

---

**Skriptum zur Vorlesung**  
**Theoretische Physik III**  
**(Quantenmechanik)**

---

WS 1995/1996

WS 2004/2005

Prof. Dr. Ulrich Eckern

Lehrstuhl für Theoretische Physik II

Institut für Physik

Universität Augsburg

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Vorbemerkungen</b>	<b>4</b>
<b>1</b>	<b>Photonen</b>	<b>8</b>
1.1	Darstellung der Polarisationszustände [§ 1] . . . . .	8
1.2	Basistransformationen [§ 2] . . . . .	11
1.3	Drehimpuls [§ 3] . . . . .	12
1.4	Amplitudenmechanik [§ 4] . . . . .	15
1.5	Unpolarisiertes Licht [§ 5] . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Bewegung von Teilchen in der Quantenmechanik</b>	<b>20</b>
2.1	Die Schrödinger-Gleichung [§ 6] . . . . .	20
2.2	Zustände, Operatoren, Unschärferelation [§ 7] . . . . .	23
2.3	Freie Teilchen [§ 8] . . . . .	27
2.4	Wegintegrale [§ 9] . . . . .	30
2.5	Magnetfeld, Aharonov-Bohm-Effekt [§ 10] . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Lösungen der Schrödinger-Gleichung</b>	<b>34</b>
3.1	Stufen, Barrieren, Tunneln [§ 11] . . . . .	34
3.2	Harmonischer Oszillator [§ 12] . . . . .	36
3.3	Gebundene Zustände, Resonanzen [§ 13] . . . . .	39
3.4	Kronig-Penney-Modell [§ 14] . . . . .	43
3.5	Periodische Potentiale [§ 15] . . . . .	46
3.6	Bilder, Zeitentwicklungsoperator [§ 16] . . . . .	47
3.7	Propagator, Wegintegraldarstellung [§ 17] . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Drehimpuls, Zentralpotential</b>	<b>52</b>
4.1	Kommutatoren, Eigenfunktionen [§ 18] . . . . .	52
4.2	Drehungen [§ 19] . . . . .	54
4.3	Kugel(flächen)funktionen [§ 20] . . . . .	56
4.4	Zentralkräfte [§ 21] . . . . .	60
4.5	Wasserstoffatom [§ 22] . . . . .	63

---

<b>5</b>	<b>Spin</b>	<b>67</b>
5.1	Spin-1/2: Einführung [§ 23]	67
5.2	Bloch-Gleichungen, Spin-Resonanz [§ 24]	70
5.3	Gesamtwellenfunktion [§ 25]	73
5.4	Inhomogenes Magnetfeld [§ 26]	76
5.5	Addition von Spins [§ 27]	78
<b>6</b>	<b>Näherungsmethoden</b>	<b>82</b>
6.1	Quasiklassische Näherung [§ 28]	82
6.2	Variationsverfahren [§ 29]	85
6.3	Zeitunabhängige Störungstheorie (nicht entartet) [§ 30]	86
6.4	Zeitunabhängige Störungstheorie (entartet) [§ 31]	89
6.5	Übergänge unter dem Einfluss von Störungen [§ 32]	92
6.6	Induzierte optische Übergänge [§ 33]	95
<b>7</b>	<b>Systeme identischer Teilchen</b>	<b>100</b>
7.1	Bosonen und Fermionen [§ 34]	100
7.2	Zustandsfunktion zweier Elektronen [§ 35]	102
7.3	Zweite Quantisierung [§ 36]	104
<b>8</b>	<b>Streutheorie</b>	<b>110</b>
8.1	Problemstellung [§ 37]	110
8.2	Bornsche Näherung [§ 38]	112
8.3	Partialwellenzerlegung [§ 39]	114

# Kapitel 0

## Vorbemerkungen

Obwohl die *klassische Physik* (Mechanik, Elektrodynamik, spezielle Relativitätstheorie) viele Phänomene in der Natur ausreichend beschreibt, gibt es natürlich auch viele Sachverhalte, die nicht oder nicht befriedigend erklärt werden können. Beispiele finden sich in der Atomphysik (Periodensystem, Atomspektren, Photoeffekt), Chemie und Molekülphysik (Form und Größe von Molekülen, chemische Bindung), Festkörperphysik/Physik makroskopischer Systeme (Hohlraumstrahlung, Temperaturabhängigkeit spezifischer Wärmen, elektrische Leitfähigkeit, Supraleitung, Ferromagnetismus), Kernphysik (Stabilität der Kerne, radioaktiver Zerfall, Kernspaltung und -fusion), Elementarteilchenphysik (Massenspektrum, magnetische Momente, Zerfälle, Wechselwirkungen).

Wesentliche Aspekte der Quanten- bzw. Wellenmechanik sind die Quantisierung vieler physikalischer Größen ( $E = \hbar\omega$ ), der Wellencharakter klassischer Teilchen bzw. der Teilchencharakter klassischer Wellen (z. B. Interferenzen von Elektronenwellen im Doppelspalt-Experiment und Aharonov-Bohm-Effekt), die Unschärferektion (manche Größen können nicht gleichzeitig beliebig genau gemessen werden,  $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ ), der intrinsische Wahrscheinlichkeitscharakter einer Messung. Allerdings ist das Messen bzw. der Messprozess ein Problem: *Die Quantenmechanik nimmt also eine sehr eigenartige Stellung unter den physikalischen Theorien ein: Sie enthält die klassische Mechanik als Grenzfall und bedarf gleichzeitig dieses Grenzfalls zu ihrer eigenen Begründung.* (Landau-Lifschitz, Bd. III, §1) Der klassische Grenzfall wird formal durch  $\hbar \rightarrow 0$  erreicht.

Das folgende Skriptum, das im Wesentlichen auf dem Buch von Gordon Baym – dem auch die meisten Bilder entnommen sind – basiert, fasst den Stoff von etwa 30 Vorlesungs(doppel)stunden zusammen. Die Vorlesung wurde ergänzt und vertieft durch etwa 14 Übungs(doppel)stunden.

Ich danke insbesondere meiner Sekretärin, Frau Colleen Wunsch, die die erste (WORD-)Version dieses Skripts in eine schöne Form gebracht hat, sowie den Übungsassistenten der Vorlesung für ihre Anregungen. Mein herzlicher Dank gilt schließlich Herrn Bernd Pinzer, der die vorliegende T<sub>E</sub>X-Version erstellt hat.

Augsburg, 1996/2004

Ulrich Eckern

# Literaturverzeichnis

- [1] • G. Baym: *Lectures on Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, 1969, 1973)
- [2] D. I. Blochinzew: *Grundlagen der Quantenmechanik* (Harri Deutsch, 1988)
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe: *Quantum Mechanics*, Bd. I & II (Wiley, 1977)
- [4] F. Constantinescu, E. Magyari: *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon Press, 1985)
- [5] A. S. Davydov: *Quantum Mechanics* (Pergamon, 1976)
- [6] P. A. M. Dirac: *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford University Press, 1930 etc.)
- [7] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: *The Feynman Lectures on Physics*, Bd. III (Addison-Wesley, 1965)
- [8] R. P. Feynman, A. R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, 1965)
- [9] E. Fick: *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie* (Aula-Verlag, 1988)
- [10] • T. Fließbach: *Quantenmechanik* (Spektrum Akademischer Verlag, 1991, 1995, 2000 [3. Auflage])
- [11] S. Flügge: *Rechenmethoden der Quantentheorie/Practical Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, 1971, 1974)
- [12] S. Gasiorowicz: *Quantum Physics* (Wiley, 1974)
- [13] K. Gottfried: *Quantum Mechanics* (Benjamin, 1966)
- [14] G. Grawert: *Quantenmechanik* (Aula-Verlag, 1989)

- [15] W. Greiner: *Theoretische Physik*, Bd. 4: *Quantenmechanik*, Bd. 5: *Quantenmechanik II/Symmetrien* (Harri Deutsch, 1979)
- [16] L. D. Landau, E. M. Lifschitz: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Bd. III (Akademie-Verlag, 1965, 1974)
- [17] E. Merzbacher: *Quantum Mechanics* (Wiley, 1961)
- [18] A. Messiah: *Quantum Mechanics*, Bd. I & II (de Gruyter, 1991)
- [19] J. v. Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantentheorie* (Springer-Verlag, 1981)
- [20] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik*, Bd. 5, *Quantenmechanik*, Teil 1 & 2 (Zimmermann-Neufang, 1994 [2. Auflage])
- [21] J. J. Sakurai: *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, 1985)
- [22] F. Schwabl: *Quantenmechanik* (Springer-Verlag, 1990)

Dem folgenden Skript liegt im Wesentlichen das Buch von *Gordon Baym* zugrunde, das aber leider nicht mehr gedruckt wird. Auch das Buch von *Torsten Fließbach* deckt den Vorlesungsstoff recht gut ab (Preis: 30 €).

Zum Kauf – und zum Verschenken! – sei außerdem empfohlen: G.-L. Ingold, *Quantentheorie*, Verlag C. H. Beck, 2002, 7,90 €, ca. 130 Seiten (siehe auch <http://www.physik.uni-augsburg.de/theo1/ingold/>).

# Kapitel 1

## Photonen

### 1.1 Darstellung der Polarisationszustände [§ 1]

(a) Wir gehen aus von klassischen elektromagnetischen Wellen und deren Propagation im Vakuum. Zur Vereinfachung sei im Folgenden  $\mathbf{k} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ . Der Vektor des elektrischen Feldes ist dann

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} E_x(z, t) \\ E_y(z, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.1.1)$$

während das Magnetfeld (in Gaußschen Einheiten) einfach durch

$$\mathbf{H} = \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{E} \quad (1.1.2)$$

gegeben ist. Der Betrag des Wellenvektors,  $k = |\mathbf{k}|$ , hängt gemäß  $k = 2\pi/\lambda$  mit der Wellenlänge  $\lambda$  zusammen; außerdem muss  $\omega = ck$  gelten, wobei  $c$  die Lichtgeschwindigkeit ist. Die Komponenten des elektrischen (und entsprechend des magnetischen) Feldes lassen sich z. B. als Realteil der folgenden komplexen Größen gewinnen:

$$E_x(z, t) = E_x e^{i(kz - \omega t)}, \quad E_y(z, t) = E_y e^{i(kz - \omega t)} \quad (1.1.3)$$

wobei  $E_x$  und  $E_y$  (eventuell komplexe) Konstanten sind.

(b) Wir definieren jetzt die verschiedenen Polarisationszustände des Lichts:

- (i)  $E_y = 0$ : linear polarisiert in  $x$ -Richtung
- (ii)  $E_x = 0$ : linear polarisiert in  $y$ -Richtung
- (iii)  $E_x = E \cos \vartheta$ ,  $E_y = E \sin \vartheta$ : linear polarisiert in  $\vartheta$ -Richtung
- (iv)  $E_y = iE_x$ : rechts zirkular polarisiert
- (v)  $E_y = -iE_x$ : links zirkular polarisiert



Als nächstes betrachten wir die Energiedichte des Feldes,

$$\varepsilon = \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2}{8\pi}, \quad (1.1.4)$$

wobei offensichtlich der elektrische und der magnetische Beitrag gleich groß sind. Außerdem mitteln wir sofort über einen Raumbereich, d. h. ein Volumen  $V$ , das groß (in allen Richtungen) gegenüber der Wellenlänge ist. Ergebnis:

$$\varepsilon_{\text{tot}} = \int_V d^3r \varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{|\mathbf{E}|^2 \cdot V}{8\pi} \quad (1.1.5)$$

mit  $|\mathbf{E}|^2 = |E_x|^2 + |E_y|^2$ , d. h.  $|\mathbf{E}|^2/8\pi$  ist die mittlere Energie pro Volumen (= Energiedichte).

(c) Filter. Licht, mit  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$  wie gerade beschrieben, treffe nun auf einen Filter, der nur in  $x$ -Richtung polarisiertes Licht durchlässt. Dann ist hinter dem Filter die elektrische Feldstärke gegeben durch  $\mathbf{E}' = (E_x, 0, 0)$  und damit die Energie der Welle um den Faktor

$$\frac{|E_x|^2}{|E_x|^2 + |E_y|^2} = \frac{|E_x|^2}{|\mathbf{E}|^2} \quad (1.1.6)$$

reduziert.

Wir wollen diesen Effekt „quantenmechanisch“ diskutieren (Planck, 1900; Einstein, 1905). Danach besteht Licht aus Quanten, *Photonen*, die die Energie  $\hbar\omega$  tragen:

$$\varepsilon_{\text{tot}} = N \cdot \hbar\omega, \quad \varepsilon'_{\text{tot}} = N' \cdot \hbar\omega \quad (1.1.7)$$

mit  $N'/N = |E_x|^2/|\mathbf{E}|^2$ . Wie können wir aber verstehen, dass von  $N$  identischen Photonen nur  $N' < N$  durch den Filter gelassen werden? Wir interpretieren das Ergebnis so, dass wir sagen, für jedes Photon gibt es eine bestimmte *Wahrscheinlichkeit*, den Filter zu durchdringen. Zum Beispiel ist diese, für  $E_x = E \cos \vartheta$ ,  $E_y = E \sin \vartheta$ , gerade durch  $\cos^2 \vartheta$  gegeben. Entsprechend lässt sich ein Filter diskutieren, der nur (rechts oder links) zirkular polarisiertes Licht durchlässt.

(d) Zustandsvektoren. Der Zustandsvektor eines Photons wird nun wie folgt definiert:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{pmatrix} \quad (1.1.8)$$

mit  $\Psi_x = (V/8\pi\hbar\omega)^{1/2} E_x$  und entsprechend für  $\Psi_y$ . Dieser Vektor ist normiert:  $|\Psi_x|^2 + |\Psi_y|^2 = 1$ , unabhängig vom Volumen, und legt den Polarisationszustand fest:

(i)  $|x\rangle = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ : linear in  $x$ -Richtung

- (ii)  $|y\rangle = e^{i\beta} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ : linear in  $y$ -Richtung
- (iii)  $|\vartheta\rangle = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \vartheta \\ \sin \vartheta \end{pmatrix}$ : linear in  $\vartheta$ -Richtung
- (iv)  $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ : rechts zirkular
- (v)  $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}$ : links zirkular

Mit dem Spaltenvektor  $|\Psi\rangle$  assoziieren wir weiter einen Zeilenvektor  $\langle\Psi| = (\Psi_x^*, \Psi_y^*)$ , wobei das Sternchen „konjugiert komplex“ bedeutet. Außerdem sei ein Skalarprodukt definiert:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \Phi_x^* \Psi_x + \Phi_y^* \Psi_y \quad (1.1.9)$$

Insbesondere ist der Zustandsvektor normiert,  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ , z. B.  $\langle x|x\rangle = 1$ ,  $\langle R|R\rangle = 1$  und es gilt

$$\langle x|y\rangle = 0, \quad \langle R|L\rangle = 0, \quad (1.1.10)$$

d. h.  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$ , und  $|R\rangle$ ,  $|L\rangle$ , sind jeweils orthogonal zueinander. Weiterhin bilden  $\{|x\rangle, |y\rangle\}$  und  $\{|R\rangle, |L\rangle\}$  eine Basis:

$$|\Psi\rangle = \Psi_x |x\rangle + \Psi_y |y\rangle \quad (1.1.11)$$

bzw.

$$|\Psi\rangle = \frac{\Psi_x - i\Psi_y}{\sqrt{2}} |R\rangle + \frac{\Psi_x + i\Psi_y}{\sqrt{2}} |L\rangle. \quad (1.1.12)$$

Aus (1.1.11) ergibt sich, durch „Multiplikation“ mit  $\langle x|$ , sofort  $\langle x|\Psi\rangle = \Psi_x$  etc. Somit können wir diese Gleichung auch anders schreiben:

$$|\Psi\rangle = |x\rangle \langle x|\Psi\rangle + |y\rangle \langle y|\Psi\rangle \quad (1.1.13)$$

oder auch:

$$|\Psi\rangle = |R\rangle \langle R|\Psi\rangle + |L\rangle \langle L|\Psi\rangle \quad (1.1.14)$$

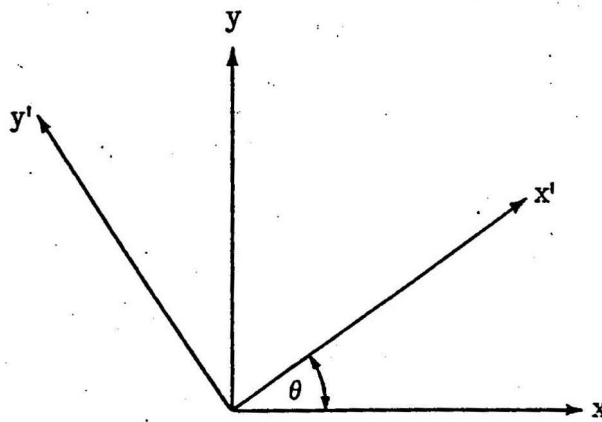
Für den diskutierten zweidimensionalen Fall lässt sich alles anhand von  $2 \times 2$ -Matrizen nachrechnen. Kehren wir nun zu (1.1.6) zurück, ist die Durchgangswahrscheinlichkeit offensichtlich durch

$$|\langle x|\Psi\rangle|^2 \quad (1.1.15)$$

gegeben. Wir nennen  $\langle x|\Psi\rangle$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude der in  $x$ -Richtung polarisierten Komponente von  $|\Psi\rangle$ ; ihr Betragsquadrat gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen  $x$ -Filter zu durchdringen.

Für  $\langle \dots |$  und  $|\dots\rangle$  ist die Bezeichnung „bra“ und „ket“ geläufig.

Abbildung 1.1:



**Fig. 1-2**  
Rotation of plane polarized basis by angle  $\theta$ .

## 1.2 Basistransformationen [§ 2]

(a) Wir untersuchen jetzt, wie sich die Komponenten eines Zustandsvektors  $|\Psi\rangle$  bei einem Basiswechsel verhalten,  $\{|x\rangle, |y\rangle\} \rightarrow \{|x'\rangle, |y'\rangle\}$ .

Dazu gehen wir aus von der Identität

$$|\Psi\rangle = |x\rangle\langle x|\Psi\rangle + |y\rangle\langle y|\Psi\rangle \quad (1.2.1)$$

und nehmen das Skalarprodukt mit  $\langle x'|$  bzw.  $\langle y'|$ . Das Ergebnis ist

$$\begin{pmatrix} \Psi_{x'} \\ \Psi_{y'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle x'|x\rangle & \langle x'|y\rangle \\ \langle y'|x\rangle & \langle y'|y\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_x \\ \Psi_y \end{pmatrix}, \quad (1.2.2)$$

wobei natürlich diese Matrix als Transformationsmatrix bezeichnet wird. Für das angegebene Beispiel (siehe Abb. 1.1) kennen wir (aus elementarer Vektorrechnung) das Resultat:

$$|x\rangle = \cos \vartheta |x'\rangle - \sin \vartheta |y'\rangle \quad (1.2.3)$$

$$|y\rangle = \sin \vartheta |x'\rangle + \cos \vartheta |y'\rangle \quad (1.2.4)$$

Hier lässt sich die Transformationsmatrix (hier auch: Drehmatrix)  $\hat{R}(\vartheta)$  ablesen:

$$\hat{R}(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ -\sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (1.2.5)$$

Gl. (1.2.2) lässt sich verschieden interpretieren.  $\Psi_{x'}$  und  $\Psi_{y'}$  sind (i) die Komponenten von  $|\Psi\rangle$  in dem um  $\vartheta$  gedrehten Koordinatensystem, aber auch (ii) die Komponenten des Vektors  $|\Psi'\rangle$ , der aus  $|\Psi\rangle$  durch Drehung um  $-\vartheta$  hervorgeht.

(b) Wenn wir einen Vektor  $|\Psi\rangle$  mit der Matrix  $\hat{R}$  transformieren, haben die neuen Komponenten im Allgemeinen mit den alten keine Ähnlichkeit - außer wenn es sich um Eigenvektoren handelt:

$$\hat{R}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad (1.2.6)$$

Hier heißt  $\lambda$  Eigenwert. Das Standardverfahren zur Bestimmung von  $\lambda$  führt auf

$$\det(\hat{R} - \lambda\mathbb{1}) \quad (1.2.7)$$

wobei hier (und auch gelegentlich sonst) explizit der Einheitsoperator (Einheitsmatrix) ausgeschrieben wurde. Wir definieren weiter den Spinoperator (-matrix)  $\hat{S}$  eines Photons (in der  $x$ - $y$ -Basis):

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.8)$$

mit dem sich  $\hat{R} = \cos\vartheta \cdot \mathbb{1} + i \sin\vartheta \cdot \hat{S}$  schreiben lässt, und bestimmen zuerst die Eigenwerte und -vektoren von  $\hat{S}$ . Wir rechnen leicht nach, dass  $\hat{S}^2 = \mathbb{1}$ , und daher folgt  $\lambda^2 = 1$  und

$$\lambda = \pm 1. \quad (1.2.9)$$

Außerdem sind die beiden Eigenvektoren gerade durch die schon eingeführten Zustände  $|R\rangle$  und  $|L\rangle$  gegeben:

$$\hat{S}|R\rangle = |R\rangle, \quad \hat{S}|L\rangle = -|L\rangle \quad (1.2.10)$$

d. h. zirkular polarisierte Photonen sind Eigenzustände von  $\hat{S}$  und damit auch von  $\hat{R}$ :

$$\hat{R}|R\rangle = e^{i\vartheta} |R\rangle, \quad \hat{R}|L\rangle = e^{-i\vartheta} |L\rangle. \quad (1.2.11)$$

Ein beliebiger Zustand verhält sich unter der Wirkung von  $\hat{R}$  demnach gerade so, dass die  $R$ -Komponente mit  $e^{i\vartheta}$  und die  $L$ -Komponente mit  $e^{-i\vartheta}$  multipliziert wird:

$$\begin{aligned} \hat{R}|\Psi\rangle &= \hat{R}(|R\rangle\langle R|\Psi\rangle + |L\rangle\langle L|\Psi\rangle) \\ &= e^{i\vartheta} |R\rangle\langle R|\Psi\rangle + e^{-i\vartheta} |L\rangle\langle L|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

### 1.3 Drehimpuls [§ 3]

(a) Wir werden nun zeigen, dass der Spinoperator  $\hat{S}$  direkt mit dem Drehimpuls (entlang der Ausbreitungsrichtung) eines Photons verknüpft ist, gemäß

$$L_z = \hbar\langle\Psi|\hat{S}|\Psi\rangle. \quad (1.3.1)$$

Dazu erinnern wir an den klassischen Ausdruck (siehe Elektrodynamik) für die Impulsdichte des elektromagnetischen Feldes:

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi c} \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (1.3.2)$$

Dies ist im übrigen gleich der Energiestromdichte (Poynting-Vektor) dividiert durch  $c^2$ . Dann ist

$$\mathbf{L} = \int d^3r \mathbf{r} \times \mathbf{p}(\mathbf{r}, t). \quad (1.3.3)$$

Setzen wir nun in (1.3.2) eine ebene Welle ein, ist offensichtlich  $\mathbf{p} \parallel \hat{\mathbf{z}}$  und damit  $L_z = 0$ . Dieses Resultat gilt aber nur, wenn der ganze Raum mit einer ebenen Welle gefüllt ist - das ist keine realistische Lösung. Wenn der Lichtstrahl auf ein endliches Volumen beschränkt ist, wird  $\mathbf{p}$ , um die Maxwell-Gleichungen zu erfüllen, in der Nähe der Oberfläche auch eine  $x$ - $y$ -Komponente haben. Zur Berechnung formen wir (1.3.3) um mit Hilfe des (transversalen) Vektorpotentials: Wegen  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$  können wir schreiben:

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \quad (1.3.4)$$

Wir ersetzen  $\mathbf{H}$  in (1.3.2) bzw. (1.3.3) durch  $\nabla \times \mathbf{A}$ , integrieren partiell (Oberfläche nach unendlich schieben!), und finden

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r \left[ \mathbf{E} \times \mathbf{A} + \sum_{\alpha} E_{\alpha} (\mathbf{r} \times \nabla) A_{\alpha} \right]. \quad (1.3.5)$$

Nun ist aber  $(\mathbf{r} \times \nabla)_z = \frac{\partial}{\partial \varphi}$ , wobei  $\varphi$  der Polarwinkel in Zylinderkoordinaten mit Achse entlang  $\hat{\mathbf{z}}$  ist. Das heißt in dem zweiten Term in (1.3.5) gibt es nur Beiträge die von der Oberfläche des Lichtstrahls herrühren, und diese können gegenüber dem ersten Beitrag, der proportional zum Volumen ist, vernachlässigt werden. Achtung: zur Berechnung müssen wir mit reellen Ausdrücken für  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{A}$  arbeiten, und setzen daher z. B.

$$A_x = \frac{c}{\omega} E_x^0 \sin(kz - \omega t + \alpha_x) \quad (1.3.6)$$

$$A_y = \frac{c}{\omega} E_y^0 \sin(kz - \omega t + \alpha_y) \quad (1.3.7)$$

und berechnen

$$L_z = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r [E_x(z, t) A_y(z, t) - E_y(z, t) A_x(z, t)] \quad (1.3.8)$$

mit dem Resultat

$$L_z = \frac{V}{4\pi c} E_x^0 E_y^0 \sin(\alpha_y - \alpha_x). \quad (1.3.9)$$

Mit den Größen  $E_x = E_x^0 e^{i\alpha_x}$ ,  $E_y = E_y^0 e^{i\alpha}$ , die direkt – siehe Kap. 1.1 – mit dem Zustandsvektor verknüpft sind, lässt sich (1.3.9) umschreiben, zunächst zu

$$L_z = \frac{V}{4\pi\omega} (E_x^* E_y - E_x E_y^*) \quad (1.3.10)$$

und dann zu

$$L_z = \frac{V}{4\pi\omega} (|E_{\text{RCP}}|^2 - |E_{\text{LCP}}|^2), \quad (1.3.11)$$

wobei  $E_{\text{RCP}} = (E_x - iE_y)/\sqrt{2}$ ,  $E_{\text{LCP}} = (E_x + iE_y)/\sqrt{2}$  (RCP = rechts zirkular polarisiert, LCP = links zirkular polarisiert). Endergebnis:

$$L_z = \hbar [|\langle R|\Psi\rangle|^2 - |\langle L|\Psi\rangle|^2] \quad (1.3.12)$$

Dies ist identisch mit (1.3.1), wenn wir dort den Einheitsoperator in der Form  $|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|$  einschieben und benutzen, dass  $|R\rangle$  und  $|L\rangle$  Eigenfunktionen zu  $\hat{S}$  sind (siehe Kap. 1.2).

(b) Operatoren und Matrizen. Zum Beispiel ist

$$\hat{S}\mathbb{1} = \hat{S}(|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|) = |R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L|. \quad (1.3.13)$$

Hier und an anderen Stellen verwenden wir das äußere Produkt zweier Vektoren, definiert durch

$$|\Psi\rangle\langle\Phi| = \begin{pmatrix} \Psi_x \Phi_x^* & \Psi_x \Phi_y^* \\ \Psi_y \Phi_x^* & \Psi_y \Phi_y^* \end{pmatrix}. \quad (1.3.14)$$

Zum Beispiel:

$$|x\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |x\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.15)$$

$$|y\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |y\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.3.16)$$

Es ist klar, dass auf diese Weise jedem Operator eine Matrix zugeordnet werden kann,

$$\hat{M} \leftrightarrow \langle i|\hat{M}|j\rangle = M_{ij} \quad (1.3.17)$$

wobei  $\{|i\rangle\}$  ein vollständiger orthonormaler Satz von Zuständen (orthonormale Basis) sein muss. Diese Korrespondenz haben wir bereits mehrmals implizit verwendet. Wir definieren noch den adjungierten Operator  $\hat{M}^+$  zu  $\hat{M}$  wie bei Matrizen über die Matrixelemente:

$$(M^+)_{ij} = M_{ji}^* \quad (1.3.18)$$

Ein Operator heißt selbstadjungiert oder hermitesch wenn  $\hat{M}^+ = \hat{M}$ . Dann sind seine Eigenwerte reell. Multiplikation ist ebenfalls wie bei Matrizen erklärt:

$$\left(\hat{M}\hat{P}\right)_{ij} = \sum_k M_{ik}P_{kj} \quad (1.3.19)$$

(c) Wie können wir nun das Ergebnis (1.3.12) interpretieren? Es ist eine experimentelle Tatsache, dass, wenn ein Photon von Materie absorbiert wird, sich der Drehimpuls (in  $z$ -Richtung) der Materie entweder um  $+\hbar$  oder um  $-\hbar$  ändert, dass man aber nicht voraussagen kann, welches dieser beiden Ereignisse eintritt. Somit müssen wir (1.3.12) bzw. (1.3.1) als *Mittelwert*, gemittelt über viele Experimente gleicher Art, interpretieren. Der Mittelwert ist also gleich  $+\hbar$  mal der Wahrscheinlichkeit  $|\langle R|\Psi\rangle|^2$ , dass sich ein Photon im Zustand  $|\Psi\rangle$  so verhält, als sei es rechts zirkular polarisiert, plus  $-\hbar$  mal der Wahrscheinlichkeit  $|\langle L|\Psi\rangle|^2$ , dass es sich so verhält, als sei es links zirkular polarisiert. Nur im Zustand  $|R\rangle$  oder  $|L\rangle$  hat der Drehimpuls einen *scharfen* Wert.

Wir fassen die Beschreibung der  $z$ -Komponente des Drehimpulses eines Photons zusammen. Dieser Größe entspricht ein Operator,  $\hat{L}_z = \hbar\hat{S}$ . Photonen, die in einem Eigenzustand sind, haben einen scharfen Wert der  $z$ -Komponente des Drehimpulses. In anderen Zuständen hat  $L_z$  keinen scharfen Wert, wir können nur Wahrscheinlichkeiten für  $R$  bzw.  $L$  angeben. Der Mittelwert oder Erwartungswert wird gemessen, wenn viele Experimente mit gleichen Photonen durchgeführt werden.

## 1.4 Amplitudenmechanik [§ 4]

Bei der Diskussion des Photonendrehimpulses hatten wir bereits gesehen, dass  $|\langle R|\Psi\rangle|^2$  die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Photon im Zustand  $|\Psi\rangle$  den Drehimpuls  $+\hbar$  in einem Experiment abgibt. Weiterhin war  $|\langle R|\Psi\rangle|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Photon einen Filter durchdringt, der nur rechts zirkular polarisiertes Licht durchlässt. In beiden Fällen ist dies also die Wahrscheinlichkeit, dass das Photon im Zustand  $|\Psi\rangle$  sich so verhält, als wäre es im Zustand  $|R\rangle$ . Hintergrund dieser Interpretation ist das *Superpositionsprinzip*, ausgedrückt durch die Relation

$$|\Psi\rangle = |R\rangle\langle R|\Psi\rangle + |L\rangle\langle L|\Psi\rangle. \quad (1.4.1)$$

Allgemein: Wird in einem Experiment eine Größe abgefragt („Welchen Drehimpuls hast Du?“), die charakteristisch für einen Zustand  $|\Phi\rangle$  ist, so ist  $|\langle\Phi|\Psi\rangle|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass  $|\Psi\rangle$  sich so verhält, als ob an dessen Stelle der Zustand  $|\Phi\rangle$  vorläge. „Charakteristisch für einen Zustand“ heißt, dass die abgefragte Größe in diesem Zustand einen scharfen Wert hat. Schlampige Ausdrucksweise:  $|\langle\Phi|\Psi\rangle|^2$  ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Photon sich im Zustand  $|\Phi\rangle$  „befindet“. Die Größe  $\langle\Phi|\Psi\rangle$  heißt *Wahrscheinlichkeitsamplitude* für den Zustand  $|\Psi\rangle$  im Zustand  $|\Phi\rangle$  zu sein.

Es ist verlockend zu sagen, dass ein Photon, da es immer  $+\hbar$  oder  $-\hbar$  überträgt, *immer* im Zustand  $|R\rangle$  oder im Zustand  $|L\rangle$  ist (mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten). **Dies ist falsch**, denn mit dieser Interpretation können wir nicht verstehen, warum ein Photon im Zustand  $|x\rangle$  nie durch einen  $y$ -Filter (der nur in  $y$ -Richtung polarisiertes Licht durchlässt) geht:

(a) Ein Photon in  $|x\rangle$  ist mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  in  $|R\rangle$ , und  $|R\rangle$  geht mit Wahrscheinlichkeit  $1/2$  durch einen  $y$ -Filter. Wahrscheinlichkeit also  $= 1/4$ .

(b) Analog für  $|L\rangle$ . Summe (a) und (b) liefert die Gesamtwahrscheinlichkeit  $= 1/2$ . Aber dies ist falsch!

Bei der Wahrscheinlichkeitsbetrachtung wurden gerade die für die Amplitudenmechanik wesentlichen *Interferenzterme* weggelassen. Die korrekte Betrachtung ist die folgende. Wir stellen zunächst  $|x\rangle$  als Superposition von  $|R\rangle$  und  $|L\rangle$  dar,

$$|x\rangle = |R\rangle\langle R|x\rangle + |L\rangle\langle L|x\rangle \quad (1.4.2)$$

und berechnen dann die Amplitude für den Durchgang durch einen Filter:

$$\langle y|x\rangle = \langle y|R\rangle\langle R|x\rangle + \langle y|L\rangle\langle L|x\rangle \quad (1.4.3)$$

Dann erst berechnen wir die Wahrscheinlichkeit,  $|\langle y|x\rangle|^2$  die sich natürlich – aufgrund der Interferenzterme – zu Null ergibt. Wir können (1.4.3) auch anders lesen. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für aufeinander folgende Möglichkeiten ( $x \rightarrow R \rightarrow y$ ,  $x \rightarrow L \rightarrow y$ ) ist das Produkt der Amplituden. Dabei ist über ununterscheidbare Möglichkeiten zu summieren. Formal:

$$\langle x|y\rangle = \langle y|\mathbb{1}|x\rangle = \langle y|(|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|)|x\rangle \quad (1.4.4)$$

und damit ergibt sich (1.4.3).

In diesem Zusammenhang ist „ununterscheidbar“ sehr wichtig. Stellen wir uns zum Beispiel einen Photonenstrahl vor (Zustand  $|\Phi\rangle$ ), der auf ein Prisma trifft, das rechts und links zirkular polarisierte Photonen räumlich aufspaltet. Diese treffen dann auf verschiedene Spiegel, werden in einem zweiten Prisma zusammengeführt und treffen dann auf einen  $x$ -Filter (siehe Bild 1.2):

Wenn ein Photon aus dem  $x$ -Filter austritt, können wir im Prinzip aus dem Rückstoß an den Spiegeln ausrechnen, ob es ein  $R$ - oder ein  $L$ -Photon war! Die Phasenverschiebung auf den beiden Wegen, je nach Stellung der Spiegel, wird aber verschieden sein, d. h. der Zustand hinter dem Prisma B ist nicht mehr  $|\Phi\rangle$ , sondern

$$|\Phi'\rangle = |R\rangle\langle R|\Phi\rangle e^{i\alpha} + |L\rangle\langle L|\Phi\rangle e^{i\beta} \quad (1.4.5)$$

und damit ist die Wahrscheinlichkeit, den Filter zu passieren, gegeben durch  $|\langle x|\Phi'\rangle|^2$ . Wenn wir diese Größe berechnen, finden wir einen Interferenzterm von der Form

$$2\text{Re}\left(\langle x|R\rangle\langle R|\Phi\rangle\langle x|L\rangle^*\langle L|\Phi\rangle^* e^{i(\alpha-\beta)}\right) \quad (1.4.6)$$



Abbildung 1.2:

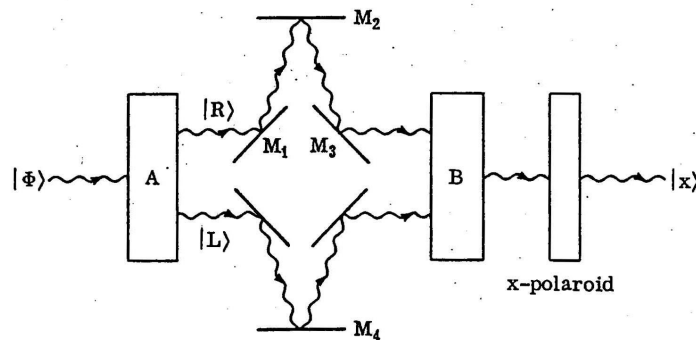


Fig. 1-4

Device for observing whether a photon passes through an x-polaroid as a right or left circularly polarized photon. Prism A splits the beam into right and left circularly polarized components, which are then reflected from mirrors [M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub>, and M<sub>3</sub> for the right circularly polarized component] before being recombined by prism B.

Die „Ort-Impuls-Unschärfe“, auf die wir später noch zurückkommen, bedingt aber nun, dass die Lage der Spiegel unscharf ist – und daher sind  $\alpha$  und  $\beta$  verschmiert. Das Resultat vieler Messungen ist dann der Mittelwert über die Phasen, d. h. der Interferenzterm verschwindet, und wir erhalten das klassische Ergebnis. Durch Anbringen der Spiegel sind die Wege unterscheidbar geworden!

## 1.5 Unpolarisiertes Licht [§ 5]

Bisher haben wir uns nur mit Photonen beschäftigt, die alle in einem wohldefinierten Polarisationszustand sind. Wie können wir aber unpolarisiertes Licht beschreiben? Betrachten wir zum Beispiel einen Lichtstrahl (monochromatisch), dessen Photonen aus zwei unabhängigen Quellen kommen. Die eine Quelle sende Photonen im Zustand  $|\Psi_1\rangle$ , die andere im Zustand  $|\Psi_2\rangle$ . Wenn die Quellen die Photonen zufällig aussenden, können wir nicht sagen, ob ein bestimmtes Photon im Strahl von der einen oder anderen Quelle kommt. Aber unter Umständen kennen wir die Intensität der Quellen, und können damit Wahrscheinlichkeiten  $p_1$  und  $p_2$  angeben, ob ein Photon im Zustand  $|\Psi_1\rangle$  oder  $|\Psi_2\rangle$  ist ( $p_1 + p_2 = 1$ ). Dieser allgemeinere Fall, d. h. wenn  $p_1 \neq 1$ ,  $p_2 \neq 1$ , heißt gemischter Zustand und enthält den bisher diskutierten Fall *eines* Zustands, auch *reiner* Zustand genannt, als Spezialfall (z. B.  $p_2 = 0$ ).

Wie berechnen wir nun aber einen Erwartungswert, z. B.  $\langle \hat{L}_z \rangle$ ? Dies ist wie vorher auch bestimmt,  $(+\hbar)$  mal die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon  $+\hbar$  überträgt, plus  $(-\hbar)$  mal die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon  $-\hbar$  überträgt. Diese beiden

sind nun

$$+\hbar : W_+ = p_1 |\langle R|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 |\langle R|\Psi_2\rangle|^2 \quad (1.5.1)$$

$$-\hbar : W_- = p_1 |\langle L|\Psi_1\rangle|^2 + p_2 |\langle L|\Psi_2\rangle|^2 \quad (1.5.2)$$

und wir finden somit

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \hbar(W_+ - W_-). \quad (1.5.3)$$

Nun fassen wir die Terme proportional zu  $p_1$  und  $p_2$  zusammen, mit dem Ergebnis

$$\langle \hat{L}_z \rangle = p_1 \langle \hat{L}_z \rangle_1 + p_2 \langle \hat{L}_z \rangle_2, \quad (1.5.4)$$

wobei  $\langle \hat{L}_z \rangle_1 = \langle \Psi_1 | \hbar \hat{S} | \Psi_1 \rangle$  und analog für „2“. Hier tritt also der Mittelwert im Zustand „1“, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit  $p_1$ , plus der Mittelwert im Zustand „2“, multipliziert mit  $p_2$ , auf. **Wichtiger Unterschied:** Die Aussage „Das Photon ist im Zustand  $|\Psi_1\rangle$  oder  $|\Psi_2\rangle$ , aber wir wissen nicht, in welchem“ ist nicht gleich der Aussage „Das Photon ist in einem Zustand, der eine Superposition von  $|\Psi_1\rangle$  und  $|\Psi_2\rangle$  ist“.

Wir formalisieren etwas die obigen Betrachtungen, indem wir den reinen und gemischten Zuständen einen Zustandsoperator (auch: Dichtematrix)  $\hat{\rho}$  zuordnen.

(i) reiner Zustand:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (1.5.5)$$

(ii) gemischter Zustand:

$$\hat{\rho} = p_1 |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + p_2 |\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \quad (1.5.6)$$

Im vorliegenden einfachen Fall ist  $\hat{\rho}$  eine  $2 \times 2$ -Matrix. Wir definieren die Spurbildung „Sp“ wie üblich:

$$\text{Sp} \hat{M} = \sum_i \langle i | \hat{M} | i \rangle \quad (1.5.7)$$

wobei  $\{|i\rangle\}$  eine orthonormale Basis ist. Dann gilt (für (i) und (ii))

$$(1) \quad \text{Sp} \hat{\rho} = 1 \quad (\text{Normierung}) \quad (1.5.8)$$

$$(2) \quad \hat{\rho}^+ = \hat{\rho} \quad (\text{Eigenwerte reell}) \quad (1.5.9)$$

$$(3) \quad \langle \Psi | \hat{\rho} | \Psi \rangle \geq 0 \quad (\text{Eigenwerte positiv}) \quad (1.5.10)$$

Außerdem müssen die Eigenwerte kleiner oder gleich eins sein. Beispiel:  $\hat{\rho} = |x\rangle\langle x|$  d. h. in Matrixschreibweise

$$\hat{\rho} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.5.11)$$

Wir lesen ab:  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = 0$  (reiner Zustand!).

Als wichtige Konsequenz dieser Überlegungen ergibt sich

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \text{Sp} \left( \hat{\rho} \hat{L}_z \right) \quad (1.5.12)$$

was sich leicht überprüfen lässt, wenn wir z. B. die  $R$ - $L$ -Basis verwenden und mit (1.5.3) vergleichen:

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_z \rangle &= \langle R | \hat{\rho} \hat{L}_z | R \rangle + \langle L | \hat{\rho} \hat{L}_z | L \rangle \\ &= \hbar (\langle R | \hat{\rho} | R \rangle - \langle L | \hat{\rho} | L \rangle) \\ &= (1.5.3) \end{aligned} \quad (1.5.13)$$

Der beschriebene Formalismus, der einen Zustandsoperator benutzt, spielt auch in der Statistischen Physik eine wichtige Rolle (aber nur eine geringe Rolle im Folgenden).

# Kapitel 2

## Bewegung von Teilchen in der Quantenmechanik

### 2.1 Die Schrödinger-Gleichung [§ 6]

(a) Der Zustand eines Teilchens in der Quantenmechanik wird durch eine komplexe Wellenfunktion beschrieben. Die Zeitentwicklung der Zustandsfunktion,  $|\Psi(t)\rangle$ , ist durch die Schrödinger-Gleichung gegeben, die wir jetzt diskutieren wollen. Zur Vereinfachung betrachten wir eine Dimension und ein Intervall der Länge  $L$ , das in viele kleine Intervalle der Länge  $a$  aufgeteilt ist (siehe Abbildung 2.1).

Die Intervalle tragen Nummern  $1, 2, \dots, i, i+1, \dots$  und

$$\langle i|\Psi(t)\rangle \tag{2.1.1}$$

ist damit die Amplitude, das Teilchen im Intervall  $i$  zu finden. Die Zustände  $\{|i\rangle\}$  bilden eine Basis („Ortsbasis“), und wir verlangen

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{2.1.2a}$$

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}. \tag{2.1.3a}$$

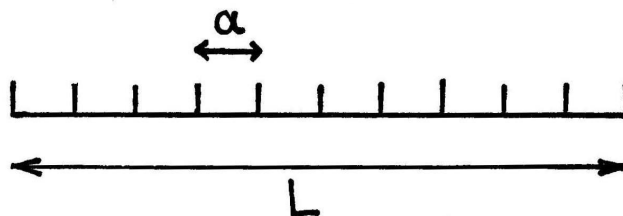


Abbildung 2.1: Diskretisierung der Ortskoordinate.

Außerdem sei der Zustand  $|\Psi\rangle$  (wir unterdrücken gelegentlich das Zeitargument) normiert,  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ , woraus wir sofort finden:

$$\sum_i \langle\Psi|i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \sum_i |\langle i|\Psi\rangle|^2 = 1. \quad (2.1.4)$$

Im Grenzfall  $a \rightarrow 0$  ist eine andere Notation angemessen:

$$|i\rangle = a^{1/2}|x\rangle, \quad \langle i|\Psi\rangle = a^{1/2}\Psi(x), \quad a \sum_i \rightarrow \int dx \quad (2.1.5)$$

Damit wird aus (2.1.4)

$$\int dx |\Psi(x)|^2 = 1 \quad (2.1.6)$$

und wir können sagen:  $|\Psi(x)|^2 dx$  ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall  $x \dots x + dx$  zu finden. Weiterhin:

$$(2.1.2a) \rightarrow \langle x|y\rangle = \delta(x - y) \quad (2.1.2b)$$

$$(2.1.3a) \rightarrow \int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}. \quad (2.1.3b)$$

Die Wellenfunktion/Zustandsfunktion soll den Zustand des Systems vollständig bestimmen. Durch Vorgabe von  $\Psi$  zu einem bestimmten Zeitpunkt werden daher nicht nur die Eigenschaften zu diesem Zeitpunkt, sondern auch für alle zukünftigen Zeiten festgelegt. Mathematisch bedeutet dies, dass die Zeitableitung  $\partial\Psi/\partial t$  durch den Wert der Funktion zum gleichen Zeitpunkt bestimmt sein muss. Aufgrund des Superpositionsprinzip muss dieser Zusammenhang linear sein. Ganz allgemein:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{W} |\Psi(t)\rangle, \quad (2.1.7)$$

wobei  $\hat{W}$  ein linearer Operator ist (hier:  $i^2 = -1$ ). Außerdem soll (2.1.6) natürlich für alle Zeiten gelten (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit). Daher

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle\Psi|\Psi\rangle &= 0 = \langle\dot{\Psi}|\Psi\rangle + \langle\Psi|\dot{\Psi}\rangle \\ &= i \langle\Psi|\hat{W}^+ - \hat{W}|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Somit muss  $\hat{W}$  ein hermitescher Operator sein.

Bekanntermaßen ist  $\hat{W}$  gleich dem Hamiltonoperator dividiert durch  $\hbar$ . Diesen Zusammenhang können wir plausibel machen, wenn wir uns an den Übergang von der Wellenoptik zur geometrischen Optik erinnern, der im Grenzfall  $\lambda \rightarrow 0$  anwendbar ist: In der geometrischen Optik geht man davon aus, dass eine beliebige Feldkomponente des elektromagnetischen Feldes die Form  $u = u_0 e^{i\varphi}$  hat, wobei  $u_0$  schwach

veränderlich, die Phase  $\varphi$  (Eikonale) aber groß ist und sich auf kurzen Strecken stark ändert. Der Verlauf eines Lichtstrahls (für  $\lambda \rightarrow 0$ ) wird durch das *Fermat'sche Prinzip* festgelegt, nach dem die *optische Weglänge* des Strahls (= Phasendifferenz zwischen Anfangs- und Endpunkt) minimal sein muss.

Andererseits wird die Bahn eines *klassischen Teilchens* auch durch ein Extremalprinzip bestimmt,  $\delta S = 0$ , wobei  $S$  die mechanische Wirkung ist. Somit sollte im klassischen Grenzfall die Phase der Wellenfunktion auch proportional zu  $S$  sein, und der Proportionalitätsfaktor heißt  $\hbar^{-1}$ :

$$\hbar \rightarrow 0: \quad \langle x | \Psi \rangle \propto e^{iS/\hbar}. \quad (2.1.9)$$

Mit (2.1.8) finden wir

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi \rightarrow \hat{W} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (2.1.10)$$

Wie aber aus der Mechanik bekannt, ist  $-\partial S/\partial t$  gerade die Hamiltonfunktion. Somit ist

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad (2.1.11)$$

wobei die Gestalt des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  noch zu bestimmen ist (wir kennen bis jetzt nur den klassischen Grenzfall,  $\hbar \rightarrow 0$ , in dem  $\hat{H} \rightarrow H = \text{Hamiltonfunktion}$ ).

(b) Ortsdarstellung. Wir betrachten (2.1.11) in der diskreten Ortsbasis,  $\Psi_j = \langle j | \Psi \rangle$ :

$$i\hbar \dot{\Psi}_j(t) = \sum_k H_{jk} \Psi_k(t) \quad (2.1.12)$$

und *nehmen nun an*, dass  $H_{jk}$  nur auf der Diagonalen und für  $j = k \pm 1$  von Null verschiedene Matrixelemente hat. Dann erhalten wir

$$i\hbar \dot{\Psi}_j = H_{jj} \Psi_j + H_{j,j+1} \Psi_{j+1} + H_{j,j-1} \Psi_{j-1} \quad (2.1.13)$$

und definieren  $V_j$  über die Relation

$$H_{jj} = V_j - H_{j,j+1} - H_{j,j-1} \quad (2.1.14)$$

sowie

$$H_{R,j} = H_{j,j+1}; \quad H_{L,j} = H_{j,j-1}. \quad (2.1.15)$$

Dann gehen wir zur Kontinuumsnotation über und entwickeln ( $a \rightarrow 0$ ):

$$\Psi_{j+1} - \Psi_j \rightarrow \Psi(x+a) - \Psi(x) = a\Psi'(x) + \frac{1}{2}a^2\Psi''(x) + \dots \quad (2.1.16)$$

Endergebnis ( $\Psi \rightarrow \Psi(x, t); x_j \rightarrow x$ ):

$$i\hbar\dot{\Psi} = V(x)\Psi + a(H_R - H_L)\Psi'(x) + \frac{a^2}{2}(H_R + H_L)\Psi''(x) + \dots \quad (2.1.17)$$

Für den einfachen Fall ohne Magnetfeld sind  $H_R$  und  $H_L$  unabhängig vom Ort und gleich,

$$H_R = H_L \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad (2.1.18)$$

wobei  $m$  die Masse des Teilchens ist. Damit haben wir die Schrödinger-Gleichung (Ortsdarstellung,  $D = 1$ , kein Magnetfeld) zumindest motiviert:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x, t) + V(x, t)\Psi(x, t), \quad (2.1.19)$$

wenn wir  $V(x, t)$  mit der (i.a. zeitabhängigen) potentiellen Energie des Teilchens identifizieren.

Die Verallgemeinerung für den dreidimensionalen Fall ist die Folgende:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.1.20)$$

(c) Freie Teilchen. Wir lösen die Gleichung für den Fall  $V \equiv 0$  mit dem Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar} \quad (2.1.21)$$

und finden sofort

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (2.1.22)$$

d. h. die wohlbekannte Energie-Impuls-Relation. Im übrigen ist  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  eine Konstante, d. h. unabhängig von Raum und Zeit: Diese Lösung beschreibt einen Zustand, in dem das Teilchen zwar einen *wohldefinierten Impuls* hat, dafür aber *vollständig im Raum delokalisiert* ist.

## 2.2 Zustände, Operatoren, Unschärferelation [§ 7]

(a) Wir wollen noch etwas genauer auf den Zusammenhang zwischen dem Zustand  $|\Psi\rangle$  und seiner Darstellung in einer bestimmten Basis,  $\Psi(\mathbf{r})$ , eingehen. Wir verwenden direkt die Kontinuumsnotation und benutzen die Darstellung des Einheitsoperators in der Ortsbasis:

$$\mathbb{1} = \int d^3r |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|. \quad (2.2.1)$$

Dann folgt sofort

$$|\Psi\rangle = \mathbb{1}|\Psi\rangle = \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\Psi\rangle \quad (2.2.2)$$

und wir identifizieren  $\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle \equiv \Psi(\mathbf{r})$ . Mit dem gleichen Trick wird das Skalarprodukt zu

$$\langle \Phi|\Psi\rangle = \langle \Phi|\mathbb{1}|\Psi\rangle = \int d^3r \langle \Phi|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\Psi\rangle. \quad (2.2.3)$$

Mit  $\langle \Phi|\mathbf{r}\rangle = \langle \mathbf{r}|\Phi\rangle^*$  ist dann

$$\langle \Phi|\Psi\rangle = \int d^3r \Phi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.2.4)$$

Auch folgt aus (2.2.2) sofort

$$\langle \mathbf{r}'|\Psi\rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\Psi\rangle, \quad (2.2.5)$$

d. h.  $\langle \mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle$  ist mit der (dreidimensionalen) Delta-Funktion zu identifizieren.

Betrachten wir nun die bekannte Fourier-Darstellung einer Wellenfunktion („Entwicklung nach ebenen Wellen“),

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{p}), \quad (2.2.6)$$

und führen eine *Impulsbasis*  $\{|\mathbf{p}\rangle\}$  derart ein, dass ihre Komponenten in der Ortsbasis gerade die ebenen Wellen sind:

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (2.2.7)$$

Dann liegt nahe, auch  $\Psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle$  zu setzen, und aus (2.2.6) wird

$$\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle, \quad (2.2.8)$$

d. h. der Einheitsoperator in Impulsdarstellung ist gerade

$$\mathbb{1} = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|. \quad (2.2.9)$$

Das Skalarprodukt (2.2.3) kann natürlich auch in der Impulsbasis (oder in jeder anderen Basis) berechnet werden. Die bekannte Relation

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar} \quad (2.2.10)$$



ergibt sich auf natürliche Weise.

(b) Der Ortsoperator  $\hat{\mathbf{r}}$  sei nun so definiert, dass die Zustände  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  gerade Eigenzustände sind:

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \quad (2.2.11)$$

d. h.  $\hat{\mathbf{r}}$  ist diagonal in der Ortsbasis. Wie sieht nun  $\hat{\mathbf{r}}$  in der Impulsbasis aus? Dazu berechnen wir die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle &= \int d^3r \langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \int d^3r \mathbf{r} \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \\ &= \int d^3r \mathbf{r} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

Abgesehen von gewissen Unendlichkeiten (diese Relationen und andere sind nur im Distributionensinn erklärt) können wir in der letzten Form  $\mathbf{r}$  durch  $-i\hbar\partial/\partial\mathbf{p}$  ersetzen. Es folgt

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \frac{(2\pi\hbar)^3 \partial \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}} \rightarrow +i\hbar (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, \quad (2.2.13)$$

wobei der letzte Schritt einer partiellen Integration entspricht. (Berechnen Sie zum Beispiel  $\langle \Phi | \hat{\mathbf{r}} | \Psi \rangle$  mit Hilfe der Impulsbasis.) Lasche Sprechweise:  $\hat{\mathbf{r}}$  in der Impulsbasis ist  $+i\hbar$  mal der Ableitung nach  $\mathbf{p}$ .

(c) Analog definieren wir den *Impulsoperator*,  $\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$  und bestimmen seine Matrixelemente in der Ortsbasis:

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r} \rangle = -i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (2.2.14)$$

was wiederum innerhalb eines Skalarprodukts zu erklären ist. Lasche Ausdrucksweise:  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ . Kehren wir jetzt aber zur Schrödinger-Gleichung (2.1.20) zurück, so sehen wir, dass diese von der Form

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle \quad (2.2.15)$$

ist, mit  $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}})$  gerade der klassischen Hamiltonfunktion des Teilchens, in der Impuls und Ort durch die entsprechenden Operatoren ersetzt sind. Allerdings ist (2.2.15) unabhängig von der Basis geschrieben, (2.1.20) ist die Ortsdarstellung.

(d) Jeder physikalischen Größe, d. h. jeder Funktion von Impuls und Ort, können wir somit den entsprechenden Operator zuordnen:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \rightarrow \hat{f} = f(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}). \quad (2.2.16)$$

Allerdings ist gelegentlich, z.B. bei einem geladenen Teilchen im Magnetfeld, die Anordnung wichtig: Offensichtlich ist ( $D = 1$  zur Vereinfachung) nicht  $\hat{p}\hat{x}$  gleich  $\hat{x}\hat{p}$ ! Vielmehr finden wir

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \quad (2.2.17)$$

$$\langle x|\hat{p}\hat{x}|\Psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\Psi(x)], \quad (2.2.18)$$

und damit

$$\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} \equiv [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar. \quad (2.2.19)$$

Hier wurde der *Kommutator* zweier Operatoren,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.2.20)$$

eingeführt. Der Kommutator  $[\hat{p}, \hat{x}]$  verschwindet nicht,  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  vertauschen nicht. *An dieser Stelle sei an die Poisson-Klammern (und den zugehörigen Formalismus) der klassischen Mechanik erinnert.*

(e) „Zwei physikalische Größen, deren Operatoren nicht vertauschen, können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden“ und haben keinen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen. Der zweite Teil dieser Aussage ist klar: Wenn es einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen gibt, sagen wir  $\{|n\rangle\}$  mit Eigenwerten  $a_n$  und  $b_n$  zu  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , dann verschwinden alle Matrixelemente,

$$\langle n|[\hat{A}, \hat{B}]|m\rangle = 0, \quad (2.2.21)$$

d. h.  $[\hat{A}, \hat{B}]$  ist identisch Null. Den ersten Teil beweisen wir für Ort und Impuls, und definieren zunächst die Varianz  $\delta x$  und  $\delta p$  in einem beliebigen Zustand  $|\Psi\rangle$ :

$$(\Delta x)^2 = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle; \quad (\Delta p)^2 = \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle. \quad (2.2.22)$$

Zum Beweis der *Unschärferelation*

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.2.23)$$

betrachten wir zwei beliebige (normierte) Zustände  $|\tilde{\Theta}\rangle$  und  $|\tilde{\Phi}\rangle$  und bilden

$$|\zeta\rangle = |\tilde{\Theta}\rangle - z|\tilde{\Phi}\rangle, \quad (2.2.24)$$

wobei  $z$  eine komplexe Zahl mit Betrag eins ist. Dann folgt aus  $\langle \zeta|\zeta\rangle \geq 0$  sofort

$$z\langle \tilde{\Theta}|\tilde{\Phi}\rangle + z^*\langle \tilde{\Phi}|\tilde{\Theta}\rangle \leq 2 \quad (2.2.25)$$

und mit

$$|\tilde{\Theta}\rangle = \frac{|\Theta\rangle}{\langle \Theta|\Theta\rangle^{1/2}}, \quad |\tilde{\Phi}\rangle = \frac{|\Phi\rangle}{\langle \Phi|\Phi\rangle^{1/2}} \quad (2.2.26)$$

die Ungleichung

$$z\langle\Theta|\Phi\rangle + z^*\langle\Phi|\Theta\rangle \leq 2[\langle\Phi|\Phi\rangle\langle\Theta|\Theta\rangle]^{1/2}.$$

Wir wählen nun  $z = -i$ , und

$$|\Phi\rangle = (\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)|\Psi\rangle, \quad |\Theta\rangle = (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)|\Psi\rangle. \quad (2.2.27)$$

Damit wird  $(\Delta x)^2 = \langle\Theta|\Theta\rangle$ ,  $(\Delta p)^2 = \langle\Phi|\Phi\rangle$ , und wir erhalten

$$2\Delta x \cdot \Delta p \geq -i\langle\Psi|[\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle, \hat{p} - \langle\hat{p}\rangle]|\Psi\rangle \quad (2.2.28)$$

und mit (2.2.19) schließlich (2.2.23).

*Wir merken noch an:  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  sind natürlich hermitesche Operatoren (d. h. sie haben reelle Eigenwerte).*

## 2.3 Freie Teilchen [§ 8]

(a) Eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Fall freier Teilchen hatten wir bereits angegeben, siehe (2.1.21):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - E_p t)/\hbar}, \quad E_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (2.3.1)$$

Das Betragsquadrat dieser Funktion ist eins, d. h. es treten offensichtlich Schwierigkeiten bei der Normierung dieser Funktion auf. Dem kann man begegnen, indem man ein endliches Volumen,  $V$ , betrachtet, mit festen oder periodischen Randbedingungen. Wir betrachten zur Vereinfachung wieder  $D = 1$  und das Intervall  $-a/2 \dots a/2$ .

(i) Periodische Randbedingungen (Ring) Dann gilt für alle Zeiten  $\Psi(x + a) = \Psi(x)$ , d. h.

$$e^{ipa/\hbar} = 1 \quad \Rightarrow \quad p = \frac{2\pi\hbar}{a}n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.3.2)$$

(ii) Feste Randbedingungen (hohe Wände) Dann gilt für alle Zeiten  $\Psi(a/2) = \Psi(-a/2)$ , die Wellenfunktion verschwindet am Rand. Offensichtlich betrachtet man sinnvollerweise die Lösungen

$$\Psi = \left\{ \begin{array}{l} \sin(px/\hbar) \\ \cos(px/\hbar) \end{array} \right\} e^{-iE_p t/\hbar} \quad (2.3.3)$$

mit dem Resultat:

$$\begin{array}{ll} \sin : & p = (\pi\hbar/a)n, \quad n \text{ gerade} \\ \cos : & p = (\pi\hbar/a)n, \quad n \text{ ungerade} \end{array} \quad (2.3.4)$$

Abbildung 2.2:

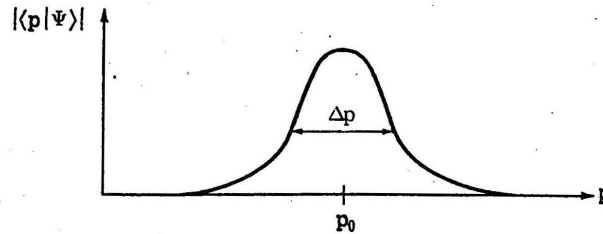


Fig. 3-3

The absolute value of the momentum space amplitude  $\langle p|\Psi\rangle$  for a wave packet of mean momentum  $p_0$  and uncertainty in momentum  $\sim \Delta p$ .

Auf einem endlichen Intervall lässt sich der Normierungsfaktor aus der Bedingung

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad (2.3.5)$$

leicht berechnen.

(b) Natürlich gibt es auch für unendliche Systeme normierbare Lösungen, denn auch eine beliebige Linearkombination

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} f(p) e^{i(px - E_p t)/\hbar} \quad (2.3.6)$$

ist eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung (in  $D = 1$ ,  $E_p = p^2/2m$  vorausgesetzt). Normierung:

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} |f(p)|^2 = 1. \quad (2.3.7)$$

Die Größe  $f(p) = \langle p|\Psi(0)\rangle$  ist die Impulsamplitude des Zustands zum Zeitpunkt  $t = 0$ . Zum Beispiel können wir ansetzen:

$$f(p) = g(p) e^{i\alpha(p)}, \quad (2.3.8)$$

wobei  $g(p)$  reell und positiv, und  $\alpha(p)$  reell ist.

Außerdem sei  $g(p)$  bei einem bestimmten Wert  $p_0$  zentriert, mit einer Breite  $\Delta p$  (siehe Bild 2.2).

Setzen wir (2.3.8) in (2.3.6) ein, so erhalten wir für  $t = 0$  eine Wellenfunktion, die ein Teilchen mit mittlerem Impuls  $p_0$  (und Unschärfe  $\Delta p$ ) beschreibt. Wie entwickelt sich dieser Zustand im Lauf der Zeit? Dazu bestimmen wir die Punkte  $x_t$ , bei denen  $|\Psi(x, t)|^2$  lokalisiert ist, mit Hilfe der Approximation der *stationären Phase*. Bei

dieser Näherung geht man davon aus, dass sich alle Beiträge im Integral über  $p$  im wesentlichen wegheben, außer wenn

$$\frac{\partial}{\partial p} [px_t - E_p t + \hbar\alpha(p)] = 0. \quad (2.3.9)$$

Nach Bildung der Ableitung ist außerdem  $p \rightarrow p_0$  zu setzen. Mit  $x_0 = -\hbar\alpha'(p_0)$  finden wir

$$x_t = \frac{p_0}{m}t + x_0, \quad (2.3.10)$$

d. h. das Zentrum/Maximum des Wellenpakets bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $p_0/m$ , der *Gruppengeschwindigkeit* des Wellenpakets. (Die *Phasengeschwindigkeit* ist  $E_p/p = \omega/k = p/2m$ .) Wie ändert sich nun die räumliche Ausdehnung? Dazu betrachten wir ein Beispiel:

$$\alpha(p) = -x_0 p/\hbar; \quad g(p) = A e^{-b^2(p-p_0)^2}. \quad (2.3.11)$$

Aus der Normierungsbedingung (2.3.7) ergibt sich

$$A = \sqrt{2\pi\hbar b} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.3.12)$$

Außerdem ist  $\langle \hat{p} \rangle = p_0$ ,  $(\Delta p)^2 = (4b^2)^{-1}$  (unabhängig von der Zeit). Die Wellenfunktion für  $t = 0$  ergibt sich, siehe (2.3.6), zu

$$\Psi(x, t = 0) = B e^{ip_0(x-x_0)} e^{-(x-x_0)^2/4\hbar^2 b^2} \quad (2.3.13)$$

mit  $B = (2\pi\hbar^2 b^2)^{1/4}$ . Wir lesen ab:

$$\langle x \rangle_{t=0} = x_0, \quad \Delta x_{t=0} = \hbar b. \quad (2.3.14)$$

Somit ist der Anfangszustand - eine Gauß-Funktionen in Ort und Impuls - ein Zustand minimaler Unschärfe,  $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$ . Die Zeitentwicklung des Ortsmittelwerts haben wir schon bestimmt,  $\langle \hat{x} \rangle_t = x_t$ , siehe (2.3.10). Wie verhält sich nun aber die Ortsunschärfe,  $\Delta x_t$ ? Da wir es nur mit Gauß'schen Integralen zu tun haben, lässt sich alles explizit berechnen. Das Resultat ist

$$\Delta x_t^2 = \frac{\hbar^2 [b^4 + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}]}{b^2}. \quad (2.3.15)$$

Somit verläuft das Wellenpaket im Laufe der Zeit,  $\Delta p \cdot \Delta x_t > \hbar/2$  für  $t > 0$ . Insbesondere ist  $\Delta x_t \propto t$  für große Zeiten.

## 2.4 Wegintegrale [§ 9]

(a) Wir wollen die Propagation freier Teilchen von einem anderen Gesichtspunkt aus betrachten und schreiben (2.3.6) um:

$$\langle x|\Psi(t)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x|p\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\Psi(0)\rangle \quad (2.4.1)$$

und setzen hier ein:

$$\langle p|\Psi(0)\rangle = \int dx' \langle p|x'\rangle \langle x'|\Psi(0)\rangle. \quad (2.4.2)$$

Wir nehmen  $t > 0$  an, und definieren den Propagator  $K(xt, x'0)$  über die Relation

$$\Psi(x, t) = \int dx' K(xt, x'0) \Psi(x', 0). \quad (2.4.3)$$

Durch Vergleich mit (2.4.1) und (2.4.2) finden wir folgenden Ausdruck:

$$K(xt, x'0) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x|p\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|x'\rangle. \quad (2.4.4)$$

Nun erinnern wir uns:  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ ,  $\hat{H}|p\rangle = E_p|p\rangle$ , und damit

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} |p\rangle = e^{-iE_p t/\hbar} |p\rangle. \quad (2.4.5)$$

Wenn wir dies in (2.4.4) berücksichtigen, finden wir

$$K(xt, x'0) = \langle x| e^{-i\hat{H}t/\hbar} |x'\rangle, \quad (2.4.6)$$

d.h. der Propagator beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Teilchens, das für  $t = 0$  bei  $x'$  lokalisiert ist. Betrachten wir jetzt drei Zeiten  $t_1 > t_2 > t_3$ , dann ist

$$K(x_1 t_1, x_3 t_3) = \langle x_1| e^{-i\hat{H}(t_1-t_3)/\hbar} |x_3\rangle. \quad (2.4.7)$$

Wir finden aber auch folgende Beziehung, durch Einschieben des Einheitsoperators:

$$K(x_1 t_1, x_3 t_3) = \int dx_2 K(x_1 t_1, x_2 t_2) K(x_2 t_2, x_3 t_3). \quad (2.4.8)$$

Dieses Ergebnis lässt sich graphisch interpretieren, wie in Abbildung 2.3 dargestellt. Zur expliziten Berechnung des Propagators kehren wir zurück zu (2.4.4), mit dem Resultat

$$K(xt, x'0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x-x')^2}{t}\right) \Theta(t). \quad (2.4.9)$$

Hier - und auch an (2.4.6) - erkennt man:

$$K(xt, x'0) \rightarrow \delta(x-x') \text{ für } t \rightarrow +0. \quad (2.4.10)$$

Abbildung 2.3:

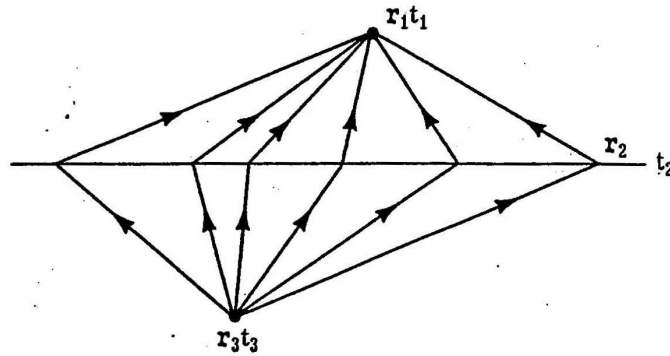


Fig. 3-4

Motion from  $r_3 t_3$  to  $r_1 t_1$  as a sum over all two-legged paths. The time  $t_2$  is the same for all paths.

Der Ausdruck (2.4.9) ist insofern interessant, als dass wir im Exponenten die klassische Wirkung erkennen:

$$S_{\text{cl}} = \int_0^t dt' \frac{m}{2} v^2 = \frac{m}{2} \int_0^t dt' \left( \frac{x - x'}{t} \right)^2 = \frac{m}{2} \frac{(x - x')^2}{t}, \quad (2.4.11)$$

da die Bahn eines freien Teilchens entlang einer Gerade verläuft, und damit ist die Geschwindigkeit  $v = (x - x')/t$ .

(b) In einer Verallgemeinerung von (2.4.8) betrachten wir jetzt das Zeitintervall  $0 \dots t$ , das wir  $N$ -fach unterteilen:  $t_j = j \cdot \varepsilon$ ,  $\varepsilon = t/N$ ,  $t_N = t$ . Durch  $(N - 1)$ -faches Einschieben der  $\mathbb{1}$  in der Ortsbasis erhalten wir

$$K(xt, x'0) = \int dx_{N-1} \dots dx_1 K(xt, x_{N-1}t_{N-1}) \dots K(x_1t_1, x'0), \quad (2.4.12)$$

wobei jeder der Faktoren, d. h. jeder *Kurzzeitpropagator*, gegeben ist durch

$$K(x_j t_j, x_{j-1} t_{j-1}) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left( \frac{i m (x_j - x_{j-1})^2}{2 \hbar \varepsilon} \right). \quad (2.4.13)$$

Da der Exponent gerade  $iS_{\text{cl}}(x_j, x_{j-1}, \varepsilon)/\hbar$  ist, schreibt man auch

$$K(xt, x'0) = \sum_{\text{alle Wege}} e^{iS_{\text{Weg}}/\hbar}, \quad (2.4.14)$$

wobei  $S_{\text{Weg}}$  die gesamte Wirkung eines Weges ist, der in  $(x'0)$  beginnt, zu den Zeiten  $t_j$  durch die Punkte  $x_j$  geht, und in  $(xt)$  endet. Diese Bildung nennt man auch *Wegintegral* - eine Summe über alle Wege  $(x'0) \rightarrow (xt)$ , wobei über den Ausdruck  $e^{iS/\hbar}$  summiert wird. Der Vorteil der Darstellung (2.4.14) zusammen mit (2.4.13)

ist, dass ohne Schwierigkeiten auch eine potentielle Energie,  $V(x)$ , berücksichtigt werden kann. In diesem Fall ist

$$S_{\text{cl}} \rightarrow \varepsilon \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{(x_j - x_{j-1})}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_{j-1}) \right] \quad (2.4.15)$$

zu setzen (siehe auch Kapitel 3.7).

Die Verallgemeinerung zu  $D = 3$  ist unproblematisch. Den Einfluss eines Magnetfeldes diskutieren wir kurz im nächsten Paragraphen.

*Anmerkung:* Wir können nun ebenfalls den Kontakt zur Diskussion in Kapitel 2.1 herstellen. Der klassische Grenzfall entspricht  $\hbar \rightarrow 0$ . In diesem Fall wird das viel-dimensionale Integral in (2.4.14) durch die Wege stationärer Phase bestimmt sein, d. h.  $\delta S = 0$ . Diese Bedingung, wie aus der Mechanik bekannt, führt mit

$$S = \int dt L(q, \dot{q}, t) \quad (2.4.16)$$

zu den klassischen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}. \quad (2.4.17)$$

Hier ist  $L(q, \dot{q}, t)$  die Lagrange-Funktion des Teilchens, und wir haben kurzfristig „ $q$ “ für den Ort verwendet. Für „kleine  $\hbar$ “ - semiklassischer Grenzfall - lassen sich unter Umständen Resultate durch „Entwickeln um den klassischen Weg“ gewinnen.

## 2.5 Magnetfeld, Aharonov-Bohm-Effekt [§ 10]

Für ein geladenes Teilchen mit der Ladung  $e$  in einem Magnetfeld hat die Hamilton-Funktion folgende Form:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left[ \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 + V(\mathbf{r}, t), \quad (2.5.1)$$

wobei  $\mathbf{A}(\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A})$  das Vektorpotential ist. Dem Vektorpotential entspricht ein Beitrag in der Lagrange-Funktion:

$$L_A = \frac{e}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (2.5.2)$$

und der Wirkung:

$$S_A = \int dt L_A = \frac{e}{c} \int d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}, \quad (2.5.3)$$

wobei wir  $dt\mathbf{v} = dt\dot{\mathbf{r}} = d\mathbf{r}$  benutzt haben.

Nach diesen Vorbemerkungen können wir qualitativ den Aharonov-Bohm-Effekt diskutieren (Doppelspaltexperiment mit geladenen Teilchen, siehe Abb. 2.4).



Abbildung 2.4:

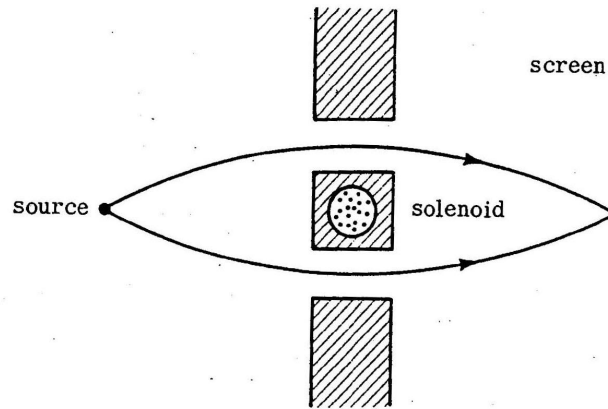


Fig. 3-11

Two-slit diffraction experiment with a solenoid enclosed in the region between the two slits. The magnetic field is out of the paper and confined to the interior of the solenoid; the particles travel only in field free regions.

Das eingeschlossene Magnetfeld, senkrecht zur gezeichneten Fläche, ist sorgfältig abgeschirmt und übt keine Kraft auf die Teilchen aus. Trotzdem gibt es eine Phasenverschiebung zwischen Weg „1“ und Weg „2“ aufgrund des Vektorpotentials,

$$\Delta\varphi = \frac{e}{\hbar c} \int_{\text{Weg 1}} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} - \frac{e}{\hbar c} \int_{\text{Weg 2}} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}. \quad (2.5.4)$$

Aufgrund der üblichen Regeln für Linienintegrale erkennen wir aber, dass  $\Delta\varphi$  nicht von den genauen Wegen abhängt, sondern nur von dem eingeschlossenen Fluss:

$$\Delta\varphi = \frac{e}{\hbar c} \oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \frac{e}{\hbar c} \int d\mathbf{F} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.5.5)$$

wobei  $d\mathbf{F}$  ebenfalls senkrecht zur Zeichenebene steht. Mit  $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e = hc/e = 4 \times 10^{-7} \text{gauss} \cdot \text{cm}^{-2}$  – diese Größe wird als Flussquant bezeichnet – finden wir schließlich

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} \quad (2.5.6)$$

mit  $\Phi$  dem magnetischen Fluss.

Wir können also erwarten, dass das Interferenzmuster auf dem Schirm eine periodische Funktion des magnetischen Flusses ist, mit der Periode  $\Phi_0$ . Die experimentelle Beobachtung dieses Effekts, der theoretisch von Aharonov und Bohm (1959) vorausgesagt wurde, gilt als eine der schönsten Bestätigungen der Konzepte der Quantenmechanik.

# Kapitel 3

## Lösungen der Schrödinger-Gleichung

### 3.1 Stufen, Barrieren, Tunneln [§ 11]

(a) Stationäre Zustände. Für zeitunabhängige Potentiale,  $V(\mathbf{r})$ , können wir eine Lösung der Schrödinger-Gleichung von der Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.1.1)$$

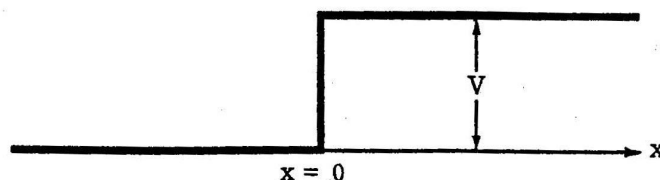
suchen. Diese Zustände heißen stationär, da  $|\Psi|^2$  offensichtlich nicht von der Zeit abhängt.

(b) Wir betrachten jetzt eine Stufe  $D = 1$  der Höhe  $V$  (siehe Abbildung 3.1). und suchen Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.1.2)$$

Wir setzen  $\hbar k = \sqrt{2mE}$ ,  $\hbar \kappa = \sqrt{2m(E - V)}$ , und betrachten zunächst  $E > V$ . Dann ist eine Lösung (wir verlangen, dass von rechts keine einlaufende Welle

Abbildung 3.1:



**Fig. 4-1**

One-dimensional potential step at  $x=0$ .

Abbildung 3.2:

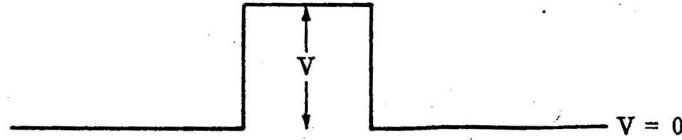


Fig. 4-3

kommt):

$$x < 0 : \quad A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (3.1.3)$$

$$x > 0 : \quad C e^{i\kappa x} \quad (3.1.4)$$

Die Anschlussbedingungen – Stetigkeit von  $\Psi$  und  $\Psi'$  – verknüpfen die Konstanten miteinander:

$$B = \frac{k - \kappa}{k + \kappa} A, \quad C = \frac{2k}{k + \kappa} A \quad (3.1.5)$$

Wir bestimmen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte,  $j$ , aus „Geschwindigkeit“ mal Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$x < 0 : \quad j_L = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad (3.1.6)$$

$$x > 0 : \quad j_R = \frac{\hbar \kappa}{m} |C|^2$$

Natürlich ist  $j_L = j_R$ .  $A$  ist die Amplitude der einfallenden Welle,  $B$  die Amplitude der reflektierten Welle und  $C$  die Amplitude der transmittierten Welle. Der Transmissionskoeffizient,  $T(E) = \kappa |C|^2 / k |A|^2$ , ist eine monoton wachsende Funktion der Energie,  $T(E \rightarrow V) \rightarrow 0$ ,  $T(E \rightarrow \infty) = 1$ .

Für  $E < V$  ist  $\kappa = i|\kappa|$ , d. h. wir finden eine exponentiell abklingende Wahrscheinlichkeitsamplitude im *klassisch verbotenen Bereich*  $x > 0$ . Natürlich ist dann  $j_L = j_R = 0$  ( $|A| = |B|$ ). Allerdings gibt es eine Phasenverschiebung zwischen einfallender und reflektierter Welle:

$$\frac{A}{B} = \frac{k - i|\kappa|}{k + i|\kappa|} = -e^{2i\delta(E)}, \quad (3.1.7)$$

d. h.  $\tan(\delta(E)) = k/|\kappa|$ ;  $\delta(E \rightarrow 0) \rightarrow 0$ .

(c) Barriere. Wir betrachten  $E < V$  und untersuchen das wichtige Phänomen des „Tunnelns“: ein quantenmechanisches Teilchen kann eine Barriere durchdringen, obwohl seine Energie, klassisch betrachtet, zu klein ist. Wir setzen  $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E - V|}$

und betrachten wieder den Fall, dass nur von links eine Welle einläuft. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} x < 0 : & \quad A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ 0 < x < a : & \quad C e^{-\kappa x} + D e^{+\kappa x} \\ a < x : & \quad AS(E) e^{ik(x-a)} \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

Da die Barriere eine endliche Breite hat, ist innerhalb der Barriere auch die exponentiell anwachsende Lösung zugelassen. Weiterhin haben wir die Größe auch Tunnel-Matrixelement oder Transmissionsamplitude genannt, eingeführt. Nach längerer Rechnung ergibt sich

$$S(E) = \frac{2i\kappa k}{2i\kappa k \cosh(\kappa a) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa a)}. \quad (3.1.9)$$

Der Transmissionskoeffizient,  $T = |S|^2$ , ist dann

$$T(E) = \left[ 1 + \frac{\sinh^2(\kappa a)}{4(E/V)(1 - E/V)} \right]^{-1}. \quad (3.1.10)$$

Im Fall einer dicken Barriere,  $\kappa a \gg 1$ , wird  $T$  exponentiell klein:

$$\kappa a \gg 1 : \quad T(E) \approx \frac{16E(V - E)}{V^2} e^{-2\kappa a}. \quad (3.1.11)$$

In dem anderen Grenzfall,  $\kappa a \ll 1$  ( $E \rightarrow V$ ), finden wir

$$E \rightarrow V : \quad T(E) \approx \left[ 1 + \frac{V}{2\hbar^2/ma^2} \right]^{-1}, \quad (3.1.12)$$

d. h.  $T$  hängt von dem Verhältnis von Potentialhöhe zu „Lokalisierungsenergie“ =  $\hbar^2/2ma^2$  ab.

Beispiele für den Tunneleffekt sind der  $\alpha$ -Zerfall, siehe Abbildung 3.3, und metallische Tunnelkontakte, siehe Abbildung 3.4.

## 3.2 Harmonischer Oszillator [§ 12]

(a) Wir bestimmen die stationären Zustände des harmonischen Oszillators,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (3.2.1)$$

mit Hilfe eines algebraischen Verfahrens, das auf Dirac zurückgeht. Wir definieren zwei Operatoren  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^+$ :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad (3.2.2)$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad (3.2.3)$$

Abbildung 3.3:

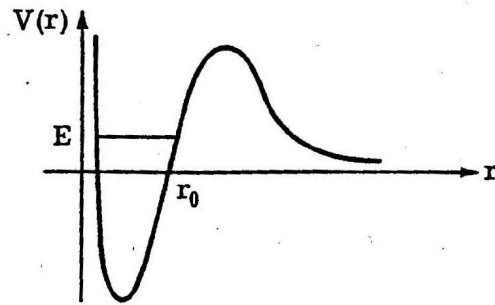


Fig. 4-4

Potential felt by  $\alpha$  particle of energy  $E$  in the residual nucleus.

Abbildung 3.4:

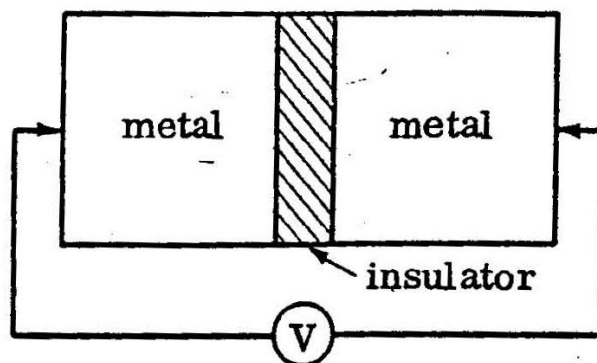


Fig. 4-5

Tunneling junction.

und  $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ . Folgende Relationen lassen sich leicht nachrechnen:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (3.2.4)$$

$$\hat{N}\hat{a} = \hat{a}(\hat{N} - 1); \quad \hat{N}\hat{a}^+ = \hat{a}^+(\hat{N} + 1) \quad (3.2.5)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2.6)$$

Konsequenz: Wenn wir die Eigenwerte und -zustände von  $\hat{N}$  gefunden haben, kennen wir auch die Eigenwerte und -zustände von  $\hat{H}$ .

(b) Wir nennen die Eigenzustände von  $\hat{N}$  einfach  $|n\rangle$ ,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.2.7)$$

und überlegen uns, welche Werte  $n$  annehmen kann. Aus (3.2.5) erhalten wir

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{a}(\hat{N} - 1)|n\rangle = (n - 1)\hat{a}|n\rangle. \quad (3.2.8)$$

Somit ist  $\hat{a}|n\rangle = K \cdot |n - 1\rangle$ , d. h. der Zustand, in dem  $n$  um 1 erniedrigt wurde. Die Normierung ergibt sich zu  $K = \sqrt{n}$ :

$$K^2 \langle n - 1 | n - 1 \rangle = K^2 = \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle = n \quad (3.2.9)$$

Entsprechend gilt  $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle$ .  $\hat{a}^+$  und  $\hat{a}$  heißen auch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Für einen beliebigen Zustand gilt  $\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle \geq 0$ , d. h. alle Eigenwerte sind  $\geq 0$ . Daher folgt:

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.10)$$

Ausgehend von  $|0\rangle$ ,  $\hat{a}|0\rangle = 0$ , können wir also alle Zustände  $|n\rangle$  durch mehrmalige Anwendung von  $\hat{a}^+$  konstruieren,

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (3.2.11)$$

Die Energieeigenwerte sind dann

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.2.12)$$

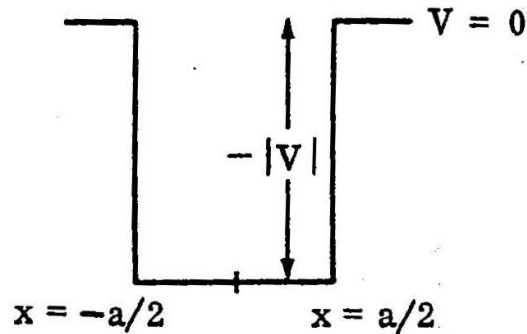
Zur explizierten Konstruktion der Wellenfunktionen können wir z.B. die Ortsbasis verwenden,

$$0 = \langle x | \hat{a} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \langle x | 0 \rangle, \quad (3.2.13)$$

wobei als Abkürzung  $\xi = x\sqrt{(m\omega/\hbar)}$  eingeführt wurde. Resultat:

$$\langle x | 0 \rangle = \Psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2}. \quad (3.2.14)$$

Abbildung 3.5:

**Fig. 4-7****Finite depth square well symmetric about  $x = 0$ .**

Die angeregten Zustände erhält man durch Anwendung von  $(\hat{a}^+)^n$ . Resultat:

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (3.2.15)$$

In diesen beiden Gleichungen wurde eine vereinfachende Schreibweise verwendet: Wir müssen uns  $\xi$  jeweils eingesetzt denken.  $H_n(\xi)$  sind die Hermite-Polynome (Polynome  $n$ -ten Grades):

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; \quad \text{etc.} \quad (3.2.16)$$

Obiges Ergebnis ist u.a. ein Beispiel für die *Knotenregel*: In einer Dimension hat der Grundzustand keinen Knoten (=Nullstelle), der erste angeregte Zustand einen Knoten, der zweite zwei Knoten, usw. Die obigen Ergebnisse lassen sich natürlich auch als direkte Lösung der Schrödinger-Gleichung gewinnen. Die Bedingung  $\Psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$  legt dann die Energieeigenwerte fest.

### 3.3 Gebundene Zustände, Resonanzen [§ 13]

(a) Wir betrachten nun nochmals (vgl. 2.3) einen Potentialtopf der Länge  $a$  symmetrisch zu  $x = 0$  (vgl. Abbildung 3.5;  $V(x) = -|V|$  im Bereich  $-a/2 \cdots +a/2$ , und  $V(x) = 0$  sonst).

In Kapitel 2.3 hatten wir bereits den Fall  $|V| \rightarrow \infty$  diskutiert und gesehen, dass dann die Lösungen proportional zu  $\sin(kx)$  oder  $\cos(kx)$  waren, d. h. insbesondere

ungerade oder gerade. Dies ist ein allgemeines Resultat: Wir definieren den Paritätsoperator  $\hat{P}$  über die Beziehung

$$\langle x|\hat{P}|\Psi\rangle = \langle -x|\Psi\rangle. \quad (3.3.1)$$

Wegen  $V(x) = V(-x)$  folgt

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0, \quad (3.3.2)$$

d. h. der Paritätsoperator vertauscht mit dem Hamiltonoperator, und wir können die Eigenzustände zu  $\hat{H}$  so wählen, dass sie auch Eigenzustände zu  $\hat{P}$  sind. Wegen  $\hat{P}^2 = \mathbb{1}$  sind die Eigenwerte von  $\hat{P}$  gerade  $\pm 1$ , entsprechend geraden und ungeraden Wellenfunktionen.

Dieses Prinzip gilt für jeden Operator, der mit  $\hat{H}$  vertauscht,  $[\hat{H}, \hat{X}] = 0$ . Diese Operatoren  $\hat{X}$  sind *erhaltene Größen* (vorausgesetzt, sie sind nicht selbst explizit zeitabhängig), denn für beliebige Zustände  $|\Psi\rangle$ , die der Schrödinger-Gleichung genügen, gilt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \hat{X} | \Psi \rangle = \langle \Psi | [\hat{X}, \hat{H}] | \Psi \rangle = 0 \quad (3.3.3)$$

wegen  $\hat{H}\hat{X} = \hat{X}\hat{H}$ .

(b) Für den Potentialtopf setzen wir folgende Lösungen an:

$$\begin{aligned} & x < -\frac{a}{2} : C e^{\kappa x} \\ \text{gerade:} & \quad \text{im Topf: } A \cos(kx) \\ & x > \frac{a}{2} : C e^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

$$\begin{aligned} & x < -\frac{a}{2} : -C e^{\kappa x} \\ \text{ungerade:} & \quad \text{im Topf: } A \sin(kx) \\ & x > \frac{a}{2} : C e^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Die Randbedingungen – Stetigkeit von  $\Psi$  und  $\Psi'$  bei  $x = \pm a/2$  – liefern dann folgende Gleichungen:

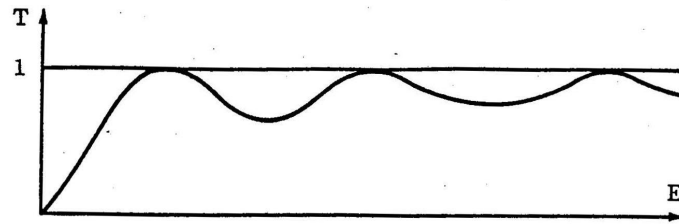
$$\text{gerade:} \quad k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \kappa \quad (3.3.6)$$

$$\text{ungerade:} \quad k \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = -\kappa \quad (3.3.7)$$

Außerdem ist  $\hbar k = \sqrt{2m(E + |V|)}$ ,  $\hbar \kappa = \sqrt{-2mE}$ , sowie  $-|V| < E < 0$ . Die Lösung ist in vielen Standardtexten zu finden, und wir wollen hier nicht weiter darauf eingehen. Für kleine  $|V|$  gibt es nur *eine* (gerade) Lösung, mit wachsenden  $|V|$



Abbildung 3.6:



**Fig. 4-8**  
Transmissivity of the square well.

kommt zuerst eine ungerade, dann wieder eine gerade, usw. Lösung hinzu. Die Zahl der gebundenen Zustände – d. h. die Wellenfunktionen verschwinden exponentiell mit der Entfernung zum Topf – ist immer (für  $|V|$  endlich) endlich.

(c) Weiterhin können wir auch Lösungen für  $E > 0$  konstruieren, die z. B. ein Teilchen beschreiben, das von links auf den Topf trifft und teilweise reflektiert und transmittiert wird (vgl. 3.1). Das Ergebnis für den Transmissionskoeffizienten können wir in (3.1.10) ablesen, wenn wir – vgl. Kapitel 3.1(c) – dort  $V \rightarrow -|V|$  setzen:

$$\left[ \hbar\kappa = \sqrt{2m|E - V|} = \sqrt{2m(V - E)} \right]_{\text{Barriere}} \rightarrow \left[ \sqrt{-2m(|V| + E)} = i\hbar k \right]_{\text{Topf}} \quad (3.3.8)$$

$$\left[ \sinh(\kappa a) \right]_{\text{Barriere}} \rightarrow \left[ \sinh(\pm ika) = \pm i \sin(ka) \right]_{\text{Topf}} \quad (3.3.9)$$

$$\left[ T(E) \right]_{\text{Barriere}} \rightarrow \left[ T(E) \right]_{\text{Topf}} = \left[ 1 + \frac{\sin^2(ka)}{4(E/|V|)(1 + E/|V|)} \right]^{-1}. \quad (3.3.10)$$

Für bestimmte Energiewerte, gegeben durch  $\sin(ka) = 0$ , ist  $T = 1$ : Diese Maxima nennt man Resonanzen, siehe Bild 3.6.

Die Transmissionsamplitude, betrachtet als analytische Funktion der (komplexen) Energie  $E$ , hat einige interessante Eigenschaften (vgl. Abb. 3.7:

- (i) Pole für reelle  $E < 0 \leftrightarrow$  gebundene Zustände
- (ii) Pole im Quadranten  $\text{Re } E > 0, \text{Im } E < 0$ , die den Resonanzen entsprechen. Allerdings liegen diese – üblicherweise wird die Ebene so aufgeschnitten, dass  $\sqrt{E}$  einen Sprung entlang der positiven reellen Achse hat – auf dem zweiten Riemannschen Blatt. Die Phasenverschiebung variiert stark mit  $E$  nahe der Resonanz.

(d) Die obigen Überlegungen lassen sich an einem Beispiel illustrieren,  $V(x) = v_0\delta(x)$ , siehe Abbildung 3.8,

Abbildung 3.7:

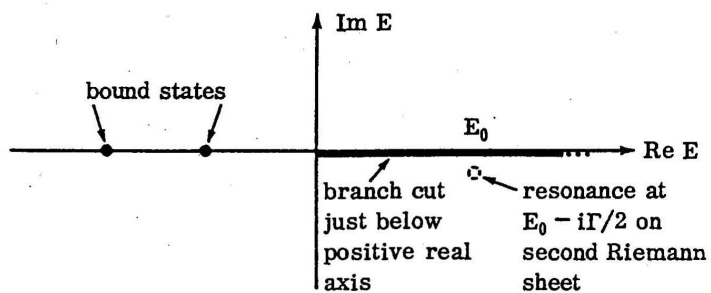
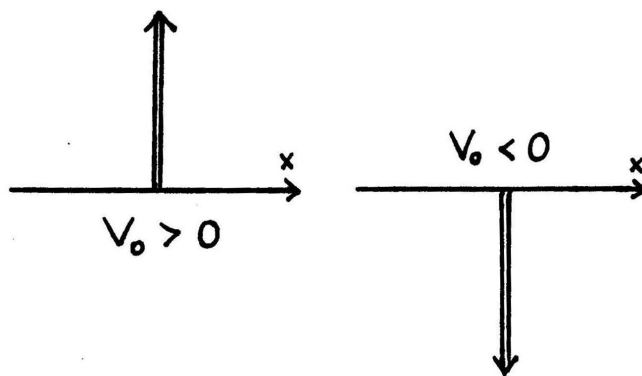


Fig. 4-9

Singularities of the transmission amplitude in the complex  $E$  plane.Abbildung 3.8:  $\delta$ -förmiges Potential, abstoßend (links) bzw. anziehend (rechts).

Zur Vereinfachung der folgenden Gleichungen setzen wir  $v_0 = \hbar^2\Omega/m$  und machen den folgenden Ansatz für den Ortsanteil der Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} x < 0 : & \quad e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ x > 0 : & \quad S e^{ikx} \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

Hier ist die einfallende Welle normiert;  $\hbar k = \sqrt{2mE}$ . Eine besondere Diskussion ist nun aber bezüglich der Anschlussbedingungen notwendig. Dazu schreiben wir die Schrödinger-Gleichung nochmals auf:

$$E\Psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = \frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x)\Psi(0), \quad (3.3.12)$$

wegen  $\delta(x)\Psi(x) = \delta(x)\Psi(0)$ . Durch Integration von  $-\varepsilon \dots +\varepsilon, \varepsilon \rightarrow 0$ , erkennen wir, dass zwar  $\Psi$  stetig ist,  $\Psi'$  jedoch einen Sprung hat:

$$\Psi'(+\varepsilon) - \Psi'(-\varepsilon) = 2\Omega\Psi(0) \quad (3.3.13)$$

Endergebnis:

$$B = \frac{\Omega}{ik - \Omega}, \quad S = 1 + B = \frac{ik}{ik - \Omega} \quad (3.3.14)$$

Der Transmissionskoeffizient zeigt keine Resonanzen:

$$T(E) = |S(E)|^2 = \frac{E}{E + (\hbar\Omega)^2/2m} \quad (3.3.15)$$

Weiterhin hat  $S(E)$  einen Pol in der  $E$ -Ebene für  $\Omega < 0$ :

$$k = -i\Omega \rightarrow \sqrt{2mE} = -i\hbar\Omega, \quad (3.3.16)$$

und daher muss  $E < 0$  sein:  $\sqrt{2mE} = i\sqrt{2m|E|}$ . Die zugehörige Energie ist

$$E_B = -\frac{(\hbar\Omega)^2}{2m}. \quad (3.3.17)$$

Die Wellenfunktion dieses (einigen) gebundenen Zustands ergibt sich zu

$$\Omega < 0 : \quad \Psi_B(x) = |\Omega|^{1/2} e^{-|\Omega x|}, \quad (3.3.18)$$

d. h. die Ausdehnung ist durch  $|\Omega|^{-1}$  gegeben.

### 3.4 Kronig-Penney-Modell [§ 14]

(a) Wir untersuchen jetzt die stationären Zustände eines Teilchens in einem speziellen periodischen Potential  $\Omega > 0$ ,

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m}\Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na). \quad (3.4.1)$$

Dieses Modell hat große Bedeutung für das Verständnis der Elektronenzustände eines kristallinen Festkörpers erlangt. Als Besonderheiten eines periodischen Potentials ergeben sich:

- (i) Im Band der in Frage kommenden Energiewerte  $0 \leq E < \infty$  gibt es *verbotene Bereiche*.
- (ii) Alle Zustände sind *delokalisiert*.

Wir verwenden folgenden Ansatz:

$$(n-1)a \leq x \leq na : \quad A_n e^{iq(x-na)} + B_n e^{-iq(x-na)}, \quad (3.4.2)$$

wobei wie üblich  $\hbar^2 q^2 = 2mE$ . Die Anschlussbedingungen, Stetigkeit von  $\Psi$  und Sprung in  $\Psi'$ , vgl. (3.3.13), angewandt auf  $x = na$ , liefern eine Matrixgleichung, die  $(A_{n+1}, B_{n+1})$  mit  $(A_n, B_n)$  verknüpft:

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (3.4.3)$$

mit

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \left(1 - i\frac{\Omega}{q}\right) e^{iqa} & -i\frac{\Omega}{q} e^{iqa} \\ i\frac{\Omega}{q} e^{-iqa} & \left(1 + i\frac{\Omega}{q}\right) e^{-iqa} \end{pmatrix}. \quad (3.4.4)$$

Iteration führt offensichtlich auf

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \hat{T}^n \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \quad (3.4.5)$$

Bei Vorgabe beliebiger Werte  $A_0, B_0$  werden die  $A_n, B_n$  mit steigendem  $n$  entweder exponentiell anwachsen oder abklingen. Dies sind aber nicht die Zustände, die uns interessieren. Unter Umständen gibt es aber auch Lösungen, die sich beim Fortschreiten um eine Gitterkonstante nur um einen Phasenfaktor ändern:

$$\hat{T} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \lambda = e^{ika} \quad (3.4.6)$$

Jeder dieser Zustände wird durch Angabe von  $\lambda$  bzw.  $k$  ( $-\pi/a < k \leq \pi/a$ ) charakterisiert. Wir berechnen die Eigenwerte (und finden  $\lambda_1 \lambda_2 = 1 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2^*$ ), setzen  $\lambda_1 + \lambda_2 = 2\cos(ka)$ , und erhalten folgende Bestimmungsgleichung für  $q = q(k)$ :

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{\Omega}{q} \sin(qa) \quad (3.4.7)$$

Die Lösung,  $q(k)$ , eingesetzt in  $\hbar^2 q^2/2m$ , liefert dann die erlaubten Energiewerte,  $E_k$ . Siehe Bild 3.9 und Bild 3.10.

Abbildung 3.9:

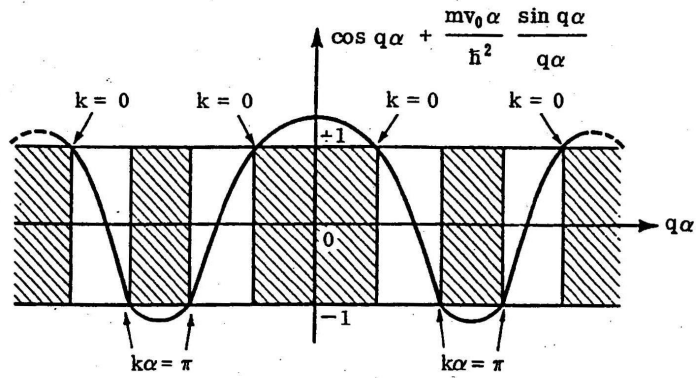


Fig. 4-15

Graphical solution of Eq. (4-121). Allowed values of  $q$  are in the unshaded areas on the  $q$  axis.

Abbildung 3.10:

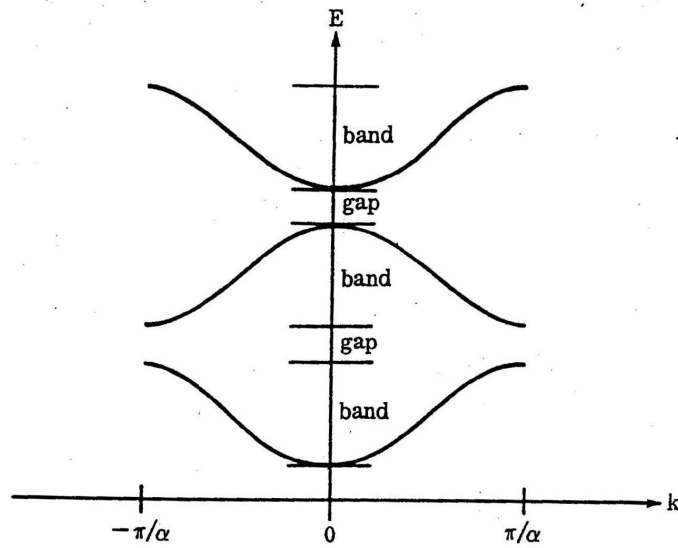


Fig. 4-16

Energy bands for the one-dimensional periodic array of delta functions.

(b) Wie werden diese Energiezustände nun durch die vielen Elektronen in einem Festkörper besetzt? Zunächst erinnern wir an die periodischen Randbedingungen (siehe Kapitel 2.3), die dafür sorgen, dass in jedem Band genau  $N$  (= Zahl der Gitterplätze) diskrete  $k$ -Werte möglich sind. Weiterhin sind Elektronen *Fermionen*, und das *Pauli-Prinzip* besagt, dass zwei Fermionen nicht den gleichen Zustand besetzen können. (Wir kommen in Kapitel 6 darauf zurück.) Allerdings müssen wir noch berücksichtigen, dass Elektronen noch zwei Spineinstellmöglichkeiten haben („up“ und „down“). Somit ergibt sich zum Beispiel: Wenn der Festkörper genau  $2N$  Elektronen enthält, ist genau das unterste Band besetzt, Anregungen erfordern eine endliche Energie („Halbleiter“), während bei einer größeren oder kleineren Elektronenzahl ein Band nur teilweise besetzt ist („Leiter“). In einem Leiter ist die Anregungsenergie beliebig klein (unendliches Volumen vorausgesetzt); das bedeutet insbesondere, dass die Elektronen ohne Schwierigkeiten von einem elektrischen Feld beschleunigt werden können, d. h. es fließt elektrischer Strom bei Anlegen eines Feldes.

### 3.5 Periodische Potentiale [§ 15]

Wir wollen einige der Überlegungen im letzten Paragraphen formalisieren (wir bleiben aber bei  $D = 1$ ). Wir gehen von einem periodischen Potential aus,

$$V(x) = V(x + a), \quad (3.5.1)$$

und definieren einen *Translationsoperator*  $\hat{T}$  über folgende Relation:

$$\langle x | \hat{T} | \Psi \rangle = \langle x + a | \Psi \rangle, \quad (3.5.2)$$

d. h.  $\hat{T}$  verschiebt in der Ortsdarstellung das Argument um eine Gitterkonstante. Anhand der Taylor-Reihe

$$\Psi(x + a) = \Psi(x) + a\Psi'(x) + \frac{1}{2}a^2\Psi''(x) + \dots \quad (3.5.3)$$

erkennen wir aber auch sofort, dass gilt:

$$\Psi(x + a) = \exp\left(a\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x), \quad (3.5.4)$$

d. h. der Translationsoperator ist gegeben durch

$$\hat{T} = e^{ia\hat{p}/\hbar} \quad (3.5.5)$$

und somit ein unitärer Operator,  $\hat{T}^+ = \hat{T}^{-1}$ . Im Fall eines periodischen Potentials vertauscht der Translationsoperator mit dem Hamiltonoperator,

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0, \quad (3.5.6)$$

d. h. insbesondere können wir die Eigenzustände zu  $\hat{H}$  so wählen, dass sie auch Eigenzustände zu  $\hat{T}$  sind! Wie schon im letzten Paragraphen diskutiert, sollte die Wellenfunktion sich bei Translation nur um einen Phasenfaktor ändern. Daher

$$\langle x | \hat{T} | \Psi \rangle = \lambda \langle x | \Psi \rangle, \quad \lambda = e^{ika} \quad (3.5.7)$$

$$\Psi(x+a) = e^{ika} \Psi(x) \quad (3.5.8)$$

Wenn wir weiterhin  $u_k(x)$  definieren über

$$\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad (3.5.9)$$

so erkennen wir, dass  $u_k(x)$  eine gitterperiodische Funktion sein muss:

$$u_k(x+a) = u_k(x). \quad (3.5.10)$$

Eine Wellenfunktion dieses Typs heißt *Blochwelle*. Da  $k$  und  $k + 2\pi n/a$  den gleichen Eigenwert des Translationsoperators liefern können wir die  $k$ -Werte auf das Intervall

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a} \quad (3.5.11)$$

einschränken. Ergebnis: In einem periodischen Potential lässt sich ein kompletter Satz von Eigenzuständen in der Form von Blochwellen konstruieren, die dann gleichzeitig Eigenzustände des Translationsoperators sind. Die Energieeigenwerte tragen dann den Index „ $k$ “.

### 3.6 Bilder, Zeitentwicklungsoperator [§ 16]

(a) Wir untersuchen jetzt, wie der Erwartungswert eines Operators  $\hat{A}(t)$ , der im Allgemeinen selbst zeitabhängig sein kann, von der Zeit abhängt. Der Hamiltonoperator des Systems,  $\hat{H}$ , sei zeitunabhängig. Dann lässt sich die Schrödinger-Gleichung formal lösen:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle. \quad (3.6.1a)$$

*Anmerkung:* Es sei  $\{|n\rangle\}$  ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenzuständen zum Hamiltonoperator mit Eigenwerten  $E_n$ , und  $|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ . Dann folgt sofort mit (3.6.1a):

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (3.6.1b)$$

Außerdem finden wir für den Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{A}_H(t) | \Psi(0) \rangle \quad (3.6.2)$$

mit

$$\hat{A}_H = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (3.6.3)$$

Dies ist das sogenannte *Heisenberg-Bild* des Operators  $\hat{A}$ . Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion wurde auf den Operator geschoben. Die „alte“ Version heißt im Gegensatz dazu *Schrödinger-Bild*. Somit können wir leicht die Bewegungsgleichung für  $\hat{A}_H$  angeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)_H, \quad (3.6.4)$$

wobei im Moment – siehe aber auch (d) –  $\hat{H}_H = \hat{H}$ , da  $e^{\pm i\hat{H}t/\hbar}$  mit  $\hat{H}$  vertauscht.

(b) Als Beispiel betrachten wir

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (3.6.5)$$

Unter Benutzung der Vertauschungsrelationen von Ort und Impuls ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{r}}_H = \frac{\hat{\mathbf{p}}_H}{m} \quad (3.6.6)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{p}}_H = -\nabla V(\hat{\mathbf{r}}_H), \quad (3.6.7)$$

d. h. die Bewegungsgleichung für die Operatoren im Heisenberg-Bild hat die gleiche Form wie die klassischen Bewegungsgleichungen. Die Ähnlichkeit beruht darauf, dass der Kommutator, dividiert durch ( $i\hbar$ ), der Poisson-Klammer der klassischen Mechanik entspricht. Im Allgemeinen lassen sich (3.6.6) und (3.6.7) nur schwer lösen. Ausnahme: freie Teilchen, konstantes Kraftfeld, harmonischer Oszillator. In diesen Fällen sind die Ergebnisse der klassischen Mechanik direkt übertragbar.

Harmonischer Oszillator:

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin(\omega t) \quad (3.6.8)$$

$$\hat{p}_H(t) = \hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t) \quad (3.6.9)$$

(c) Wechselwirkungsdarstellung (Dirac-Bild). Ein häufig auftretender Fall ist

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \quad (3.6.10)$$

mit einem zeitabhängigen Anteil  $\hat{H}_1(t)$ . Dann ist eine gemischte Version bequem, d. h. wir verschieben den durch  $\hat{H}_0$  bestimmten Anteil der Zeitabhängigkeit von den Zuständen zu den Operatoren:

$$\hat{A}_D(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (3.6.11)$$

$$|\Psi_D(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle \quad (3.6.12)$$



Die Bewegungsgleichung für  $\hat{A}_D$  ist die Folgende:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_D = [\hat{A}_D, \hat{H}_0] + i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)_D \quad (3.6.13)$$

(d) Im allgemeinen Fall eines zeitabhängigen Hamiltonoperators führen wir den (unitären) Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0)$  ein:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (3.6.14)$$

wobei  $t_0$  den „Anfangszeitpunkt“ bezeichnet. Es gilt

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (3.6.15)$$

Das Heisenberg-Bild ist jetzt gegeben durch

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0). \quad (3.6.16)$$

Die Bewegungsgleichung ist aber unverändert (3.6.4). *Achtung:* Jetzt ist  $\hat{H}_H$  nicht gleich  $\hat{H}$  ! Wegen  $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$  können wir aus (3.6.14) leicht eine Integralgleichung gewinnen:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \quad (3.6.17)$$

**Wichtig:** (3.6.14) lässt sich nicht einfach lösen, da  $\hat{H}(t)\hat{H}(t') \neq \hat{H}(t')\hat{H}(t)$  für  $t \neq t'$  ! Nach mehrmaliger Iteration von (3.6.17) kann man sich aber von folgender, kompakter Darstellung überzeugen:

$$\hat{U}(t, t_0) = T_t \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right) \quad (3.6.18)$$

Hier ist  $T_t$  der *Dysonsche Zeitordnungsoperator*, definiert durch

$$T_t \left[ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases} \quad (3.6.19)$$

*Verallgemeinerung für mehrere Zeiten:* Der Zeitordnungsoperator ordnet in einem Ausdruck der Form

$$T_t \left[ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \hat{C}(t_3) \dots \hat{X}(t_n) \right]$$

die Operatoren so an, dass die späteren Zeiten links von den früheren Zeiten stehen. Beweis von (3.6.18): Entwickeln der Exponentialfunktion; mehrmaliges Vertauschen der Integrationsvariablen; Vergleich mit der Reihe, die durch unendlichfache Iteration von (3.6.17) entsteht.

### 3.7 Propagator, Wegintegraldarstellung [§ 17]

(a) Der Hamiltonoperator sei zeitunabhängig; die stationären Zustände bezeichnen wir mit  $|n\rangle$ , die zugehörigen Energieeigenwerte mit  $E_n$ . Zur Vereinfachung sei  $D = 1$ . Der Propagator ist definiert – vergleiche Kapitel 2.4 – über die Relation

$$K(xt, x't') = \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} | x' \rangle \Theta(t - t'). \quad (3.7.1)$$

Durch Einschleiben des Einheitsoperators in der Form

$$\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (3.7.2)$$

erhalten wir

$$K(xt, x't') = \sum_n \langle x | n \rangle e^{-iE_n(t-t')/\hbar} \langle n | x' \rangle \Theta(t - t'), \quad (3.7.3)$$

und für die Fourier-Transformierte bezüglich der Zeitdifferenz:

$$K(x, x', E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt/\hbar} K(xt, x't') \quad (3.7.4)$$

$$\Rightarrow K(x, x', E) = i\hbar \sum_n \frac{\langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle}{E - E_n} \quad (3.7.5)$$

Hier ist bei  $E$  ein positiver Imaginärteil zuzufügen,  $E \rightarrow E + i0$ , um die Integration in (3.7.4) sinnvoll zu erklären. Damit ist  $K(x, x', E)$  eine analytische Funktion in der oberen Halbebene, eine sogenannte *retardierte* Funktion. In koordinaten-freier Darstellung setzen wir

$$\hat{K}(t, t') = e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} \Theta(t - t') \quad (3.7.6)$$

und finden die Bewegungsgleichung

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \hat{K} = \delta(t - t'). \quad (3.7.7)$$

Daher heißt  $\hat{K}(t - t')$  auch Green'sche Funktion.

(b) Wir betrachten wieder (3.7.1) für  $t > t' = 0$  und unterteilen das Zeitintervall  $N$ -fach:  $\varepsilon = t/N$ ,  $t_j = j\varepsilon$ , und

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \prod_{j=1}^N e^{-i\hat{H}(t_j - t_{j-1})/\hbar}. \quad (3.7.8)$$

Durch  $N - 1$ -faches Einschleiben der  $\mathbb{1}$  in der Form

$$\mathbb{1} = \int dx_j |x_j\rangle \langle x_j| \quad (3.7.9)$$

finden wir, analog zu (2.4.12)

$$K(xt, x'0) = \int dx_{N-1} \dots dx_1 K(xt, x_{N-1}t_{N-1}) \dots K(x_1t_1, x'0). \quad (3.7.10)$$

Im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  erhalten wir die Wegintegraldarstellung des Propagators (die von Feynman eingeführt wurde). Zur Berechnung des Kurzzeitpropagators ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) verwenden wir

$$K(x_jt_j, x_{j-1}t_{j-1}) \approx \langle x_j | e^{-i\hat{p}^2\varepsilon/2m\hbar} e^{-iV(\hat{x})\varepsilon/\hbar} | x_{j-1} \rangle \quad (3.7.11)$$

und schieben den Einheitsoperator in der Form

$$\mathbb{1} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle\langle p| \quad (3.7.12)$$

ein. Damit erhalten wir

$$K(x_jt_j, x_{j-1}t_{j-1}) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-iH(p, x_{j-1})\varepsilon/\hbar} e^{ip(x_j - x_{j-1})/\hbar} \quad (3.7.13)$$

und finden, nach einer Gauß'schen Integration,

$$K(x_jt_j, x_{j-1}t_{j-1}) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} e^{iS_{cl}/\hbar} \quad (3.7.14)$$

$$S_{cl} = \varepsilon \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_{j-1}) \right]. \quad (3.7.15)$$

Abgekürzte Schreibweise:

$$K(xt, x'0) = \int Dx e^{iS[x]/\hbar}, \quad (3.7.16)$$

wobei die Integration über alle Wege geht ( $x(0) = x'$ ,  $x(t) = x$  vorausgesetzt).

(c) Bemerkungen

- (3.7.3) und (3.7.4) heißen auch Spektraldarstellung.
- Wir betrachten (3.7.4) für  $x = x'$ , integrieren über  $x$  und setzen  $t - t' = -i\hbar\beta$ . Dann erhalten wir die Größe

$$Z = \int dx K(x, x', t - t' = -i\hbar\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (3.7.17)$$

$Z$ , auch *kanonische Zustandssumme* genannt, ist eine zentrale Größe in der Statistischen Physik.

# Kapitel 4

## Drehimpuls, Zentralpotential

### 4.1 Kommutatoren, Eigenfunktionen [§ 18]

(a) Der Drehimpulsoperator in der Quantenmechanik ist analog seinem klassischen Äquivalent definiert:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (4.1.1)$$

oder in Komponenten:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \text{etc.} \quad (4.1.2)$$

Der Drehimpulsoperator ist hermitesch,  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}^\dagger$ , und damit sind seine Eigenwerte reell. Aus den bekannten Vertauschungsrelationen für  $\hat{\mathbf{r}}$  und  $\hat{\mathbf{p}}$  finden wir eine Reihe von Relationen, z.B.

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{L}_x, \hat{y}] = i\hbar\hat{z}, \quad [\hat{L}_x, \hat{z}] = -i\hbar\hat{y}, \quad (4.1.3)$$

die sich mit Hilfe des antisymmetrischen Einheitstensors dritter Stufe,  $\varepsilon_{ijk}$ , zusammenfassen lassen:

$$[\hat{L}_i, \hat{r}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{r}_k, \quad (4.1.4)$$

wobei über  $k$  summiert wird. In  $\varepsilon_{ijk}$  sind nur diejenigen Komponenten von Null verschiedenen, für die  $(ijk)$  eine Permutation von  $(123)$  ist.  $\varepsilon_{123} = +1$ , und  $\varepsilon_{ijk} = +1$  für eine gerade Anzahl von paarweisen Vertauschungen, und  $\varepsilon_{ijk} = -1$  für eine ungerade Anzahl von paarweisen Vertauschungen der Indizes (ausgehend von  $(123)$ ). Sei  $\mathbf{n}$  ein numerischer Vektor; dann folgt aus (4.1.4):

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{r}_j] = i\hbar(\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{n})_j, \quad \text{also} \quad (4.1.5)$$

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{r}}] = i\hbar(\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{n}). \quad (4.1.6)$$

Aufgrund der „Symmetrie“ zwischen Ort und Impuls gilt analog:

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar(\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{n}). \quad (4.1.7)$$

Die Komponenten von  $\hat{\mathbf{L}}$  vertauschen aber nicht miteinander; wir benutzen die allgemeine Beziehung

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (4.1.8)$$

und finden

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar (\hat{\mathbf{L}} \times \mathbf{n}) \quad (4.1.9)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (4.1.10)$$

Explizit:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad \text{etc.} \quad (4.1.11)$$

bzw. in Vektornotation

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar \hat{\mathbf{L}}. \quad (4.1.12)$$

(b) Als Konsequenz ergibt sich u.a.

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}] = 0, \quad (4.1.13)$$

d. h. das Quadrat des Drehimpulsoperators vertauscht mit jeder einzelnen Komponente. Somit können wir, wenn wir einen vollständigen Satz von Eigenzuständen zu  $\hat{\mathbf{L}}^2$  gefunden haben, diese so wählen, dass sie auch Eigenzustände zu *einer der Komponenten* von  $\hat{\mathbf{L}}$  sind. Wir wählen als diese *willkürlich* die  $z$ -Komponente. Alle Eigenwerte von  $\hat{\mathbf{L}}^2$  sind positiv, und wir setzen diese gleich  $\hbar^2 l(l+1)$  (mit  $l > 0$ ). Dies ist dimensionsmäßig korrekt und definiert  $l$ . Außerdem setzen wir die Eigenwerte von  $\hat{L}_z$  gleich  $\hbar m$ ; die möglichen Werte, die  $l$  und  $m$  annehmen können, sind aber noch zu bestimmen. Entsprechend bezeichnen wir die Eigenfunktionen mit  $|l, m\rangle$ :

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle; \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle. \quad (4.1.14)$$

Schließlich definieren wir noch

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (4.1.15)$$

und finden folgende Relationen:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm \quad (4.1.16)$$

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z \quad (4.1.17)$$

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \quad (4.1.18)$$

sowie  $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z$ . Außerdem ist  $(\hat{L}_+)^+ = \hat{L}_-$ , und daher gilt für jeden Zustand, und insbesondere auch für  $|l, m\rangle$ ,

$$\langle l, m | \hat{L}_+ \hat{L}_- |l, m\rangle \geq 0. \quad (4.1.19)$$

Wenn wir hier (4.1.17) und (4.1.18) verwenden, erhalten wir

$$\begin{aligned} l(l+1) - m^2 + m &\geq 0 \quad \text{sowie} \\ l(l+1) - m^2 - m &\geq 0. \end{aligned} \quad (4.1.20)$$

Diese beiden Relationen bedeuten, dass  $|l + 1/2|$  größer sein muss als  $|m \pm 1/2|$ , und dies geht nur für

$$-l \leq m \leq +l. \quad (4.1.21)$$

Im Weiteren gehen wir vor wie bei der Konstruktion der Eigenzustände des harmonischen Oszillators. Aus (4.1.16) folgt

$$\hat{L}_z \hat{L}_- |l, m\rangle = \hat{L}_- (\hbar m - \hbar) |l, m\rangle = \hbar(m-1) \hat{L}_- |l, m\rangle, \quad (4.1.22)$$

d. h.  $\hat{L}_- |l, m\rangle \propto |l, m-1\rangle$ :  $\hat{L}_-$  verringert  $m$ , die azimutale Quantenzahl, um 1, und entsprechend vergrößert  $\hat{L}_+$   $m$  um 1. Da  $|l, m\rangle$  normiert ist, finden wir mit (4.1.17)

$$\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \hbar C_\pm |l, m \pm 1\rangle \quad (4.1.23)$$

$$C_\pm^2 = l(l+1) - m(m \pm 1). \quad (4.1.24)$$

Aus diesen Relationen ergibt sich: Wenn  $m$  ein Eigenwert von  $\hat{L}_z/\hbar$  ist, so sind auch  $m \pm 1, m \pm 2$ , etc. Eigenwerte. Andererseits muss  $|m| \leq l$  sein. Dies geht nur, wenn die aufsteigende Reihe mit dem Wert  $m = l$  und die absteigende Reihe mit dem Wert  $m = -l$  abbricht [ $C_\pm(m = \pm l) = 0$ ]. Die möglichen Werte von  $m$  sind also  $+l$  minus eine ganze Zahl bzw.  $-l$  plus eine ganze Zahl. Daher muss  $2l$  eine ganze Zahl sein, d. h.  $l$  ist ganz- oder halbzahlig. Für jedes vorgegebene  $l$  gibt es  $2l + 1$  verschiedene  $m$ -Werte,

$$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l. \quad (4.1.25)$$

Orthogonalitätsrelation:

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (4.1.26)$$

Bemerkung: Die Werte von  $l$ , die beim Bahndrehimpuls  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  möglich sind, sind ganzzahlig. Wenn jedoch interne Freiheitsgrade betroffen sind – Eigendrehimpuls (Spin) –, kann die entsprechende Größe ganz- oder halbzahlig sein.

## 4.2 Drehungen [§ 19]

Wir hatten bereits in Kap. 3.5 gesehen, dass der Impulsoperator Translationen im Ortsraum „erzeugt“,

$$\langle \mathbf{r} | e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar} | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (4.2.1)$$

Entsprechend lassen sich mit dem Drehimpulsoperator Drehungen beschreiben. Wir betrachten zunächst den Operator

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{\mathbf{r}} + \vec{\omega} \times \hat{\mathbf{r}}, \quad (4.2.2)$$

wobei  $\vec{\omega}$  ein infinitesimaler Vektor ist. [Aus technischen Gründen wird ein „Pfeil“ benutzt, um den Drehvektor  $\vec{\omega}$  zu kennzeichnen.] Wir benutzen (4.1.6) und bestätigen durch Entwicklung leicht die Beziehung

$$\hat{\mathbf{r}}' = e^{i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \hat{\mathbf{r}} e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \quad (4.2.3)$$

( $e^x \approx 1 + x$ , quadratische Terme weglassen). Diese Relation gilt auch für endliche  $\vec{\omega}$ :  $\hat{\mathbf{r}}'$  ist der um die Achse  $\vec{\omega}/|\vec{\omega}|$  um den Winkel  $|\vec{\omega}| = \omega$  gedrehte Ortsoperator! Zur Illustration setzen wir  $\omega \rightarrow \omega + \delta\omega$ , d. h. wir betrachten Rotationen um eine feste Achse; dann folgt aus (4.2.3)

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\omega} \hat{\mathbf{r}}' &= e^{i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{|\vec{\omega}|}, \hat{\mathbf{r}} \right] e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \\ &\stackrel{(4.1.6)}{=} \vec{\omega} \times \frac{\hat{\mathbf{r}}'}{|\vec{\omega}|}. \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

Dies ist eine (z.B. aus der klassischen Mechanik) bekannte Beziehung.

Wie wirkt der Operator  $\exp(i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar)$  auf eine Wellenfunktion? Da  $\hat{\mathbf{r}}'$  der „gedrehte Operator“ ist, setzen wir

$$\hat{\mathbf{r}}' |\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle. \quad (4.2.5)$$

Hier ist  $\mathbf{r}'$  die durch eine Drehung aus  $\mathbf{r}$  hervorgegangene Koordinate. Wir benutzen (4.2.3) und erhalten

$$\hat{\mathbf{r}} e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} |\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}' e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} |\mathbf{r}\rangle. \quad (4.2.6)$$

Daher ist der Zustand  $e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} |\mathbf{r}\rangle$  ein Eigenzustand zum Ortsoperator mit Eigenwert  $\mathbf{r}'$ , d. h.

$$|\mathbf{r}'\rangle = e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} |\mathbf{r}\rangle \quad (4.2.7)$$

und

$$\langle \mathbf{r}' | = \langle \mathbf{r} | e^{i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar}. \quad (4.2.8)$$

Damit finden wir

$$\Psi(\mathbf{r}') = \langle \mathbf{r}' | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | e^{i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \Psi' \rangle \quad (4.2.9)$$

bzw. (von rechts nach links gelesen)

$$\Psi'(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}'). \quad (4.2.10)$$

Die gedrehte Wellenfunktion,  $|\Psi'\rangle$ , bekommt in der Ortsdarstellung als Argument die gedrehte Koordinate.

Anmerkung (1): Die Überlegungen zur Rotation des Ortsoperators, vgl. (4.2.3), gelten für jeden Vektoroperator.

Anmerkung (2): Wir setzen formal (vgl. (4.2.9), aber auch (4.2.7))

$$|\Psi'\rangle = \hat{R}|\Psi\rangle, \quad \hat{R} = e^{i\vec{\omega}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar} \quad (4.2.11)$$

und fordern, dass der Erwartungswert in einem beliebigen, vorgegebenen Zustand invariant unter Rotationen sein soll, d. h.

$$\langle\Psi|\hat{\mathbf{q}}|\Psi\rangle = \langle\Psi'|\hat{\mathbf{q}}'|\Psi'\rangle, \quad (4.2.12)$$

wobei  $\hat{\mathbf{q}}$  ein beliebiger Vektoroperator ist. Dann folgt (wegen  $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^+$ ;  $\hat{R}$  ist ein unitärer Operator  $\Leftrightarrow$  Erhaltung der Norm)

$$\hat{\mathbf{q}} = \hat{R}^{-1}\hat{\mathbf{q}}'\hat{R} \quad (4.2.13)$$

bzw. (vgl. (4.2.3))

$$\hat{\mathbf{q}}' = \hat{R}\hat{\mathbf{q}}\hat{R}^{-1}. \quad (4.2.14)$$

Das bedeutet anschaulich, dass eine Drehung des Zustands *und* der physikalischen Größe den Erwartungswert unverändert lässt. Entsprechend gilt

$$\Psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\Psi\rangle = \langle\mathbf{r}|\hat{R}^{-1}\hat{R}|\Psi\rangle = \langle\mathbf{r}''|\Psi'\rangle = \Psi'(\mathbf{r}'') \quad (4.2.15)$$

mit  $|\mathbf{r}''\rangle = \hat{R}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}'(-\vec{\omega})\rangle$ : Eine Drehung von Zustand und Basis (in die gleiche Richtung!) lässt die Komponenten des Zustands unverändert.

Anmerkung (3): Häufig werden Drehungen auch durch die Euler-Winkel  $\alpha, \beta, \gamma$  beschrieben:

$$\hat{R} = e^{i\gamma\hat{L}_z/\hbar} e^{i\beta\hat{L}_y/\hbar} e^{i\alpha\hat{L}_z/\hbar} \quad (4.2.16)$$

Der Zusammenhang von  $\alpha, \beta, \gamma$  mit  $\vec{\omega}$  lässt sich nicht leicht herstellen.

### 4.3 Kugel(flächen)funktionen [§ 20]

(a) Um die Darstellung des Drehimpulsoperator in Kugelkoordinaten herzuleiten, können wir direkt von (4.1.1) in der Ortsdarstellung ausgehen:

$$\hat{\mathbf{L}} \rightarrow -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla \quad (4.3.1)$$



und Kugelkoordinaten einführen:

$$x = r \sin \Theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \Theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \Theta. \quad (4.3.2)$$

Wir können aber auch von (4.2.8) ausgehen und infinitesimale Drehungen um die kartesischen Achsen betrachten, z.B.  $\vec{\omega} = (0, 0, \omega)$ ,  $\omega \rightarrow 0$ :

$$\langle r', \Theta', \varphi' | = \langle r, \Theta, \varphi | \left[ 1 + \frac{i\omega \hat{L}_z}{\hbar} \right]. \quad (4.3.3)$$

Nun wissen wir aber, dass bei einer derartigen Drehung  $r' = r$ ,  $\Theta' = \Theta$ ,  $\varphi' = \varphi + \omega$  zu setzen ist:

$$\langle r, \Theta, \varphi + \omega | = \langle r, \Theta, \varphi | \left[ 1 + \frac{i\omega \hat{L}_z}{\hbar} \right]. \quad (4.3.4)$$

Mit

$$\langle r, \Theta, \varphi + \omega | \approx \langle r, \Theta, \varphi | + \omega \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \Theta, \varphi | \quad (4.3.5)$$

finden wir somit durch Vergleich

$$\langle r, \Theta, \varphi | \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \Theta, \varphi |. \quad (4.3.6)$$

Entsprechend gilt für eine infinitesimale Drehung um die  $x$ -Achse:

$$\Theta' = \Theta - \omega \sin \varphi, \quad \varphi' = \varphi - \omega \cot \Theta \cos \varphi, \quad (4.3.7a)$$

und um die  $y$ -Achse:

$$\Theta' = \Theta + \omega \cos \varphi, \quad \varphi' = \varphi - \omega \cot \Theta \sin \varphi. \quad (4.3.7b)$$

Resultat:

$$\hat{L}_x \rightarrow -i\hbar \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \cot \Theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (4.3.8)$$

$$\hat{L}_y \rightarrow -i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \cot \Theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (4.3.9)$$

$$\hat{L}_\pm \rightarrow -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm i \frac{\partial}{\partial \Theta} - \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (4.3.10)$$

Auch das Quadrat des Drehimpulsoperators lässt sich entsprechend darstellen:

$$\hat{L}^2 \rightarrow -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) \right] \quad (4.3.11)$$

Mit Hilfe dieser Beziehung lässt sich der Laplace-Operator umschreiben:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2}, \quad (4.3.12)$$

wobei  $L^2$  jetzt gerade der in (4.3.11) angegebene Differentialoperator ist; nach Multiplikation mit  $-\hbar^2/2m$  ergibt sich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} \quad (4.3.13)$$

mit  $p_r = -i\hbar(\partial/\partial r + 1/r)$ . In dieser Form sollten Erinnerungen an die klassische Mechanik (Kepler-Problem) und auch an die Elektrodynamik (Laplace-Gleichung in Kugelkoordinaten) wach werden!

(b) Die Eigenfunktionen von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  in der Ortsdarstellung sind gewisse Funktionen, auch Kugelflächenfunktionen genannt, für die sich folgende Notation eingebürgert hat:

$$\langle \Theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{lm}(\Theta, \varphi). \quad (4.3.14)$$

Anmerkung: Die Bedingung „ $m$  (und damit auch  $l$ ) ist ganzzahlig“ folgt aus der Forderung der Eindeutigkeit der Wellenfunktion bei einer Drehung um  $2\pi$ :

$$\begin{aligned} \langle \Theta, \varphi + 2\pi | l, m \rangle &= \langle \Theta, \varphi | e^{2\pi i \hat{L}_z/\hbar} | l, m \rangle \\ &= e^{2\pi i m} \langle \Theta, \varphi | l, m \rangle = \langle \Theta, \varphi | l, m \rangle. \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

Die Differentialgleichungen für die Kugelfunktionen ergeben sich aus  $\hat{L}_z | l, m \rangle = \hbar m | l, m \rangle$  und  $\hat{L}^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l+1) | l, m \rangle$ . Es ist klar, dass der  $\varphi$ -abhängige Teil  $\propto e^{im\varphi}$  ist, vgl. (4.3.6). Wir machen einen Produktansatz,

$$Y_{lm}(\Theta, \varphi) \propto e^{im\varphi} f(\xi), \quad \xi = \cos \Theta, \quad (4.3.16)$$

und erhalten folgende Differentialgleichung:

$$\left[ \frac{m^2}{1-\xi^2} - \frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] f(\xi) = l(l+1) f(\xi) \quad (4.3.17)$$

bzw.

$$\left[ (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} (1-\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} + l(l+1)(1-\xi^2) - m^2 \right] f(\xi) = 0. \quad (4.3.18)$$

Lösungen dieser Gleichung sind von der Form

$$f(\xi) \propto (1-\xi^2)^{|m|/2} P_l^{|m|}(\xi). \quad (4.3.19)$$

$P_l^{|m|}(\xi)$  heißt zugeordnetes Legendre-Polynom und ist ein Polynom vom Grad  $l - |m|$  ( $\geq 0$ ):

$$P_l^{|m|}(\xi) = \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi). \quad (4.3.20)$$

Die Funktionen  $P_l(\xi)$  heißen Legendre-Polynome,

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l. \quad (4.3.21)$$

Zusammenfassend erhalten wir

$$Y_{lm}(\Theta, \varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} (1 - \xi^2)^{|m|/2} P_l^{|m|}(\xi). \quad (4.3.22)$$

Die Konstante  $C_{lm}$  ist durch die Normierung bestimmt,

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\Theta, \varphi) Y_{l'm'}(\Theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (4.3.23)$$

und ergibt sich zu

$$C_{lm} = \begin{cases} (-1)^m & \text{für } m \geq 0 \\ +1 & \text{für } m < 0 \end{cases} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}. \quad (4.3.24)$$

(Das Vorzeichen für  $m > 0$  ist natürlich nur Konvention.)

Alternativ können wir auch von der Beziehung  $\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0$  ausgehen, d. h. (vgl. (4.3.10))

$$\left( i \frac{\partial}{\partial \Theta} - \cot \Theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{ll}(\Theta, \varphi) = 0. \quad (4.3.25)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist  $\propto e^{il\varphi} (\sin \Theta)^l$ . Die übrigen  $Y_{lm}$  lassen sich dann durch mehrmaliges Anwenden von  $\hat{L}_-$  konstruieren.

Beispiele:

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta, & Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \Theta, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \Theta - 1), & Y_{2\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \Theta \cos \Theta e^{\pm i\varphi}, \\ & & Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \Theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}$$

Anmerkung (1): Die Paritätsoperation  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  entspricht in Kugelkoordinaten  $\Theta \rightarrow \pi - \Theta$ ,  $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ . Anhand der expliziten Form sehen wir, dass unter dieser Operation

$$Y_{lm}(\Theta, \varphi) \rightarrow (-1)^l Y_{lm}(\Theta, \varphi), \quad (4.3.26)$$

d. h. Zustände mit geradem (ungeradem)  $l$  haben eine gerade (ungerade) Parität. Formal (vgl. (3.3.1)):

$$\hat{P}|l, m\rangle = (-1)^l |l, m\rangle \quad (4.3.27)$$

wegen  $\langle \mathbf{r} | \hat{P} | \Psi \rangle = \langle -\mathbf{r} | \Psi \rangle$ .

Anmerkung (2): Die Kugelflächenfunktionen bilden *ein vollständiges orthonormales Funktionensystem auf der Einheitskugel*, d. h. jede Funktion von  $\Theta, \varphi$  kann nach  $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$  entwickelt werden. Formal:

$$\sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m| = \mathbb{1}, \quad (4.3.28)$$

aber auch

$$\int d\Omega |\Theta, \varphi\rangle \langle \Theta, \varphi| = \mathbb{1} \quad (4.3.29)$$

(Vgl. zum Beispiel (4.1.26) mit (4.3.23)).

Anmerkung (3): Es gilt das „Additionstheorem“

$$P_l(\cos \alpha) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Theta', \varphi') Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (4.3.30)$$

Hier ist  $\alpha$  der Winkel zwischen den durch  $(\Theta', \varphi')$  und  $(\Theta, \varphi)$  festgelegten Einheitsvektoren.

## 4.4 Zentralkräfte [§ 21]

(a) Nachdem wir die Theorie des Drehimpulses entwickelt haben, können wir jetzt die Bewegung eines Teilchens in einem Zentralpotential diskutieren (d. h. das Potential hängt nur vom Abstand  $r = |\mathbf{r}|$  ab):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\mathbf{r}}|). \quad (4.4.1)$$

Der Hamiltonoperator ist dann invariant unter Rotationen um den Ursprung, d. h. der Drehimpuls ist eine Erhaltungsgröße:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0 \quad (4.4.2)$$

und insbesondere

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0. \quad (4.4.3)$$

Dies bedeutet, dass wir einen vollständigen Satz von Eigenzuständen finden können, die gleichzeitig Eigenzustände von  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  und  $\hat{L}_z$  sind. Wir nennen diese  $|E, l, m\rangle$ . Außerdem vertauscht  $\hat{H}$  auch mit  $\hat{L}_x$  und  $\hat{L}_y$ , d. h. auch mit  $\hat{L}_\pm$ . Wegen

$$\hat{H}\hat{L}_\pm|E, l, m\rangle = \hat{L}_\pm\hat{H}|E, l, m\rangle = E\hat{L}_\pm|E, l, m\rangle \quad (4.4.4)$$

sind die Zustände  $\hat{L}_\pm|E, l, m\rangle$  ebenfalls Eigenzustände zu  $\hat{H}$  mit dem gleichen Eigenwert  $E$ . Konsequenz: Das zu einem festen  $l$ -Wert gehörige Energieniveau ist auf jeden Fall  $(2l + 1)$ -fach entartet – eine direkte Folgerung aus der Rotationsinvarianz des Problems! In der Ortsdarstellung (und in Kugelkoordinaten) lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (4.4.5)$$

und wir machen wieder einen Produktansatz:

$$\Psi(\mathbf{r}) = f_l(r) Y_{lm}(\Theta, \varphi). \quad (4.4.6)$$

Hier hängt der erste Faktor,  $f_l(r)$ , wie durch die Notation angedeutet, nicht von  $m$  ab. Wenn wir dann noch  $f_l(r) = u_l(r)/r$  setzen, erhalten wir

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r), \quad (4.4.7)$$

welches wie eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung aussieht (allerdings:  $0 \leq r < \infty$ ), die zusätzlich das *Zentrifugalpotential* enthält. (Dieser Anteil ist nur für  $l > 0$  wirksam.) Wie wirkt sich diese Zentrifugalbarriere aus? Dazu betrachten wir (4.4.7) für  $r \rightarrow 0$ , unter der Annahme, dass  $V(r)$  schwächer als  $1/r^2$  divergiert. Dann können wir  $V(r)$  vernachlässigen und erhalten

$$r \rightarrow 0: \quad u_l \propto r^{l+1} \text{ oder } \propto r^{-l}. \quad (4.4.8)$$

Die zweite Lösung ist unphysikalisch (da nicht normierbar). Resultat: Die Zentrifugalbarriere sorgt dafür, dass ein Teilchen mit endlichem Drehimpuls nicht zu nah an den Ursprung kommt,  $f_l(r) \approx r^l$ , und das ist umso mehr so, je größer  $l$  wird.

Unter der Annahme  $V(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$  finden wir für große Abstände

$$r \rightarrow \infty, E > 0: \quad f_l \propto \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (4.4.9)$$

$$r \rightarrow \infty, E < 0: \quad f_l \propto \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (4.4.10)$$

mit  $\hbar k = \sqrt{2mE}$  für  $E > 0$  und  $\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}$  für  $E < 0$ .

Nomenklatur:

- $l = 0$ :  $s$ -Zustände („sharp“)  
 $l = 1$ :  $p$ -Zustände („principal“)  
 $l = 2$ :  $d$ -Zustände („diffusive“)  
 $l = 3$ :  $f$ -Zustände („fundamental“)

(b) Als Beispiel betrachten wir einen dreidimensionalen Potentialtopf,

$$V(r) = \begin{cases} -V & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (4.4.11)$$

Für dieses – und jedes andere stückweise konstante – Potential ist eine Gleichung vom Typ

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] f_l(r) = 0 \quad (4.4.12)$$

zu lösen, bzw. mit  $k^2 \leftrightarrow -\kappa^2$  (und geeigneter Identifizierung von  $k$  bzw.  $\kappa$ ). Die Lösungen hängen von  $x = kr$  ab und heißen

$$\begin{aligned}
 j_l(x) &: \text{ sphärische Besselfunktionen} \\
 n_l(x) &: \text{ sphärische Neumannfunktionen} \\
 h_l(x) = j_l(x) + in_l(x) &: \text{ sphärische Hankelfunktionen}
 \end{aligned}$$

Beispiele:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad (4.4.13)$$

$$j_2(x) = \left( \frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x, \quad (4.4.14)$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}, \quad (4.4.15)$$

$$n_2(x) = -\left( \frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \cos x - \frac{3}{x^2} \sin x. \quad (4.4.16)$$

Asymptotisches Verhalten:

$$x \rightarrow 0: \quad \begin{aligned} j_l(x) &\propto x^l \\ n_l(x) &\propto -x^{-(l+1)} \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

$$x \rightarrow \infty: \quad \begin{aligned} j_l(x) &\rightarrow \frac{1}{x} \sin \left( x - l\frac{\pi}{2} \right) \\ n_l(x) &\rightarrow -\frac{1}{x} \cos \left( x - l\frac{\pi}{2} \right) \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

Wir erkennen an (4.4.18) dass  $h_l(x)$  asymptotisch eine auslaufende, und  $h_l^*(x)$  asymptotisch eine einlaufende Welle beschreibt. Nahe dem Ursprung ( $x \rightarrow 0$ ) ist  $n_l(x)$  auszuschließen. Für den Fall  $k^2 \rightarrow -\kappa^2$  ist  $h_l(i\kappa r)$  die korrekte Lösung (abfallend für  $r \rightarrow \infty$ ).

Mit Hilfe der beschriebenen Funktionen (und unter Berücksichtigung der Anschlussbedingungen) lässt sich jedes radialsymmetrische Problem mit einem stückweise konstanten Potential behandeln.

## 4.5 Wasserstoffatom [§ 22]

(a) Ein Wasserstoffatom besteht aus einem Proton („p“) und einem Elektron („e“), die über das Coulombpotential wechselwirken. Der Hamiltonoperator ist

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_p^2}{2m_p} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e} + V(|\hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p|), \quad (4.5.1)$$

mit den beiden Massen  $m_p$  und  $m_e$ , und  $V(r) = -e^2/r$ . Die Impuls- und Ortsoperatoren für das Proton und das Elektron genügen jeweils den üblichen Vertauschungsrelationen, während gemischte Kommutatoren verschwinden, wie z.B.

$$[\hat{\mathbf{p}}_e, \hat{\mathbf{r}}_p] = 0. \quad (4.5.2)$$

Wie auch bei der Behandlung des Kepler-Problems in der klassischen Mechanik gehen wir als erstes zu Schwerpunkt- und Relativvariablen über:

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p, \quad \hat{\mathbf{R}} = \frac{m_p \hat{\mathbf{r}}_p + m_e \hat{\mathbf{r}}_e}{m_p + m_e}, \quad (4.5.3)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{m_e \hat{\mathbf{p}}_p - m_p \hat{\mathbf{p}}_e}{m_p + m_e}, \quad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_p + \hat{\mathbf{p}}_e, \quad (4.5.4)$$

und definieren die reduzierte Masse,  $m = m_e m_p / (m_e + m_p)$ , und die Gesamtmasse,  $M = m_e + m_p$ . Wir finden:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\mathbf{r}}|) \quad (4.5.5)$$

wie in der klassischen Mechanik. Wichtig ist dabei, dass Schwerpunkt- und Relativbewegung unabhängig voneinander sind, und dass Relativimpuls und -koordinate den übliche Impuls-Ort-Vertauschungsrelationen genügen:

$$[\hat{P}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{P}_i, \hat{r}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad (4.5.6)$$

d. h. wir können sofort einen Produktansatz machen und die Schwerpunktbewegung (= ebene Welle) abseparieren. Somit erhalten wir für die Relativbewegung die Schrödinger-Gleichung eines Teilchens mit reduzierter Masse  $m$  im Potential  $-e^2/r$ .

(b) Da der Hamiltonoperator für die Relativbewegung mit  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  vertauscht, machen wir wieder den Ansatz

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Theta, \varphi), \quad (4.5.7)$$

wobei die Quantenzahl „ $n$ “ jetzt den Index „ $E$ “ (siehe Kap. 4.4) ersetzt hat.  $R_{nl}(r)$  genügt folgender Differentialgleichung:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right] (r \cdot R) = E(r \cdot R) \quad (4.5.8)$$

Für jedes  $l$  gibt es eine unendlich große Zahl von (normierbaren) Lösungen mit Index „ $n$ “,  $n \geq l + 1$ , auch Hauptquantenzahl genannt, die gegeben sind durch

$$R_{nl}(r) = -C_{nl} e^{-r/na_0} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right), \quad \text{mit} \quad (4.5.9)$$

$$C_{nl} = \left( \frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}. \quad (4.5.10)$$

Hier ist

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (4.5.11)$$

der Bohrsche Radius und  $L_{n+l}^{2l+1}$  ein assoziiertes Laguerre-Polynom. Wichtig ist, dass die Energiewerte nur von  $n$  abhängen,

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad (\text{Lyman-Formel}) \quad (4.5.12)$$

mit  $e^2/2a_0 \approx 13.6 \text{ eV} = 1 \text{ Rydberg}$ . Für ein fest vorgegebenes  $n$  (und damit  $E_n$ ,  $n \geq 1$ ) kann  $l$  die Werte

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (4.5.13)$$

annehmen. Wir hatten bereits die  $(2l+1)$ -fache Entartung zu festem  $l$  aufgrund der Rotationssymmetrie diskutiert. Die zusätzliche Entartung – die Energie hängt nur von  $n$  und nicht mehr von  $l$  ab – heißt auch „zufällig“ und ist eine Eigenart des Coulomb-Potentials. Die gesamte Entartung eines Energieniveaus wird damit (wir haben den Spin der Elektronen noch nicht berücksichtigt!)

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (4.5.14)$$

(c) Beispiele:

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad (4.5.15)$$

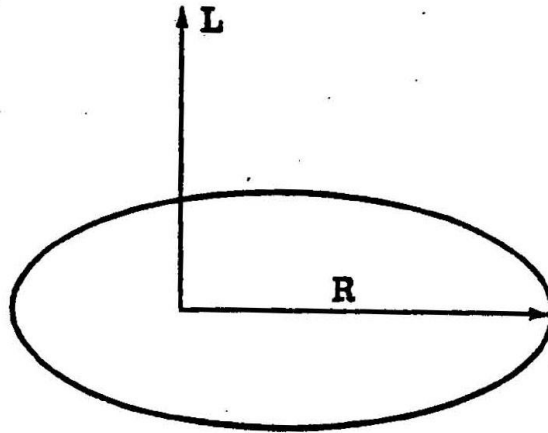
$$R_{20} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \quad (4.5.16)$$

$$R_{21} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-r/2a_0} \quad (4.5.17)$$

(d) Die große Entartung der Niveaus hängt direkt mit einer weiteren Symmetrie des Problems zusammen, die klassisch ihren Niederschlag darin findet, dass gebundene



Abbildung 4.1:

**Fig. 7-1**

**The angular momentum  $\mathbf{L}$  and Lenz's vector  $\mathbf{R}$   
for an elliptic orbit of the classical Kepler problem.**

Bahnen des Kepler-Problems in sich geschlossen sind. Die zugehörige Erhaltungsgröße, der Runge-Lenz-Vektor, ist längs der großen Achse vom Brennpunkt zum Perihel gerichtet (siehe Bild 4.1):

$$\mathbf{R} = \frac{1}{m} \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{e^2}{r} \mathbf{r}. \quad (4.5.18)$$

Die entsprechende quantenmechanische (hermitesche) Version dieses Ausdrucks ist

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}|} \hat{\mathbf{r}}. \quad (4.5.19)$$

Es lässt sich nachrechnen, dass dieser Vektoroperator erhalten ist:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{R}}] = 0. \quad (4.5.20)$$

Die Existenz dieser weiteren erhaltenen Größe kann die zusätzliche Entartung im Wasserstoff-Problem erklären, und es lässt sich auch ein algebraisches Verfahren zur Bestimmung der Energieeigenwerte angeben (siehe Baym, S. 175-179). Weitere Relationen:

$$\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{R}} = 0 \quad (4.5.21)$$

$$\hat{\mathbf{R}}^2 = e^4 + \frac{2\hat{H}(\hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar^2)}{m} \quad (4.5.22)$$

$$[\hat{R}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{R}_k \quad (4.5.23)$$

$$[\hat{R}_i, \hat{R}_j] = i\hbar \frac{-2\hat{H}}{m} \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (4.5.24)$$

*Wichtig:* Wir stellen fest, dass sich der Hamiltonoperator durch andere Erhaltungsgrößen – hier:  $\hat{\mathbf{L}}$  und  $\hat{\mathbf{R}}$  – ausdrücken lässt!

*Allgemeine Regel:* Liegt eine Entartung des Energiespektrums vor, so ist damit eine erhaltene Größe bzw. eine Symmetrie des Problems verknüpft!

# Kapitel 5

## Spin

### 5.1 Spin-1/2: Einführung [§ 23]

(a) Viele Elementarteilchen haben einen „inneren“ Drehimpuls, auch Spin genannt, mit folgender Eigenschaft. Wenn wir die Komponente des Spins entlang einer beliebigen Richtung (im Ortsraum) messen, finden wir entweder den Wert  $+\hbar/2$  oder den Wert  $-\hbar/2$ . Man spricht auch von Spin-1/2-Teilchen; insbesondere das Elektron wird uns noch beschäftigen. Wir ordnen dem Spin einen Vektoroperator  $\hat{\mathbf{s}}$  zu, mit den drei Komponenten  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ , und verlangen, dass diese die üblichen Drehimpuls-Vertauschungsrelationen erfüllen:

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{s}_k. \quad (5.1.1)$$

Die Überlegungen aus Kapitel 4.1 sind direkt anwendbar. Als Basis wählen wir Eigenzustände zu  $\hat{\mathbf{s}}^2$  und  $\hat{s}_z$ :

$$\hat{\mathbf{s}}^2|s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, s_z\rangle, \quad \hat{s}_z|s, s_z\rangle = \hbar s_z|s, s_z\rangle. \quad (5.1.2)$$

Nun ist aber  $s = 1/2$  fest im Folgenden, und daher wird dies nicht immer explizit angegeben;  $s_z$  kann die Werte  $\pm 1/2$  annehmen. In dieser Basis entsprechen den Operatoren folgende Matrizen:

$$\hat{\mathbf{s}}^2 \leftrightarrow \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.3)$$

Abkürzende Notation:

$$s_z = +\frac{1}{2} \leftrightarrow |\uparrow\rangle, \quad s_z = -\frac{1}{2} \leftrightarrow |\downarrow\rangle \quad (5.1.4)$$

Ein beliebiger Zustand lässt sich wie üblich entwickeln:

$$|\Psi\rangle = \chi_\uparrow|\uparrow\rangle + \chi_\downarrow|\downarrow\rangle, \quad (5.1.5)$$

und entspricht einem komplexen Vektor mit zwei Komponenten. Aus der Normierung ( $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  als normiert vorausgesetzt) folgt

$$|\chi_\uparrow|^2 + |\chi_\downarrow|^2 = 1. \quad (5.1.6)$$

Die Vertauschungsrelationen sind erfüllt, wenn wir die Operatoren mit den Pauli-Matrizen identifizieren:

$$\hat{\mathbf{s}} \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \text{mit den Komponenten} \quad (5.1.7)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.8)$$

Das Quadrat dieser Matrizen ist gleich der Einheitsmatrix:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.1.9)$$

und es gilt:

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \quad (5.1.10)$$

$$\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (5.1.11)$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (5.1.12)$$

sowie für zwei Vektoren  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$ :

$$(\mathbf{a} \cdot \vec{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \vec{\sigma}) = a_i b_j \sigma_i \sigma_j = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (5.1.13)$$

Weiterhin lässt sich jede  $2 \times 2$ -Matrix in der Form  $\alpha + \vec{\beta} \cdot \vec{\sigma}$  schreiben;  $\alpha$  und  $\vec{\beta}$  sind reell, wenn die Matrix hermitesch ist.

(b) Aufgrund der Normierungsbedingung lässt sich ein beliebiger Zustand wie folgt darstellen:

$$\chi_\uparrow = e^{i\delta} e^{-i\varphi/2} \cos(\Theta/2), \quad \chi_\downarrow = e^{i\delta} e^{+i\varphi/2} \sin(\Theta/2), \quad (5.1.14)$$

Der Phasenfaktor  $e^{i\delta}$  ist offensichtlich irrelevant; wir setzen  $\delta = 0$ . Der angegebene Zustand ist ein Eigenzustand zu  $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}$ , wobei  $\mathbf{n}$  gerade der durch  $\varphi$  und  $\Theta$  charakterisierte Einheitsvektor ist, mit Eigenwert  $+\hbar/2$ ! Um dies einzusehen, setzen wir  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ , benutzen die Matrixdarstellung

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n} \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} \quad (5.1.15)$$

und setzen

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \begin{pmatrix} \chi_\uparrow \\ \chi_\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_\uparrow \\ \chi_\downarrow \end{pmatrix}. \quad (5.1.16)$$

Resultat:

$$n_x = \cos \varphi \sin \Theta, \quad n_y = \sin \varphi \sin \Theta, \quad n_z = \cos \Theta. \quad (5.1.17)$$

(c) Drehungen im Spinraum. Wir untersuchen die Wirkung, die der Operator  $\hat{d}(\vec{\omega}) = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{s}}/\hbar)$  hat. In der Matrixdarstellung, unter Berücksichtigung von  $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega})^2 = \omega^2$ ,  $\omega = |\vec{\omega}|$ , ergibt sich zunächst

$$\begin{aligned} \mathfrak{d}(\vec{\omega}) &= e^{-i\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega}/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega}/2)^n}{n!} \\ &= \mathbb{1} \cos(\omega/2) - i\vec{\sigma} \cdot \vec{\omega} \sin(\omega/2) \end{aligned} \quad (5.1.18)$$

mit  $\vec{\omega} = \vec{\omega}/\omega$ . Explizit:

$$\mathfrak{d}_{\uparrow\uparrow} = \cos(\omega/2) - i\bar{\omega}_z \sin(\omega/2) = \mathfrak{d}_{\downarrow\downarrow}^* \quad (5.1.19)$$

$$i\mathfrak{d}_{\uparrow\downarrow} = (\bar{\omega}_x - i\bar{\omega}_y) \sin(\omega/2) = i\mathfrak{d}_{\downarrow\uparrow}^* \quad (5.1.20)$$

Als Beispiel betrachten wir eine Drehung um die  $y$ -Achse,  $\vec{\omega} = (0, 1, 0)$ , berechnen

$$\mathfrak{d} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega/2) \\ \sin(\omega/2) \end{pmatrix}, \quad (5.1.21)$$

und erkennen im Vergleich mit (5.1.14), dass dieser gedrehte Zustand Eigenzustand zu  $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}$  ist, wobei  $\mathbf{n}$  der durch die Drehung um  $\vec{\omega}$ , Drehwinkel  $\omega$ , aus der  $z$ -Achse hervorgegangene Einheitsvektor ist. Dies lässt sich verallgemeinern. Es sei  $|\mathbf{m}\uparrow\rangle$  Eigenzustand zu  $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{m}$  mit Eigenwert  $\hbar/2$ , dann ist

$$|\mathbf{n}\uparrow\rangle = \hat{d}|\mathbf{m}\uparrow\rangle \quad (5.1.22)$$

Eigenzustand zu  $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}$  mit Eigenwert  $\hbar/2$ , wobei  $\mathbf{n}$  durch die Drehung aus  $\mathbf{m}$  hervorgegangen ist. Es ergibt sich aus dieser Tatsache folgende Relation:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n} = \hat{d}(\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{m})\hat{d}^+. \quad (5.1.23)$$

In der Matrixdarstellung erkennen wir aber auch:

$$\mathfrak{d}(2\pi\vec{\omega}) = -\mathbb{1}. \quad (5.1.24)$$

Allgemein gilt  $\hat{d}(\vec{\omega} + 2\pi\vec{\omega}) = -\hat{d}(\vec{\omega})$ , d. h. diese Darstellung der Rotationen ist zweiwertig,  $\pm\hat{d}(\vec{\omega})$  entsprechen der gleichen Rotation.

Anmerkung:

$$\langle \mathbf{m}\uparrow | \hat{\mathbf{s}} | \mathbf{m}\uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \mathbf{m} \quad (|\mathbf{m}| = 1). \quad (5.1.25)$$

## 5.2 Bloch-Gleichungen, Spin-Resonanz [§ 24]

(a) Ein klassisches Teilchen der Ladung  $e$  ( $e$  kann auch negativ sein) und der Masse  $m$  hat ein magnetisches Moment, das dem Drehimpuls proportional ist:

$$\vec{\mu}_{\text{orb}} = \frac{e}{2mc} \mathbf{L}. \quad (5.2.1)$$

Quantenmechanisch ist der Drehimpuls quantisiert; somit ist ein geeignetes Maß für die Größe des magnetischen Momentes das *Bohrsche Magneton* (wir setzen die Elementarladung und die Elektronenmasse ein!),

$$\mu_{\text{B}} = \frac{|e|\hbar}{2mc} \approx 0,5 \cdot 10^{-8} \frac{\text{eV}}{\text{gauss}}. \quad (5.2.2)$$

Auch mit dem Spin ist ein magnetisches Moment verknüpft,

$$\hat{\mu}_{\text{spin}} = g \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{s}}, \quad (5.2.3)$$

wobei man  $g$  den „Landéschen  $g$ -Faktor“ nennt. Für Elektronen ist  $g = 2$  in sehr guter Näherung ( $g = 2,002319\dots$ ), für Protonen ergibt sich  $g \approx 5,6$ . Achtung: Wegen der größeren Masse ist das Moment des Protons, bei gegebenem Spin, etwa tausendmal kleiner als das Moment des Elektrons!

*Anmerkung:* Auch neutrale Teilchen mit Spin haben i. A. ein magnetisches Moment (Neutronen:  $g \approx 3,83$ ).

(b) Wir konzentrieren uns zunächst auf den Spin und nehmen an, dass sich das Teilchen in einem Magnetfeld  $\mathbf{B}$  befindet. Dann können wir für den Hamiltonoperator ansetzen:

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (5.2.4)$$

wobei  $\mathbf{B}$  auch zeitabhängig sein kann. Die Wirkung des Feldes auf den Spin sieht man am besten im Heisenberg-Bild, vgl. Kapitel 3.6:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{s}}_{\text{H}}(t) = [\hat{\mathbf{s}}_{\text{H}}, \hat{H}_{\text{H}}] = \left( [\hat{\mathbf{s}}, \hat{H}] \right)_{\text{H}}. \quad (5.2.5)$$

Den Kommutator berechnen wir mit den bekannten Spin-Vertauschungsregeln und erhalten

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{s}}_{\text{H}} = \frac{ge}{2mc} \hat{\mathbf{s}}_{\text{H}} \times \mathbf{B} \quad (5.2.6)$$

wobei wir das Zeitargument weggelassen haben. *Diese Gleichung enthält die Operatoren nur linear, d. h. wir können ohne Probleme den Erwartungswert in einem beliebigen (zeitunabhängigen) Zustand nehmen.* Offensichtlich beschreibt (5.2.6) die

Präzession des Spins um das Magnetfeld: Zur Illustration betrachten wir ein zeitunabhängiges Feld entlang der  $z$ -Richtung,  $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ , und setzen

$$\omega_0 = \frac{geB_0}{2mc} \quad (= \text{Larmor-Frequenz}). \quad (5.2.7)$$

Mit  $\mathbf{S} = \langle \hat{\mathbf{s}}_H \rangle$  wird damit aus (5.2.6)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{S} = \frac{\omega_0}{B_0} \mathbf{S} \times \mathbf{B} = \omega_0 \begin{pmatrix} S_y \\ -S_x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.2.8)$$

Offensichtlich sind  $\mathbf{S}^2$  und  $S_z$  erhaltene Größen. Die Lösung dieser Gleichung ist

$$\begin{aligned} S_x(t) &= S_x(0) \cos(\omega_0 t) + S_y(0) \sin(\omega_0 t) \\ S_y(t) &= -S_x(0) \sin(\omega_0 t) + S_y(0) \cos(\omega_0 t). \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

Die Schrödinger-Gleichung für die Komponenten  $x_\uparrow, x_\downarrow$  lautet entsprechend

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{x}_\uparrow \\ \dot{x}_\downarrow \end{pmatrix} = -\frac{ge\hbar}{4mc} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_\uparrow \\ x_\downarrow \end{pmatrix} \quad (5.2.10)$$

mit der Lösung (im Moment ist  $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ )

$$x_\uparrow(t) = x_\uparrow(0) e^{i\omega_0 t/2}, \quad x_\downarrow(t) = x_\downarrow(0) e^{-i\omega_0 t/2}. \quad (5.2.11)$$

Vergleiche (5.1.14). Dies lässt sich auch sofort mit Hilfe der allgemeinen Formel

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle \rightarrow e^{i\omega_0 t \sigma_z/2} \begin{pmatrix} x_\uparrow(0) \\ x_\downarrow(0) \end{pmatrix} \quad (5.2.12)$$

gewinnen. Die Bewegungsgleichungen (5.2.8) – in der allgemeinen Form,  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t)$  – heißen auch Bloch-Gleichungen.

(c) Spin-Resonanz. Wir betrachten den Fall, dass zusätzlich ein oszillierendes Feld in die  $x$ -Richtung angelegt wird, d. h. wir setzen

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (5.2.13)$$

und definieren  $\omega_1 = geB_1/2mc$  analog zu (5.2.7). Das Wechselfeld kann in zwei „rotierende“ Anteile zerlegt werden,

$$\begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ -B_1 \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ B_1 \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.2.14)$$

Im rotierenden Bezugssystem wird aus dem ersten Anteil ein konstantes Feld, während sich die Frequenz des zweiten Anteils verdoppelt. Wir setzen

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\omega t \hat{s}_z / \hbar} |\Psi'(t)\rangle, \quad (5.2.15)$$

und erhalten mit

$$e^{-i\omega t \sigma_z / 2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z / 2} = \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z} \quad (5.2.16)$$

folgende Bewegungsgleichung:

$$i \begin{pmatrix} \dot{x}'_{\uparrow} \\ \dot{x}'_{\downarrow} \end{pmatrix} = \left[ \frac{\omega - \omega_0}{2} \sigma_z - \frac{\omega_1}{2} \sigma_x - \frac{\omega_1}{2} (\sigma_x \cos(2\omega t) + \sigma_y \sin(2\omega t)) \right] \begin{pmatrix} x'_{\uparrow} \\ x'_{\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.2.17)$$

Für  $\omega \approx \omega_0$  vernachlässigen wir die zwei Hochfrequenzterme und erhalten damit wieder eine Gleichung, die die Präzession eines Spins um ein *konstantes, effektives* Magnetfeld beschreibt. Das effektive Feld zeigt entlang  $(-\omega_1, 0, \omega - \omega_0)$ . Die Lösung lässt sich wiederum leicht angeben,

$$\begin{pmatrix} x'_{\uparrow}(t) \\ x'_{\downarrow}(t) \end{pmatrix} = e^{-i\Omega t \tilde{\sigma} / 2} \begin{pmatrix} x'_{\uparrow}(0) \\ x'_{\downarrow}(0) \end{pmatrix}, \quad (5.2.18)$$

mit

$$\tilde{\sigma} = \frac{\omega - \omega_0}{2} \sigma_z - \frac{\omega_1}{2} \sigma_x, \quad \Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2 \quad (5.2.19)$$

( $\tilde{\sigma}^2 = 1$ ) und schließlich

$$|\Psi(t)\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} x_{\uparrow}(t) \\ x_{\downarrow}(t) \end{pmatrix} = e^{i\omega t \sigma_z / 2} e^{-i\Omega t \tilde{\sigma} / 2} \begin{pmatrix} x_{\uparrow}(0) \\ x_{\downarrow}(0) \end{pmatrix}. \quad (5.2.20)$$

Jetzt nehmen wir noch an, dass sich der Spin zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Zustand  $|\uparrow\rangle$  befindet, d. h.  $x_{\downarrow}(0) = 0$ , und berechnen die Amplitude, den Spin zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $|\downarrow\rangle$  zu finden:

$$\langle \downarrow | \Psi(t) \rangle = e^{-i\omega t / 2} \langle \downarrow | e^{-i\Omega t \tilde{\sigma} / 2} | \uparrow \rangle. \quad (5.2.21)$$

Endergebnis:

$$x_{\downarrow}(t) = i e^{-i\omega t / 2} \frac{\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (5.2.22)$$

$$P_{\downarrow}(t) = |x_{\downarrow}(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{2\Omega^2} (1 - \cos(\Omega t)). \quad (5.2.23)$$

Der Maximalwert von  $|x_{\downarrow}|^2$  ist natürlich kleiner als eins, kann aber = 1 werden im Resonanzfall  $\omega = \omega_0$ . Dann wird der Spin vollständig „herumgedreht“, und zwar für Zeiten  $\Omega t = \pi, 3\pi, \dots$ , d. h. zum ersten Mal nach einem sogenannten  $180^\circ$ -Puls. Nach einem  $90^\circ$ -Puls,  $\Omega t = \pi/2$ , und für  $\omega = \omega_0$ , zeigt ein Spin, der anfangs entlang der  $z$ -Achse gerichtet war, in die  $y$ -Richtung.

Die obigen Überlegungen sind von großer Bedeutung für Spinresonanzexperimente (*ESR = electron spin resonance, NMR = nuclear magnetic resonance*).



Abbildung 5.1:

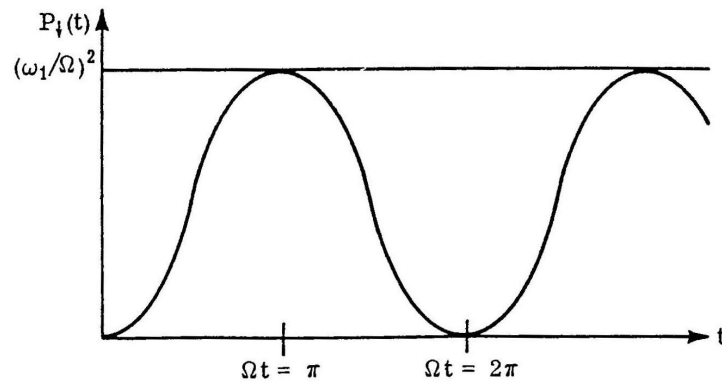


Fig. 14-5

Probability of spin flip as a function of time in a spin resonance experiment.

### 5.3 Gesamtwellenfunktion [§ 25]

Die Gesamtwellenfunktion eines Teilchens mit Spin hat einen Orts- und einen Spinanteil. Der Spin ist unabhängig von allen Größen, die etwas mit den räumlichen Freiheitsgraden zu tun haben, und wir *verlangen* daher

$$[\hat{s}, \hat{r}] = 0, \quad [\hat{s}, \hat{p}] = 0, \quad \text{etc.} \quad (5.3.1)$$

Als Quantisierungsrichtung für den Spin wählen wir wieder die  $z$ -Richtung und setzen

$$\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \uparrow | \Psi \rangle, \quad \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \downarrow | \Psi \rangle. \quad (5.3.2)$$

Damit ist z.B.  $|\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen im Zustand „ $\uparrow$ “ am Ort  $\mathbf{r}$  zu finden, und

$$\int d^3r |\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 \quad (5.3.3)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zustand „ $\uparrow$ “ zu finden. Die Normierungsbedingung wird dann zu

$$\int d^3r (|\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|^2) = 1. \quad (5.3.4)$$

Der Gesamtdrehimpuls ist die Summe aus Bahndrehimpuls und Spin,

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}}, \quad (5.3.5)$$

und der Operator

$$e^{-i\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{J}}/\hbar} \quad (5.3.6)$$

erzeugt Drehungen sowohl im Orts- als auch im Spin-Raum:

$$|\mathbf{r}', \mathbf{n}\uparrow\rangle = e^{-i\vec{\omega}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar} |\mathbf{r}, \mathbf{m}\uparrow\rangle, \quad (5.3.7)$$

wobei wir die Notation von Kap. 4.2 und 5.1 verwendet haben. Das gesamte magnetische Moment ist aber *nicht* parallel zum Gesamtdrehimpuls, sondern durch

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e}{2mc} \left( \hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{s}} \right) \quad (5.3.8)$$

gegeben (wir nehmen jetzt an, dass das Teilchen die Ladung  $e$  hat, und setzen  $g = 2$  (Elektronen) im Folgenden). Der gesamte Hamiltonoperator ist dann zunächst

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \right)^2 - \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + V(\hat{\mathbf{r}}). \quad (5.3.9)$$

Der gemischte Term ist symmetrisch in Ort und Impuls:

$$-\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (5.3.10)$$

Gemäß  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  ist das Magnetfeld mit dem Vektorpotential verknüpft. Im Fall eines räumlich konstanten Magnetfeldes können wir  $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}/2$  setzen. Dann ist  $\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ , und wir finden durch einfache Umformung

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2} (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}})^2 - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} + V(\hat{\mathbf{r}}), \quad (5.3.11)$$

d. h. in erster Ordnung den Beitrag  $-\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$ , wie es sein sollte.

Welchen Einfluss hat nun das Magnetfeld – wir betrachten nur den Term erster Ordnung in  $\mathbf{B}$  und wählen das Feld konstant und entlang der  $z$ -Richtung – z.B. auf das Energiespektrum des Wasserstoffatoms (vgl. Kap. 4.5)? Wir schreiben

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_1 = +\mu_B B \left( \hat{L}_z + 2\hat{s}_z \right) / \hbar, \quad (5.3.12)$$

wobei  $\hat{H}_0$  gerade der Anteil der Relativbewegung in (4.5.5) ist. Die Eigenzustände zu  $\hat{H}_0$ , unter Berücksichtigung des Spins, sind von der Form

$$|n, l, m; s = \frac{1}{2}, s_z\rangle \equiv |n, l, m\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, s_z \right\rangle, \quad (5.3.13)$$

oder explizit

$$\begin{pmatrix} \Psi_{nlm\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{nlm\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (5.3.14)$$

Diese Zustände sind aber auch Eigenzustände zu  $\hat{H}_1$ , da

$$\hat{H}_1 |n, l, m; s, s_z\rangle = +\mu_B B (m + 2s_z) |n, l, m; s, s_z\rangle. \quad (5.3.15)$$

Abbildung 5.2:

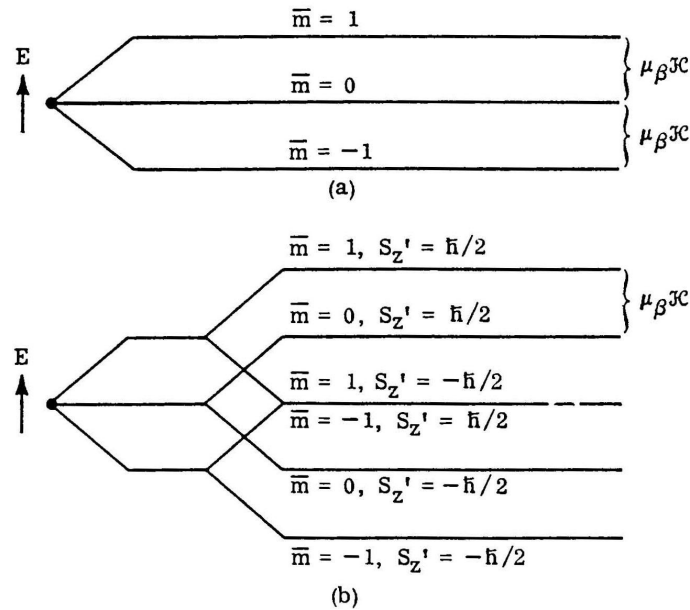


Fig. 14-3

Splitting of a hydrogenic P state in a strong magnetic field: (a) neglecting spin; (b) including spin, but neglecting spin orbit interaction.

Daher können wir die Energieeigenwerte ohne Schwierigkeiten angeben:

$$E_{nms_z} = E_n^{(0)} + \mu_B B(m + 2s_z), \quad (5.3.16)$$

wobei  $E_n^{(0)}$  in (4.5.12) gegeben ist. Wir erinnern, dass für feste Hauptquantenzahl ( $n$ )  $l$  die Werte  $0, \dots, n-1$  annehmen kann und  $m$  von  $-l, \dots, l$  läuft. Außerdem ist  $s_z = \pm 1/2$ , d. h.  $m + 2s_z = m \pm 1$ . Wenn wir den Spin für einen Moment ignorieren, stellen wir fest, dass das Magnetfeld die  $(2l + 1)$ -fache Entartung, die mit der Rotationsinvarianz zusammenhängt, aufhebt: Dies ist ein Beispiel für den *Zeeman-Effekt*. Berücksichtigung des Spins führt zu einer weiteren, zweifachen Aufspaltung der Niveaus ( $\uparrow$  und  $\downarrow$ ), allerdings entstehen wegen  $g = 2$  wiederum entartete Energieeigenwerte (siehe Abb. 5.2).

Weitere Korrekturen beruhen auf relativistischen Effekten, wie z.B. der Spin-Bahn-Kopplung, die folgenden Beitrag zum Hamiltonoperator liefert:

$$\hat{H}_{s.o.} = f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (5.3.17)$$

mit

$$f(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \quad (5.3.18)$$

für ein Zentralpotential  $V(r)$ . Die Spin-Bahn-Kopplung beruht darauf, dass ein Elektron, das sich mit Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  durch ein elektrisches Feld  $\mathbf{E}$  bewegt, in niedrigster Ordnung in  $v/c$  ein Magnetfeld  $\mathbf{v} \times \mathbf{E}/c$  spürt. Mit  $\hat{H}_{\text{s.o.}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{spin}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{E})/mc$  ergibt sich (5.3.17) (bis auf einen Faktor 2; siehe „Relativistische Quantenmechanik“).

Anmerkung: Wir setzen  $r \approx a_0$  in (5.3.18) und erhalten die Abschätzung

$$\hbar^2 f(r \approx a_0) \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \approx 10^{-4} \frac{e^2}{a_0} \approx 10^{-4} \text{ Ry} \quad (5.3.19)$$

wegen  $e^2/\hbar c \approx 1/137$ .

## 5.4 Inhomogenes Magnetfeld [§ 26]

(a) Wir untersuchen den Effekt, den ein inhomogenes Magnetfeld auf die räumliche Bewegung eines spinbehafteten Teilchens hat (*Stern-Gerlach-Versuch*). Die Wechselwirkungsenergie eines Spins mit einem Magnetfeld ist

$$H_{\text{spin}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{spin}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}), \quad (5.4.1)$$

d. h. wir erwarten eine dementsprechende Kraft auf das Teilchen,

$$\mathbf{F} = -\nabla H_{\text{spin}} = \nabla(\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{spin}} \cdot \mathbf{B}), \quad (5.4.2)$$

die das Teilchen in einen Raumbereich mit minimaler Energie zieht. Zum Beispiel für  $\hat{\boldsymbol{\mu}} \parallel \mathbf{B}$  heißt das, dass das Teilchen in den Raumbereich mit größerem Feld gezogen wird. Wir betrachten  $\mathbf{B} = (0, 0, B(z))$  und ein Spin-1/2-Teilchen mit Zuständen  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$ . Dann können wir eine Aufspaltung des Teilchenstrahls in zwei Komponenten erwarten (siehe Bild 5.3), wenn die Teilchen ursprünglich in einem beliebigen Anfangszustand sind.

*Anmerkung:* Die Beobachtung dieses Effekts ist ein klarer Hinweis auf den quantenmechanischen Charakter der betroffenen magnetischen Momente. Außerdem weist die beobachtete Aufspaltung in zwei Komponenten (an Silber-Atomen) eindeutig auf die Existenz eines halbzahligen Spins hin!

(b) Als Beispiel nehmen wir an, dass der Spin vor Durchgang durch das Feld in  $x$ -Richtung zeigt, und dass der räumliche Zustand durch ein Wellenpaket  $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$  gegeben ist:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_0(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_0(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (5.4.3)$$

Zu einem späteren Zeitpunkt,  $t + T$ , d. h. hinter dem Feld, ist dann

$$\Psi(\mathbf{r}, t + T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t + T) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t + T) \end{pmatrix}, \quad (5.4.4)$$

Abbildung 5.3:

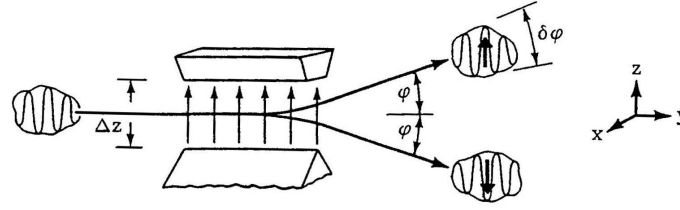


Fig. 14-8

Splitting of a wave packet of a spin  $\frac{1}{2}$  atom by an inhomogeneous field in the Stern-Gerlach apparatus.  $\varphi$  is the angle of deflection and  $\delta\varphi$  is the angular width of the emerging wave packets.

wobei  $\Psi_{\uparrow}$  und  $\Psi_{\downarrow}$  Wellenpakete sind, die in den in Bild 5.3 eingezeichneten Bereichen lokalisiert sind. Insbesondere ist daher  $\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t + T)\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t + T) \approx 0$ . Erhaltung der Wahrscheinlichkeit für  $\uparrow$  (und  $\downarrow$ ) führt zu

$$\int d^3r |\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t + T)|^2 = \int d^3r |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (5.4.5)$$

und entsprechend für  $\downarrow$ , und daher ist

$$\int d^3r |\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t + T)|^2 = \int d^3r |\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t + T)|^2. \quad (5.4.6)$$

Für den Gesamtspin (integriert über den Raum) ergibt sich zum Zeitpunkt  $t$  ( $\mathbf{e}_x$  sei Einheitsvektor in  $x$ -Richtung):

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_t = \int d^3r \langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_{\mathbf{r}, t} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{e}_x. \quad (5.4.7)$$

Zum Zeitpunkt  $t + T$ , da die beiden Wellenpakete zu diesem Zeitpunkt nicht überlappen, ist die lokale Spindichte gegeben durch

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_{\mathbf{r}, t+T} \approx \frac{\hbar}{4} \mathbf{e}_z (|\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t + T)|^2 - |\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t + T)|^2). \quad (5.4.8)$$

Mit (5.4.6) erhalten wir schließlich

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_{t+T} = \int d^3r \langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_{\mathbf{r}, t+T} \approx 0. \quad (5.4.9)$$

In einem *homogenen* Feld haben wir andererseits folgendes Resultat:

$$\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle_{t+T} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{e}_x \cos(\omega_0 T) - \frac{\hbar}{2} \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 T), \quad (5.4.10)$$

entsprechend einer Rotation um die  $z$ -Achse. Qualitativ betrachtet führt ein variables Feld  $B(z)$  zu einer variablen Frequenz  $\omega_0(z)$  — je nach Position im Raum drehen sich die Spins schneller oder langsamer, und dies führt *im Mittel* zu dem angegebenen Resultat (5.4.9). Wir bezeichnen mit  $\Delta\omega_0$  die „Unschärfe“ in der Frequenz; dann muss sicher  $\Delta\omega_0 \cdot T > 2\pi$  sein – andernfalls kann (5.4.10) im Mittel nicht verschwinden. Mit

$$\Delta\omega \approx \frac{e}{mc} \Delta B \approx \frac{e}{mc} B'(z) \Delta z \quad (5.4.11)$$

ergibt sich

$$\left| \frac{eB'}{mc} \right| T > \frac{2\pi}{\Delta z}. \quad (5.4.12)$$

Dies ist eine nützliche Beziehung, mit der sich die Funktionsfähigkeit eines Stern-Gerlach-Aufbaus abschätzen lässt. Im Übrigen ist dies auch gerade die Bedingung, dass die beiden Strahlen genügend separiert sind,  $\delta\varphi < \varphi$  (siehe Abb. 5.3): Offensichtlich ist  $\varphi \approx p_z/p_y$ , wobei  $p_y$  der (mittlere) Impuls des einfallenden Strahls ist, und  $\pm p_z$  die Impulsänderung aufgrund der Einwirkung der Kraft,  $p_z \approx F \cdot T$ , mit  $F \approx |e\hbar B'|/mc$ . Damit erhalten wir

$$\varphi \approx \left| \frac{e\hbar B'}{mc} \right| \frac{T}{p_y}. \quad (5.4.13)$$

Schließlich benutzen wir noch eine Abschätzung aus der Theorie der Beugung von Wellen,

$$\delta\varphi \approx \frac{\lambda}{\Delta z} \approx \frac{2\pi\hbar}{p_y \Delta z}, \quad (5.4.14)$$

wobei  $\lambda$  die deBroglie-Wellenlänge des einfallenden Teilchens ist, und sehen daran die Äquivalenz von (5.4.12) mit  $\delta\varphi < \varphi$ : Die Bedingung „vollständige Aufspaltung des Strahls“ ist äquivalent zu „vollständigem Dephasing“.

Im allgemeinen hängen die Energieeigenwerte eines Atoms auch vom elektrischen Feld ab. Daher kann man mit Hilfe eines *inhomogenen elektrischen Feldes* verschiedene interne Zustände in einem Atomstrahl separieren.

## 5.5 Addition von Spins [§ 27]

(a) Wir betrachten zuerst den einfachen Fall von zwei Spin-1/2-Teilchen mit Spinoperatoren  $\hat{\mathbf{s}}_1$  und  $\hat{\mathbf{s}}_2$ . Da sich diese auf zwei verschiedene Teilchen beziehen, setzen wir

$$[\hat{\mathbf{s}}_1, \hat{\mathbf{s}}_2] = 0. \quad (5.5.1)$$

Der Gesamtspin,

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2 \quad (5.5.2)$$

erfüllt wegen (5.5.1) wiederum die üblichen Drehimpuls-Vertauschungsrelationen,

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k. \quad (5.5.3)$$

Wir wählen die  $z$ -Achse wieder als Quantisierungsrichtung. Dann bilden die vier Zustände

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \quad (5.5.4)$$

eine vollständige Orthonormalbasis für das 2-Spin-System. Wir verwenden eine Schreibweise, die suggestiv ist:

$$|\uparrow\uparrow\rangle \leftrightarrow |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \quad \text{etc.} \quad (5.5.5)$$

Nun wissen wir aber, dass  $\hat{\mathbf{S}}^2$  und  $\hat{S}_z$  miteinander kommutieren, d. h. wir können Zustände wählen, die gleichzeitig Eigenzustände zu diesen beiden Operatoren sind:

$$\hat{\mathbf{S}}^2|S, S_z\rangle = \hbar S(S+1)|S, S_z\rangle, \quad \hat{S}_z|S, S_z\rangle = \hbar S_z|S, S_z\rangle, \quad (5.5.6)$$

wobei  $S_z$  die Werte  $-S, \dots, S$  annehmen kann. Wie kann man diese Zustände durch  $|s_{1z}, s_{2z}\rangle$  ausdrücken? Die Wirkung von  $\hat{S}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$  auf die vier Zustände in (5.5.4) lässt sich leicht berechnen:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z|\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar|\uparrow\uparrow\rangle, & \hat{S}_z|\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar|\downarrow\downarrow\rangle \\ \hat{S}_z|\uparrow\downarrow\rangle &= \hat{S}_z|\downarrow\uparrow\rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.5.7)$$

Somit sind die Eigenwerte von  $\hat{S}_z$  offensichtlich  $0, \pm\hbar$ . Zur Berechnung der Wirkung von  $\hat{\mathbf{S}}^2$  schreiben wir dies um:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 &= (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2 \\ &= \frac{3\hbar}{2} + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \hat{s}_{1+}\hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-}\hat{s}_{2+} \end{aligned} \quad (5.5.8)$$

Für jeden einzelnen Spin gilt (vgl. Kap. 4.1)

$$\hat{s}_+|\uparrow\rangle = 0 \quad \hat{s}_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle \quad (5.5.9)$$

$$\hat{s}_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle \quad \hat{s}_-|\downarrow\rangle = 0 \quad (5.5.10)$$

und damit folgt sofort

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle \leftrightarrow S = 1 \quad (5.5.11)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\downarrow\downarrow\rangle = 2\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle \leftrightarrow S = 1. \quad (5.5.12)$$

Wegen

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\uparrow\downarrow\rangle = \hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle \quad (5.5.13)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\downarrow\uparrow\rangle = \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle + \hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle \quad (5.5.14)$$

erkennen wir weiterhin, dass  $|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle$  Eigenzustände zu  $\hat{\mathbf{S}}^2$  sind:

$$\hat{\mathbf{S}}^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = 2\hbar^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \leftrightarrow S = 1 \quad (5.5.15)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = 0 \leftrightarrow S = 0. \quad (5.5.16)$$

Zusammenfassung (inklusive korrekter Normierung):

$$\text{Singlett-Zustand: } |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (5.5.17)$$

$$\text{Triplet-Zustände: } \begin{cases} |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (5.5.18)$$

(b) Als zweites Beispiel – das sich ohne Probleme verallgemeinern lässt – betrachten wir die Addition von Bahndrehimpuls und Spin:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (5.5.19)$$

Die Zustände  $\{|l, m, s, s_z\rangle = |l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle\}$  bilden eine Basis. Wir stellen aber auch fest, dass

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{L}}^2] &= 0 = [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{s}}^2], \\ \text{während } [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{L}_z] &\neq 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{s}_z] \neq 0. \end{aligned} \quad (5.5.20)$$

Somit bilden auch die Zustände  $\{|J, J_z, l, s\rangle\}$  eine Basis. Der Zusammenhang zwischen diesen beiden Orthonormalsystemen ist durch die *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* gegeben:

$$|J, J_z, l, s\rangle = \sum_{l', m, s', s_z} |l', m, s', s_z\rangle \langle l', m, s', s_z | J, J_z, l, s\rangle \quad (5.5.21)$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind nur ungleich 0 für  $l = l', s = s'$ . Außerdem muss  $J_z = m + s_z$  sein. Wieviele Zustände gibt es? Für festes  $l$  und  $s$  gibt es  $(2l + 1)$   $m$ -Werte und  $(2s + 1)$   $s_z$ -Werte, d. h.  $(2l + 1)(2s + 1)$  unabhängige Zustände. Ohne weiter in die Details zu gehen, weisen wir nur darauf hin, dass  $J$  folgende Werte annehmen kann:

$$|l - s| \leq J \leq l + s. \quad (5.5.22)$$



Kleiner Test: Die Gesamtzahl der Zustände berechnet sich dann ( $-J \leq J_z \leq J$ ) gemäß

$$\sum_{J=|l-s|}^{l+s} (2J+1) = (2l+1)(2s+1) \quad (5.5.23)$$

wie zu erwarten (siehe Baym, Kap. 15, für weitere Details).

# Kapitel 6

## Näherungsmethoden

### 6.1 Quasiklassische Näherung [§ 28]

(a) Wir wollen die Überlegungen aus Kapitel 2.1 zum klassischen Grenzfall,  $\hbar \rightarrow 0$ , vertiefen und zeigen, wie sich daraus in einem gewissen Grenzfall eine Methode zur approximativen Bestimmung der Wellenfunktion herleiten lässt. Wir betrachten ein Teilchen in einem Potential, so dass in der Ortsdarstellung

$$\hat{H} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \quad (6.1.1)$$

zu setzen ist, und gehen mit dem Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = a e^{i\varphi} \quad (6.1.2)$$

mit  $a, \varphi$  reell in die Schrödinger-Gleichung ein. Wir erhalten zwei Gleichungen:

$$\dot{a} + \frac{\hbar}{2m}(2\nabla a \cdot \nabla\varphi + a\nabla^2\varphi) = 0 \quad (6.1.3)$$

$$\hbar\dot{\varphi} + \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\varphi)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2ma}\nabla^2 a = 0. \quad (6.1.4)$$

Die erste dieser Gleichung, (6.1.3), hat die Form einer Kontinuitätsgleichung und beschreibt die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit; wir setzen

$$\rho = a^2, \quad \mathbf{j} = \frac{\hbar}{m}\text{Im}(\Psi^*\nabla\Psi) = \frac{\hbar a^2}{m}\nabla\varphi \quad (6.1.5)$$

und finden

$$\dot{\rho} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (6.1.6)$$

Die Größe  $\mathbf{j}$  ist die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*. Entsprechend den Überlegungen aus Kapitel 2.1 erwarten wir, dass für  $\hbar \rightarrow 0$  gilt:  $\varphi \rightarrow S/\hbar$ , wobei  $S$  die klassische Wirkung ist. Daher setzen wir  $\varphi = S/\hbar$  in (6.1.4) ein:

$$\dot{S} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2ma}\nabla^2 a = 0. \quad (6.1.7)$$

Wenn wir jetzt den Term  $\propto \hbar^2$  vernachlässigen, erkennen wir, wie es sein muss, die klassische Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Wirkung  $S$  eines Teilchens. Außerdem wird

$$\mathbf{j} = \frac{q}{m} \nabla S, \quad (6.1.8)$$

d. h. „Dichte  $\times$  Geschwindigkeit“ ( $\mathbf{p} = \nabla S$ ).

(b) Geladenes Teilchen. Dann gibt es folgenden Zusatzbeitrag im Hamiltonoperator:

$$\frac{ie\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (6.1.9)$$

Als Resultat ändert sich der Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte,

$$\mathbf{j} \rightarrow \frac{1}{m} a^2 \left( \hbar \nabla \varphi - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right), \quad (6.1.10)$$

und entsprechend ist

$$\nabla \varphi \rightarrow \nabla \varphi - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \quad (6.1.11)$$

in (6.1.4) zu ersetzen.

(c) Wir untersuchen jetzt, zur Vereinfachung für  $D = 1$ , genauer die *stationären* Lösungen der Schrödinger-Gleichung im quasiklassischen Grenzfall. Dazu setzen wir

$$S = S_0(x) - Et, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (6.1.12)$$

und erhalten

$$(6.1.4) \rightarrow (S'_0)^2 - p(x)^2 + O(\hbar^2) = 0, \quad (6.1.13)$$

$$(6.1.3) \rightarrow 2a'S'_0 + aS''_0 = 0, \quad (6.1.14)$$

wegen  $\dot{a} = 0$ . Resultat:

$$S'_0 \approx \pm p(x), \quad S_0 \approx \pm \int_0^x dx' p(x'), \quad a(x) \propto \frac{1}{\sqrt{p}}, \quad (6.1.15)$$

so dass insgesamt (abgesehen vom Zeitanteil)

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{q}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) + \frac{B}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p dx\right). \quad (6.1.16)$$

Im klassisch verbotenen Bereich,  $E < V(x)$ , ist  $p(x)$  rein imaginär, so dass die Exponenten reell werden. Die Wellenfunktion für diese Bereiche schreiben wir in der Form

$$\Psi(x) = \frac{A'}{\sqrt{|q|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx\right) + \frac{B'}{\sqrt{|p|}} \exp\left(+\frac{1}{\hbar} \int |p| dx\right). \quad (6.1.17)$$

Der Gültigkeitsbereich dieser Näherung ergibt sich durch genauere Analyse von (6.1.4) zu

$$\left| \left( \frac{\hbar}{p} \right)' \right| \ll 1, \quad (6.1.18)$$

d. h. die Wellenlänge des Teilchens darf sich auf Strecken von der Größenordnung der Wellenlänge selbst nur wenig ändern. Mit  $F = -V'$  ergibt sich auch

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1, \quad (6.1.19)$$

d. h. bei zu kleinem Impuls, insbesondere in der Nähe *klassischer Umkehrpunkte*, wird die quasiklassische Näherung problematisch.

(d) Der Punkt  $x = a$  sei ein klassischer Umkehrpunkt derart, dass  $V(x) > E$  für alle  $x > a$  ist, d. h. der Bereich  $x > a$  ist klassisch verboten. Dann können wir ansetzen:

$$x > a : \quad \Psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx'\right) \quad (6.1.20)$$

und

$$x < a : \quad \Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx'\right) + \frac{B}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx'\right). \quad (6.1.21)$$

Zur Bestimmung der Koeffizienten  $A, B$  ist es notwendig, in der Nähe des Umkehrpunktes die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung zu betrachten. Dies lässt sich umgehen, wenn man  $x$  formal als komplexe Größe auffasst und (6.1.20) analytisch fortsetzt (siehe Landau-Lifschitz, Bd. III, § 47). Endergebnis:

$$x < a : \quad \Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (6.1.22)$$

Von diesem Ergebnis ist es nur ein kleiner Schritt, die *Bohr - Sommerfeld - Quantisierungsbedingung* für die Energieniveaus eines Teilchens in einem Potentialtopf herzuleiten. Der klassisch erlaubte Bereich,  $b < x < a$ , sei durch zwei Umkehrpunkte begrenzt. Die Anwendung der Anschlussbedingung auf beide Umkehrpunkte und die Forderung nach Eindeutigkeit der Wellenfunktion im erlaubten Bereich führt auf die Bedingung

$$\int_b^a p dx = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (6.1.23)$$

wobei  $n$  eine ganze Zahl ist.

*Anmerkung:* Diese Formel ist exakt für den harmonischen Oszillator!

## 6.2 Variationsverfahren [§ 29]

Das Rayleigh-Ritz-Verfahren ist eine einfache Methode, die Grundzustandsenergie eines (zeitunabhängigen) Hamiltonoperators abzuschätzen. Das Verfahren beruht auf der Beobachtung, dass der Erwartungswert von  $\hat{H}$  in einem beliebigen (normierten) Zustand immer größer oder gleich der Grundzustandsenergie ist:

$$\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0. \quad (6.2.1)$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn  $|\Psi\rangle$  der wahre Grundzustand ist. Um (6.2.1) zu beweisen, stellen wir  $\hat{H}$  mit Hilfe seiner Eigenzustände  $\{|n\rangle\}$  dar:

$$\hat{H} = \sum_n |n\rangle E_n \langle n|, \quad (6.2.2)$$

wobei  $n = 0, 1, 2, \dots$  die Zustände mit  $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$  bezeichnet. Damit ergibt sich

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_n E_n |\langle n | \Psi \rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle n | \Psi \rangle|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (6.2.3)$$

Wie können wir dieses Verfahren praktisch verwenden? Mit Hilfe einer beliebigen Funktion  $|\Psi\rangle$  können wir gemäß (6.2.3) eine obere Schranke für  $E_0$  bestimmen, und diese Schranke wird umso besser sein, je „näher“ die Versuchswellenfunktion dem exakten Grundzustand ist. Man wird somit in der Regel einen Ansatz machen, der einerseits einfach genug ist, um  $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$  und  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  exakt zu berechnen, der aber andererseits von einem oder mehreren Parametern abhängt: Minimierung bezüglich der Parameter liefert dann, im Rahmen des gewählten Ansatzes, eine optimale Abschätzung.

Anmerkung: Der Ansatz  $\Psi(x) \propto e^{-\alpha^2 x^2}$  für den harmonischen Oszillator liefert, nach Minimierung bezüglich  $\alpha$ , das exakte Ergebnis für die Grundzustandsenergie und die -wellenfunktion. Entsprechendes gilt für  $\Psi(x) \propto e^{-\beta r}$  und das Wasserstoffproblem.

Unter Umständen lassen sich auch die Energiewerte der angeregten Zustände abschätzen. Wir nehmen z.B. an, dass der Grundzustand  $|0\rangle$  bekannt ist, und wählen die Versuchswellenfunktion orthogonal dazu,  $\langle \Psi | 0 \rangle = 0$ . Dann folgt analog zu (6.2.3)

$$\langle \Psi | 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_1 \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (6.2.4)$$

etc. In der Praxis führt dies zum Ziel, wenn weitere Information über den Grundzustand, z.B. seine Symmetrie, vorliegt. So ist der Grundzustand des harmonischen Oszillators ohne Zweifel gerade, und eine *ungerade* Versuchsfunktion liefert daher eine Abschätzung für den ersten angeregten Zustand. Diese Überlegung gilt für alle

geraden Potentiale,  $V(x) = V(-x)$ , und entsprechend für kugelsymmetrische Potentiale: Ein Ansatz mit einer  $s$ -Wellen-Versuchsfunktion liefert eine Abschätzung für den Grundzustand, eine  $p$ -Wellen-Versuchsfunktion liefert den niedrigsten  $p$ -Zustand, usw.

Gelegentlich lässt sich auch eine *untere Schranke* für  $E_0$ , die Energie des Grundzustands von  $\hat{H}$ , angeben, z.B. wenn

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (6.2.5)$$

ist, wobei  $\hat{V}$  ein positiver Operator ist, d. h.  $\langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle \geq 0$  für alle Zustände  $|\Psi\rangle$ . Es sei  $|0\rangle$  der exakte Grundzustand zu  $\hat{H}$ ; dann gilt

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \geq \langle 0 | \hat{H}_0 | 0 \rangle \geq \varepsilon_0, \quad (6.2.6)$$

wobei  $\varepsilon_0$  die exakte Grundzustandsenergie zu  $\hat{H}_0$  ist. Wenn wir  $\hat{H}$  entsprechend (6.2.5) aufspalten können und dann auch noch die Grundzustandsenergie von  $\hat{H}_0$  bekannt ist, haben wir sofort eine untere Schranke für  $E_0$ : *Das Vernachlässigen von positiven Termen verringert immer die Grundzustandsenergie.*

### 6.3 Zeitunabhängige Störungstheorie (nicht entartet) [§ 30]

(a) Ein störungstheoretisches Verfahren lässt sich u. U. anwenden, wenn der Hamiltonoperator aus zwei Teilen besteht, einem bekannten,  $\hat{H}_0$ , und einem „kleinen“ Anteil,  $\hat{V}$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (6.3.1)$$

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad (6.3.2)$$

d. h. wir nehmen an, dass sowohl die Eigenwerte  $\varepsilon_n$  als auch die Zustände  $\{|n\rangle\}$  zur Verfügung stehen. Wir nehmen weiter an, dass sich die Eigenenergien und -zustände von  $\hat{H}$  kontinuierlich aus denen von  $\hat{H}_0$  entwickeln; genauer gesagt, wir setzen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad (6.3.3)$$

und variieren  $\lambda$  von 0 bis 1. Bei diesem Prozess sollen  $\varepsilon_n$  und  $|n\rangle$  kontinuierlich in die entsprechenden Größen zu  $\hat{H}$ ,  $E_n$  und  $|N\rangle$  übergehen. Der Parameter  $\lambda$  dient formal nur zum Abzählen der Potenzen in einer Reihenentwicklung; am Schluss setzen wir  $\lambda = 1$ . Potenzreihenansatz:

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (6.3.4)$$

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda |N^{(1)}\rangle + \lambda^2 |N^{(2)}\rangle + \dots \quad (6.3.5)$$

Anmerkung: Die Konvergenz einer derartigen Reihenentwicklung ist in der Regel sehr problematisch!

(b) Wir gehen davon aus, dass die Zustände  $\{|n\rangle\}$  normiert sind,  $\langle n|n\rangle = 1$ , und wählen die Normierung von  $|N\rangle$  derart, dass  $\langle n|N\rangle = 1$ . Daher gilt

$$\langle n|N\rangle = 1 = \langle n|n\rangle + \lambda\langle n|N^{(1)}\rangle + \lambda^2\langle n|N^{(2)}\rangle + \dots \quad (6.3.6)$$

und alle Korrekturen  $|N^{(i)}\rangle$  sind daher orthogonal zu  $|n\rangle$ :

$$\langle n|N^{(i)}\rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots \quad (6.3.7)$$

Wir setzen jetzt (6.3.4) und (6.3.5) in die Schrödinger-Gleichung

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}\right)|N\rangle = E_n|N\rangle \quad (6.3.8)$$

ein und vergleichen die Koeffizienten der verschiedenen Potenzen von  $\lambda$ :

$$\lambda^0 : \quad \hat{H}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \quad (6.3.9)$$

$$\lambda^1 : \quad \hat{H}_0|N^{(1)}\rangle + \hat{V}|n\rangle = \varepsilon_n|N^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n\rangle \quad (6.3.10)$$

$$\vdots$$

$$\lambda^k : \quad \hat{H}_0|N^{(k)}\rangle + \hat{V}|N^{(k-1)}\rangle = \varepsilon_n|N^{(k)}\rangle + E_n^{(1)}|N^{(k-1)}\rangle + \dots + E_n^{(k)}|n\rangle. \quad (6.3.11)$$

Wir nehmen das Skalarprodukt mit  $\langle n|$  in (6.3.10) und erhalten für die Korrektur erster Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle, \quad (6.3.12)$$

d. h. die Verschiebung der Energie in erster Ordnung ist gerade durch den Erwartungswert der Störung, genommen in dem ungestörten Zustand, gegeben. Entsprechend folgt aus (6.3.11):

$$E_n^{(k)} = \langle n|\hat{V}|N^{(k-1)}\rangle. \quad (6.3.13)$$

Wichtig war hierbei die Wahl (6.3.7). Wenn wir die Korrekturen (6.3.13) summieren, erhalten wir schließlich ( $\lambda = 1$ )

$$E_n = \varepsilon_n + \langle n|\hat{V}|N\rangle. \quad (6.3.14)$$

Die Korrekturen zum Zustand erhalten wir, wenn wir (6.3.10) und (6.3.11) von links mit  $\langle m|$ ,  $m \neq n$ , multiplizieren. Zum Beispiel ergibt sich in erster Ordnung

$$(6.3.10) \rightarrow \langle m|\hat{H}_0|N^{(1)}\rangle + \langle m|\hat{V}|n\rangle = \varepsilon_n\langle m|N^{(1)}\rangle, \quad (6.3.15)$$

und mit  $\langle m|\hat{H}_0 = \varepsilon_m\langle m|$ :

$$\langle m|N^{(1)}\rangle = \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}. \quad (6.3.16)$$

Somit haben wir *in erster Ordnung*:

$$|N\rangle \approx |n\rangle + \sum'_m \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad (6.3.17)$$

wobei nur über  $m \neq n$  zu summieren ist. (Dies wird durch den Strich am Summationszeichen angedeutet.) Generell kann man daher vermuten, dass diese Entwicklung Sinn macht, wenn alle Matrixelemente  $\langle m|\hat{V}|n\rangle$  klein gegen die entsprechenden Energiedifferenzen sind.

*Anmerkung:* Der Zustand  $|N\rangle$  ist noch zu normieren, allerdings tritt eine Korrektur erst in zweiter Ordnung auf:

$$\langle N|N\rangle \approx 1 + \sum'_m \frac{|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2}. \quad (6.3.18)$$

Mit (6.3.17) und (6.3.14) ergibt sich die Korrektur zur Energie in zweiter Ordnung:

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}. \quad (6.3.19)$$

Wenn es sich bei dem Zustand  $|n\rangle$  um den Grundzustand von  $\hat{H}_0$  handelt, ist daher  $E_n^{(2)}$  *immer negativ!*

(c) Als Beispiel betrachten wir den eindimensionalen harmonischen Oszillator, der durch eine konstante Kraft gestört wird:

$$\hat{V} = -F\hat{x}. \quad (6.3.20)$$

Wegen  $\langle n|\hat{V}|n\rangle = 0$  verschwindet die Korrektur erster Ordnung,  $E_n^{(1)} = 0$ . Die einzigen nicht verschwindenden Matrixelemente sind (siehe Kapitel 3.2)

$$\langle n|\hat{V}|n+1\rangle = -F \left[ \frac{\hbar(n+1)}{2m\omega} \right]^{1/2}, \quad (6.3.21)$$

$$\langle n|\hat{V}|n-1\rangle = -F \left[ \frac{\hbar n}{2m\omega} \right]^{1/2}. \quad (6.3.22)$$

Damit erhalten wir

$$E_n^{(2)} = \frac{|\langle n|\hat{V}|n+1\rangle|^2}{-\hbar\omega} + \frac{|\langle n|\hat{V}|n-1\rangle|^2}{\hbar\omega} = -\frac{F^2}{2m\omega^2}. \quad (6.3.23)$$



Natürlich war dieses Resultat, das im übrigen exakt ist, zu erwarten: Ein konstantes Kraftfeld verschiebt gerade den Nullpunkt,

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - Fx = \frac{m\omega^2}{2} \left( x - \frac{F}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{F^2}{2m\omega^2}, \quad (6.3.24)$$

und ein verschobener Oszillator hat natürlich die gleichen Energiewerte,  $\hbar\omega(n + 1/2)$ . Die einzige Änderung ist der konstante Term,  $-F^2/2m\omega^2$ . Ebenfalls lässt sich störungstheoretisch nachweisen, dass die „gestörten“ Zustände einfach verschoben sind,

$$|\bar{N}\rangle = e^{-i\hat{p}F/m\omega^2\hbar} |n\rangle, \quad (6.3.25)$$

Vgl. Kapitel 3.5;  $|\bar{N}\rangle$  ist bereits normiert. In der Orstdarstellung ist daher

$$\langle x|\bar{N}\rangle = \Psi_n \left( x - \frac{F}{m\omega^2} \right), \quad (6.3.26)$$

wie zu erwarten.

## 6.4 Zeitunabhängige Störungstheorie (entartet) [§ 31]

(a) Im letzten Paragraphen hatten wir implizit angenommen, dass die ungestörten Energieniveaus nicht entartet sind. Diese Annahme geben wir jetzt auf und gehen aus von (wie in Kapitel 6.3 sei  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ )

$$\hat{H}_0|n, i\rangle = \varepsilon_n|n, i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (6.4.1)$$

d. h. das Niveau ist  $f$ -fach entartet. Außerdem ist

$$\langle n, i|n, j\rangle = \delta_{ij}; \quad V_{ij} \equiv \langle n, i|\hat{V}|n, j\rangle. \quad (6.4.2)$$

Nun ist aber auch jede Linearkombination der  $\{|n, i\rangle\}$  eine Eigenfunktion zu  $\hat{H}_0$  mit Eigenwert  $\varepsilon_n$  d. h. wir können einen Satz von  $f$  orthogonalen Zuständen

$$|n, \alpha\rangle = \sum_{i=1}^f C_{\alpha,i}|n, i\rangle, \quad \text{mit } C_{\alpha,i} = \langle n, i|n, \alpha\rangle, \quad (6.4.3)$$

suchen, der die Störung  $\hat{V}$  diagonalisiert:

$$\langle n, \alpha|\hat{V}|n, \beta\rangle = V_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}. \quad (6.4.4)$$

Wir setzen zunächst

$$\sum_j V_{ij}C_{\beta j} = V_{\alpha}C_{\beta i}. \quad (6.4.5)$$

Dies ist eine normale Eigenwertaufgabe in dem Unterraum des entarteten Niveaus, und die

$$\mathbf{C}_\alpha = (C_{\alpha 1}, C_{\alpha 2}, \dots, C_{\alpha f}), \quad \mathbf{C}_\alpha^* \cdot \mathbf{C}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \quad (6.4.6)$$

sind die orthonormierten Eigenvektoren zu der Matrix  $V_{ij}$  ( $V_{ij}$  ist hermitesch). Wir multiplizieren (6.4.5) mit  $C_{\alpha i}^*$  und summieren über  $i$ , mit dem Resultat

$$\sum_{ij} C_{\alpha i}^* V_{ij} C_{\beta j} = V_\alpha \delta_{\alpha\beta}. \quad (6.4.7)$$

Dies entspricht gerade (6.4.4).

(b) Mit Hilfe der neuen Zustände  $|n, \alpha\rangle$  lässt sich die Störungstheorie wie in Kapitel 6.3 durchführen. Die Ergebnisse (in zweiter Ordnung für die Eigenwerte, in erster Ordnung für die Zustände) sind

$$|N, \alpha\rangle = |n, \alpha\rangle + \sum'_m \frac{|m\rangle \langle m|\hat{V}|n, \alpha\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad (6.4.8)$$

$$E_{n,\alpha} = \varepsilon_n + \langle n, \alpha|\hat{V}|n, \alpha\rangle + \sum'_m \frac{|\langle m|\hat{V}|n, \alpha\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad (6.4.9)$$

wobei wiederum über alle Zustände  $|m\rangle$ ,  $m \neq n$ , zu summieren ist, d. h. *nicht* über die  $f$  Zustände  $\{|n, \alpha\rangle\}$ . In einem ersten Schritt (erster Ordnung in der Energie) ist somit einfach die Matrix  $V_{ij}$  zu diagonalisieren. Dies liefert die Korrektur erster Ordnung zur Energie und die korrekten Zustände nullter Ordnung in dem Unterraum des entarteten Niveaus. Die Störung hebt im allgemeinen die Entartung auf.

(c) Als Beispiel betrachten wir ein Wasserstoffatom im elektrischen Feld (Stark-Effekt) und insbesondere das Niveau mit der Hauptquantenzahl  $n = 2$ . Dieses ist 4-fach entartet (wir zählen nicht den Spin), und die Zustände sind

$$|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21(-1)\rangle \quad (6.4.10)$$

wegen  $l = 0, 1$  und  $m = -l, \dots, l$ . Die Störung, entsprechend einem konstanten elektrischen Feld in die  $z$ -Richtung, ist

$$\hat{V} = -F \cdot \hat{z}. \quad (6.4.11)$$

Im Prinzip müssen wir also eine  $4 \times 4$ -Matrix diagonalisieren. Zuerst stellen wir aber fest, dass die Matrixelemente von  $\hat{z}$  (und damit  $\hat{V}$ ) zwischen Zuständen mit verschiedenen  $m$ -Werten verschwinden,

$$\langle lm|\hat{z}|l'm'\rangle = 0 \text{ für } m \neq m', \quad (6.4.12)$$

da  $[\hat{L}_z, \hat{z}] = 0$ :

$$0 = \langle lm|[\hat{L}_z, \hat{z}]|l'm'\rangle = \hbar(m - m')\langle lm|\hat{z}|l'm'\rangle. \quad (6.4.13)$$

Dies ist ein Beispiel für eine *Auswahlregel*: Die Störung kommutiert mit einer Erhaltungsgröße des ungestörten Problems, und daher verschwinden Matrixelemente der Störung zwischen den Zuständen, die zu verschiedenen Eigenwerten dieser Erhaltungsgröße gehören. Somit sind durch die Störung nur die beiden Zustände mit  $m = 0$  betroffen,

$$|200\rangle, |210\rangle, \quad (6.4.14)$$

und es bleibt eine  $2 \times 2$ -Matrix. Schließlich sind die ungestörten Zustände *gerade* unter der Paritätsoperation  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , und die Störung ist ungerade, d. h. die Diagonalelemente verschwinden ebenfalls:

$$V_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.4.15)$$

mit

$$V_{12} = -F\langle 200|\hat{z}|210\rangle = V_{21} = 3Fa_0. \quad (6.4.16)$$

Im letzten Schritt haben wir

$$\Psi_{210}(\mathbf{r}) = R_{21}(r)Y_{10}(\Theta, \varphi) \quad (6.4.17)$$

und die Resultate aus Kapitel 4.3 und 4.5 benutzt. Die Eigenvektoren und Eigenwerte in dem betroffenen Unterraum sind

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \leftrightarrow \pm 3Fa_0. \quad (6.4.18)$$

Daher wird der ( $n = 2$ )-Zustand in drei Niveaus aufgespalten, die  $m = \pm 1$ -Zustände sind nicht betroffen, und es bleibt eine zweifache Entartung des mittleren Niveaus. Zur Abschätzung der Stärke der Aufspaltung betrachten wir die dimensionslose Größe

$$\frac{Fa_0}{e^2/a_0} = \frac{F/e}{e/a_0^2}, \quad (6.4.19)$$

wobei

$$\frac{e}{a_0^2} \approx 5,15 \times 10^9 \text{ Volt/cm} \quad (6.4.20)$$

ist. Daher ist, für „normale“ elektrische Felder, die Aufspaltung aufgrund des Stark-Effekts sehr viel kleiner als der Abstand zwischen den ungestörten Niveaus (und damit die Störungstheorie gerechtfertigt).

## 6.5 Übergänge unter dem Einfluss von Störungen

### [§ 32]

(a) In diesem und im folgenden Paragraphen untersuchen wir den Einfluss einer *zeitabhängigen* Störung. Wir gehen aus von

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (6.5.1)$$

wobei die Störung  $\hat{V}$  von der Zeit abhängt. Insbesondere wollen wir annehmen, dass  $\hat{V}(t)$  für  $t < t_0$  verschwindet, d. h. die Störung wird zum Zeitpunkt  $t_0$  eingeschaltet. Eigenzustände und -werte von  $\hat{H}_0$  seien wiederum bekannt.

$$t < t_0 : \quad i\hbar|\dot{\Psi}_0(t)\rangle = \hat{H}_0|\Psi_0(t)\rangle \quad (6.5.2)$$

$$t > t_0 : \quad i\hbar|\dot{\Psi}(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))|\Psi(t)\rangle \quad (6.5.3)$$

(b) Wir lösen (6.5.3) formal mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators (siehe Kapitel 3.6):

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (6.5.4)$$

mit  $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ . Wir wollen nun den Anteil der Zeitentwicklung abspalten, der durch  $\hat{H}_0$  bestimmt ist (Dirac- bzw. Wechselwirkungsbild), d. h. wir setzen

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} |\Psi_D(t)\rangle \quad (6.5.5)$$

und finden

$$|\Psi_D(t)\rangle = \hat{S}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (6.5.6)$$

mit

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \hat{U}(t, t_0). \quad (6.5.7)$$

(Es gilt  $\hat{S}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ ,  $\hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}$ ). Die Bewegungsgleichung für diese Größe ist

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S} = \hat{V}_D(t) \hat{S}, \quad (6.5.8)$$

mit

$$\hat{V}_D = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \quad (6.5.9)$$

Dies ist von der Struktur ähnlich zu (3.6.14), und die Lösung ist daher (vgl. (3.6.18)) gegeben durch

$$|\Psi_D(t)\rangle = T_t \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}_D(t') \right) |\Psi(t_0)\rangle \quad (6.5.10)$$

mit den Zeitordnungsoperator  $T_t$ .

(c) Es seien  $\{|n\rangle\}$  die stationären Zustände zu  $\hat{H}_0$ . Wir stellen uns nun vor, dass sich das System zum Anfangszeitpunkt in einem dieser Zustände befindet, z.B.  $|n\rangle$ . Dann können wir die Frage stellen: „Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das gestörte System zu einem späteren Zeitpunkt in irgendeinem anderen Zustand  $|m\rangle$  anzutreffen?“ Diese Größe, Übergangswahrscheinlichkeit genannt, ist gegeben durch

$$P_{n \rightarrow m}(t) = |\langle m | \hat{U}(t, t_0) | n \rangle|^2. \quad (6.5.11)$$

Wegen

$$1 = \langle n | n \rangle = \langle n | \hat{U}^\dagger \hat{U} | n \rangle = \sum_m \langle n | \hat{U}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{U} | n \rangle \quad (6.5.12)$$

gilt offensichtlich

$$\sum_m P_{n \rightarrow m}(t) = 1. \quad (6.5.13)$$

Weiterhin können wir  $\hat{U}$  in (6.5.11) durch  $\hat{S}$  ersetzen – durch  $\hat{H}_0$  werden keine Übergänge induziert:

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \left| \langle m | T_t \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}_D(t') \right) | n \rangle \right|^2. \quad (6.5.14)$$

Wir setzen nun  $n \neq m$  voraus und berechnen die Übergangsamplitude in erster Ordnung in der Störung;  $t_0 = 0$  zur Vereinfachung. In einem ersten Schritt erhalten wir

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle m | e^{i\hat{H}_0 t' / \hbar} \hat{V}(t') e^{-i\hat{H}_0 t' / \hbar} | n \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)t' / \hbar} \langle m | \hat{V}(t') | n \rangle, \quad (6.5.15)$$

und damit

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)t' / \hbar} \langle m | \hat{V}(t') | n \rangle \right|^2. \quad (6.5.16)$$

Als einfachstes Beispiel betrachten wir

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0, \\ \hat{V} & \text{für } t > 0, \end{cases} \quad (6.5.17)$$

d. h. ein ansonsten zeitlich konstanter Operator  $\hat{V}$  wird bei  $t = 0$  „eingeschaltet“. Dann ist das Matrixelement in (6.5.16) zeitunabhängig, die Integration lässt sich ohne Schwierigkeiten durchführen, und wir erhalten

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \left| \frac{\sin((\varepsilon_m - \varepsilon_n)t/2\hbar)}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n)/2} \langle m | \hat{V} | n \rangle \right|^2, \quad (6.5.18)$$

Abbildung 6.1:

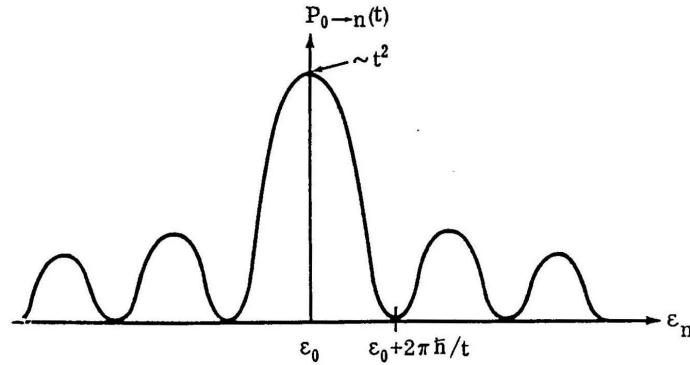


Fig. 12-1

Probability of a first-order transition from  $|0\rangle$  to  $|n\rangle$  after the potential has been on a time  $t$ , assuming  $|\langle n|\hat{V}|0\rangle|^2$  to be a slowly varying function of  $\epsilon_n$ .

oder auch, mit  $\omega_{mn} = (\epsilon_m - \epsilon_n)/\hbar$ ,

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{4}{\hbar^2 \omega_{mn}^2} \sin^2 \left( \frac{\omega_{mn} t}{2} \right) |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2. \quad (6.5.19)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit hängt also nicht nur von den Matrixelementen, sondern auch von der Energiedifferenz ab (siehe Bild 6.1).

Die Höhe des zentralen Maximums wächst  $\propto t^2$ , seine Breite nimmt  $\propto t^{-1}$  ab. Für eine gegebene Zeit  $\Delta t$ , die die Störung wirkt, sind im wesentlichen nur Übergänge möglich, deren Energiedifferenz im zentralen Maximum liegt,

$$\Delta\epsilon \cdot \Delta t \approx \hbar, \quad (6.5.20)$$

d. h. für eine kurzzeitige Störung können wir eine größere Energieunschärfe tolerieren, während bei einer langwirkenden Störung näherungsweise nur energieerhaltende Übergänge möglich sind.

*Anmerkung:* Die Unschärferelation (6.5.20) ist grundsätzlich von der  $\hat{x}$ - $\hat{p}$ -Unschärferelation verschieden. Bei letzterer handelt es sich um zwei physikalische Größen (Observablen), während die Zeit nur ein Parameter ist!

(d) Wir betrachten jetzt eine Störung, die nicht plötzlich, sondern *adiabatisch* eingeschaltet wird:

$$\hat{V}(t) = e^{\eta t} \hat{V}, \quad \eta \rightarrow +0. \quad (6.5.21)$$

Dann müssen wir die untere Integrationsgrenze in (6.5.16) durch  $-\infty$  ersetzen, und wir erhalten

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2. \quad (6.5.22)$$

Dies – als Funktion von  $\omega_{mn}$  – ist eine Lorenz-Kurve mit der Breite  $\approx \eta$ , d. h. Übergänge sind nur wahrscheinlich für  $\Delta\varepsilon < \hbar\eta$ . Die Übergangsrate, d. h. die Zahl der Übergänge pro Zeiteinheit, ist

$$\Gamma_{n \rightarrow m}(t) = \dot{P}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{2\eta e^{2\eta t}}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} |V_{mn}|^2 \quad (6.5.23)$$

(wobei  $V_{mn} = \langle m | \hat{V} | n \rangle$  definiert wurde) und reduziert sich im Grenzfall  $\eta \rightarrow 0$  auf eine Delta-Funktion,

$$\Gamma_{n \rightarrow m} \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n) |V_{mn}|^2, \quad (6.5.24)$$

da

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{a}{x^2 + a^2} = \pi \delta(x). \quad (6.5.25)$$

Das Ergebnis (6.5.24) ist auch als *Fermis Goldene Regel* bekannt (insbesondere im Zusammenhang mit Übergängen in ein Kontinuum von Zuständen; siehe Kapitel 6.6).

## 6.6 Induzierte optische Übergänge [§ 33]

(a) Wir wenden die Ergebnisse des letzten Paragraphen, insbesondere (6.5.16), jetzt auf eine harmonische Störung an, d. h. wir setzen für  $t > 0$

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \cos(\omega t). \quad (6.6.1)$$

Wiederum lässt sich die Integration explizit durchführen. Wir erhalten zwei Beiträge, die in ihrer Struktur ähnlich zu (6.5.19) sind, sowie einen „gemischten Term“  $\propto \cos(2\omega t)$ . Den letzteren können wir weglassen, wenn wir das Ergebnis über einige Perioden der externen Störung mitteln. Anders ausgedrückt: Die ersten beiden Terme,

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\pm} \frac{\sin^2 [(\omega_{mn} \pm \omega)t/2]}{(\omega_{mn} \pm \omega)^2} |V_{nm}|^2, \quad (6.6.2)$$

dominieren in der Nähe einer Resonanz, d. h. für  $\omega_{mn} \approx \pm\omega$ . Mit Hilfe der Relation

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(ax)}{ax^2} = \pi \delta(x) \quad (6.6.3)$$

erhalten wir für große Zeiten

$$P_{n \rightarrow m}(t \rightarrow \infty) = \frac{\pi t}{2\hbar^2} \sum_{\pm} |V_{nm}|^2 \delta(\omega_{mn} \pm \omega), \quad (6.6.4)$$

und schließlich für die Übergangsrate

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_{mn}|^2}{4} \sum_{\pm} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n \pm \hbar\omega). \quad (6.6.5)$$

Offensichtlich beschreiben diese beiden Terme die Absorption bzw. die stimulierte Emission:

$$\begin{aligned} \text{A : } & \varepsilon_m = \varepsilon_n + \hbar\omega \\ \text{E : } & \varepsilon_m = \varepsilon_n - \hbar\omega \end{aligned} \quad (6.6.6)$$

Das quantenmechanische System nimmt entweder die Energie  $\hbar\omega$  aus der externen Störung auf, oder es gibt die Energie  $\hbar\omega$  ab (stimuliert durch die Störung). Das Ergebnis (6.6.5) erhält man ebenfalls durch adiabatisches Einschalten der Störung (im Grenzfall  $\eta \rightarrow 0$ ).

(b) Ein wichtiger Fall ist, dass der Endzustand  $|m\rangle$  im Kontinuum liegt, oder dass  $|m\rangle$  zu einer Gruppe eng benachbarter Zustände gehört. Diesem Fall tragen wir durch eine Änderung der Notation Rechnung,  $|m\rangle \rightarrow |\mu\rangle$ . Die natürliche Fragestellung ist dann: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von  $\varepsilon_n$  nach  $\varepsilon_\mu \approx \varepsilon_n + \hbar\omega$  (wir betrachten den Fall, dass das Kontinuum oberhalb des Anfangszustands liegt)? Wir müssen dann (6.6.2), mit  $m \rightarrow \mu$ , über aller möglichen Endzustände summieren:

$$P_{n \rightarrow \{\mu\}}(t) = \sum'_{\mu} P_{n \rightarrow \mu}, \quad (6.6.7)$$

wobei der Strich auf die Einschränkung  $\varepsilon_\mu \approx \varepsilon_n + \hbar\omega$  hinweist. Wir definieren die *Zustandsdichte* der Endzustände derart, dass  $\varrho(\varepsilon)d\varepsilon$  gerade die Zahl der Zustände im Intervall  $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$  angibt. Damit erhalten wir

$$\sum'_{\mu} P_{n \rightarrow \mu}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int d\varepsilon_{\mu} \varrho(\varepsilon_{\mu}) \frac{\sin^2 [(\omega_{\mu n} - \omega)t/2]}{(\omega_{\mu n} - \omega)^2} |V_{\mu n}|^2. \quad (6.6.8)$$

Für große Zeiten hat der Integrand als Funktion von  $\varepsilon_{\mu}$  ein scharfes Maximum. Wir nehmen an, dass die Matrixelemente für die Übergänge in die in Frage kommenden Endzustände im wesentlichen gleich sind, ersetzen  $|V_{\mu n}|^2$  durch eine irgendwie gemittelte Größe, und führen dann das Integral aus:

$$\sum'_{\mu} P_{n \rightarrow \mu}(t) \approx t \frac{\pi}{2\hbar} \overline{|V_{\mu n}|^2} \varrho(\varepsilon_n + \hbar\omega). \quad (6.6.9)$$

*Große Zeiten* bedeutet demnach, dass  $\hbar/t$  klein sein muss im Vergleich zu dem Energieintervall  $\Delta\varepsilon$ , über das sich die Zustandsdichte und die Matrixelemente als Funktion der Energie wesentlich ändern. (6.6.9) entspricht (6.6.5), wenn wir dort die Absorption betrachten, mit  $\varrho(\varepsilon_m)$  multiplizieren und über die Energie integrieren.



Die Rate für Übergänge aus einem diskreten Niveau in ein Kontinuum ist somit direkt proportional zur Dichte der Endzustände (und daher ist dies eine weitverbreitete Methode, die Zustandsdichte experimentell zu bestimmen).

(c) Wir wenden die zeitabhängige Störungstheorie jetzt auf die Wechselwirkung von Elektronen (z.B. in Atomen) mit klassischer elektromagnetischer Strahlung an. In der *transversalen Eichung* werden die elektromagnetischen Wellen durch das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  beschrieben, mit  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , während das skalare Potential gleich null gesetzt wird. Wir setzen

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \left[ e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \quad (6.6.10)$$

mit  $\mathbf{A}_0$  reell und  $\omega = c|\mathbf{k}|$ . Dann ergeben sich das elektrische und das magnetische Feld zu

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}_0 \left[ e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} - e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right], \quad (6.6.11)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 \left[ e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} - e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right]. \quad (6.6.12)$$

$$(6.6.13)$$

Schließlich setzen wir  $\mathbf{A}_0 = A_0 \mathbf{e}$ ,  $|\mathbf{e}| = 1$ ,  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e} = 0$ . Die Störung ist durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 = \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \quad (6.6.14)$$

mit  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$ .

Zunächst noch einige Abschätzungen. Wir setzen  $p \approx \hbar/a_0$  und erhalten

$$\frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \approx \frac{e^2}{a_0}; \quad V_1 \approx \frac{e\hbar E_0}{m\omega a_0}; \quad V_2 \approx \frac{e^2 E_0^2}{m\omega^2}; \quad (6.6.15)$$

mit  $E_0 = \omega A_0/c$ . Für  $\hbar\omega > e^2/a_0$  ist daher  $V_1$  eine kleine Störung für  $E_0 \ll e/a_0^2$ , d. h. wenn  $E_0$  sehr viel kleiner als das „atomare“ Feld  $e/a_0^2$  ist. Unter dieser Voraussetzung finden wir aber auch

$$\frac{V_2}{V_1} \approx \frac{E_0}{e/a_0^2}, \quad (6.6.16)$$

d. h. der quadratische Term  $\propto \mathbf{A}^2$  ist vernachlässigbar – wie auch magnetische Effekte:

$$\mu_B |\mathbf{B}| \approx \mu_B k A_0 = \frac{\mu_B \omega A_0}{c} \approx \frac{e^2}{\hbar c} \frac{E_0}{e/a_0^2} \frac{e^2}{a_0}, \quad (6.6.17)$$

d. h. magnetische Beiträge sind nochmals um einen Faktor  $e^2/\hbar c \approx 1/137$  kleiner als  $\hat{V}_1$  ( $\alpha = e^2/\hbar c$  heißt auch Feinstrukturkonstante).  $\hat{V}_1$  ist daher der dominante Anteil der Störung.

Bei der Berechnung der Übergangsrates sind gewisse Matrixelemente von  $\hat{V}$  zwischen atomaren Zuständen zu berechnen. Die räumliche Ausdehnung dieser Zustände ist  $\approx a_0 = \hbar^2/me^2 \ll \lambda = 2\pi/k$  ( $\lambda \approx 10^{-4}$  cm für  $\hbar\omega \approx 1$  eV, so dass Vereinfachungen möglich sind. Insbesondere können wir  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$  im Exponenten von (6.6.10) vernachlässigen (Dipol-Näherung) und erhalten schließlich

$$\hat{V}_1 \approx -\frac{2eE_0}{m\omega}(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{e}) \cos(\omega t). \quad (6.6.18)$$

Dies ist von der gleichen Form wie (6.6.1). Wegen  $\lambda \gg a_0$  wirkt die Störung wie ein räumlich homogenes Feld. Wir können daher vermuten, dass auch der Ansatz

$$\hat{V} = -e\mathbf{E}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{E}(t) = 2E_0\mathbf{e} \sin(\omega t) \quad (6.6.19)$$

zu physikalisch äquivalenten Ergebnissen führt. Dies lässt sich mit Hilfe der Relation

$$[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{1}{2m}[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{r}}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{\mathbf{p}} \quad (6.6.20)$$

nachweisen. Wir berechnen die für die Störung (6.6.18) relevanten Matrixelemente:

$$\begin{aligned} \langle m | \left( -\frac{2eE_0}{m\omega} \right) \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle &= \frac{i}{\hbar} \frac{2eE_0}{\omega} \langle m | \hat{H}_0 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} \hat{H}_0 | n \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{2eE_0}{\omega} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) \langle m | \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle \\ &= \pm 2eiE_0 \langle m | \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle, \end{aligned} \quad (6.6.21)$$

wobei im letzten Schritt  $\varepsilon_m - \varepsilon_n = \pm \hbar\omega$  eingesetzt wurde. Abgesehen von einem Faktor  $\mp i$  ist dies das relevante Matrixelement für die Störung (6.6.19), die somit die gleichen Übergangsrates wie die Störung (6.6.18) liefert.

*Anmerkung (1):* Die Äquivalenz von (6.6.18) und (6.6.19) lässt sich auch mit Hilfe einer Eichtransformation zeigen.

*Anmerkung (2):* (6.6.21) zeigt, wie sich Impuls- und Ortsmatrixelemente ineinander umrechnen lassen. Zur expliziten Berechnung kann die eine oder die andere Form bequemer sein.

(d) Wir betrachten nochmals die Absorption und fassen die obigen Ergebnisse zusammen:

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} (eE_0)^2 |\langle m | \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle|^2 \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n - \hbar\omega). \quad (6.6.22)$$

Daher ist  $\hbar\omega \cdot \Gamma_{n \rightarrow m}$  die pro Zeiteinheit absorbierte Energie, und wir definieren einen Wirkungsquerschnitt als

$$\sigma_a = \frac{\text{absorbierte Energie / Zeit}}{\text{Energistromdichte des Feldes}}. \quad (6.6.23)$$

Die Energiestromdichte des Feldes ist entsprechend der klassischen Elektrodynamik betragsmäßig gegeben durch (siehe Kapitel 1.1 und 1.3)

$$j_E = \frac{c}{4\pi} |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)| \cdot |\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)| \quad (6.6.24)$$

und ergibt sich im Mittel zu  $j_E = (c/2\pi)E_0^2$ . ( $j_E$  hat die Einheit Energie/(Fläche · Zeit)). Damit erhalten wir

$$\sigma_a = \frac{\hbar\omega\Gamma_{n\rightarrow m}}{j_E} = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \omega |\langle m | \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle|^2 \delta(\omega_{mn} - \omega). \quad (6.6.25)$$

Nun sei  $|n\rangle$  der Grundzustand (und daher  $\omega_{mn} > 0$ ). Integration von (6.6.25) und Summation über alle  $m$  ergibt

$$\int d\omega \sum_m \sigma_a(\omega) = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \sum_m \omega_{mn} |\langle m | \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e} | n \rangle|^2.$$

Die verbleibende Summe lässt sich ganz allgemein auswerten, mit dem Resultat

$$\int d\omega \sum_m \sigma_a(\omega) = 4\pi^2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar}{2m} = \frac{2\pi^2 e^2}{mc}. \quad (6.6.26)$$

Diese *Oszillator-Summenregel* enthält kein  $\hbar$  mehr auf der rechten Seite – und ist daher mit der klassischen Elektrodynamik herleitbar.

Herleitung: Benutze (vgl. auch (6.6.21))

$$[[\hat{H}_0, \hat{x}], \hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{m} \quad (6.6.27)$$

und berechne  $-\hbar^2/m = \langle n | [[\hat{H}_0, \hat{x}], \hat{x}] | n \rangle$  durch Einschleiben eines Einheitsoperators, mit dem Resultat

$$-\frac{\hbar^2}{m} = -2\hbar \sum_m \omega_{mn} |\langle m | \hat{x} | n \rangle|^2. \quad (6.6.28)$$

*Anmerkung:* Diese Summenregel ist allgemein gültig – wir mussten die potentielle Energie in  $\hat{H}_0$  nicht spezifizieren!

# Kapitel 7

## Systeme identischer Teilchen

### 7.1 Bosonen und Fermionen [§ 34]

(a) In der klassischen Mechanik besitzen gleichartige Teilchen trotz der Identität ihrer physikalischen Eigenschaften eine Individualität. Man kann sich die Teilchen durchnummeriert vorstellen und dann die Bewegung entlang jeder Bahnkurve verfolgen. Zu jedem späteren Zeitpunkt können die Teilchen daher identifiziert werden. Wie aber unmittelbar aus der *Unschärferelation* folgt, verliert in der Quantenmechanik die Bahnkurve ihren Sinn: Auch wenn wir die Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt numerieren, können wir daraus nicht über ihre Identifizierung zu einem späteren Zeitpunkt aussagen. Dieses *Prinzip der Ununterscheidbarkeit* identischer Teilchen spielt eine grundlegende Rolle in der Quantenmechanik.

Als Beispiel betrachten wir  $N$  identische, nicht wechselwirkende Teilchen mit

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}_j}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}_j) \right] = \sum_{j=1}^N \hat{h}_j, \quad (7.1.1)$$

d. h. der Hamiltonoperator ist eine Summe von sogenannten 1-Teilchen-Operatoren. Wir stellen uns vor, dass wir das 1-Teilchen-Problem gelöst haben,

$$\hat{h}|a\rangle = \varepsilon_a|a\rangle, \quad (7.1.2)$$

wobei „ $a$ “ für alle Quantenzahlen steht. Im folgenden sei  $\{|j\rangle\}$  eine bestimmte Basis (z.B. Ort und  $z$ -Komponente des Spins), und als Abkürzung schreiben wir

$$\sum_{s_z^j} \int d^3r_j |\mathbf{r}_j, s_z^j\rangle \langle \mathbf{r}_j, s_z^j| \rightarrow \int dj |j\rangle \langle j|. \quad (7.1.3)$$

Mit  $\Phi_a(j) = \langle \mathbf{r}_j, s_z^j | a \rangle$  bilden wir nun einen Eigenzustand des Gesamtsystems,

$$\Psi_N(1, \dots, N) = \Phi_a(1)\Phi_b(2) \cdots \Phi_u(N), \quad \text{so dass} \quad (7.1.4)$$

$$\hat{H}|\Psi_N\rangle = E_N|\Psi_N\rangle, \quad \text{mit} \quad (7.1.5)$$

$$E_N = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \dots + \varepsilon_u. \quad (7.1.6)$$

Die 1-Teilchen-Energien sind einfach zu summieren.

(b) Der Hamiltonoperator ändert sich nicht, wenn zwei „Koordinaten“ vertauscht werden. Wir definieren den Vertauschungs- oder *Permutationsoperator* über die Relation

$$\langle \dots, i, \dots, j, \dots | \hat{P}_{ij} | \Psi \rangle = \langle \dots, j, \dots, i, \dots | \Psi \rangle. \quad (7.1.7)$$

Offensichtlich ist  $\hat{P}_{ij}^2 = 1$ , d.h. dieser Operator ist gleich seinem Inversen, und er hat die Eigenwerte  $\pm 1$ . Wegen  $[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0$  für beliebige  $(ij)$  können wir die Eigenzustände von  $\hat{H}$  auch als Eigenzustände zu  $\hat{P}_{ij}$  wählen. Da  $\hat{P}_{ij}$  und  $\hat{P}_{kl}$  im Allgemeinen aber nicht kommutieren, nützt diese Bemerkung wenig. Es ist aber eine *experimentelle Tatsache*, dass in der Natur nur zwei Typen von Teilchen vorkommen:

**Bosonen:** Die Gesamtwellenfunktion ist symmetrisch, wenn zwei beliebige Koordinaten vertauscht werden.

$$\hat{P}_{ij} \Psi_B(1 \dots i \dots j \dots N) = + \Psi_B(1 \dots i \dots j \dots N) \quad (7.1.8)$$

**Fermionen:** Die Gesamtwellenfunktion ist antisymmetrisch, wenn zwei beliebige Koordinaten vertauscht werden.

$$\hat{P}_{ij} \Psi_B(1 \dots i \dots j \dots N) = - \Psi_B(1 \dots i \dots j \dots N) \quad (7.1.9)$$

*Anmerkung:* Es zeigt sich (und lässt sich innerhalb der relativistischen Quantenmechanik begründen), dass Teilchen mit ganzzahligem Spin Bosonen und Teilchen mit halbzahligem Spin Fermionen sind.

$$B \Leftrightarrow s = 0, 1, 2, \dots \quad F \Leftrightarrow s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (7.1.10)$$

Beispiele:

Bosonen: Photonen, Pionen,  $^4\text{He}$ -Kerne, ...  
Fermionen: Elektronen, Protonen, Neutronen, ...

Neueste Untersuchungen haben aber gezeigt, dass in *zwei Dimensionen* auch andere „Teilchen“, sogenannte *Anyonen*, existieren können, mit  $\hat{P}|\Psi\rangle = e^{i\varphi}|\Psi\rangle$  und  $\varphi \neq 0, \pi$ . In einem gewissen Sinn ist außerdem die Unterscheidung von Fermionen und Bosonen *in einer Dimension* hinfällig.

Eine wichtige Konsequenz von (7.1.9) ist das *Pauli-Prinzip*: Zwei Fermionen können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen,

$$\Psi_F(\dots, i, \dots, i, \dots) \equiv 0. \quad (7.1.11)$$

Auf dieses Prinzip hatten wir bereits am Ende von Kapitel 3.4 im Zusammenhang mit den Energiezuständen eines einfachen „Metalls“ hingewiesen.

*Anmerkung:* Wir vernachlässigen für einen Moment den Spin. Dann hängt ein allgemeiner  $N$ -Teilchen-Zustand nur von den Ortskoordinaten  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  ab. Die Wahrscheinlichkeit, irgendeines der Teilchen an einem vorgegebenen Ort  $\mathbf{r}$  zu finden, ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \varrho(\mathbf{r}) = & \int d^3r_2 d^3r_3 \dots d^3r_N |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 + \\ & \int d^3r_1 d^3r_3 \dots d^3r_N |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 + \\ & \vdots \end{aligned} \quad (7.1.12)$$

Diese Größe, die 1-Teilchen „Wahrscheinlichkeitsdichte“, lässt sich auch als Erwartungswert des *Dichteoperators*

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}) = \sum_j \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_j) \quad (7.1.13)$$

darstellen. (In diese – allgemeinere – Aussage kann der Spin ohne weiteres eingeschlossen werden.) Generell folgt aus der Ununterscheidbarkeit der Teilchen, dass sich jede physikalische Größe durch einen in allen Koordinaten *symmetrischen Operator* darstellen lässt. Für einen Produktzustand vom Typ (7.1.4) folgt (wieder ohne Spin)

$$\varrho(\mathbf{r}) = |\Phi_a(\mathbf{r})|^2 + \dots + |\Phi_u(\mathbf{r})|^2, \quad (7.1.14)$$

d. h. die Wahrscheinlichkeitsdichten addieren sich einfach auf. Normierung:

$$\int d^3r \varrho(\mathbf{r}) = N.$$

## 7.2 Zustandsfunktion zweier Elektronen [§ 35]

(a) Wir gehen aus von (7.1.4) für  $N = 2$ ,

$$\Psi_2(1, 2) = \Phi_a(1)\Phi_b(2). \quad (7.2.1)$$

Offensichtlich ist jede Linearkombination

$$c_1\Psi_2(1, 2) + c_2\Psi_2(2, 1) \quad (7.2.2)$$

auch eine Eigenfunktion von  $\hat{H}$  mit dem gleichen Eigenwert  $\varepsilon_a + \varepsilon_b$  (Dieses Phänomen heißt auch Austauschentartung). Nach Kapitel 7.1 sind aber nur Zustände mit  $c_1 = \pm c_2$  in der Natur realisiert!

Explizit:

$$\Psi_B(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_a(1)\Phi_b(2) + \Phi_a(2)\Phi_b(1)), \quad (7.2.3)$$

$$\Psi_F(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_a(1)\Phi_b(2) - \Phi_a(2)\Phi_b(1)). \quad (7.2.4)$$

Offensichtlich ist  $\hat{P}_{12}|\Psi_B\rangle = |\Psi_B\rangle$  und  $\hat{P}_{12}|\Psi_F\rangle = -|\Psi_F\rangle$ . Der Faktor „ $\sqrt{2}$ “ tritt aufgrund der Normierung auf (die 1-Teilchen-Zustände sind als normiert vorausgesetzt).

(b) Wir betrachten jetzt zwei Elektronen ( $s = 1/2$ ) und schreiben die 1-Teilchen-Zustände als Produkt von Orts- und Spinanteil, vgl. (5.3.13) bzw. (5.3.14). Der Zustand (7.2.4) ist dann aber im Allgemeinen kein Eigenzustand zum Quadrat des Gesamtspins,

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2. \quad (7.2.5)$$

Vergleiche Kapitel 5.5. Die Eigenzustände zu  $\hat{S}^2$  sind bekanntermaßen der Singulett-Zustand  $|0, 0\rangle$  und die drei Triplett-Zustände,  $|1, S_z\rangle$ ,  $S_z = -1, 0, +1$ :

$$\text{S: } |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (7.2.6)$$

$$\text{T: } |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (7.2.7)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (7.2.8)$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (7.2.9)$$

Wir erkennen sofort, dass der Singulett-Zustand *antisymmetrisch* ist und die Triplett-Zustände *symmetrisch* sind bei Vertauschen der Teilchen! Nun muss aber die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch sein, d. h. der Ortsanteil der Wellenfunktion muss gerade symmetrisch (S) bzw. antisymmetrisch (T) sein:

$$\Psi_F^{(\text{S})} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]|0, 0\rangle, \quad (7.2.10)$$

$$\Psi_F^{(\text{T})} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]|0, S_z\rangle. \quad (7.2.11)$$

Daher tritt in  $\Psi_F^{(\text{T})}$  ein Austauschloch auf – die Wellenfunktion verschwindet für  $\mathbf{r}_1 \approx \mathbf{r}_2$ .

Diese einfache Tatsache hat weitreichende Konsequenzen, z.B. für die Beschreibung von Elektronen in Festkörpern. In vielen Fällen ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen nicht vernachlässigbar. Grob gesprochen können wir uns vorstellen, dass wir die Wechselwirkung zwischen den Elektronen mit Hilfe eines Variationsansatzes oder im Rahmen der Störungstheorie behandeln. Dann sind die Matrixelemente

$$\Delta E_S = \langle \Psi_F^{(\text{S})} | \hat{V} | \Psi_F^{(\text{S})} \rangle, \quad \Delta E_T = \langle \Psi_F^{(\text{T})} | \hat{V} | \Psi_F^{(\text{T})} \rangle, \quad (7.2.12)$$

mit  $V = e^2/r$ ,  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , ein Maß für die Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen. Aufgrund des Austauschlochs ist in vielen (nicht allen!) Fällen  $\Delta E_S > \Delta E_T$ ,

d. h. ein Triplett-Zustand liegt energetisch niedriger als ein Singulett-Zustand. Obwohl die Wechselwirkung nur im Ortsraum wirkt, hängt die Energie der zwei Elektronen davon ab, welchen Spinzustand sie haben! Die Energieänderung (7.2.12) lässt sich auch wie folgt zusammenfassen:

$$\Delta E = \Delta E_S + (\Delta E_T - \Delta E_S) \frac{S(S+1)}{2}, \quad (7.2.13)$$

da  $S(S+1) = 0$  oder  $= 2$  für die beiden Fälle. Mit

$$\hbar^2 S(S+1) \leftrightarrow (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 \leftrightarrow \frac{3\hbar^2}{2} + 2\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 \quad (7.2.14)$$

führt dies zu einer „spin-abhängigen“ Wechselwirkung („Austauschwechselwirkung“),

$$\Delta E = \text{konst.} - \frac{4J\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2}{\hbar^2}, \quad (7.2.15)$$

mit  $-J = (\Delta E_T - \Delta E_S)/4$ . Im Allgemeinen – siehe oben – ist  $J > 0$ , d. h. die Austauschwechselwirkung bevorzugt Triplett-Zustände und eine „Parallelstellung der Spins“.

### 7.3 Zweite Quantisierung [§ 36]

(a) Wir konstruieren jetzt explizit die Vielteilchen-Zustände, die ein System von identischen Teilchen (Bosonen oder Fermionen) beschreiben, und führen dann eine Notation ein, die den Umgang mit diesen Zuständen erleichtert. Wir gehen aus von (7.1.14) und bilden

$$|\Psi_B\rangle = \sum_{\hat{P}} \hat{P} |\Psi_N\rangle, \quad (7.3.1)$$

wobei die Summe über alle möglichen Permutationen, d. h. über alle möglichen paarweisen Vertauschungen läuft. Dieser Zustand beschreibt ein System von Bosonen, denn

$$\hat{P}' |\Psi_B\rangle = \sum_{\hat{P}} (\hat{P}' \hat{P}) |\Psi_N\rangle = \sum_{\hat{P}''} \hat{P}'' |\Psi_N\rangle = + |\Psi_B\rangle. \quad (7.3.2)$$

Dieser Zustand ist vollständig symmetrisch. Ein Fermisystem wird durch einen vollständig antisymmetrischen Zustand beschrieben:

$$|\Psi_F\rangle = \sum_{\hat{P}} (-1)^P \hat{P} |\Psi_N\rangle, \quad (7.3.3)$$



wobei  $(-1)^P$  gleich  $+1$  ist bei einer geraden Zahl von paarweisen Vertauschungen, und gleich  $-1$  bei einer ungeraden Zahl von paarweisen Vertauschungen. Der Fermionenzustand (7.3.3) lässt sich auch als Determinante darstellen:

$$|\Psi_F\rangle = \begin{vmatrix} \Phi_a(1) & \Phi_a(2) & \dots & \Phi_a(N) \\ \Phi_b(1) & \Phi_b(2) & \dots & \Phi_b(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Phi_u(1) & \Phi_u(2) & \dots & \Phi_u(N) \end{vmatrix}. \quad (7.3.4)$$

Die Normierung dieser Zustände ergibt sich aus

$$\langle \Psi_F | \Psi_F \rangle = N!, \quad (7.3.5)$$

$$\langle \Psi_B | \Psi_B \rangle = \frac{N!}{N_a! N_b! \dots N_u!}, \quad (7.3.6)$$

wobei  $N_a, N_b, \dots$  gerade angibt, wie oft die Zustände  $a, b, \dots$  in (7.3.1) auftreten. (Vergleiche Kapitel 7.2 für  $N = 2$ ; in (7.2.3) wurde  $a \neq b$  vorausgesetzt.) Diese Zustände sind Eigenzustände zu  $\hat{H}$  (siehe (7.1.1) mit Eigenwert

$$\varepsilon_a + \varepsilon_b + \dots + \varepsilon_u. \quad (7.3.7)$$

(b) Das Pauli-Prinzip hat dramatische Konsequenzen für das Tieftemperaturverhalten von Bosonen im Vergleich zu Fermionen. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die 1-Teilchen-Energien

$$\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots \quad (7.3.8)$$

nicht vom Spin abhängen, und wir vergleichen  $N$  Bosonen ( $s = 0$ ) mit  $N$  Fermionen ( $s = 1/2$ ). Bei dem Bosonensystem sind alle Bosonen im Grundzustand im niedrigsten 1-Teilchen-Zustand:

$$\Psi_B^0(1, 2, \dots, N) = \Phi_0(1)\Phi_0(2)\dots\Phi_0(N), \quad (7.3.9)$$

und die Energie dieses Zustandes ist

$$E_B^0 = N\varepsilon_0. \quad (7.3.10)$$

Im Gegensatz dazu befinden sich je zwei Fermionen (Spin  $\uparrow$  und Spin  $\downarrow$ ) in den  $N/2$  ( $N$  sei gerade) niedrigsten Zuständen, und die Energie dieses Zustandes ist

$$E_F^0 = 2(\varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_k), \quad k = \frac{N}{2} - 1. \quad (7.3.11)$$

(c) Gegeben sei nun wieder eine 1-Teilchen-Basis mit Energieeigenwerten  $\varepsilon_i$  (wir bleiben bei der Numerierung  $0, 1, 2, \dots$ ). Dann sind offensichtlich die Zustände  $\Psi_B$

und  $\Psi_F$  eindeutig festgelegt, wenn wir angeben, wie oft jeder 1-Teilchen-Zustand in (7.3.1) bzw. (7.3.4) vorkommt. Diese Darstellung heißt auch *Besetzungszahldarstellung*. Zum Beispiel für die Grundzustände gilt

$$|\Psi_B^0\rangle \leftrightarrow |N_{[0]}, n_{[1]}, n_{[2]}, n_{[3]}, \dots\rangle, \quad (7.3.12)$$

wobei  $N_{[0]}$  bedeutet, dass der Zustand „0“  $N$ -mal vorkommt (besetzt ist). Entsprechend

$$|\Psi_F^0\rangle \leftrightarrow |1_{[0\uparrow]}, 1_{[0\downarrow]}, 1_{[1\uparrow]}, \dots, 1_{[k\downarrow]}, 0_{[(k+1)\uparrow]}, \dots\rangle. \quad (7.3.13)$$

Wichtiges Resultat: Die Besetzungszahlen eines Fermisystem sind nur gleich 0 oder 1!

*Anmerkung:* Das Zahlentupel  $\{n_0, n_1, n_2, \dots\}$  bzw.  $\{n_{0\uparrow}, n_{0\downarrow}, n_{1\uparrow}, \dots\}$  ist unendlich lang, da im Allgemeinen die Zahl der -Teilchen-Zustände unbeschränkt ist.

(d) Die Besetzungszahldarstellung hat Ähnlichkeit mit den Zuständen  $\{|n\rangle\}$ , die wir bereits beim harmonischen Oszillator kennengelernt hatten. Wir betrachten zuerst Bosonen und definieren entsprechend zu Kapitel 3.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit folgenden Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0. \quad (7.3.14)$$

Ausgehend vom „Vakuum“

$$|0\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots\rangle \quad (7.3.15)$$

konstruieren wir die (normierten) Besetzungszahlzustände durch mehrmaliges Anwenden von Erzeugungsoperatoren:

$$|\Psi_B\rangle \leftrightarrow |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle = \dots \frac{(\hat{a}_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{(\hat{a}_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(\hat{a}_0^+)^{n_0}}{\sqrt{n_0!}} |0\rangle. \quad (7.3.16)$$

Aus Kapitel 3.2 wissen wir, dass diese Zustände Eigenzustände zum Besetzungszahloperator  $\hat{n}_j$  sind:

$$\hat{n}_j = \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \quad \Rightarrow \quad \hat{n}_j |n_0, n_1, \dots\rangle = n_j |n_0, n_1, \dots\rangle. \quad (7.3.17)$$

Daher misst der Operator

$$\hat{N} = \sum_j \hat{n}_j \quad (7.3.18)$$

offensichtlich die Gesamtteilchenzahl,

$$\hat{N} |n_0, n_1, \dots\rangle = N |n_0, n_1, \dots\rangle. \quad (7.3.19)$$

Zwei Zustände  $|n_0, n_1, \dots\rangle$  und  $|n'_0, n'_1, \dots\rangle$  sind immer zueinander orthogonal, außer wenn sie in *allen* Besetzungszahlen übereinstimmen. Damit stehen insbesondere Zustände mit verschiedener Teilchenzahl immer senkrecht aufeinander.

*Anmerkung:* Der so konstruierte Hilbert-Raum von Zuständen heißt auch Fock-Raum.

Die Energie eines Zustands  $|\{n_j\}\rangle$  ist

$$E(\{n_j\}) = \sum_j \varepsilon_j n_j, \quad (7.3.20)$$

d. h. ein bestimmter 1-Teilchen-Energiewert  $\varepsilon_i$  tritt genau so oft auf wie die entsprechende Wellenfunktion in dem Vielteilchenzustand vorkommt. Daher hat  $\hat{H}$  aus (7.1.1) folgende Darstellung:

$$\hat{H} \leftrightarrow \sum_j \varepsilon_j \hat{n}_j, \quad (7.3.21)$$

denn die Anwendung dieses Ausdrucks auf den Zustand im Fock-Raum liefert gerade (7.3.20).

Beispiel: Teilchen im Kasten der Länge  $a$ , periodische Randbedingungen. Dann ist (vgl. Kapitel 2.3)

$$\Phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{ipx/\hbar}, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{a}n, \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (7.3.22)$$

Mit

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}^+] = \delta_{pp'}, \quad [\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}] = [\hat{a}_p^+, \hat{a}_{p'}^+] = 0, \quad (7.3.23)$$

erhalten wir

$$\hat{H} \leftrightarrow \sum_p \varepsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p, \quad \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}. \quad (7.3.24)$$

Natürlich ist  $\hat{H}$  in der Impulsbasis diagonal. Wie sieht  $\hat{H}$  in einer anderen Basis, z.B. der Ortsbasis aus? Wir definieren Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die ein Teilchen an einem bestimmten Ort erzeugen oder vernichten, gemäß

$$\hat{\Psi}^+(x) = \sum_p \Phi_p^*(x) \hat{a}_p^+, \quad (7.3.25)$$

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_p \Phi_p(x) \hat{a}_p. \quad (7.3.26)$$

Offensichtlich gilt  $[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')] = 0$ , und außerdem

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')] &= \sum_{p,p'} \Phi_p(x) \Phi_{p'}^*(x') [\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}^+] \\ &= \sum_p \Phi_p(x) \Phi_p^*(x') \\ &= \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (7.3.27)$$

da

$$\frac{1}{a} \sum_p e^{ip(x-x')/\hbar} = \delta(x-x'). \quad (7.3.28)$$

Wir setzen

$$\hat{a}_p^+ = \int dx \Phi_p(x) \hat{\Psi}^+(x), \quad \hat{a}_p = \int dx \Phi_p^*(x) \hat{\Psi}(x) \quad (7.3.29)$$

in (7.3.24) ein und erhalten

$$\hat{H} \leftrightarrow \int dx \hat{\Psi}^+(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \hat{\Psi}(x). \quad (7.3.30)$$

Hier taucht gerade der 1-Teilchen-Operator der kinetischen Energie in der Ortsbasis auf. Entsprechend gilt

$$\hat{N} = \int dx \hat{\Psi}^+(x) \hat{\Psi}(x). \quad (7.3.31)$$

Ohne weiteren Beweis halten wir fest, wie sich beliebige 1-Teilchen- und 2-Teilchen-Operatoren (letztere treten bei wechselwirkenden Teilchen auf) darstellen lassen:

$$\sum_j V(\hat{x}_j) \leftrightarrow \int dx \hat{\Psi}^+(x) V(x) \hat{\Psi}(x), \quad (7.3.32)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\hat{x}_i - \hat{x}_j) \leftrightarrow \int dx dx' \hat{\Psi}^+(x) \hat{\Psi}^+(x') U(x-x') \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x). \quad (7.3.33)$$

In der Impulsbasis wird z.B. aus (7.3.32)

$$\int dx \hat{\Psi}^+(x) V(x) \hat{\Psi}(x) = \sum_{p,p'} V_{pp'} \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p'}, \quad (7.3.34)$$

wobei  $V_{pp'}$  die „Übergangsamplitude“ für  $p' \rightarrow p$  ist:

$$V_{pp'} = \int dx \Phi_p^*(x) V(x) \Phi_{p'}(x) = \langle p | \hat{V} | p' \rangle. \quad (7.3.35)$$

Der Übergang zu  $D = 3$  ist problemlos. Außerdem lässt sich ohne Schwierigkeiten der Spin berücksichtigen.

(e) Die Besetzungszustände für ein System von Fermionen konstruieren wir analog zu (7.3.16):

$$|\Psi_F\rangle \leftrightarrow |n_0, n_1, n_2, \dots\rangle = \cdots (c_2^+)^{n_2} (c_1^+)^{n_1} (c_0^+)^{n_0} |0\rangle, \quad (7.3.36)$$

wobei der Spin durch eine Änderung der Numerierung berücksichtigt werden kann. (Wegen  $n_i = 0, 1$  und  $0! = 1! = 1$  treten keine zusätzlichen Faktoren auf.) Aufgrund

der Antisymmetrie des Zustands müssen die Fermionenerzeuger und -vernichter aber folgenden *Antikommutationsrelationen* genügen:

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^+\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\} = 0, \quad (7.3.37)$$

mit  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ ; „ $i$ “ und „ $j$ “ steht hier beispielsweise für Impuls und Spin,  $\hat{c}_i$  entspricht  $\hat{c}_{p\uparrow}$  und  $\hat{c}_{p\downarrow}$ . Die Relationen (7.3.37) kann man sich wie folgt explizit klarmachen, wenn wir uns die Zustandsfunktion zweier Teilchen erzeugen:

$$\hat{c}_i^+ |0\rangle \leftrightarrow \varphi_i(1), \quad (7.3.38)$$

$$\hat{c}_j^+ \hat{c}_i^+ |0\rangle \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_i(1)\varphi_j(2) - \varphi_i(2)\varphi_j(1)], \quad (7.3.39)$$

$$\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ |0\rangle \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_j(1)\varphi_i(2) - \varphi_j(2)\varphi_i(1)]. \quad (7.3.40)$$

Offensichtlich ist dann  $\hat{c}_j^+ \hat{c}_i^+ |0\rangle = -\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ |0\rangle$  für  $i \neq j$ . Für gleiche Quantenzahlen ergibt sich

$$(\hat{c}_i^+)^2 |0\rangle = -(\hat{c}_i^+)^2 |0\rangle \equiv 0. \quad (7.3.41)$$

Die Vertauschung zweier Teilchen wird durch folgenden Operator beschrieben:

$$\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_i \hat{c}_j |\dots\rangle = [\delta_{ij} \hat{n}_i - \hat{n}_i \hat{n}_j] |\dots\rangle. \quad (7.3.42)$$

Erst wird ein Teilchen in „ $j$ “ vernichtet, dann wird ein Teilchen von „ $i$ “ nach „ $j$ “ transportiert, und schließlich wird wieder ein Teilchen in „ $i$ “ erzeugt. Die rechte Seite von (7.3.42) verschwindet für  $i = j$  (natürlich kann man nicht zwei Teilchen im gleichen Zustand vernichten), und ergibt  $-|\dots\rangle$  für  $i \neq j$  (vorausgesetzt, beide Zustände „ $i$ “ und „ $j$ “ sind besetzt). Wie vorher ist  $\hat{n}_j = \hat{c}_j^+ \hat{c}_j$  der Besetzungszahloperator; für Fermionen hat er die Eigenwerte 0, 1:

$$\hat{n}_j |\dots, n_j, \dots\rangle = \hat{n}_j \dots (\hat{c}_j^+)^{n_j} \dots |0\rangle = n_j |\dots, n_j, \dots\rangle, \quad (7.3.43)$$

wiederum mit Hilfe von (7.3.37). Analog zu Abschnitt (d) lassen sich auch für Fermionen die 1-Teilchen- und 2-Teilchen-Operatoren darstellen. Die Erzeuger und Vernichter in der Ortsbasis erfüllen jetzt aber die Antikommutationsrelationen

$$\{\hat{\Psi}_s(x), \hat{\Psi}_{s'}^+(x')\} = \delta(x - x') \delta_{ss'}, \quad (7.3.44)$$

$$\{\hat{\Psi}_s(x), \hat{\Psi}_{s'}(x')\} = \{\hat{\Psi}_s^+(x), \hat{\Psi}_{s'}^+(x')\} = 0, \quad (7.3.45)$$

wobei hier explizit der Spin (z. B.  $s = \uparrow, \downarrow$ ) mit aufgeschrieben wurde. Zum Beispiel ist der Dichteoperator durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\hat{\rho}(x) = \sum_s \hat{\Psi}_s^+(x) \hat{\Psi}_s(x) = \sum_s \sum_{pp'} \Phi_p^*(x) \Phi_{p'}(x) \hat{c}_{ps}^+ \hat{c}_{p's}. \quad (7.3.46)$$

Analog erhalten wir für die Spindichte

$$\hat{\mathbf{s}}(x) = \frac{\hbar}{2} \sum_{ss'} \hat{\Psi}_s^+(x) \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \hat{\Psi}_{s'}(x) \quad (7.3.47)$$

mit  $\boldsymbol{\sigma}_{ss'} = ((\sigma_x)_{ss'}, (\sigma_y)_{ss'}, (\sigma_z)_{ss'})$  den Pauli-Matrizen.

# Kapitel 8

## Streutheorie

### 8.1 Problemstellung [§ 37]

(a) Wir untersuchen Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle, \quad (8.1.1)$$

mit  $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\hat{\mathbf{r}})$ , die die Streuung eines Teilchens an einem (kurzreichweitigen, bei  $\mathbf{r} \approx 0$  lokalisiertem) Potential  $V(\mathbf{r})$  beschreiben;  $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ . Diese Lösung soll aus einem Wellenpaket bestehen, das zu einem frühen Zeitpunkt „links“ von dem Potential lokalisiert ist und sich auf dieses zubewegt. Zu späten Zeiten erwarten wir im Wesentlichen, das Wellenpaket „rechts“ zu finden, plus gestreute Wellen (siehe Abbildung 8.1).

Unter der Voraussetzung, dass das Wellenpaket räumlich größer ist als der Streuer, d.h. die Reichweite des Potentials, ist es möglich, diese Situation mit Hilfe von einfallenden ebenen Wellen zu beschreiben, und das werden wir weiter unten tun.

(b) Es sei nun  $|\Phi\rangle$  ein Eigenzustand zu  $\hat{H}_0$  (ebene Welle bzw. Wellenpaket),

$$\hat{H}_0|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle. \quad (8.1.2)$$

Dann lässt sich die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (8.1.3)$$

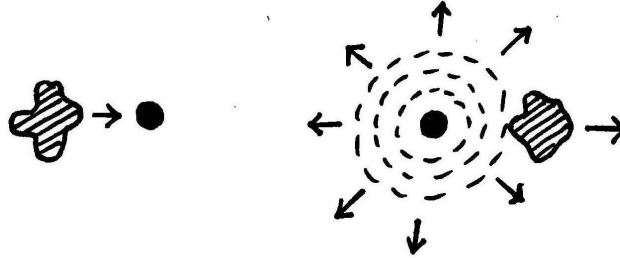
wie folgt umschreiben:

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + [E - \hat{H}_0]^{-1}\hat{V}|\Psi\rangle. \quad (8.1.4)$$

Abgesehen von der singulären Natur des in dieser Gleichung auftretenden inversen Operators ist dies offensichtlich die Lösung mit der Eigenschaft  $|\Psi\rangle \rightarrow |\Phi\rangle$  für  $\hat{V} \rightarrow 0$ . Die Singularität wird durch einen kleinen Imaginärteil behoben. Wir erhalten

$$|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\Phi\rangle + [E - \hat{H}_0 \pm i0]^{-1}\hat{V}|\Psi^{(\pm)}\rangle. \quad (8.1.5)$$

Abbildung 8.1:

Abbildung 8.2: Einfallendes Wellenpaket  $\rightarrow$  transmittiertes Wellenpaket plus Streuwellen.

Diese Gleichung ist als Lippmann-Schwinger-Gleichung bekannt. Auf die physikalische Bedeutung des  $(\pm)$  kommen wir gleich zurück. In der Ortsdarstellung ergibt sich

$$\Psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \hat{V} | \Psi^{(\pm)} \rangle \quad (8.1.6)$$

mit

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \mathbf{r} | [E - \hat{H}_0 \pm i0]^{-1} | \mathbf{r}' \rangle \quad (8.1.7)$$

als Greenscher Funktion des freien Problems. (Welche Differentialgleichung erfüllt  $G_{\pm}$ ?) Die Berechnung von  $G_{\pm}$  führt man am besten mit Hilfe der Impulsbasis durch (vgl. z.B. Sakurai, Kap. 7.1). Ergebnis:

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (8.1.8)$$

mit  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  wie üblich. Daher beschreibt  $G_+$  ( $G_-$ ) auslaufende (einfallende) Kugelwellen (vgl. (4.4.9)). (8.1.6) ist eine Integralgleichung für  $\Psi^{(\pm)}$ . Wir betrachten große Abstände,  $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ , entwickeln

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx k \left( r - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r} \right) \quad (8.1.9)$$

und erhalten als Näherung

$$G_+ \approx -\frac{1}{4\pi r} e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}, \quad (8.1.10)$$

wobei wir noch  $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$  gesetzt haben. Der Vektor  $\mathbf{k}'$  zeigt zum „Beobachtungspunkt“  $\mathbf{r}$  und ist betragsmäßig gleich  $k$ ; daher ist  $\mathbf{k}'$  der Wellenvektor für Wellen,

die zum Beobachtungspunkt laufen. Mit (8.1.6) und (8.1.10) erhalten wir

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (8.1.11)$$

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \Psi^{(+)}(\mathbf{r}'). \quad (8.1.12)$$

Somit besteht  $\Psi^{(+)}$  aus einer ebenen Welle plus einer auslaufenden Kugelwelle mit Amplitude  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ;  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  heißt Streuamplitude. Wir berechnen die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi) \quad (8.1.13)$$

für die beiden in (8.1.11) gegebenen Anteile:

$$\begin{aligned} \text{ebene Welle: } \mathbf{j}_1 &= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \\ \text{Kugelwelle: } \mathbf{j}_2 &= \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2} \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (8.1.14)$$

Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* ist definiert über die Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit in das Raumwinkelement  $d\Omega$  gestreut werden (d. h. durch die Fläche  $r^2 d\Omega$  gehen), dividiert durch die einfallende Zahl der Teilchen pro Fläche und Zeit:

$$d\sigma = \frac{|\mathbf{j}_2| r^2 d\Omega}{|\mathbf{j}_1|} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 d\Omega. \quad (8.1.15)$$

Resultat:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2. \quad (8.1.16)$$

## 8.2 Bornsche Näherung [§ 38]

(a) Für ein schwaches Potential – siehe unten – können wir  $\Psi^+$  in (8.1.12) durch eine ebene Welle ersetzen und erhalten

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (8.2.1)$$

d. h. in der Bornschen Näherung ist die Streuamplitude direkt durch die Fouriertransformierte des Streupotentials gegeben:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (8.2.2)$$

Für ein kugelsymmetrisches Potential,  $V(\mathbf{r}) \rightarrow V(r)$ , vereinfacht sich (8.2.1) zu

$$f(\Theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr), \quad (8.2.3)$$



mit  $q^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = 4k^2 \sin^2(\Theta/2)$ ;  $\Theta$  ist der Ablenkwinkel.

(b) Als Beispiel betrachten wir die Streuung an einem Yukawa-Potential (= abgeschirmtes Coulomb-Potential),

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}. \quad (8.2.4)$$

Resultat:

$$f(\Theta) = -\frac{2m V_0}{\hbar^2} \frac{1}{\mu q^2 + \mu^2}; \quad (8.2.5)$$

$\mu^{-1}$  gibt die Reichweite des Potentials an. Im Grenzfall  $\mu \rightarrow 0$ ,  $V_0/\mu \rightarrow ZZ'e^2$  finden wir für den Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(ZZ'e^2)^2}{16k^4 \sin^4(\Theta/2)}. \quad (8.2.6)$$

Mit  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  „verschwindet“ sogar  $\hbar$  aus diesem Ausdruck,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)}. \quad (8.2.7)$$

Dies ist genau der Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt, den man auch klassisch erhält (Rutherford-Streuung), mit seiner charakteristischen Divergenz in Vorwärtsrichtung ( $\Theta \rightarrow 0$ )!

*Anmerkungen:* In Bornscher Näherung und für ein kugelsymmetrisches Potential ist

- (i) die Streuamplitude nur eine Funktion von  $q$ ;
- (ii) die Streuamplitude reell;
- (iii)  $d\sigma/d\Omega$  unabhängig vom Vorzeichen des Potentials;
- (iv)  $f(\Theta)$  unabhängig von  $\Theta$  für  $k \rightarrow 0$ ;
- (v)  $f(\Theta)$  klein für große  $q$ ;

(c) Die Gültigkeit der Bornschen Näherung ergibt sich, wenn wir (8.1.8) in (8.1.6) einsetzen und den zweiten Term für  $\mathbf{r} \approx 0$  betrachten. Dies führt zu der Bedingung

$$\left| \frac{m}{\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(\mathbf{r}') \right| \ll 1. \quad (8.2.8)$$

Die Auswertung dieser Bedingung z.B. für das Yukawa-Potential liefert

$$k \ll \mu : \quad |V_0| \ll \frac{\hbar^2 \mu^2}{m}, \quad (8.2.9)$$

$$k \gg \mu : \quad |V_0| \ll \frac{\hbar^2 k \mu}{m}, \quad (8.2.10)$$

wobei im letzteren Fall logarithmische Korrekturen vernachlässigt wurden. Die Bornsche Näherung wird also tendenziell besser für große  $k$ -Werte, d. h. für große Energien,  $E > \hbar^2 \mu^2 / 2m$ .

*Anmerkung:* Für  $V_0 < 0$  und  $|V_0| > 2,7 \times \hbar^2 \mu^2 / 2m$  hat das Yukawa-Potential einen gebundenen Zustand. Dann sollte die Bornsche Näherung natürlich nicht mehr anwendbar sein.

(d) Korrekturen zur Bornschen Näherung lassen sich systematisch ableiten. Wir gehen zurück zu (8.1.5) und definieren einen Übergangsoperator  $\hat{T}$  über die Relation

$$\hat{V}|\Psi^{(+)}\rangle = \hat{T}|\Phi\rangle. \quad (8.2.11)$$

Wir multiplizieren (8.1.5) von links mit  $\hat{V}$  und lesen folgende Identität ab:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}[E - \hat{H}_0 + i0]^{-1}\hat{T}. \quad (8.2.12)$$

Diese Gleichung lässt sich ohne Schwierigkeiten iterieren. Aus (8.1.12) und mit  $\langle \mathbf{r} | \Phi \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  erhalten wir folgendes exaktes Resultat für die Streuamplitude:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle, \quad (8.2.13)$$

welches sich offensichtlich in niedrigster Ordnung,  $\hat{T} \approx \hat{V}$ , auf (8.2.1) reduziert. Im allgemeinen ist  $\hat{T}$  aber, im Gegensatz zu  $\hat{V}$  nicht diagonal in der Ortsbasis!

### 8.3 Partialwellenzerlegung [§ 39]

(a) Wir betrachten wieder ein kugelsymmetrisches Potential und legen zur Vereinfachung den Wellenvektor der einfallenden Welle entlang der  $z$ -Richtung. Dann bietet sich eine Zerlegung nach Eigenfunktionen von  $\hat{\mathbf{L}}^2$  und  $\hat{L}_z$  an, wobei sofort  $m = 0$  gesetzt werden kann (aufgrund der Drehsymmetrie um die  $z$ -Achse). Asymptotisch, d. h. für große Abstände vom Streuer, können wir die Ergebnisse aus Kapitel 4.4(b) anwenden, d. h. Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung sind von der Form

$$\Psi \propto \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l \frac{P_l(\cos \Theta)}{kr} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right). \quad (8.3.1)$$

Hier haben wir die beiden asymptotischen Ausdrücke (4.4.18) zusammengefasst und *Streuphasen*  $\delta_l$  definiert. Wir wollen untersuchen, wie sich die Streuamplitude

$$f(\Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \Theta) \quad (8.3.2)$$

durch die Streuphasen ausdrücken lässt. Mit

$$\int_0^\pi d\Theta \sin \Theta P_l(\cos \Theta) P_{l'}(\cos \Theta) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1} \quad (8.3.3)$$

ist die Umkehrung von (8.3.2)

$$f_l = \frac{1}{2} \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta P_l(\cos \Theta) f(\Theta). \quad (8.3.4)$$

(b) Der totale Wirkungsquerschnitt ergibt sich aus (8.1.16) nach Integration über den Raumwinkel:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta |f(\Theta)|^2. \quad (8.3.5)$$

Wir setzen (8.3.2) ein und erhalten unter Berücksichtigung der Orthogonalitätsrelation (8.3.3)

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \text{mit } \sigma_l = 4\pi(2l+1)|f_l|^2, \quad (8.3.6)$$

wobei man  $\sigma_l$  *partielle Streuquerschnitte* nennt.

(c) Im Weiteren werden wir (8.1.11),

$$\Psi^+(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\Theta), \quad (8.3.7)$$

mit der allgemeinen Lösung (8.3.1) vergleichen und so den gesuchten Zusammenhang herstellen. Dazu müssen wir noch  $e^{ikz} = e^{ikr \cos \Theta}$  nach Partialwellen entwickeln:

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \Theta) j_l(kr) \\ &\approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \Theta) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr}, \end{aligned} \quad (8.3.8)$$

wobei im letzten Schritt die asymptotische Form der sphärischen Besselfunktionen, vgl. (4.4.18), verwendet wurde. Wir vergleichen jetzt:

$$A_l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \leftrightarrow i^l \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} + f_l \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (8.3.9)$$

Die Differenz  $\Psi^+(\mathbf{r}) - e^{ikz}$  muss eine auslaufende Welle darstellen, d. h. Terme  $\propto e^{-ikr}$  müssen sich in dieser Gleichung wegheben. Dies führt zu

$$A_l = i^l e^{i\delta_l}. \quad (8.3.10)$$

Der restliche Anteil,  $\propto e^{ikr}$ , führt dann auf folgende Gleichung:

$$\frac{(A_l e^{i\delta_l} - i^l) e^{-il\pi/2}}{2ikr} = \frac{f_l}{r}. \quad (8.3.11)$$

Schließlich (mit  $i^l e^{-il\pi/2} = 1$ ) ergibt sich

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \quad (8.3.12)$$

und

$$|f_l|^2 = \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2}. \quad (8.3.13)$$

(d) Die partiellen Wirkungsquerschnitte (8.3.6) sind gegeben durch

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (8.3.14)$$

und daher auf jeden Fall kleiner als  $4\pi(2l+1)/k^2$ . Eine interessante Relation, bekannt als *Optisches Theorem*, ergibt sich sofort, wenn wir in (8.3.2)  $\Theta = 0$  setzen ( $P_l(1) = 1$ ):

$$f(\Theta = 0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \quad (8.3.15)$$

$$\Rightarrow \text{Im} f(\Theta = 0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (8.3.16)$$

d. h. der totale Wirkungsquerschnitt hängt direkt mit dem Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude zusammen:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\Theta = 0). \quad (8.3.17)$$

Ein Beweis von (8.3.16), der nicht auf die Partialwellenzerlegung zurückgreift, ist natürlich auch möglich (siehe Sakurai, Kap. 7.3).

*Anmerkung:* Im Rahmen der Bornschen Näherung ist der Effekt des Streuers gering und entsprechend  $\delta_l \ll 1$ . Allerdings ist  $f(\Theta)$  reell, und damit ist die Bornsche Näherung nicht genau genug, um die exakte Relation (8.3.17) zu erfüllen.