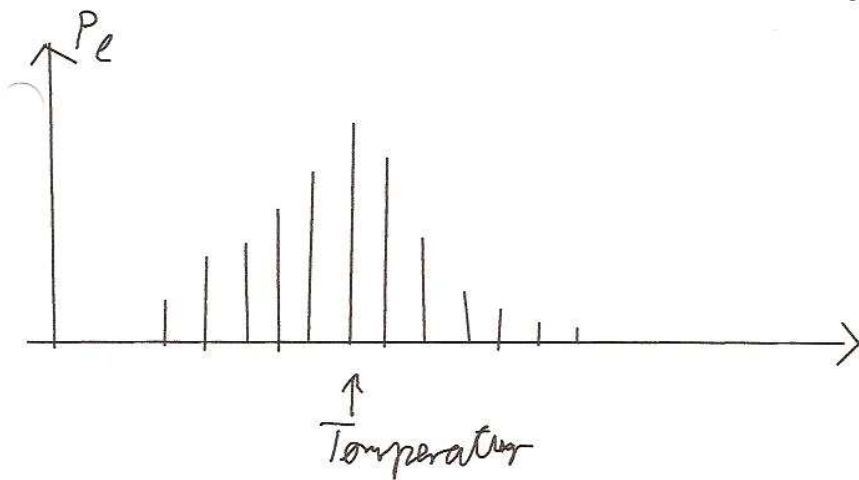
$$(iii) E_{\mu} \Leftrightarrow l \Rightarrow E_e$$

Linienintensität im Medium \Rightarrow Besetzungszahlverteilung

als Fkt der Temperatur

$$P_e = \frac{1}{Z} (2l+1) e^{-\frac{E_e}{kT}}$$

$$Z = \sum (2l+1) \exp\left(-\frac{E_e}{kT}\right)$$



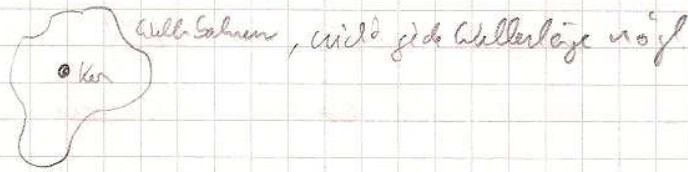
20.06.08

VII Zentralpotentiale / Wasserstoffatom

Historisch: Bohrsches Atommodell

verallgemeinerung zu Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

Modell:



⇒ flache Atome, beschleunigte Ladung

weiter zu ⇒ Schrödinger

A) Zentralpotentiale $V(\vec{r}) = V(r)$; $r = |\vec{r}|$

klassisch: $E_{cl} = \frac{\mu}{2} v_{rel}^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2}$

$p_r = \text{Relativimpuls}$

$$E = \frac{1}{2\mu} p_r^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

QM: stationäre Schr. Gl. in Ortsdarstellung

$$\left[\frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

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

Δ in sphärischen Koordinaten.

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} \left[L^2 + V(r) \right]$$

2) Separation der Variablen r, θ, φ

Wegen $[H, L^2] = 0 \Rightarrow [H, L_x] = 0$ und $[H, L_z] = 0$

H, L^2, L_z können gleichzeitig diagonalisiert werden.

Zustände können nach E, l, m klassifiziert werden.

Ansatz: $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

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

Für festes l ist (...) unabhängig von m .

⇒ Zustände sind $(2l+1)$ -fach entartet

Forderung:

$$\rho(r) = |Y|^2 = |R(r)|^2 |Y_m|^2 \text{ integral bezüglich } d\vec{r}$$

$$\Rightarrow |R(r)|^2 r^2 \text{ integral bezüglich } dr$$

wegen $d\vec{r} = r^2 dr d\Omega$; und $\int |Y_m|^2 d\Omega = 1$

Die Energie hängt von l und einem weiteren diskreten (für Bindungen) bzw. kontinuierlichem Index (Streuung) ab.

E_{nl} oder E_{kl}

Übergang von $R(r)$ zu $U(r)$: $R(r) = \frac{1}{r} U(r)$

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

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2}_{\text{Impuls}^2} + \underbrace{\hbar^2 \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)}_{\text{effektives Potential}} \right] U_{nl}(r) = E_{nl} U_{nl}(r)$$

entspricht ein dimensionales Schrödinger Gf. mit effektivem Potential.

$$V_{eff}(r) = \hbar^2 \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$$

repulsive Zentrifugalbarriere

Verhalten von $U(r)$ bei kleinem r :

Annahme: $V(r)$ sei bei $r=0$ regulär oder zumindest

weniger singular als $\frac{1}{r^2}$.

Ausatz: $U(r) \sim r^s$

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} s(s-1) r^{s-2}}_{\text{dominant}} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu} r^{s-2} + \underbrace{V(r) r^s}_{\text{vernachlässigbar}} \right] = E r^s$$

$$s(s-1) = l(l+1)$$

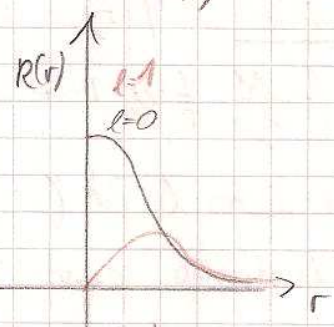
$\Rightarrow s = l+1$ oder $s = -l$ für außerhalb des Potentials

$R(r) = \frac{U(r)}{r}$ ist bei $(s=l+1)$ Null regulär bei $(s=-l)$ singular

(für $l=0$ wäre $s=0$ noch integrierbar, aber $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{r})$)

ist keine Lösung des Schröd. Gf. bei $r=0$)

$U(r)$ verschwindet wie r^{l+1}
 $R(r)$ verschwindet wie r^l
 Für $l=0$ geht $R(r) \rightarrow \text{konst.}$



wegen Drehimpulsbarriere

$U(r)$ ist nur für $r \geq 0$ def. und geht bei $r=0$ gegen 0 .

Entspricht ∞ -hoher Barriere bei $r=0$.

Normierungsbed.: $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |U(r)|^2 dr = 1$

Für kontinuierliches Spektrum: Orthogonalität

$$\int_0^\infty U_k^*(r) U_{k'}(r) dr = \delta(k-k')$$

Bedeutung: k ist die radiale, l die orbitale (azimutale),
 m die magnetische Quantenzahl

Zustand: $|k, l, m\rangle$

B) Wasserstoffatom

1) Ansatz und Lösung des Eigenwertproblems

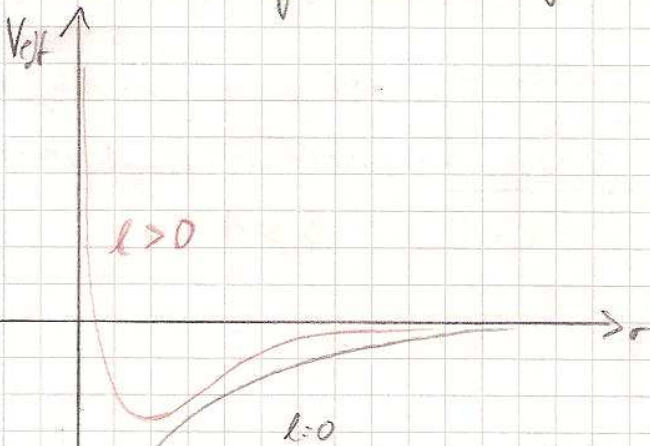
$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \equiv -\frac{e^2}{r}$$

reduzierte Masse $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \approx \frac{1}{2000}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{kl}(r) = E_{kl} U_{kl}(r) \quad \text{und } U_{kl}(0) = 0$$

diskontinuierliches Spektrum von H für $E < 0$

kontinuierliches Spektrum von H für $E > 0$



dividiere die Gleichung durch E_{kl}

wähle dimensionslose Variable $\rho = \frac{r}{a_0}$, a_0 = Bohrs Radius

$$\kappa_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_F}}$$

$$\left[\left(\frac{d}{d\rho}\right)^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho}{\rho^3} - \kappa_{kl}^2 \right] U_{kl}(\rho) = 0 \quad (*)$$

Lösung: Verhalten für große ρ :

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \kappa_{kl}^2\right) U_{kl}(\rho) = 0 \quad (\leq \text{eindringen in Barriere})$$

$$U_{kl}(\rho) \sim e^{\pm \kappa_{kl} \rho}$$

, modulo Polynom in ρ

da es unendlich abfallend

Ausatz: $U = e^{-n_{kl} s} y_{kl}(s)$ eingesetzt in (*)

$$\left[\frac{d}{ds^2} - 2n_{kl} \frac{d}{ds} + n_{kl}^2 - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{2}{s} - n_{kl}^2 \right] y_{kl}(s) = 0$$

Produktregel

und $y_{kl}(0) = 0$, genauer: $y_{kl}(s) \sim s^{l+1}$ für $s \rightarrow 0$

Polentwicklungansatz: $y_{kl}(s) = s^l \sum_{q=0}^{\infty} c_q s^q$, $s = l+1$, $c_0 \neq 0$

Rekursionsbeziehung: für c_q durch Koeffizientenvergleich

$$q(q+2l+1)c_q = 2[(q+l)n_{kl}-1]c_{q-1} \quad (\text{Dgl. 2. Ordnung})$$

(trifft aber nur $c_q \leftrightarrow c_{q-1}$)

Verhalten für große q :

$$c_q \sim \frac{c_{q-1}}{q} \frac{2[(q+l)n_{kl}-1]}{q+2l+1} \rightarrow \frac{c_{q-1} \cdot 2n_{kl}}{q}$$

Diese Reihe konvergiert mit Konvergenzradius ∞ und nähert sich

$$c_0 \frac{(2n_{kl})^q}{q!} = e^{2n_{kl}s}$$

Zusammen: $e^{-n_{kl}s} e^{2n_{kl}s}$ wächst exponentiell! \Rightarrow nicht normierbar!

Ausweg: die Reihe bricht ab

$$\Rightarrow \exists q \geq 1 \text{ sodass } (q+l)n_{kl} - 1 = 0 \quad \hat{=} \text{Bedingung}$$

Da q, l ganzzahlig sind, kann n nicht beliebig sein:

Erlaubte Werte für n :

$$n_{kl} = \frac{1}{(k+l)}$$

$$E_{kl} = -\frac{E_l}{(k+l)^2}$$

$k+l$ müssen ganzzahlig sein
 $\frac{1}{2} = k+l = k$ Hauptquantenzahl

$$y_{kl} = s^{l+1}$$

Polynom von Grad $k-1$, $k \geq 1$

25.06.08

hat also k -Themen, alle $\neq 0$.

Rekursionsformel: mit $n_{kl} = \frac{1}{(k+l)}$

$$\Rightarrow c_q = \frac{2}{q} \frac{1}{(q+2l+1)} \frac{1}{(k+l)} (q+l-k-1) c_{q-1} \quad 1 \leq q \leq k-1$$

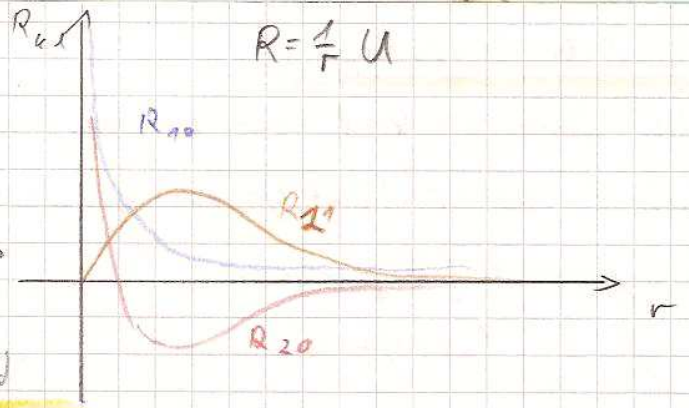
$$c_q = \left(\frac{2}{k+l}\right)^q \frac{1}{q!} \frac{(2l+1)!}{(q+2l+1)!} (-1)^q \frac{(k-1)!}{(k-q-1)!} c_0$$

Beispiele:

$$R_{k=1, l=0}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{k=2, l=0}(r) = 2(a_0)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{k=2, l=1}(r) = 2(a_0)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{13} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$



Bis auf Normierung identisch mit verallgemeinerten Laguerre Polynomen

$$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^z z^{-m} \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}} (e^{-z} z^n)$$

$$L_n(z) = L_n^{m=0}(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n)$$

$$R(r) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} e^{-\frac{r}{n}} \left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right)$$

Hinweis: L_n^m sind Orthogonalpolynome:

$$\int P_{\{index\}}^* P_{\{index\}} \cdot \text{Gewicht}(r) = \delta_{\{index\} \{index\}}$$

z.B. $e^{-\frac{r}{2}}$

2) Diskussion des Resultats

$$\alpha = \frac{1}{137} e^2 \approx \frac{1}{137} \text{ dimensionslose Größe} \Rightarrow \text{Feinstrukturkonstante}$$

$$E_I = \frac{1}{2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 = 13,6 \text{ eV}$$

Energie

$$e = \frac{-q}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$$

$$q = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{1}{\alpha} \lambda_{\text{Compton}} = 0,52 \text{ \AA}$$

$$\lambda_{\text{Compton}} = \frac{\hbar}{\mu c}$$

minimale Länge auf der ein Teilchen der Masse μ lokalisiert werden kann. $p \sim \mu c$; $E \sim \frac{1}{2} \mu c^2$

$$a_0 = 137 \cdot \lambda_c$$

$$E_b: \text{ Bindungsenergie } \approx \frac{1}{n^2} \frac{\alpha^2}{2} \mu c^2$$

nicht relativistische Behandlung ist gerechtfertigt!

Entartung: $n = k + l$



Bezeichnung 2s... unverschämlich für allg. Potential

Grad der Entartung:

Für festes $n = k + l$ können die Werte $l = 0, 1, \dots, n-1$ annehmen.
Jeder l -Wert ist $(2l+1)$ -fach entartet.

Insgesamt für festes n :

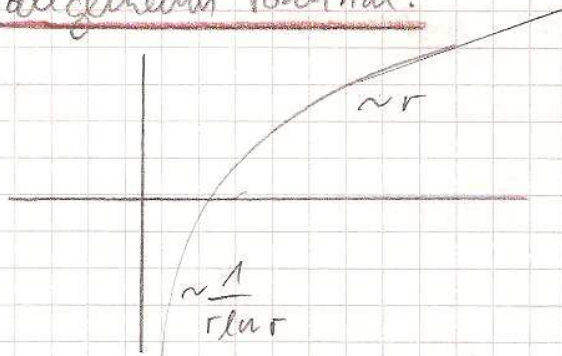
$$\sum_{l=0, \dots, n-1} (2l+1) = n^2$$

Spektroskopische Notation

l	0	1	2	3	4
Bezeichnung	s	p	d	f	g

Der Zustand wird charakterisiert durch die Hauptquantenzahl n und den Drehimpuls:

allgemeines Potential:



$\propto CD$

($b\bar{b}$) gebundene Zustände

Wasserstoffartige Systeme:

deuterium ($\mu^+ e^-$)

($p \mu^-$) \Rightarrow kleiner Bohrradius

Positronium ($e^+ e^-$)

($p \pi^-$) \Rightarrow Isotomische Wechselwirkung

$n=5$		
$n=4$	3p	Zahl der
$n=3$	2p	Knotten des
	1p	Wellenfkt +1
$n=1$		
$l=0$	$l=1$	\rightarrow

c) Dichten und Ströme

Stationär heißt nicht statisch

1) ohne Magnetfeld

Ausgangspunkt: $\Phi_{\text{stat}}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$

Dichte: $|\Phi_{\text{stat}}|^2 = |R_{nl}(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$ unabhängig von φ

Strom: $\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2\mu} (\Phi^* \vec{\nabla} \Phi - \vec{\nabla} \Phi^* \Phi + C)$ $C = \text{konstante}$

Zerlege ϕ in Betrag und Phase

$$\phi(\vec{r}) = \alpha(\vec{r}) e^{i\varphi(\vec{r})}$$

$$\alpha(\vec{r}) = \text{reell}$$

$$\rho(\vec{r}) = \alpha^2(\vec{r}) \quad \text{und} \quad \vec{j} = \frac{k}{\mu} \alpha^2(\vec{r}) \vec{\nabla} \varphi(\vec{r})$$

reig und j gegeben, kann man dann ϕ rekonstruieren?

Anwendung auf ϕ_{nlm} :

$$\alpha_{nlm}(\vec{r}) = |R_{nl}(\vec{r})| |Y_l^m(\theta, \varphi)|$$

Phase $\varphi(\vec{r}) = m\varphi$

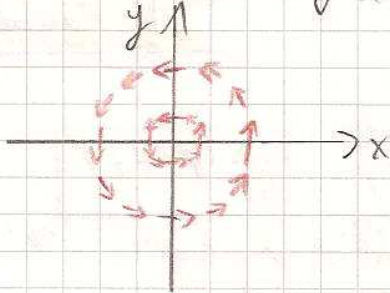
Gradient in Polarkoordinaten:

$$\vec{\nabla} = \hat{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\theta} \partial_\varphi + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \hat{e}_r \partial_r$$

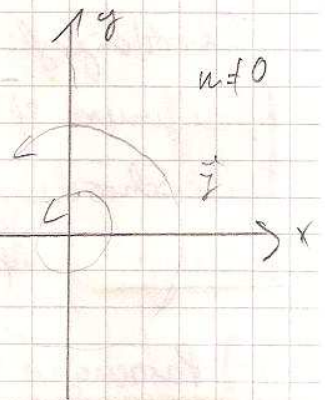
(*) $\vec{j} = \frac{k}{\mu} \rho \frac{1}{r \sin\theta} m \hat{e}_\varphi$ Was ergibt sich für $\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$?

Stromdichte zeigt in \hat{e}_φ -Richtung und ist unabhängig von r .

Blick von oben auf das Atom ($m \neq 0$)



Wie bei Drehbewegung um die z-Achse



27.6.'08 Drehimpulsdichte (klassisch) $d\vec{L} = \mu \vec{r} \times \vec{j} d^3\vec{r}$

\vec{j} zeigt nur in \hat{e}_φ -Richtung.

$$dL_z = \mu \hat{e}_z (\vec{r} \times \vec{j}) d^3\vec{r}$$

$\mu g \hat{e}_z$ Massendichte

$\mu \vec{j} \hat{e}_z$ Massenstromdichte = Impulsdichte

$$dL_z = \mu r \sin\theta j d^3\vec{r} = k m g(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad \text{mit (*)}$$

$$L_z = k m$$

2) Stromdichte bei Bewegung eines Magnetfeldes

geg: $\vec{A}(\vec{r})$; zeitl. konst, sodass $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ und $\vec{E} = 0$

$$H = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q U(\vec{r})$$

\vec{p} : kanonischer Impuls; klassisch: $\mu \cdot \vec{v}$

Stromdichte: $\vec{j} = \frac{1}{2\mu} \left(\underbrace{\psi^* \left(\frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} - q\vec{A} \right) \psi}_{\mu \cdot \vec{v}} + C \right) = \frac{1}{\mu g} [\hbar \vec{\nabla} \psi^* - q\vec{A} \psi^*] = \vec{j}$

\vec{j} erfüllt: $\partial_t \rho - \nabla \cdot \vec{j} = 0$

Speziell $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$, wähle $\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$

$\vec{j} = \frac{1}{\mu} \rho \left[\hbar \nabla \psi + \frac{q}{2} \vec{r} \times \hat{e}_z \cdot B \right]$

Speziell für Grundzustand ($l=0 \Rightarrow \vec{g}=0$)

Annahme: Wellenfunkt. wird durch B nicht stark geändert:

$\vec{j} = -\frac{q}{2\mu} B \hat{e}_z \times \vec{r} \rho_{100}$ Körnung

3) Eichtransformation von Potentialen und Wellenfkt.

E, \vec{B} -Felder bleiben ungedändert, wenn:

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

$\Lambda = \text{Lambda}$

$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda$

Schrödingergl: $\left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A} \right)^2 + q\phi \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$

Wir muss ψ transformiert werden ($\psi \rightarrow \psi' = ?$), sodass ψ' die Schrödingergl. mit dem transformierten Potential erfüllt.

Lösung: $\psi \rightarrow \psi' = \exp\left[\frac{iq}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t) \right] \psi$

1) Paramegnetismus/Diamagnetismus, Zeeman-Effekt

1) allg. Diskussion: $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$ konst $(\vec{a}(\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{c}(\vec{a} \times \vec{b}))$

$H = \frac{1}{2\mu} \left[\vec{p} + \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{B} \right]^2 + V(\vec{r})$

$= \frac{1}{2\mu} \left[\vec{p}^2 + \frac{q}{2} \left(\underbrace{\vec{p}(\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B})\vec{p}}_{(\vec{B}(\vec{p} \times \vec{r}) \cdot 2)} \right) + \frac{q^2}{2} \underbrace{(\vec{r} \times \vec{B})^2}_{r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2} \right] + V(\vec{r})$

da $[p_i, r_j] = i\hbar \delta_{ij} \Rightarrow p_1 r_2 - p_2 r_1 = \hbar (p_1 - r_1 p_2)$

$H = \underbrace{\frac{1}{2\mu}}_{H_0} + V(\vec{r}) + \underbrace{\frac{1}{2\mu} q (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{B}}_{\mu_B \frac{\hbar}{\hbar}} + \underbrace{\frac{q^2}{8\mu} (x^2 + y^2) B^2}_{H_2}$

mit $\mu_B = \frac{\hbar q}{2\mu}$

$H = H_0 + H_1 + H_2$ mit $H_0 \gg H_1 \gg H_2$

Energie-Niveaus spalten auf $\sim B \cdot m$

$$2l+1 \quad l=1$$

Interpretation des paramagnetischen Terms (verstärkt das Feld)

Klassisch: magn. Moment $\vec{\mu} = \frac{q}{2m_e} \vec{L}$

$H_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, das magn. Moment richtet sich in Richtung von \vec{B} aus.

(\Rightarrow geringe Energie)

allgemein: $H_{\text{Zeeman}} = -\frac{q}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}$

$L \rightarrow g_s \approx 2$

$H_2 = \sim B^2$ diamagnetischer Term

(feld zu Abschirmung des \vec{B} -Feldes)

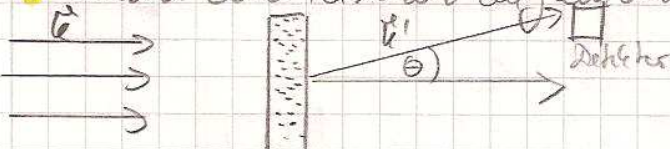
VIII Streutheorie

A) Einführung

1) Streuung / Experiment

2 Möglichkeiten:

• Stahl von Teilchen auf ein stationäres Target



Einfallender Strahl Target

Vorteil dieser Anordnung:

Bei geringender Dichte des Targets, volle Gebrauch des Strahls

Nachteil: Energie im Schwerpunktsystem wird reduziert.

• Teilchenstrahl gegeneinander



Vorteil: Streuenergie $E_{\text{Streu}} = E_1 + E_2$

Nachteil: (Schwer Kollisionspartner zu finden)

Starke Fokussierung und hohe Teilchenströme sind erforderlich

B) Übergang zu Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

⇒ Streuung an fixiertem Potential $V(\vec{r})$

μ = reduzierte Masse ; \vec{r} = Relativkoordinat

1) Zeitabhängige Beschreibung mit Wellenpaketen

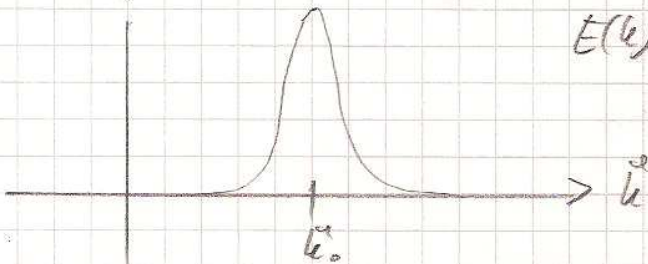
Verhalten für große Abstände ($V(\vec{r})$ vernull $\rightarrow 0$)

Einlaufende Welle: ($\vec{k} = \vec{p}$)

$$\phi_{\vec{k}_0}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot e^{-iE(\vec{k})\frac{t}{\hbar}} \cdot A_{\vec{k}_0}(\vec{k})$$

$A_{\vec{k}_0}(\vec{k})$ = um \vec{k}_0 konzentriertes Wellenpaket

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (\text{Potential spielt keine Rolle})$$



gestreute Welle (ausbreitend):

$$\psi^s(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{r} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-iE(\vec{k})\frac{t}{\hbar}} A_{\vec{k}_0}(\vec{k}) F(\vec{k}, \hat{r})$$

\hat{r} : Einheitsvektor in \vec{r} -Richtung (\hat{r} = Beobachter) $\hat{r} = \frac{\vec{r}}{r}$

Für "schon" Wellenpaket mit $\vec{k} \approx \vec{k}_0$

$$\psi^s(\vec{r}, t) \approx F(\vec{k}_0, \hat{r}) \frac{1}{r} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-iE(\vec{k})\frac{t}{\hbar}} A_{\vec{k}_0}(\vec{k})$$

2.7.08

$t \ll 0$



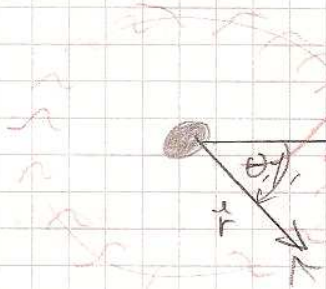
Streuzentrum

$t \sim 0$



Wellenfront im WW-Bereich

$t \gg 0$



Durchlaufende Welle

gestreute Welle

$|\psi^s|, t$ abhängig von $\phi_{\vec{k}_0}$ aber mit $\frac{f(\theta, \vec{r})}{r}$ multipliziert

insgesamt ψ für große Abstände

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} A_{\vec{k}}(\vec{k}) e^{-iE(\vec{k})t/\hbar} \left[e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{c}{v} f(\theta, \varphi) \right]$$

1) hier nur elastische Streuung! Streuamplitude

2) für $t \rightarrow -\infty$ verschwindet die gestreute Welle

2) Stationäre Behandlung

Einlaufende ebene Welle

$$N e^{i\vec{k}\vec{r}} = \phi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

gestreute Welle

$$N \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} f(\theta, \varphi) = \psi_{\vec{k}}^s(\vec{r})$$

(Normierung: $\int d^3k \phi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$, $N = (2\pi)^{3/2}$)

stationäre Schrödinger Gleichung für große r

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \right)$$

f hat die Dimension einer Länge.

3) Stromdichte und Streuquerschnitt

$$\vec{j} = \frac{1}{2m} (\psi^* \vec{k} \psi + c.c.)$$

komplex konjugiert

Beitrag der einlaufenden Welle: $\vec{j} = \frac{1}{2m} N^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$

Beitrag der gestreuten Welle: $\vec{j}_s = \frac{N^2}{m} \text{Re} \left(\frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r} f(\theta, \varphi) \vec{k} \pm \frac{1}{r} \nabla \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\theta, \varphi) \right) \right)$

$$\nabla e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{1}{r} f(\theta, \varphi) = \left(\nabla \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \right) f + \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} (\nabla f)$$

Gradient in Kugelkoordinat: $\nabla = \hat{e}_r \frac{1}{r^2} \partial_r + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \sin\theta \partial_\theta + \hat{e}_\varphi \frac{1}{r} \partial_\varphi$

$$\nabla f \sim \frac{1}{r}$$

$$\partial_r \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} = \frac{i\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} - \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r^2}$$

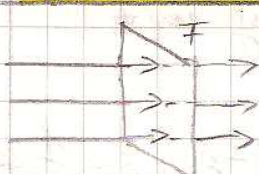
zusätzlich Unterdrückt

$$\vec{j}_s = \frac{N^2}{m} \frac{\hbar k}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \hat{e}_r$$

Wahrscheinlichkeitsstrom in \hat{e}_r -Richtung

$$\vec{j}_s = |j_{el}| |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{r^2}$$

Definition des Wirkungsquerschnitts:



Detektor: Raumwinkel $\Delta\Omega$
Fläche $\Delta\Omega r^2$

Stromertrag **Differenzieller Wirkungsquerschnitt**

$$[\text{Fläche}] = \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

Zahl der beobachteten Teilchen im Detektor

$\Delta\Omega \cdot \text{Zeiteinheit} \cdot \text{Zahl der einlaufenden Teilchen}$

$$= \frac{j_s(\theta, \varphi) \cdot \Delta\Omega r^2}{\Delta\Omega |j_{el}|} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

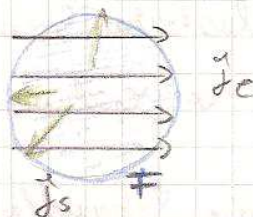
Fläche $F \cdot \text{Zeiteinheit}$

Totaler Wirkungsquerschnitt: $\int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_{\text{total}}$
 Im Experiment $|j_e| = \text{Luminosität}$ [$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$]

4) Optisches Theorem

$j_e = N^2 \frac{\hbar^2 k^4}{m}$; räumlich konstant

$j_s = N^2 \frac{\hbar^2 |k|}{m} \frac{1}{r^2} f(\theta, \varphi)^2$



Stromerhaltung?

Strom durch Fläche F nach außen

$$\int_F d\vec{F} \cdot \vec{j}_e = 0 \quad \text{und} \quad \int_F d\vec{F} \cdot \vec{j}_s = N^2 \frac{\hbar^2 k^4}{m} \int_F d\vec{F} \cdot \vec{e}_r \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} = |j_e| \sigma_{\text{total}}$$

Normal auf $F = r^2 d\Omega$

Kompensation durch Interferenz zwischen ϕ_e und ψ_k^s :

$$\vec{j}_{\text{int}} = \frac{\hbar}{2im} \left[(\phi_e^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \psi_k^s(\vec{r}) + \psi_k^{s*}(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_e(\vec{r})) + \text{c.c.} \right]$$

komplex konjugiert

(da $(\phi^* + \psi^*) \vec{\nabla} (\phi + \psi) + \text{c.c.} = \phi^* \vec{\nabla} \psi + \psi^* \vec{\nabla} \phi + \text{c.c.}$)

\vec{j}_{int} liefert einen negativen Beitrag Vorwärtsrichtung ($\theta=0$)

Betrachte also radialen Anteil $\sim \vec{e}_r$ bei $\theta=0$.

$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \partial_r + \dots \vec{e}_\varphi + \vec{e}_\theta$

$\vec{\nabla} \psi_k^s = \vec{e}_r N f(\theta, \varphi) \left(\frac{i\hbar}{r} - \frac{1}{r^2} \right) e^{i\hbar r}$

$\vec{\nabla} \phi_e = i\hbar N e^{i\hbar r}$ unterdrückt

radialer Anteil: $\vec{e}_r \vec{j}_{\text{int}} = \frac{N^2 \hbar}{2im} \left[e^{-i\hbar r} \frac{i\hbar}{r} f(\theta, \varphi) e^{i\hbar r} + \frac{e^{-i\hbar r}}{r} f^*(\theta, \varphi) \frac{i\hbar}{r} e^{i\hbar r} \text{ (hetero)} \right]$

$$\vec{e}_r \vec{j}_{\text{int}} = \frac{N^2 \hbar k}{2im} \left[e^{-i\hbar r + i\hbar r} f(\theta, \varphi) + \text{c.c.} + e^{i\hbar r - i\hbar r} f^*(\theta, \varphi) \cos\theta + \text{c.c.} \right]$$

fallt ab wie $\frac{1}{r}$

$$\vec{e}_r \vec{j}_{\text{int}} = \frac{N^2 \hbar k}{2im} \left[e^{i\hbar r(1-\cos\theta)} f(\theta, \varphi) (1+\cos\theta) + \text{c.c.} \right]$$

Für $\cos\theta \neq 1$ liefert der Phasenfaktor nach Faltung mit Wellenpaket \Rightarrow Null

Der Beitrag kommt nur vom Bereich $1 \geq \cos\theta \geq 1-\epsilon$, $\epsilon N \frac{1}{kr} \ll 1$

$$\int d\vec{F} \stackrel{1}{j_{\text{int}}} = \int d\Omega r^2 \hat{e}_r j_{\text{int}} = \frac{N^2 \lambda k}{2m r} r^2 2\pi \int_{-1}^1 d\cos\theta \left[e^{i k r (1 + \cos\theta)} f(\theta, t) (1 + \cos\theta)^{k r} \right]$$

$$|1 - \cos\theta = x|$$

$$= \frac{N^2 \lambda \pi k r}{m} \int_0^1 dx \left[e^{i k r x} (2-x) f(\theta=0, t) + \text{c.c.} \right]$$

$$= \frac{N^2 \lambda \pi k r}{m} \left[\frac{1}{i k r} 2 f(\theta=0, t) + \text{c.c.} \right]$$

Term der Untergrenze 0

Der Term der oberen Grenze $\sim e^{i k r} \rightarrow$ trägt nach Fallg mit d_t nicht bei

$$= -\frac{N^2 \lambda \pi k}{m} \text{Im}(f(\theta=0, t)) = -\frac{4\pi}{k} |j_e| \text{Im}(f(\theta=0, t))$$

Die Stromerhaltung fordert:

$$|j_e| \sigma_{\text{total}} = |j_e| \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0, t)) = 0$$

$$\Rightarrow \sigma_{\text{total}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0, t))$$

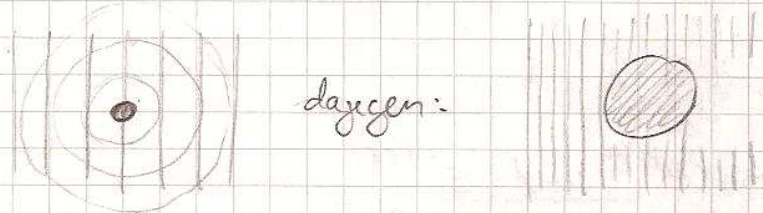
4.07.08

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0)) \quad (*)$$

- 1) Zuvörderst nur für Potentiale endlicher Reichweite (bzw. genügend schnell abfallend)
für Coulombpotential: $\sigma_{\text{tot}} \rightarrow \infty \Leftrightarrow \text{Im}(f(\theta=0)) \rightarrow \infty$
- 2) $\psi(\vec{r})$ gilt auch bei inelastischer Streuung
- 3) f hat immer $\text{Im}(f) \neq 0$, wenn Streuung vorliegt
- 4) Für $k \rightarrow 0$ muss $\text{Im}(f(\theta=0), k) \sim k$ verschwinden damit σ_{tot} nicht divergiert

1) Partialwellen

Annahme: $V(\vec{r}) = V(r) \Rightarrow$ Schrödingers Gl. im Kugelkoordinat wie kein Bindungsproblem $\psi(\vec{r}) = F(kr) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$
 Rotationssymmetrie um z-Achse, keine φ -Abhängigkeit
 \Rightarrow nur magnetische Quantenzahl $m=0$
Kohäsion: Bei niedriger Energie (klein k) nur wenige, niedrige Drehimpulse.



einfache θ -Abhängigkeit komplizierte θ -Abhängigkeit
Eckenwellen: großer Beitrag bei einem bestimmten Wert von l und $k \Rightarrow$ Resonanz

1) Entwicklung der Streulösung (für große r) nach Drehimpulsen $l (=0)$

a) Ebene Welle:
$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

alternativ:
$$\sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l0}(\theta)$$

Sphärische Besselfunktionen
$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

große r: $j_l(kr) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}$

kleine r: $j_l(kr) \rightarrow \frac{(kr)^l}{(2l+1)!}$

1) Strom amplitude: $f(\theta, r) \equiv f(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos\theta)$

2) $\psi(r, \theta)$ rei Strahlbüdung für große r:

$\psi(r, \theta) = N(e^{i\theta \cos\theta} + f(\cos\theta) \frac{e^{i\theta r}}{r})$

$= N \sum_{l=0}^{\infty} ((2l+1) i^l j_l(kr) + (2l+1) f_l \frac{e^{i\theta r}}{r}) P_l(\cos\theta)$

$j_l(kr) = \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} = \left(e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right) \frac{1}{2i kr}$

mit $e^{i l \frac{\pi}{2}} = i^l$ auslaufende einlaufende Kugelwelle

$\psi(r, \theta) = N \sum_l \left(\frac{2l+1}{2ik} (-1)^{l+1} \frac{e^{-i\theta r}}{r} + \left[\frac{2l+1}{2ik} + (2l+1) f_l \right] \frac{e^{i\theta r}}{r} \right) P_l(\cos\theta)$

Für jede Lösung der Schrödingers gl. gilt:

$\psi(r, \cos\theta) = N \sum_l (2l+1) a_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) \frac{P_l(\cos\theta)}{r}$

jedes löst eine stehende Welle, Strom in radialer Richtung = 0.
ein und auslaufende Welle sind gleich stark.

$f_l \leftrightarrow \delta_l a_l$

• zerlege $\sin() = \frac{1}{2i} (e^{i()} - e^{-i()})$

• Koeffizientenvergleich von $e^{+i\theta r}$ und $e^{-i\theta r}$

$\Rightarrow f_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l$

$a_l = i^l \frac{1}{k} e^{i\delta_l}$

anschaulich: die Fraun Lösung zu festem l bei großem r

$\sim \frac{(2l+1)}{2ikr} (-1)^{l+1} e^{-i\theta r} + e^{i\theta r + 2i\delta_l}$

Stehlösung

Streuung = Phasensprung der auslaufenden Welle (vgl. ungestörten Fall) um $2\delta_l$

Streu phasen: $\delta_l(k)$, muss reell. (bei Absorption auch $\text{Im}(\delta_l) \neq 0$)

2) Wirkungsquerschnitt

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{l,l'} f_l^* f_{l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta)$

Diese heißt Wirkungsquerschnitt

Totale Welligenschn. H:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ mit } \int d\Omega P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi \cdot 2}{(2l+1)} \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$\sigma_l \sim A \cdot k$ Länge

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l) = \frac{4}{k} \sigma_x$$

$A^2 =$ Größe des Welligenschnitts

σ_l ist der Beitrag vom Drehimpuls l zu σ_{tot}

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad \text{Partialwellenunitarität}$$

äquivalent: $\sigma_l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - e^{2i\delta_l}|^2$

wegen $e^{-i\delta} \sin \delta = (1 - e^{-2i\delta}) \frac{1}{2i}$

Streumatrix element zum Drehimpuls l :

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l}$$

D) Partialwellen, Streuphasen aus Experimenten

Beisp: $\delta_0, \delta_1 \neq 0$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} |e^{i\delta_0} \sin(\delta_0) + 3 e^{i\delta_1} \sin(\delta_1) \cos\theta|^2$$

- Beitrag von $\sin^2 \delta_0$ isotrop
- " " $\sin^2 \delta_1 \cos \theta$
- Interferenzterm: $\sin \delta_0 \sin \delta_1 \sim \cos \theta$
(verschwindet bei Integration)

- Messung von $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ liefert $\Rightarrow \delta_0, \delta_1$, die Abweichung von höheren Potenzen in $\cos \theta \Rightarrow$ Konsistent.

Nochmals Optisches Theorem

$$f(\theta, \varphi) = \sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \text{ mit } f_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \text{ und } P_l(\cos\theta=1) = 1$$

$$f(\theta, \varphi) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

$$\text{Im}(f(\theta, \varphi)) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \Rightarrow \text{Optisches Theorem}$$

E) Beispiel: Streuung an harter Kugel

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > R \\ +\infty & r < R \end{cases}$$

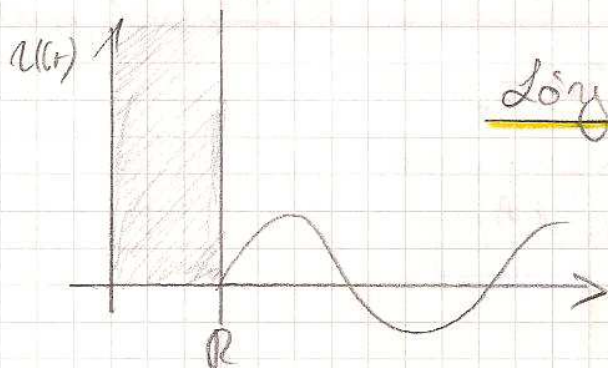
radiale Schrödinger Gl.:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) U_l(r) = \left[U_l(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] U_l(r)$$

$$\psi = \frac{U_l(r)}{r}$$

$$k^2 = 2\mu E$$

$$U_l(r) = \frac{2\mu V}{\hbar^2}$$



Lsg: $U = \sin(kr - kR)$
 $= \frac{1}{2i} (e^{i(kr - kR)} - e^{-i(kr - kR)})$
 $\delta_0 = -kR < 0$

$$r \left(\frac{\delta_0}{4}\right)^2 4\pi = \text{Größe des Streuzentrums}$$

Allgemein:

- Abstoßendes Potential $\delta < 0$
- Anziehendes Potential $\delta > 0$

9.7.08

7) Behandlung der Streutheorie durch Integralgleichung

1) Greensche Fkt

Lineare inhomogene DGL: $\mathcal{D}\psi(x) = f(x)$ (*)

gesucht sei $\psi(x)$ gegeben $f(x): \mathcal{D}$

speziell $f(x) = \delta(x - x')$

Dgl: $\mathcal{D}G(x, x') = \delta(x - x')$ Lsg: $G_e =$ Greensche Fkt zum D'Alambertschen D.

allgemeine Lösung von (*):

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int dx' G(x, x') f(x')$$

ψ_0 : eine beliebige Lösung der homogenen Dgl: $\mathcal{D}\psi_0(x) = 0$

ψ_0 wird im allgemeinen durch die Anfangsbedingungen festgelegt.

Streutheorie: Schröd. gl.: $(\nabla^2 + k^2) u(\vec{r}) = U_{eff}(r) u(\vec{r})$

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad U_{eff}(r) = \frac{2\mu V}{\hbar^2}$$

Umformung in Integralgleichung:

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

∇^2 ist translationsinvariant $\Rightarrow G(\vec{x} - \vec{x}')$

$$\vec{y} = \vec{x} - \vec{x}'$$

$$\tilde{y}(\vec{q}) = \int \frac{d\vec{y}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} y(\vec{y}) e^{-i\vec{q}\vec{y}}$$

$$(-\vec{q}^2 + k^2) \tilde{y}(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{q}\vec{y} \cos \theta}$$

Rücktransformation: $y(\vec{y}) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{q}\vec{y}} \left(\frac{1}{-\vec{q}^2 + k^2} \right) \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{iy} \int_{-\infty}^{\infty} dq q e^{iqy} \frac{1}{q^2 - k^2}$$

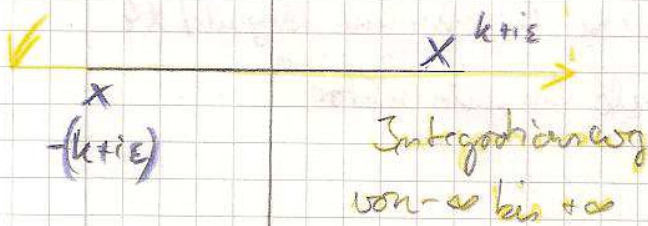
Pole des Integranden bei $q = \pm k$

Integrationsvorschrift muss spezifiziert werden.

$\Rightarrow \varepsilon$ -Vorschrift

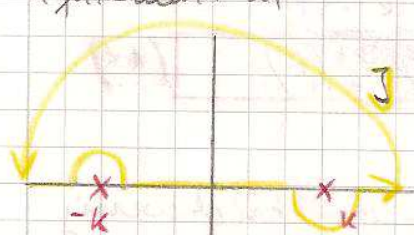
$$y_{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{iy} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{iqy} \frac{1}{q^2 - k^2 \pm i\varepsilon}$$

Für y_{+} Pol bei $q = \pm \sqrt{k^2 + i\varepsilon} = \pm k \sqrt{1 + \frac{i\varepsilon}{k^2}} = \pm k \left(1 + \frac{i\varepsilon}{2k^2}\right) \hat{=} \pm (k + i\varepsilon)$



Der Integrationsweg kann in der oberen Halbebene geschlossen werden denn e^{iqy} fällt für komplexe q mit + pos. Imaginärteil exponentiell ab.

äquivalent zu



Residuennab

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{I} = (2\pi i) \sum \text{Residuen} \hat{=} \text{Funktionswert an der Stelle}$$

mit $(q^2 - k^2) = (q+k)(q-k)$

$$y_{+}(y) = -\frac{1}{(2\pi)} \frac{1}{y} \left(\frac{q e^{iqy}}{q+k} \right) \Big|_{q=k} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iky}}{y} = y_{+}(y) = y_{-}^{*}(y)$$

1) für y_{-} hatten wir $-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iky}}{y}$ erhalten

2) für $k=0 \hat{=} \text{Problem aus der Elektrostatik:}$

$$\vec{\nabla} \phi = 4\pi \delta(\vec{x}) : \quad \phi = \frac{1}{|\vec{x}|}$$

3) $y_{+} \hat{=} \text{auslaufende Welle, } y_{-} \hat{=} \text{einlaufende Welle}$

4) y_{+} und $y_{-} \Rightarrow \text{vollständiges System}$

5) $\psi_+ \pm \psi_- =$ stehende Welle

2) von der Schrödinger-Gleichung \rightarrow Integralgleichung

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi_k(\vec{r})$$

Formale Lösung:

$$\psi_k^+(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \int d\vec{r}' G_+(\vec{r}-\vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

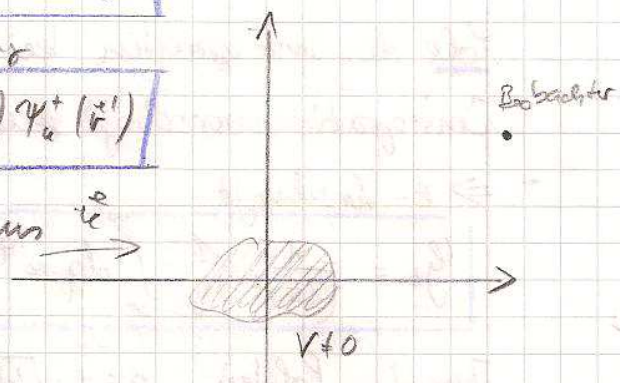
G_+ eingesetzt: Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\psi_k^+(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

$\hbar k$ ist der Impuls des einfallenden Teilchens \vec{v}

\vec{r} ist der Ort des Beobachters

$V(\vec{r})$ sei in der Nähe des Ursprungs lokalisiert



Verhalten für ψ bei großem \vec{r}

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

Das vom Beobachter am Ort \vec{r} gemessene Teilchen hat Impuls $\hbar k$ und Richtung $\frac{\vec{r}}{r}$, also $\hbar k \equiv \hbar k \frac{\vec{r}}{r}$ als Impulsvektor.

$$\frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \xrightarrow{|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}$$

$$\psi^+(\vec{r}) \Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi r} e^{i\vec{k}\vec{r}} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')$$

$$\text{Streuamplitude: } f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') \quad (**)$$

3) Bornsche Näherung

Streuung bei hoher Energie: Amplitude unterscheidet sich wenig von ebener Welle

\Rightarrow Lippmann-Schwinger-Gleichung lässt sich näherungsweise lösen

iterativ: Startwert $\psi_k^+(\vec{r})|_1 = e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$$\psi_k^+(\vec{r})|_2 = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}')|_1$$

$$\psi_k^+(\vec{r})|_3 = \dots \quad |_2$$

Resultat für Streuamplitude aus (**)

$$\text{Niedrigste Ordnung: } f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' V(\vec{r}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'}$$

Bornsche Näherung

Hinweis: bei 1. Näherung Wirkungsquerschnitt = 0 bei positivem k
 \Rightarrow optisches Theorem gilt in 2. Ordnung erst wieder

Beispiel: Yukawa Potential: $V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}$

$$f(\theta, r) = \frac{-2V_0 \frac{m}{\hbar^2}}{(k^2 - k'^2) + \alpha^2}; \quad \int_0^r e^{i\alpha r'} V(r') dr' = V_0 \frac{4\pi}{\alpha^2 + \alpha'^2}$$

$$(k^2 - k'^2) \stackrel{!}{=} k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta = 2k^2(1 - \cos \theta) = (2k \sin \frac{\theta}{2})^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |\mathcal{F}|^2 = \frac{4V_0^2 m^2}{\hbar^4 [(2k \sin \frac{\theta}{2})^2 + \alpha^2]^2}$$

Spezialfall: $\alpha \rightarrow 0 \Rightarrow$ Coulombpotential

Singularität bei $\theta = 0$

IX Zeitunabhängige Störungstheorie

A) Methode

H sei zeitunabhängig

$H = H_0 + W$, wobei Eigenwert und Eigenzustände von H_0 bekannt sind.

(z.B. $H_0 \stackrel{!}{=} \text{Coulombpotential}$, aber $H_0 \neq 0$)

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle, \quad \text{Index } p \text{ zählt die Niveaus}$$

Index i zählt die Entartung

Index 0 : ungestörtes Problem

Annahme: $|\varphi_p^i\rangle$ sind orthonormiert und vollständig

Matrixelemente von W seien klein gegen die charakteristischen Energie differenzen $E_p^0 - E_{p'}^0$.

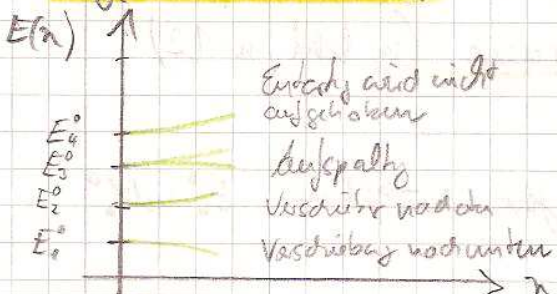
Zusatz: $W = \eta \hat{W}$

η : Entwicklungsparameter, reelles $\neq 1$

\hat{W} : Matrixelemente von $O(E_p^0 - E_{p'}^0)$

Eigenwerte und Zustände sollen als Funktion von η bestimmt werden, ausgedrückt durch E_p^0 und $|\varphi_p^i\rangle$.

Typisches Verhalten:



E_4^0 : 2-fach entartet

E_3^0 : 2-fach entartet

E_1^0 und E_2^0 nicht entartet

E_n^0

Ausgangspunkt:

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$$

Potenzreihenansatz:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \dots + \lambda^q \varepsilon_q + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \dots + \lambda^q |q\rangle + \dots$$

• $|0\rangle$ steht nicht für den Grundzustand sondern für die niedrigste Näherung

• Jedes der $|0\rangle, |1\rangle, \dots$ ist Linearkombination aus den $|\varphi'_p\rangle$

Berechne ε_q und $|q\rangle$:

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) \left(\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right) = \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q \right] \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right]$$

Koeffizientenvergleich:

Nullte Ordnung: $H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$ (0a)

allgemein Ordnung q : $(H_0 |q\rangle + \hat{W} |q-1\rangle) - \sum_{k=0}^q \varepsilon_k |k\rangle = 0$

speziell: $H_0 |1\rangle + \hat{W} |0\rangle - (\varepsilon_1 |0\rangle + \varepsilon_0 |1\rangle) = 0$ (1a)

$$H_0 |2\rangle + \hat{W} |1\rangle - (\varepsilon_2 |0\rangle + \varepsilon_1 |1\rangle + \varepsilon_0 |2\rangle) = 0$$
 (2a)

Normierung und Phase von $|\psi(\lambda)\rangle$:

1) $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1$ Norm

2) $\langle 0 | \psi(\lambda) \rangle = \text{reell}$

0. Ordnung: $\psi(\lambda) = |0\rangle$ aus 1) $\Rightarrow \langle 0 | 0 \rangle = 1$

1. Ordnung: aus 1) $(\langle 0 | + \lambda \langle 1 |) (|0\rangle + \lambda |1\rangle) = 1 \Rightarrow \lambda (\langle 1 | 0 \rangle + \langle 0 | 1 \rangle) = 0 + \mathcal{O}(\lambda^2)$

aus 2): $\langle 0 | 2 \rangle = \langle 2 | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \langle 1 | 1 \rangle$ (2b) $\langle 0 | 1 \rangle = 0$ (1b)

allgemein: $\langle 0 | q \rangle = \langle q | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{q-1} \langle m | q-m \rangle$

Warum ist die Summe reell?

Im der 0. Ordnung verwenden wir (0a) + (0b)

1. Ordng " " (1a) + (1b) ...

B) Störung eines nicht entarteten Niveaus (im Bild $n=1,2$)

Ausgangspunkt: $H_0 |p_n\rangle = E_n^0 |p_n\rangle$

0. Ordnung: Eigenwert und -zustand sollen für $\lambda \rightarrow 0$ mit E_n^0 und $|p_n^0\rangle$ zusammen fallen.

Gleichung (0a): $\boxed{E_0 = E_n^0}$ $\boxed{|0\rangle = |p_n\rangle}$ legt die Phasenkonvention für $|0\rangle$ fest

1. Ordnung:

a) Energie: multipliziere (1a) von links mit dem ungestörten Zustand $\langle p_n | = \langle 0 |$

$$\boxed{\langle p_n | H_0 | 1 \rangle + \langle p_n | \hat{W} | p_n \rangle - (\underbrace{E_0 \langle p_n | p_n \rangle}_1 + \underbrace{E_0 \langle p_n | 1 \rangle}_{\langle 0 | 1 \rangle}) = 0}$$

$\underbrace{E_0 \langle 0 | 1 \rangle}_{(1b) \rightarrow 0}$

$$\boxed{E_1 = \langle p_n | \hat{W} | p_n \rangle}$$

Zusammen: $\boxed{E_n(n) = E_n^0 + \langle p_n | W | p_n \rangle + O(n^2)}$

genügt häufig!

b) Zustand ($|p_n^i\rangle$ sind die Zustände des ungestörten Problems)

Multipliziere (1a) von links mit $\langle p_p^i |$, $p \neq n$

$$\boxed{\langle p_p^i | H_0 | 1 \rangle + \langle p_p^i | \hat{W} | 0 \rangle - (E_1 \underbrace{\langle p_p^i | 0 \rangle}_0 + E_0 \langle p_p^i | 1 \rangle) = 0}$$

$$E_p \langle p_p^i | 1 \rangle + \langle p_p^i | \hat{W} | 0 \rangle - E_0 \langle p_p^i | 1 \rangle = 0$$

$$\boxed{\langle p_p^i | 1 \rangle = \langle p_p^i | \hat{W} | 0 \rangle \cdot \frac{1}{E_0 - E_p}} \quad p \neq n!$$

und $\boxed{\langle p_n | 1 \rangle = 0}$ siehe oben (1b)

alle Matrixelemente und Zustände aus vollständigen Systemen und bekannt.

$$\boxed{p_n(n) = |p_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i (|p_p^i\rangle \langle p_p^i | W | p_n \rangle) \cdot \frac{1}{E_0 - E_p}}$$

2) Energie-Korrektur in 2. Ordnung

Gleichung (2a) von links mit $\langle p_n | = \langle 0 |$ multiplizieren:

$$E_0 \langle 0 | 2 \rangle + \langle 0 | \hat{W} | 1 \rangle - (E_2 \langle 0 | 0 \rangle + \underbrace{E_1 \langle 0 | 1 \rangle}_0 + E_0 \langle 0 | 2 \rangle) = 0$$

$$E_2 = \langle 0 | \hat{W} | 1 \rangle$$

\hookrightarrow aus Abschnitt 1b) positiv

$$\Rightarrow \boxed{E_n(n) = E_n^0 + \langle p_n | W | p_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \langle p_n | W | p_p^i \rangle \times \langle p_p^i | W | p_n \rangle \cdot \frac{1}{E_0 - E_p}}$$

Zusatz in 2. Ordnung...

Abschätzung des Fehlers wegen Vernachlässigung 2. Ordnung

Zähler ist positiv, Nenner $|E_0 - E_p| > \min |E_0 - E_p| = \Delta E$

$$\sum_{i \neq p} |\langle \varphi_p^i | \langle \varphi_p^i | = 1 - |\langle \varphi_n | \langle \varphi_n | \quad p \neq n$$

Korrektur 2. Ordnung $E < \frac{1}{\Delta E} (\langle \varphi_n | \hat{W}^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle)^2)$

c) Störungstheorie bei g_n -facher Entartung

Problem: Wahl der Basis-Vektoren im g_n -dem Eigenraum von E_n ist nicht eindeutig.

Ausgangspunkt: Gleichung (1a) multipliziert mit $\langle \varphi_n^i |$, $i = 1, \dots, g_n$

$$\langle \varphi_n^i | H_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle - (\varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle + \varepsilon_0 \langle \varphi_n^i | 1 \rangle) = 0$$

$$E_n^0 \langle \varphi_n^i | 1 \rangle$$

$$\langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle - \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle = 0 \quad (*)$$

$|0\rangle$ muss eine Linearkombination der g_n Zustände $|\varphi_n^i\rangle$ sein.

$|0\rangle = \sum_{j=1}^{g_n} |\varphi_n^j\rangle \langle \varphi_n^j | 0 \rangle$ einsetzen in (*)

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^j \rangle \langle \varphi_n^j | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$(g_n \times g_n)$ Matrix Spaltenvektor Vektor der Diagonal

kurze:

$$\sum_j W_{ij} \gamma_j = \varepsilon_1 \gamma_i \quad \text{Eigenwertproblem}$$