QUANTENMECHANIK (T3)

PROF. DIETER LÜST

Arnold-Sommerfeld-Zentrum für theoretische Physik
Ludwig-Maximilians-Universität München

Eine Einführung in die Quantenmechanik

Übersicht Teil A

Übersicht Teil B

Literatur:

A.S. Dawydow: Quantenmechanik

Schwabl, Quantenmechanik

Messiah, Quantenmechanik

Nolting, Quantenmechanik

I. GRUNDBEGRIFFE DER QUANTENMECHANIK

1. Wellenfunktionen

1.1. Die Grenzen der klassischen Physik

MATERIE	ELEKTROMAGNETISCHE STRAHLUNG
Teilchendynamik (Newton)	Wellendynamik (Maxwell)
Ort, Impuls	Feldgröße

$\Rightarrow$ deterministische Darstellung

Ab 1900: atomare und subatomareTeilchen und deren Wechselwirkungen können nicht im Rahmen der klassischen Phyisk beschrieben werden.

A) Eletromagnetische Strahlung wird in *Quanten* absorbiert und emittiert (Photonen).

$$E = \hbar\omega, \qquad \omega = 2\pi\nu$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} ergsec$$

$$\begin{aligned} E &= pc, && \text{Energie} \\ \omega &= kc, && k : \text{Wellenvektor} \\ p &= \hbar k \end{aligned}$$

$a)$ Spektraldichte der Hohlraumstrahlung $u(\omega, T) = V^{-1} dE/d\omega$

klassisch:

- Rayleigh–Jeans–Gesetz:

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

$$\int_0^{+\infty} u(\omega) d\omega = \infty, \qquad \text{Ultraviolettkatastrophe}$$

- Wien (empirisch) Wiensches Strahlungsgesetz:

$$u(\omega, T) \approx A\omega^3 \exp\left(\frac{-g\omega}{T}\right) \qquad (\omega \to \infty)$$

quantentheoretisch:

- Planck (1900) Interpolationsformel

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

Ableitung durch die Hypothese, daß Energie von den Wänden nur in ganzzahligem Vielfachen von $\hbar\omega$ an die Strahlung abgegeben (und absorbiert) wird.

$$u(\omega, T) = A \sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega P(n\hbar\omega)$$

$$P(n\hbar\omega) = \frac{\exp\left(\frac{-n\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(\frac{-n\hbar\omega}{k_B T}\right)}$$

$b)$ Photoelektrischer Effekt

Maximale Energie der Elektronen:

$$E_{max} = \frac{1}{2}mv^2 \leq \hbar\omega - W, \qquad W: \text{Austrittsarbeit}$$

c) Compton–Effekt

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c}(1 - \cos\theta)$$

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c}$$

Comptonwellenänge $\lambda_c = 3.86 \cdot 10^{-13} m$

$$(m_e = 0.91 \cdot 10^{-27} g)$$

B) Wellencharakter der Ausbreitungseigenschaften atomarer Teilchen:
de Broglie-Hypothese 1924.
Experimenteller Beweis: Davisson und Germer 1927
Beugung: Maxima bei

$$\sin\theta = \frac{2\pi\hbar}{xp}n$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Materiewellen!

C) Quantisierung des Drehimpulses
Bohrsches Atommodel 1913:
Postulate:

1. Elektronenbahn mit Drehimpuls $n\hbar$ ist eine Kreisbahn: $L = mrv = n\hbar$
2. elektromagnetische Strahlung bei Übergang in eine andere Bahn; $\omega = \frac{E-E'}{\hbar}$

Berechnung vom Radius r, Geschwindigkeit v, Energie E

$$\text{Kräftegleichgewicht:} \quad \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}, \qquad v = \frac{nh}{mr}$$

$$r = \frac{1}{Z\alpha}\lambda_c n^2$$
$$v = (Z\alpha)c\frac{1}{n}$$
$$E_n = -\frac{1}{2}(Z\alpha)^2 mc^2 \frac{1}{n^2}$$

$$mc^2 = 0.51\ MeV$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad \text{Feinstrukturkonstante}$$

$$n = 1, Z = 1: \qquad E_1 = -13.6\ eV$$

Welle–Teilchen–Dualismus:

Monitore

Beugungsbild

Folgerungen:

1. Teilchenbahn nicht genau definiert:
"Unschärfe" $\rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsbeschreibung
2. Meßprozeß und Beobachtbarkeit *nicht unabhängig* $\Rightarrow$ gleichzeitige Messung mehrerer Eigenschaften nur mit Einschränkung möglich.

Postulat: Freie Bewegung eines Teilchens mit der Energie E und dem Impuls p wird durch folgende Wellenfunktion beschrieben:

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad \text{(de Broglie–Welle)}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \qquad k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\text{Phasengeschwindigkeit} \qquad v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}$$

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} \quad \Rightarrow \quad v_p = c\sqrt{1 + \frac{m^2c^2}{p^2}} \geq c$$

Mathematische Realisierung des Teilchencharakters bei Wellenbeschreibung durch *Wellenpakete*

(i) $\omega = 0$:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk\ g(k)\ e^{ikx}$$

um $k = k_0$ konzentriert.

$$\text{z.B. Gauß'sches Paket:} \quad g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} = e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' e^{-\alpha k'^2 + ik'x}, \quad k' = k - k_0$$

$$f(x) = e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' e^{-\alpha\left(k' - i\frac{x}{2\alpha}\right)^2} e^{\frac{-x^2}{4\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}}$$

stehende Welle

$$|f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} \quad \rightarrow \quad \Delta x = \sqrt{2\alpha} \quad \text{um } x = 0$$

$$|g(k)|^2 = e^{-2\alpha(k-k_0)^2} \quad \rightarrow \quad \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \quad \text{um } k = k_0$$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta k = 1$$

(ii) $\omega = \omega(k)$:

$$\text{propagierendeWelle} \qquad e^{ikx}e^{-i\omega t},\ \omega = \omega(k)$$

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk\ g(k)\ e^{ikx - i\omega t}, \quad g(k) \text{ um } k = k_0 \text{ konzentriert}$$

$$\omega(k) = w(k_0) + (k - k_0)\frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2 \frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k_0}$$

$$\text{Gauß'sches Paket: } g(k) \ = \ e^{-\alpha(k-k_0)^2} \Rightarrow$$

$$f(x,t) = e^{i(k_0x - \omega(k_0)t)}\sqrt{\pi}\left(\alpha + \frac{it}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k_0}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot exp\left\{-\left[\frac{\left(x - \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} \cdot t\right)^2}{4\left(\alpha + \frac{it}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k_0}\right)}\right]\right\}$$

$$\text{Phasengeschwindigkeit} \qquad v_p = \frac{\omega(k_0)}{k_0} \geq c$$

$$\text{Teilchen um} \quad x_0 = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} \cdot t \quad \text{konzentriert}$$

$$\text{Gruppengeschwindigkeit} \qquad v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} < c$$

Ausdehnung des Wellenpaketes:

$$(\Delta x)^2 = \alpha + \frac{1}{4\alpha}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k_0} t^2$$

$\rightarrow$ Wellenpaket zerfließt

Teilchen mit Impuls p, Energie $p^2/2m$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$

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

$$\Delta x \Delta k \geq 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \hbar$$

Heisenberg 1926

Ort–Impuls–Unschärfebeziehung

1.3. Wellenfunktion und Vektorraum der Zustände

Annahme: Der Zustand eines quantenmechanischen Systems eines Massepunktes ist vollständig beschrieben durch eine *komplexwertige Wellenfunktion* $\psi(x,t)$ zu jeder Zeit.

Superpositionsprinzip: Falls ψ_1 und ψ_2 mögliche Wellenfunktionen sind, dann ist auch $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ $(c_1, c_2 \in \mathbf{C})$ eine mögliche Wellenfunktion.

Postulat: Die Zustände des quantenmechanischen Systems eines Massepunktes sind Elemente eines linearen Raumes H (Vektorraum) der Funktionen ψ mit den üblichen Verknüpfungen der Addition und Multiplikation mit komplexen Zahlen (nach den Regeln eines Vektorraumes).

Bezeichnung:	Wellenfunktion	$\psi(x)$
	Zustand	ψ
	Zustandsvektor	$\vert\psi\rangle$

Interpretation: $|\psi(x,t)|^2 dV$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement dV bei x zu finden. Dabei wird $\int dV |\psi(x,t)|^2 = 1$ angenommen (ψ wird auf 1 normiert).

Metrik des Zustandsraumes:

$$\int dV |\psi_1 + \psi_2|^2 = \int dV \psi_1^* \psi_1 + \int dV \psi_1^* \psi_2 + \int dV \psi_2^* \psi_1 + \int dV \psi_2^* \psi_2$$

Hilbertraum H:

a) H ist linearer Vektorraum der meßbaren ($|\psi| < \infty$) und normierbaren ($|\psi| < \infty$) komplexwertigen Funktionen.

b) In H ist ein Skalarprodukt definiert durch:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int dV \psi_1^*(x) \psi_2(x)$$

komplexe Konjugation	$\langle \psi_1 \vert \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 \vert \psi_1 \rangle$
Norm	$\vert\psi\vert = \sqrt{\langle \psi \vert \psi \rangle}$
Cauchy-Schwarzsche Ungl.	$\vert\langle \psi_1 \vert \psi_2 \rangle\vert \leq \vert\psi_1\vert \cdot \vert\psi_2\vert$
Dreiecksungleichung	$\vert\psi_1 + \psi_2\vert \leq \vert\psi_1\vert + \vert\psi_2\vert$
Nullvektor	$\langle \psi \vert \psi \rangle = 0 \to \vert\psi\rangle$ Nullvektor
Orthogonalität	$\psi_1 \perp \psi_2$ wenn $\langle \psi_1 \vert \psi_2 \rangle = 0$

c) H ist vollständig, d.h. jede unendliche Folge von Vektoren ψ_n mit:

$$|\psi_n - \psi_m| \to 0 \qquad (n, m \to \infty)$$

besitzt einen Grenzwert

$$\psi = \lim_{n\to\infty} \psi_n, \qquad \psi \in H$$

Entwicklungssatz: Es gibt Systeme von abzählbar vielen, paarweise orthogonalen, normierbaren Vektoren $|\varphi_n\rangle$, d.h.

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{m,n} \qquad \text{für alle } m, n,$$

die eine *vollständige* Basis in H bilden.

Jede Zustandswelle $\psi \in H$ läßt sich in diese Basis entwickeln:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle.$$

Die Entwicklungskoeffizienten sind gegeben durch:

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle.$$

Bezeichnung:

Der Satz der Entwicklungskoeffizienten c_n heißt *Darstellung* von $|\psi\rangle$ in der Basis $\{|\varphi_n\rangle\}$.

Interpretation:

Sei

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x), \qquad \int |\psi(x)|^2 dV = 1.$$

Dann folgt aus:

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) \\ &= \sum_n |c_n|^2 |\varphi_n(x)|^2 + \text{gemischte Terme}, \end{aligned}$$

daß $|c_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, den Zustand $|\varphi_n\rangle$ in $|\psi\rangle$ anzutreffen.

2. Quantenmechanische Messungen

2.1. Erwartungswerte von Ort und Impuls

Bezeichnung:	Erwartungswert	=	Mittelwert in gegebenen Zustand
	Observable	=	Meßgröße

Ort:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \rangle &= \int \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 dV \\ &= \langle \psi | \mathbf{x} \psi \rangle \end{aligned}$$

Impuls:

Wellenfunktion eines freien Teilchens mit dem Impuls $\mathbf{p}$:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}, \qquad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k},$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}},$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}.$$

$|\psi(\mathbf{k})|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Wellenzahlen.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \langle \psi | \mathbf{p} \psi \rangle \\ &= \int d^3k \; \hbar \; \mathbf{k} \; |\hat{\psi}(\mathbf{k})|^2 \\ &= \int d^3k \; \hat{\psi}^*(\mathbf{k}) \; \hbar \; \mathbf{k} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} \; \psi(\mathbf{x}) \; e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int d^3k \; \hat{\psi}^*(\mathbf{k}) \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{3/2}} \; \psi(\mathbf{x}) \; i\hbar \; \nabla_x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int d^3x \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \; \hat{\psi}^*(\mathbf{k}) \; e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (-i\hbar\nabla_x) \psi(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3x \; \psi^*(\mathbf{x}) \; (-i\hbar \; \nabla) \; \psi(\mathbf{x})$$

Impulsoperator: $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla_x$

Ortsoperatoren im Impulsraum:

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int d^3k \; \hat{\psi}^*(\mathbf{k}) \; (i\hbar \; \nabla_k) \; \hat{\psi}(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{x} = i\hbar \; \nabla_k$$

Verallgemeinerung:

Erwartungswert ganzer rationaler Funktionen $F_1(\mathbf{x})$ und $F_2(\mathbf{p})$:

$$\langle F_1(\mathbf{x}) \rangle = \int d^3x \; \psi^*(\mathbf{x}) \; F_1(\mathbf{x}) \; \psi(\mathbf{x})$$

$$\langle F_2(\mathbf{p}) \rangle = \int d^3x \; \psi^*(\mathbf{x}) \; F_2(-i\hbar \; \nabla_x) \; \psi(\mathbf{x})$$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \rangle \\ &= \int d^3x \; \psi^*(\mathbf{x}) \; \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \; \nabla_x^2 + V(\mathbf{x}) \right] \; \psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

2.2. Operatoren physikalischer Grössen

Def.: Der Operator A ist auf einer Funktionsmannigfaltigkeit $\{\psi\}$ definiert, wenn eine Vorschrift A gegeben ist, die jedem ψ aus $\{\psi\}$ ein ψ' aus $\{\psi\}$ zuordnet mit:

$$\psi' = A \; \psi.$$

Superpositionsprinzip:

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1 A\psi_1 + c_2 A\psi_2,$$

wobei ψ_1, ψ_2 Zustände in H, $c_1, c_2 \; \in \; \mathbf{C}$.

$\rightarrow$ in der Quantenmechanik gibt es nur lineare Operatoren

Exkurs über lineare Operatoren

a) Multiplikation mit komplexen Zahlen $(\lambda A) \; \psi = \lambda \; A\psi$

b) Addition $(A + B) \; \psi = A\psi + B\psi$

c) Multiplikation $(BA) \; \psi = B \; (A\psi)$

d) Einheitsoperator $\mathbf{1}$ $\mathbf{1}\psi = \psi$

e) Inverser Operator A^{-1} $A^{-1}A\psi = \psi$

f) Adjungierter Operator A^+ $\langle \psi | A^+ \phi \rangle = \langle A^+ \psi | \phi \rangle$

$$\int dV \; \psi^* \; (A\phi) = \int dV \; (A^+\psi)^* \; \phi$$

Produkt $(AB)^+ = B^+ A^+$

g) Selbstadjungierter (hermitescher) Operator $A = A^+$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \psi | A\psi \rangle &= \int dV \; \psi^* \; A \; \psi \\ &= \int dV \; (A\psi)^* \; \psi \\ &\in \mathbf{R} \;\; \text{(d.h. reell)} \end{aligned}$$

h) Kommutator $[A, B] = AB - BA$

i) Projektor

Def.: Ein Operator P, der auf einen Untervektorraum U von H projeziert, heißt Projektor.

U sei durch die Basis $|l_n\rangle$, $n = 1..N$, aufgespannt. Dann gilt:

$$P|\psi\rangle = \sum_n |l_n\rangle\langle l_n|\psi\rangle$$
$$\Rightarrow \; P = \sum_n |l_n\rangle\langle l_n|$$

$$\Rightarrow \; P = P^+, \qquad P = P^2$$

A sei der Operator einer physikalischen Größe

Forderung: Der Erwartungswert $\langle\psi|A\psi\rangle$ ist reell.

$$\Rightarrow \; A = A^+ \qquad (hermitesch)$$

Postulat: Jede Meßgröße der Quantenmechanik ist in eineindeutiger Weise ein linearer, hermitescher Operator im Hilbertraum der Zustände zugeordnet.

Produkte von hermiteschen Operatoren

Satz: Das Produkt AB hermitescher Operatoren A und B ist hermitesch, falls $[A, B] = 0$.

Beweis : $(AB)^+ = B^+A^+ = AB \qquad \Leftrightarrow \; [A, B] = 0$

Aus zwei nicht vertauschbaren hermiteschen Operatoren A und B lassen sich hermitesche Operatoren S und G konstruieren:

$$S = \frac{1}{2}(AB + BA)$$
$$G = i(AB - BA)$$

Produkte von Orts- und Impulsoperatoren:

$a)$ Vertauschungsrelationen

$$[x_i, x_j] = 0$$
$$[p_i, p_j] = 0$$
$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j} \qquad \rightarrow \text{ Unschärferelation}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}[x_i, p_j] &= -i\hbar\big(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_i\big)\ \psi \\ &= i\hbar\big(x_i \frac{\partial}{\partial x_j}\psi - x_i \frac{\partial}{\partial x_j}\psi + \delta_{i,j}\psi\big) \\ &= i\hbar\ \delta_{i,j}\ \psi\end{aligned}$$

$b)$ **Drehimpuls** eines Massenpunktes mit Impuls $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \qquad L_i = \epsilon_{ijk}\ x_j\ p_k$$

Hermitizität:

$$\begin{aligned}L_i^+ &= \epsilon_{ijk}\ (x_j p_k)^+ \\ &= \epsilon_{ijk}\ p_k x_j \\ &= \epsilon_{ijk}\ (-i\hbar\delta_{k,j} + x_j p_k) \\ &= L_i\end{aligned}$$

Vertauschungsrelationen:

$$[L_i, L_j] = i\hbar\ \epsilon_{ijk}\ L_k$$
$$[L_1, L_2] = i\hbar\ L_3$$
$$[L_1, L_1] = 0$$

2.3. Eigenzustände und Eigenwerte von Operatoren

Gegeben sei ein Zustand $|\psi\rangle$. Untersuchen der quadratischen Abweichung vom Mittelwert $\langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle = \langle\mathbf{A}\rangle$ des hermitischen Operators $\mathbf{A}$:

$$\Delta\mathbf{A} = \mathbf{A} - \langle\mathbf{A}\rangle$$

Mittlere quadratische Abweichung einer physik. Größe:

$$\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle = \langle\psi|\left(\mathbf{A} - \langle\mathbf{A}\rangle\right)^2|\psi\rangle \geq 0$$

Welcher Zustand $|\psi\rangle$ erfüllt $\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle = 0$?

Scharfer Zustand

$$\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle = 0 \Longrightarrow \left(\mathbf{A} - \langle\mathbf{A}\rangle\right)|\psi\rangle = 0$$

Observable $\mathbf{A}$ hat scharfen Wert im Zustand ψ

Def.: Zustände $|\psi\rangle$ und komplexe Zahlen λ, die der Gleichung $\mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ genügen, heißen Eigenzustände bzw. Eigenwerte des Operators $\mathbf{A}$.

Bezeichnungen: Die Gesamtheit der Eigenwerte heißt *Eigenwertspektrum*. Es kann *diskret* oder/und *kontinuierlich* sein. Eigenwerte mit r linear unabhänigen Eigenzuständen heißen *r-fach entartet*.

Satz.: Ist $\mathbf{A}$ hermitesch, so sind die Eigenwerte rell und die Eigenzustände orthogonal.

Beweis:

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\mathbf{A}\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle = \langle\mathbf{A}\psi|\psi\rangle &= \\
\left(\langle\psi|\mathbf{A}\psi\rangle\right)^* = \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle & \\
\mathbf{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle \Rightarrow & \\
\langle\psi_1|\mathbf{A}\psi_2\rangle - \langle\mathbf{A}\psi_1|\psi_2\rangle = (\lambda_2 - \lambda_1)\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 & \\
\lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow \langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 &
\end{aligned}$$

Bei Entartung von λ_n (r-fach) ist die Wahl eines orthonormierten Systems von r Eigenfunktionen $\psi_{n,l}$ $\quad (l = 1..r)$ mit $\mathbf{A}\psi_{n,l} = \lambda_n\psi_{n,l}$ möglich.

Eigenschaften des Eigenwertproblems $\mathbf{A}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle, \mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$

Orthonormierung:

$$\begin{aligned}
\langle n|m\rangle &= \delta_{n,m} && \text{diskr. Spektrum} \\
&= \delta(n-m) && \text{kont. Spektrum}
\end{aligned}$$

Vollständigkeit:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1} \qquad |n\rangle\langle n| \text{ ist Projektor}$$

$\Rightarrow$ Eigenvektoren sind Basis

Entwicklung von Zuständen:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_n c_n|n\rangle && \text{diskr. Spektrum} \\
c_n &= \langle n|\psi\rangle \\
|\psi\rangle &= \int dn\ c(n)|c\rangle && \text{kont. Spektrum} \\
c(n) &= \langle n|\psi\rangle \\
|\psi\rangle &= \sum_n c_n|n\rangle + \int dm\ c(m)|m\rangle
\end{aligned}$$

für Operatoren mit diskr. u. kont. Spektrum

Operatordarstellung bei kont. Eigenbasis:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} &= \int\int dm\ dn\ |n\rangle\langle n|A|m\rangle\langle m| \\
&= \int\int dm\ dn\ |n\rangle\delta(n-m)\lambda(n)\langle m| \\
&= \int dn\ \lambda(n)|n\rangle\langle n|
\end{aligned}$$

Entwicklung von Operatoren:

$$\begin{aligned}
\langle n|\mathbf{A}|m\rangle &= \lambda_n\delta_{nm} \qquad \text{(Matrixelement)} \\
\mathbf{A} &= \sum_n \lambda_n|n\rangle\langle n| = \sum_n\sum_m |n\rangle\langle n|\mathbf{A}|m\rangle\langle m|
\end{aligned}$$

Darstellung des Operators $\mathbf{A}$ in (diskr.) Eigenbasis

$$f(\mathbf{A}) = \sum_n f(\lambda_n)|n\rangle\langle n|$$

$$\text{z.B. } \mathbf{A}^2 = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n| \cdot \sum_m \lambda_m |m\rangle\langle m|$$

$$= \sum_n \sum_m \lambda_n \lambda_m |n\rangle \delta_{nm} \langle m| = \sum_n \lambda_n^2 |n\rangle\langle n|$$

Eigenwertprobleme

Beispiele:

a) Eigenzustände des Impulsoperators $\mathbf{p}$ in einer Dimension:

$$\mathbf{p}|p\rangle = p|p\rangle \Leftrightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$$

$$\Rightarrow \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\frac{i}{\hbar}px)$$

Das erfüllen alle reellen $p \Rightarrow$ kont. EW–Spektrum $\sigma_k(\mathbf{p}) = \{-\infty \le p \le +\infty\}$

$$\text{Normierung: } \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi_p^*(x)\psi_{p'}(x) = \delta(p-p')$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k) \right)$$

b) Eigenzustände des Ortsoperators $\mathbf{x}$ in einer Dimension:

$$\mathbf{x}|x\rangle = x|x\rangle \Leftrightarrow i\hbar \frac{d}{dx}\psi_x(p) = x\psi_x(p)$$

$$\Rightarrow \psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{i}{\hbar}px)$$

ebenfalls kontinuierl. EW–Spektrum $\sigma_k(\mathbf{x}) = \{-\infty \le x \le +\infty\}$

$$\text{Normierung: } \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \psi_x^*(p)\psi_{x'}(p) = \delta(x-x')$$

Es ist $\psi_p(x) = (\psi_x(p))^* = (\langle p|x\rangle)^* \quad \Rightarrow \quad \psi_p(x) = \langle x|p\rangle$

Eigenzustände $|p\rangle$ bzw. $|x\rangle$ bilden vollständige Basis

Ortsdarstellung: Basis $\{|x\rangle\}$:

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

(Falls gilt $\int dx|x\rangle\langle x| = \mathbf{1}$ wie vorausgesetzt)

Operatordarstellung in $\{|x\rangle\}$ Basis (x–Darstellung):

$$\mathbf{A} = \int dx \int dx' |x'\rangle\langle x'|\mathbf{A}|x\rangle\langle x| \qquad \langle x'|\mathbf{A}|x\rangle\text{: Matrixelemente}$$

Beispiel Potential: $\langle x'|\mathbf{V}(x)|x\rangle = V(x)\delta(x-x')$

Impulsdarstellung: Basis $\{|p\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \int dp\ |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int dp\ \psi(p)|p\rangle$$

Beispiel kinetische Energie:

$$\langle p|\ \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\ |p'\rangle = \frac{p^2}{2m}\delta(p-p')$$

2.4. Unbestimmtheitsrelation

Def: Im Zustand ψ hat die physikalische Größe A den Wert λ, wenn $\langle\mathbf{A}\rangle = \lambda$ und $\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle = 0 \quad (\Delta\mathbf{A} = \mathbf{A} - \langle\mathbf{A}\rangle)$.

Satz: $\mathbf{A}$ hat genau den Wert λ im Zustand ψ, wenn λ Eigenwert zu $\mathbf{A}$ ist und ψ Eigenzustand.

Beweis:

$$
\begin{aligned}
\text{Sei } \mathbf{A}|n\rangle &= \lambda_n|n\rangle \\
\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle &= \langle\psi|(\mathbf{A}-\langle\mathbf{A}\rangle)^2|\psi\rangle \\
&= \sum_n \langle\psi|(\mathbf{A}-\langle\mathbf{A}\rangle)^2|\psi\rangle \\
&= \sum_n (\lambda_n-\lambda)^2(\langle n|\psi\rangle)^2 = 0 \\
&\langle n|\psi\rangle = 0 \;\text{ für } n = n_0 \;\Rightarrow\; \lambda=\lambda_{n_0}
\end{aligned}
$$

Satz: Zwei Größen A und B mit $[\mathbf{A},\mathbf{B}]= i\mathbf{C}$ können nicht simultan scharfe Werte haben, falls $\mathbf{C}\neq\mathbf{0}$. Es gilt die Unschärferelation:

$$\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle\cdot\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}\langle\mathbf{C}\rangle^2$$

Zum Beispiel: $\mathbf{A}=\mathbf{x}$, $\mathbf{B}=\mathbf{p}$

$$\Rightarrow \langle(\Delta\mathbf{x})^2\rangle\langle(\Delta\mathbf{p})^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Das ist die Heisenbergsche Unschärferelation.

Beweis:

$$
\begin{aligned}
|\phi\rangle &= (\mu\Delta\mathbf{A}-i\Delta\mathbf{B})|\psi\rangle, \qquad \mu\in \mathrm{R} \\
\langle\phi|\phi\rangle &= \langle\psi|(\mu\Delta\mathbf{A}+i\Delta\mathbf{B})(\mu\Delta\mathbf{A}-i\Delta\mathbf{B}|\psi\rangle \\
&= \mu^2\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle+\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle-\mu i\langle[\Delta\mathbf{A},\Delta\mathbf{B}]\rangle \\
&= \mu^2\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle+\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle+\mu\langle\mathbf{C}\rangle \\
&= \langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle\left(\mu+\frac{\langle\mathbf{C}\rangle}{2\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle}\right)^2+\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle-\frac{\langle\mathbf{C}\rangle^2}{4\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle}\geq 0
\end{aligned}
$$

Für $\mu=-\frac{\langle\mathbf{C}\rangle}{2\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle}$ folgt die Behauptung.

Zwei Eigenwerte sind genau dann in *jedem Zustand* ψ simultan scharf meßbar, d.h. $\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle = 0$ *und* $\langle(\Delta\mathbf{B})^2\rangle = 0$, wenn $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ vertauschen, $[\mathbf{A},\mathbf{B}]= 0$.

Für welche Zustände gilt das Gleichheitszeichen?

$$|\phi\rangle = -\left(\frac{\langle\mathbf{C}\rangle\Delta\mathbf{A}}{2\langle(\Delta\mathbf{A})^2\rangle}+i\Delta\mathbf{B}\right)|\psi\rangle = 0$$

$$
\begin{aligned}
\text{Ort und Impuls: } \Delta\mathbf{A} &= x-x_0, \quad \mathbf{C}=\hbar \\
\Delta\mathbf{B} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-p_0
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow \left(\frac{x-x_0}{2\langle(\Delta x)^2\rangle}+\frac{\partial}{\partial x}-\frac{ip_0}{\hbar}\right)\psi(x)=0$$

Differentialgleichung

$$\psi(x)=\left[2\pi\langle(\Delta x)^2\rangle\right]^{-1/4}\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\langle(\Delta x)^2\rangle}+i\frac{p_0x}{\hbar}\right\}$$

In diesen Zuständen gilt:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

2.5. Bestimmung des Zustandes eines quantenmechanischen Systems

Postulat: Der Zustand eines quantenmech. Systems ist durch die Werte eines *vollständigen* Systems unabhängiger physikalischer Größen, deren Operatoren miteinander vertauschen, festgelegt. Die Werte sind die Eigenwerte der Operatoren in diesem Zustand.

Def.: Ein Satz vertauschbarer Operatoren ist vollständig, wenn die simultanen Eigenzustände eindeutig bestimmt sind, d.h. wenn der Satz der zugehörigen Eigenwerte nicht entartet ist.

Im allgemeinen gibt es verschiedene vollständige Sätze von Operatoren

z.B. freies Teilchen:

$a)$ Impulskomponenten p_1, p_2, p_3

$b)$ E, Drehimpulsquadrat $\mathbf{L}^2$ und *eine* Projektion des Drehimpulses auf eine Achse (meist z) L_z.

Bezeichnung: Im Falle des diskreten Spektrums bilden die Eigenwerte einen vollständigen Satz von *Quantenzahlen*.

Wiederholung:

Zustandsvektoren im Hilbertraum:

Rechtsvektoren $|\psi\rangle \;\epsilon\; H_R$ *bra*

Linksvektoren $\langle\Phi| \;\epsilon\; H_L$ *ket*

Skalarprodukt: Abbildung $H_L \cdot H_R \;\rightarrow\; \mathbf{C}$

$$\langle\Phi|\psi\rangle$$

Basis: $|\phi_n\rangle,\ \langle\varphi_n|$

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle &= \delta_{m,n} \\
|\psi\rangle &= \sum_n c_n\ |\varphi_n\rangle \qquad \textit{Darstellung von } |\psi\rangle \\
\langle\psi| &= \sum_n c_n^*\ \langle\varphi_n| \\
\Rightarrow\ \langle\varphi_n|\psi\rangle &= \sum_m c_m\ \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle \\
&= c_n \\
c_n^* &= \langle\psi|\varphi_n\rangle
\end{aligned}$$

Operator:

$$\begin{aligned}
A\ :\ |\psi\rangle \;\epsilon\; H_R &\;\rightarrow\; |\psi'\rangle \;\epsilon\; H_R \\
\langle\psi| \;\epsilon H_L &\;\rightarrow\; \langle\psi'| \;\epsilon\; H_L
\end{aligned}$$

Darstellung von A: $A \;\epsilon\; H_R \otimes H_L$

$$A = \sum_n \sum_m\ A_{nm}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|$$

$$\begin{aligned}
A|\psi\rangle \;\epsilon\; (H_R \otimes H_L) \cdot H_R \;\epsilon\; H_R \\
\langle\psi|A \;\epsilon\; H_L \cdot (H_R \otimes H_L) \;\epsilon\; H_L
\end{aligned}$$

Matrixdarstellung A_{nm} : $\quad A_{nm} = \langle\varphi_n|A|\varphi_m\rangle$

Einheitsoperator: $\quad A_{nm} = \delta_{n,m} \;\Rightarrow\; \mathbf{1} = \sum_n |\varphi_m\rangle\langle\varphi_n|$

$$\begin{aligned}
A|\psi\rangle &= A\sum_l c_l|\varphi_l\rangle \\
&= \sum_n\sum_m\sum_l A_{nm}c_l|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|\varphi_l\rangle \\
&= \sum_n\sum_m A_{nm}c_m|\varphi_n\rangle \\
|\psi'\rangle &= \textstyle\sum_n c'_n|\varphi_n\rangle, \qquad c'_n = A_{nm}c_m \\
&\rightarrow \text{Matrizenmultiplikation}
\end{aligned}$$

Basiswechsel:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_n c_n|\varphi_n\rangle \\
&= \sum_n \tilde{c}_n|\tilde{\varphi}_n\rangle \\
|\tilde{\varphi}_n\rangle &= \sum_m U_{nm}|\varphi_m\rangle \\
\langle\tilde{\varphi}_n| &= \sum_m U^*_{nm}\langle\varphi_m| \\
\langle\tilde{\varphi}_n|\tilde{\varphi}_m\rangle &= \sum_k\sum_l \langle\varphi_l|\varphi_k\rangle\ U^*_{nl}U_{mk} \\
&= \sum_k U^*_{nk}U_{mk} \\
&= \delta_{n,m} \\
\Rightarrow\ \sum_k U^*_{nk}U_{mk} &= \delta_{n,m} \\
\Rightarrow\ U^+U &= 1 \qquad \text{Unitäre Matrix } (U^{-1} = U^+)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow\ \tilde c_n = U_{nm} c_m, \qquad \tilde c_n^* = c_m^* U^+_{nm}$$

(Multiplikation mit unitärer Matrix)

Operator: $\quad \tilde A_{nm} = U^+_{nl} A_{lk} U_{km}, \qquad \tilde A = U^+ A U$

Eigenwertproblem: $\quad A|n\rangle \ = \ \lambda_n |n\rangle$

λ_n - Eigenwert, $\quad |n\rangle$ - Eigenvektor

$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \quad \rightarrow \quad$ *Basis*

$$A = \sum_m \sum_n A_{nm} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_m|$$

$$|n\rangle = \sum_m U_{nm} |\varphi_m\rangle$$

Darstellung in Eigenbasis:

$$\begin{aligned} A &= \sum_m \sum_n |n\rangle\langle n|A|m\rangle\langle m| \\ &= \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n| \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad \lambda_n \delta_{n,m} = U^+_{nl} A_{lk} U_{km}$$

(Diagonalisierung von (A_{lk}))

Übergang von der Eigenbasis $|n\rangle$ von A in die Eigenbasis $|\tilde n\rangle$ des Operators B:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_n \tilde c_n |\tilde n\rangle \\ c_n &= U_{nm} c_m \end{aligned}$$

Operator A: Eigenfunktionen $|\varphi_{\lambda_n}\rangle$

Impulsoperator $\hat p$: Eigenwerte p

$$\begin{aligned} \langle x|p\rangle &= \int dx'\ \delta(x-x')\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\ e^{i\frac{p}{\hbar}x'} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\ e^{i\frac{px}{\hbar}} \end{aligned}$$

3. Zeitliche Entwicklung quantenmechanischer Zustände

3.1. Schrödingergleichung

Wellenpaket: $\quad \vec k = \frac{\vec p}{\hbar}, \qquad \omega = \frac{E_{\vec p}}{\hbar} = \frac{\vec p^2}{2m\hbar}$

$$\begin{aligned} \psi(\vec r,t) &= \int d^3p\ g(p) e^{i(\frac{1}{\hbar}\vec r\vec p - t\frac{E_p}{\hbar})} \\ i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t) &= \int d^3p\ g(p)\ E_p\ e^{i(\frac{1}{\hbar}\vec r\vec p - t\frac{E_p}{\hbar})} \\ &= \int d^3p\ g(p) \frac{1}{2m}\big(\frac{\hbar}{i}\vec\bigtriangledown^2\big)^2 e^{i(\frac{1}{\hbar}\vec r\vec p - t\frac{E_p}{\hbar})} \\ &= \frac{\hat p^2}{2m}\ \psi(\vec r,t) \end{aligned}$$

Naheliegende Verallgemeinerung:

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t) = \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\bigtriangledown_r^2 + V(\vec r)\Big]\ \psi(\vec r,t)$$

für ein Teilchen mit der Masse m und dem Potential $V(\vec r)$.

Postulat: Die Zeitentwicklung eines Zustands ψ ist gegeben durch die Diffenrentialgleichung 1.Ordnung:

$$i\hbar\ \tfrac{\partial}{\partial t}\psi(t) \ = \ H(t)\ \psi(t).$$

Der lineare, hermitesche Operator H heit **Hamiltonoperator** (entspricht der Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik).

Satz: Die Zeitentwicklung erfolgt so, daß die Metrik invariant ist, d.h.:

$$\langle \psi(t)|\Phi(t)\rangle = \langle \psi(t_0)|\Phi(t_0)\rangle.$$

Speziell: $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1, \qquad \int dx\ |\psi(x,t)|^2 = 1$

Beweis:

$$\begin{aligned} i\hbar\ \frac{\partial}{\partial t}\langle \psi|\Phi\rangle &= -\langle H\psi|\Phi\rangle + \langle \psi|H\Phi\rangle \\ &= -\langle \psi|H^+\Phi\rangle + \langle \psi|H\Phi\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r},t) &= \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + div\vec{j} &= 0 \qquad \vec{j}\ : \text{Wahrscheinlichk.stromdichte} \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi &= \psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi + \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^* \\ &= \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left(\frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + \mathbf{V}\right)\psi - \frac{1}{i\hbar}\psi\left(\frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + \mathbf{V}\right)\psi^* \\ &= \frac{i}{i\hbar}\frac{\vec{\mathbf{p}}}{2m}\left(\psi^*\vec{\mathbf{p}}\psi - \psi\vec{\mathbf{p}}\psi*\right) \\ &= -\frac{\hbar}{2mi}\nabla\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right) \\ &= -div\vec{j} \end{aligned}$$

Voraussetzung $\mathbf{H}$ zeitunabhängig $\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{H} = 0$

$\mathbf{H}$ Energieoperator

Die möglichen Eigenwerte von $\mathbf{H}$ sind Energieeigenwerte. Das Spektrum des Operators $\mathbf{H}$ (also die Menge der Energieeigenwerte) kann diskret und/oder kontinuierlich sein.

$$\begin{aligned} \mathbf{H}|n\rangle &= E_n|n\rangle \\ \mathbf{H} &= \sum_n E_n|n\rangle\langle n| \end{aligned}$$

Separation der Variablen

$$\begin{aligned} \text{Zeitentwicklung:}\quad |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n(t)|n\rangle \\ \Rightarrow \sum_n i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t)|n\rangle &= \sum_n c_n(t)\mathbf{H}|n\rangle \\ &= \sum_n c_n E_n|n\rangle \\ \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t) &= E_n c_n \\ c_n(t) &= a_n e^{-i\omega_n t} \qquad ,\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} \end{aligned}$$

Erwartungswerte im Zustand $|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\omega_n t}|n\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}\rangle &= \langle \psi_n(t)|\mathbf{A}|\psi_n(t)\rangle \\ &= e^{i\omega_n t}\langle n|\mathbf{A}|n\rangle e^{-i\omega_n t} \\ &= \langle n|\mathbf{A}|n\rangle \end{aligned}$$

Erwartungswerte zeitunabhängig $\Rightarrow \psi_n(t)$ *stationäre* Zustände.

Grundzustand (tiefste Energie) E_0, ψ_0

Angeregte Zustände $E_n \geq E_0$

Energieniveaus

3.3. Extremaleigenschaften der Energieeigenwerte

$\mathbf{H}$, Eigenwerte E_n, Eigenzustände $|n\rangle$

$$\mathbf{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

Satz 1:Minimaleigenschften des Grundzustandes

$$E_0 = min_\psi\{\langle\psi|\mathbf{H}|\psi\rangle\}, \qquad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Beweis:

$$\langle\psi|\mathbf{H}|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|\mathbf{H}|n\rangle\langle n|\psi\rangle =$$
$$= \sum_n E_n\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle \geq E_0\sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$
$$\Rightarrow \langle\psi|\mathbf{H}|\psi\rangle \geq E_0$$

Satz 2: Extremaleigenschaften angeregter Zustände

$$E_{n_0} = min_\psi\{\langle\psi|\mathbf{H}|\psi\rangle\}, \qquad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\langle\psi|i\rangle = 0 \qquad ,i = 0,..,n_0 - 1$$

kinetische Energie:

$$\langle\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\rangle = \frac{\hbar}{2m}\int |\nabla\psi|^2 \; d^3x \geq 0$$

$\psi(\vec{x})$ soll möglichst kleine Änderung haben

potentielle Energie:

$$\langle\mathbf{V}\rangle = \int \psi^*(x)\mathbf{V}\psi(x) \; dx$$

$|\psi|^2$ groß im Bereich mit kleinem V

$V(x)$

3.4. Zeitliche Änderung der Erwartungswerte

Observable A, Erwartungswert $\langle\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle = \langle\mathbf{A}\rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{A}\rangle = \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}|\psi\rangle + \langle\frac{\partial}{\partial t}\psi|\mathbf{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\mathbf{A}|\frac{\partial}{\partial t}\psi\rangle, \qquad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \mathbf{H}|\psi\rangle\right)$$
$$= \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{-1}{i\hbar}\mathbf{H}\;\mathbf{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\mathbf{A}\frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}|\psi\rangle$$
$$= \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} + \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{A},\mathbf{H}]|\psi\rangle \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} + \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{A},\mathbf{H}]$$

Def: Eine Observable A, die nicht explizt von der Zeit abhängt $\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} = 0\right)$ und mit dem Hamiltonoperator vertauscht ($[\mathbf{A},\mathbf{H}] = 0$) heißt"*Konstante der Bewegung*". Der Erwartungswert $\langle\mathbf{A}\rangle$ in einem beliebigen Zustand ist zeitunabhängig.

Bsp.: Bewegung eines Teilchens in einer Dimension

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{V}(\mathbf{x}), \qquad [\mathbf{x},\mathbf{p}] = i\hbar\mathbf{1}, \quad [\mathbf{x},\mathbf{p}^2] = 2i\hbar\mathbf{p}$$
$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{ih}[\mathbf{x},\mathbf{H}] = \frac{\mathbf{p}}{m}$$
$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{p},\mathbf{H}] = -\frac{d\mathbf{V}}{d\mathbf{x}}$$
$$\Rightarrow \quad m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = -\frac{d\mathbf{V}}{d\mathbf{x}}$$

Das sieht zwar genau wie eine klassische Bewegungsgleichung aus, ist aber eine *Operatorgleichung*.

Erwartungswert und Entwicklung von x um $x_0 = \langle x \rangle$, $\quad \Delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - x_0\mathbf{1}$.

$$m\frac{d^2}{dt^2}x_0 = -\langle\frac{d\mathbf{V}}{d\mathbf{x}}\rangle = -\frac{dV(x_0)}{dx_0} - \frac{1}{2}\frac{d^3V(x_0)}{dx_0^3}\langle(\Delta\mathbf{x})^2\rangle$$

mit

$$\frac{d\mathbf{V}}{d\mathbf{x}} = \frac{dV(x_0)}{dx_0}\mathbf{1} + \frac{d^2V(x_0)}{dx_0^2}\Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}\frac{d^3V(x_0)}{dx_0^3}\Delta\mathbf{x}^2$$

Näherungsweise klassisch, falls gilt:

$$\left|\frac{dV}{dx_0}\right| \gg \frac{1}{2}\left|\frac{d^3V}{dx_0^3}\right|\langle(\Delta\mathbf{x})^2\rangle \qquad \text{und}$$

für klassische Beschreibung muß weiterhin gelten:

$$\langle\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\rangle = \frac{\langle\mathbf{p}\rangle^2}{2m} \qquad \Rightarrow \quad \langle(\Delta\mathbf{p})^2\rangle \ll \langle\mathbf{p}^2\rangle$$

Die klassische Beschreibung ist möglich, wenn das Potential glatt $\left(\frac{d^3}{dx^3}V \text{ klein}\right)$ und die kinetische Energie groß ist.

3.5. Quasiklassische Näherung

Beschreibt den Übergang von der Quantenmechanik zu klassischen Mechanik.

(Analogie: Übergang von der Wellenoptik zur Strahlenoptik)

Wellenfunktion eines Teilchens

$$\psi(\vec{r},t) = e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)}, \qquad S(\vec{r},t) \text{ komplexe Funktion}$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S$$

klassischer Limes $\hbar \to 0$

$\rightarrow$Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung der Wirkungsfunktion.

$$S_0(\vec{r},t) = \int_{t_0}^{t} L(\vec{r},\frac{d\vec{r}}{dt'},t')\ dt' \qquad L(\vec{r},\frac{d\vec{r}}{dt'},t') \text{ Lagrangefunktion}$$

(Bahnkurve eines Teilchens ist in der klassischen Mechanik normal zur Fläche $S_0 = const.$)

$$\text{Impuls} \quad \vec{p} = \nabla S_0, \qquad \text{Energie} \quad E = -\frac{\partial S_0}{\partial t}$$

klassische Näherung gut für

$$\hbar\nabla^2 S \ll (\nabla S)^2$$

$$\frac{1}{2\pi}\frac{d\lambda}{dx} \ll 1 \quad \Leftrightarrow \quad p^3 \gg m\hbar\left|\frac{dV}{dx}\right| \quad \text{mit } p = \sqrt{2m(E-V)}$$

$$\frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

<u>stationäre Zustände:</u>

$$S(\vec{r},t) = \sigma(\vec{r}) - Et$$

Entwicklung von$\sigma(\vec{r})$ nach $\hbar$:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \cdots$$

$$\frac{1}{2m}(\nabla\sigma)^2 + V(\vec{r}) - E - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\sigma = 0$$

$\Rightarrow$ gekoppeltes Gleichungssystem:

$$\frac{1}{2m}(\nabla\sigma_0)^2 + V(\vec{r}) - E = 0$$
$$\frac{1}{m}(\nabla\sigma_0)(\nabla\sigma_1) + \frac{1}{2m}\nabla^2\sigma_0 = 0$$
$$(\nabla\sigma_1)^2 + 2(\nabla\sigma_0)(\nabla\sigma_2) + \nabla^2\sigma_1 = 0, \qquad \text{usw.}$$

<u>Bsp.:</u> 1 Dimension

$$\frac{d\sigma_0}{dx} = \pm\sqrt{2m(E - V(x))}$$

$$\Rightarrow \sigma_0(x) = \pm \int\limits_{x_0}^{x} \sqrt{2m(E - V(x))}\ dx$$

$$\frac{d\sigma_1}{dx} = \sigma_1' = -\frac{1}{2}\frac{\sigma_0''}{\sigma_0'} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(\ln\sigma_0')$$

$$\Rightarrow \sigma_1 = -\frac{1}{2}\ln(\sigma_0') + const.$$

Wellenfunktion bis $0(\hbar^2)$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left[c_1 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^x p(x')\ dx'\right\} + c_2 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^x p(x')\ dx'\right\}\right]$$

Impuls $\qquad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = \sigma_0'$

(1) klassisch erlaubter Bereich $E > V(x)$ $\quad p(x)$ ist reell.

$$\Rightarrow \psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_0^x p(x')\ dx' + const.\right)$$

$$\Rightarrow |\psi(x)|^2 \sim \frac{1}{p^2}$$

(2) Umkehrpunkte x_i : $\qquad E = V(x_i) \quad \rightarrow \quad p(x_i) = 0$

$$|\psi(x)| \rightarrow \infty \text{ für } x \rightarrow x_i$$

Quasiklassische Näherung ist bei kleinen Impulsen unbrauchbar. Das erfordert

die Lösung der exakten Schrödingergleichung.

$$\frac{1}{2\pi}\frac{d\lambda}{dx} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |x - x_i| \gg \frac{\lambda}{4\pi} \quad \text{Näherung gültig}$$

(3) klassisch verbotener Bereich bei $E < V(x)$

$$\Rightarrow \quad p(x) \text{ imaginär} \qquad p(x) = ik(x)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}}\left[c_1 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^x p(x')\ dx'\right\} + c_2 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^x p(x')\ dx'\right\}\right]$$

Wellenfunktion nimmt in den verbotenen Bereich hinein exponentiell ab. Für Anschlußbedingungen i.a. exakte Lösung bei den Umkehrpunkten nötig.

4. Eindimensionale Probleme

4.1. Separation der dreidimensionalen Schrödingergleichung

Teilchen der Masse m, Potential $V(\vec{x})$

Sei

$$V(\vec{x}) \;=\; V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)\ .$$

So kann die Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\,(\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2)\ \psi \;+\; (V_1 + V_2 + V_3)\ \psi$$

durch einen Produktansatz gelöst werden:

$$\psi\ (\vec{x}, t) \;=\; \psi^{(1)}(x_1, t)\ \cdot\ \psi^{(2)}(x_2, t)\ \cdot\ \psi^{(3)}(x_3, t)$$

$\Rightarrow$ Eindimensionale Eigenwertprobleme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i^2 + V_i(x_i)\right]\ \psi_{n_i}^{(i)} \;=\; E_{n_i}\ \psi_{n_i}^{(i)}, \qquad i = 1, 2, 3$$

Ist $\psi_{n_i}(x_i)$ ein vollständiges Sytem von Eigenzuständen, so ist

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{x}) = \psi_{n_1}^{(1)}(x_1)\ \psi_{n_2}^{(2)}(x_2)\ \psi_{n_3}^{(3)}(x_3)$$

ein vollständiges System.

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-iE\frac{t}{\hbar}} \prod_{i=1}^{3} \psi_{n_i}^{(i)}(x_i)$$
$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$$

$$V(x) = 0 \qquad (const.)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\ \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\ \psi(x)$$

$$\psi(x) = C_1 e^{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}x} + C_2 e^{-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}x}$$

$E < 0$ $\qquad \psi$ wächst exponentiell

$$\Rightarrow\ \ C_1,\ C_2 = 0 \qquad \rightarrow \qquad \psi(x) = 0$$

$E > 0$

$$\psi(x) = C_1 sin(kx) + C_2 cos(kx), \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

de-Broglie-Wellen

Eigenwertspektrum kontinuierlich:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad -\infty < k < \infty$$

4.3. Das diskrete Spektrum

Potential $V(x)$:

a) $V \geq V_0$

b) $\lim\limits_{x\to\pm\infty} V(x) \;=\; V_\pm$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \;=\; \frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(x)-E\Big)\;\psi(x)$$

$$\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) \;=\; 0 \qquad (Normierbarkeit)$$

Sturm-Liouville-Eigenwertproblem

Satz 1: Die Eigenfunktionen sind reell wählbar.

Beweis: Mit ψ ist auch ψ^* Lösung, da $V(x)$ reell.

Satz 2: Die Eigenwerte sind nicht entartet.

Beweis: Seien ψ_1 und ψ_2 Lösungen mit gleichem E.
Betrachte Wronski-Determinante:

$$W(\psi_1,\psi_2) = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix} = \psi_1\psi_2' \;-\; \psi_2\psi_1'$$

W ist unabhängig von x:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dx} &= \psi_1\psi_2' \;-\; \psi_2\psi_1' \\ &= \psi_1\psi 2\;\frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(x)-E-V(x)+E\Big) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Wegen

$$\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) \;=\; 0, \qquad W=0$$

$$\Rightarrow \qquad \psi_1\psi_2' \;-\; \psi_2\psi_1' = 0, \qquad \frac{d}{dx}ln\;\psi_1 \;=\; \frac{d}{dx}ln\;\psi_2$$

$$\Rightarrow \qquad \psi_1 \;=\; c\;\psi_2$$

Satz 3: $E \geq min\{V(x)\} \;+\; \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Beweis:

$$\begin{aligned} E &= \langle\psi|H\psi\rangle \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \;+\; \int dx\; V(x)\;|\psi(x)|^2 \\ &\geq \frac{\hat{p}^2}{2m} \;+\; min\{V(x)\} \end{aligned}$$

Satz 4: $E \;<\; V_\infty \;=\; min\{V_+, V_-\}$

Beweis:

$$\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) = \lim_{x\to\pm\infty} c\; e^{\mp\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_\pm-E)}\;x} = 0$$

$$\Rightarrow \qquad E < V_+ \qquad E < V_-$$

Verteilung der diskreten Eigenwerte: $\qquad V_0 \;<\; E \;<\; V_\infty$

(I) klassisch erlaubter Bereich: $E > V(x)$

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(x)-E\Big) < 0$$

ψ zu x-Achse gekrümmt
Wendepunkt: $\quad \psi''=0 \quad \rightarrow \quad \psi=0$
oszillierendes Verhalten

(II) nicht-klassischer Bereich: $E < V(x)$

$$\frac{\psi''}{\psi} > 0$$

ψ von x-Achse weggekrümmt
$\rightarrow$ monotones Verhalten

Satz 5: Eigenfunktionen ψ_n nach steigenden Energien $E_0 < E_1 < E_2$.

Die n-te Eigenfunktion hat $(n-1)$ Nullstellen (Knoten), zwischen denen mindestens eine Nullstelle jeder höheren Eigenfunktion fällt.

$$\psi = |\psi| \; e^{i\phi(x)}$$

Anzahl der Knoten im klassisch erlaubten Bereich:

$$N \cong \frac{2\Big(\phi(x_2) - \phi(x_1)\Big)}{2\pi}$$

$$N_{max} \cong \frac{1}{\pi}\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx \; \sqrt{2m(V_\infty - V(x))}$$

Anzahl der gebundenen Zustände

4.4. Stückweise konstante Potentiale

Der unendlich tiefe Kasten als Beispiel eines diskreten Spektrums:

ganz allgemein gilt für

$$V(x) = V_i \qquad x_i < x < x_{i+1}, \qquad i = 1..N$$

($\frac{dV}{dx}$ ist groß $\rightarrow$ unwichtig)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_i'' \; + \; V_i\psi_i \; = \; E_i\psi_i$$

$$\psi_i(x) = C_1 \; e^{k_i x} \; + \; C_2 \; e^{-k_i x}, \qquad k_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_i - E)}$$

ψ stetig, differenzierbar

Speziell:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| > a \\ 0 & |x| \leq a \end{cases}$$

Aus der Normierbarkeit folgt:

$$\lim_{V\to\infty} \psi(x) = \lim_{V\to\infty} C \; e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)} \; |x|} = 0 \qquad |x| > a$$

Symmetrie des Potentials $\qquad V(x) = V(-x)$

$\rightarrow$ Eigenfunktionen haben bestimmte Parität:

$$\psi_\pm(x) \;=\; \pm\; \psi_\pm(-x)$$

Im Bereich $|x| \leq a$, $\qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$:

$$\psi_+^k = C\; cos(kx), \qquad \psi_-^k = C\; sin(kx)$$

$$\text{Randbedingung: } \psi(\pm a) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad k_\pm = \frac{\pi}{2a}\; n_\pm$$

$$n_\pm = \begin{cases} 1, \; 3, \; 5... \\ \;\; 2, \; 4, \; 6... \end{cases} \qquad \text{Normierung: } C = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Energieeigenwerte:

$$E_n = E_0\; n^2, \qquad E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\frac{1}{a^2}$$

Potential $V(x)$:

$$\lim_{x\to\pm\infty} V(x) = V_\pm \qquad (V_- = 0)$$

$$\frac{dV}{dx} = 0 \qquad |x| > x_0$$

Asymptotisches Verhalten:

$x \to -\infty$:

$$\psi_k(x) = a\ e^{ikx}\ +\ b\ e^{-ikx}, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad E = E_n$$

$x \to +\infty$:

$$\psi_k(x) = c\ e^{ipx}\ +\ d\ e^{-ipx}, \qquad p = \sqrt{k^2\ -\ \frac{2mV_+}{\hbar^2}}$$

Wellenpakete:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\ \varphi(k)\ \psi_k(x)\ e^{-iE_n\frac{t}{\hbar}}$$

Linear unabhängige Lösungen, die von links bzw. rechts einfallenden Wellen entsprechen.

von links:

$$\lim_{x\to-\infty} \psi_k^l = e^{ikx}\ +\ r_l(k)\ e^{-ikx}$$

$$\lim_{x\to+\infty} \psi_k^l = S_l(k)\ e^{ipx}$$

von rechts:

$$\lim_{x\to+\infty} \psi_k^r = e^{-ipx}\ +\ r_r(k)\ e^{ipx}$$

$$\lim_{x\to-\infty} \psi_k^r = S_r(k)\ e^{-ikx}$$

Wellenpaket $\varphi(k)$ um $k = k_0$ konzentriert.

von links:

$$x \to -\infty \qquad \psi^l(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{ikx}\ +\ r_l(k)\ e^{-ikx}\right)\ e^{-iE_k\frac{t}{\hbar}}$$

1. Term: $\qquad \langle x\rangle = \hbar\frac{k_o}{m}t$

2. Term: Phase

$$r_l(k) = |r_l(k)|\ e^{i\theta_l}$$

Entwicklung

$$\theta_l = \theta_l(k_0) + (k - k_0)\ \frac{d\theta_l}{dk}\Big|_{k_0}$$

$$\Rightarrow \qquad \langle x\rangle = -\frac{\hbar k_0}{m}t\ +\ \frac{d\theta_l}{dk}\Big|_{k_0}$$

entgegengesetzte Richtung

$t \to -\infty$

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

$t \to +\infty$

$$v = -\frac{\hbar k_0}{m} \qquad v' = \frac{\hbar p}{m}$$

Streuwahrscheinlichkeit:

1) einlaufende Welle: $t \to -\infty$

   Wahrscheinlichkeit:

$$W_0 = 1 = \lim_{t\to-\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi^l(x,t)|^2 = \int dk\ |\varphi(k)|^2$$

2) reflektierte Welle: $t \to +\infty$

$$W_r = \lim_{t\to+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi^l(x,t)|^2 = \int dk\ |\varphi(k)\ r_l(k)|^2$$

   Reflexionsvermögen:

$$R(k) = |r_l(k)|^2$$

3) Durchgehende Welle: $t \to +\infty$

$$\psi_d(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\ \varphi(k)\ S_l(k)\ e^{ipx}\ e^{-iE_k\frac{t}{\hbar}}$$
$$= \int \frac{dp}{2\pi} \left(\varphi(k)\ S_l(k)\ \frac{dk}{dp}\right) e^{i(px-\omega\frac{k}{t})} \qquad \omega = \frac{E_n}{\hbar}$$

$$W_T = \lim_{t\to+\infty} \int_{0}^{\infty} dx\ |\psi_d(x,t)|^2 \quad = \lim_{t\to+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi_d(x,t)|^2$$
$$= \int dp\ |\varphi\ S_l\ \frac{dk}{dp}|^2 \quad = \int dk\ |\varphi(k)|^2\ |S_l(k)|^2\ \frac{dk}{dp}$$

$$\frac{dk}{dp} = \frac{p}{k}$$

Transmissionsvermögen:

$$T(k) = |S_l(k)|^2\ \frac{p(k)}{k}$$

Streulösungen der eindimensionalen Schrödingergleichung

Satz 1: a) Gilt $E < V_+$, so $R = 1$ (Totalreflexion)

b) Gilt $E > V_+$, so $R + T = 1$ (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit)

Beweis a) $p = ik$, k reell

Wronski-Determinante:

$$W(\psi_l, \psi_l^*) = \psi_l \frac{d}{dx}\psi_l^* - \psi_l^* \frac{d}{dx}\psi_l$$

$$x \to -\infty \Rightarrow\ (e^{ikx} + re^{-ikx})(-ik)(e^{-ikx} - re^{ikx}) -$$
$$(ik)(e^{ikx} - re^{-ikx})(e^{-ikx} + re^{ikx})$$
$$= -\,2ik(1 - |r(k)|^2)$$
$$= 0$$

Die Wronski-Determinante ist unabhängig vom Ort.

$$x \to +\infty \qquad S_l\ e^{-ikx} = 0$$

Satz 2: Es gilt $p\ S_l = k\ S_r$ $\ (p, k$ reell)

Beweis: Die Streuwahrscheinlichkeit hängt nicht von der Richtung ab.

$$T_l = |S_l|^2\ \frac{p}{k} = |S_r|^2\ \frac{k}{p} = T_r$$

Satz 3: Phase(S_l) = Phase(S_r)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \le a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

$$\psi_I = e^{ikx} \ + \ r\ e^{-ikx}$$

$$\psi_{II} = c_1\ e^{ipx} \ + \ c_2\ e^{-ipx} \qquad p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

$$\psi_{III} = S\ e^{ikx}$$

Anschlußbedingungen:

$$\begin{aligned} e^{-ika} \ + \ r\ e^{ika} &= c_1 e^{-ipa} \ + \ c_2\ e^{ipa} && \psi(-a) \quad (1) \\ e^{-ika} \ - \ r\ e^{ika} &= \frac{p}{k}\big(c_1\ e^{-ipa} \ - \ c_2\ e^{-ipa}\big) && \psi'(-a) \quad (2) \\ S\ e^{ika} &= c_1\ e^{ipa} \ + \ c_2\ e^{-ipa} && \psi(a) \quad (3) \\ S\ e^{ika} &= \frac{p}{k}\big(c_1\ e^{ipa} \ - \ c_2\ e^{-ipa}\big) && \psi'(a) \quad (4) \end{aligned}$$

$$(3),(4) \Rightarrow \qquad c_{1,2} = \frac{1}{2}\ e^{\mp ipa}\ S\ e^{ika}\Big(1 \pm \frac{k}{p}\Big)$$

$$(1),(2) \Rightarrow \qquad 2\ e^{-ika} = c_1\ e^{-ipa}\Big(1 + \frac{p}{k}\Big) + c_2\ e^{ipa}\Big(1 - \frac{p}{k}\Big)$$

$$\Rightarrow T = |S|^2 = \frac{4E|E - V_0|}{4E|E - V_0| + V_0^2|\sin(2pa)|^2}$$

Potentialwall $V_0 > 0$

Resonanzzustände: $T = 1$, $p = \frac{\pi}{2a}n$, $n = 1, 2, ...$

$V_0 < 0$

Fortsetzung der gebundenen Zustände ins Kontinuum

5. Der harmonische Oszillator

5.1. Der eindimensionale harmonische Operator

Ein Teilchen der Masse m befindet sich im harmonischen Potential

$$V(x) = \frac{m}{2}\ \omega_0^2\ x^2$$

ω_0... klassische Oszillatorfrequenz

Stationäre Schrödingergleichung:

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\ \frac{d^2}{dx^2} \ + \frac{m}{2}\ \omega_0^2\ x^2\Big]\ \tilde{\psi}(x) = E\ \tilde{\psi}(x)$$

charakteristische Länge:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_0\ m}}, \qquad \xi = \frac{x}{x_0} \qquad \tilde{\psi}(x) = \psi(\xi)$$

charakteristische Energie:

$$\frac{1}{2}\ \hbar\ \omega_0, \qquad \varepsilon = \frac{E}{\frac{1}{2}\ \hbar\ \omega_0}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{d^2}{d\xi^2}\ \psi(\xi) + \big(\varepsilon - \xi^2\big)\ \psi(\xi) = 0$$

Asymptotisches Verhalten:

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\ \psi = \xi^2\ \psi, \qquad \psi(\xi) \sim e^{\mp\frac{\xi^2}{2}}\big(1 + 0(\xi)\big)$$

Ansatz für Eigenfunktionen:

$$\psi_E(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\ H_\varepsilon(\xi)$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\ H_\varepsilon - 2\xi\ \frac{d}{d\xi}\ H_\varepsilon + (\varepsilon - 1)\ H_\varepsilon = 0$$

Hermite'sche Differentialgleichung

Potenzreihenansatz:

$$H_\varepsilon(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\ \xi^n$$

für allgemeines ε:

$$\lim_{\xi\to\infty} H_\varepsilon(\xi) = e^{\xi^2}$$

Endliche Lösungen: spezielles ε : $\varepsilon = 2n + 1 \qquad n = 0, 1, 2...$

$\rightarrow$ Potenzreihe bricht ab.

<u>Hermite'sche Polynome $H_n(\xi)$:</u>

Rodriguez-Formel:

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

Energieeigenwerte:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\ \hbar\ \omega_0, \qquad n = 0, 1, 2...$$

Eigenfunktionen:

$$\psi_n(x) = c_n\ e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\ H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

Normierung:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\ 2^n\ n!}}\ x_0^{-\frac{1}{2}}$$

$\{\psi_n\}$: vollständiges Orthonormalsystem

Spektrum diskret $\quad\leftrightarrow\quad$ nur gebundene Zustände ($\lim_{|x|\to\infty} V = \infty$)

E_n äquidistant: $\qquad E_{n+1} - E_n = \hbar\ \omega_0$

n-ter angergeter Zustand enthält n <u>Oszillatorquanten</u>.

Zustände haben positive oder negative Parität (Potential invariant unter $x \rightarrow -x$)

$$H_0(\xi) = 1, \qquad H_1(\xi) = 2\xi, \qquad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

Rekursionsformel:

$$\xi\ H_n(\xi) = n\ H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}\ H_{n+1}(\xi)$$

$$\frac{d}{d\xi}\ H_n = 2n\ H_{n-1}(\xi)$$

Mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert von ξ im Zustand n:

Mittelwert $$\langle\xi\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\ \psi_n^2(\xi)\ \xi = 0$$

$$\langle\Delta\xi^2\rangle_n = \langle\xi^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\ \psi_n(\xi)\ \xi^2\ \psi_n(\xi)$$

$$\xi\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\ \psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \psi_{n+1}$$

$$\xi^2\psi_n = \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}\ \psi_{n-2} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\ \psi_n + \frac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}\ \psi_{n+2}$$

$\Rightarrow$ $$\langle\xi^2\rangle_n = n + \frac{1}{2}$$

$\Leftrightarrow \qquad \langle x^2\rangle_n = \big(n+\frac{1}{2}\big)\ \frac{\hbar}{m\ \omega_0} = \big(n+\frac{1}{2}\big)\ x_0^2$

$\Rightarrow \qquad E_n = m\ \omega_0^2\ \langle x^2\rangle_n \qquad$ analog der klassischen Formel

Allgemeines Matrixelement:

$$\langle\psi_n|x|\psi_m\rangle = \begin{cases} \left(\frac{\hbar}{m\ \omega_0}\ \frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\ \delta_{m,n-1} \\ \left(\frac{\hbar(n+1)}{2m\ \omega_0}\right)^{\frac{1}{2}}\ \delta_{m,n+1} \end{cases}$$

5.2. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Erzeugung:

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{x}{x_0} - \frac{i}{\hbar}\ x_0\ p\Big)$$

Vernichtung:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar}\ x_0\ p\Big)$$

$$\Rightarrow \qquad [a, a^+] = 1$$

Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\ \omega_0^2\ x^2 \\ &= \hbar\ \omega_0\big(a^+a + \frac{1}{2}\big) \end{aligned}$$

$\langle\Phi|H|\Phi\rangle: \qquad \hbar\ \omega_0\ \langle\Phi|a^+a + \frac{1}{2}|\Phi \geq \frac{1}{2}\ \hbar\ \omega_0$

$$\langle\Phi|a^+a|\Phi\rangle = \langle a\Phi|a\Phi\rangle \geq 0$$

Grundzustand:

$$E_0 = \frac{\hbar\ \omega_0}{2}: \qquad a|0\rangle = 0$$

Angeregter Zustand:

$$|n\rangle = c_n\ (a^+)^n\ |0\rangle$$

$$E_n = \hbar\ \omega_0\big(n + \frac{1}{2}\big)$$

Beweis:

$$H\ (a^+)^n\ |0\rangle = \hbar\ \omega_0\ \Big[a^+a\ (a^+)^n + \frac{1}{2}\ (a^+)^n\Big]\ |0\rangle$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} a^+a\ (a^+)^n\ |0\rangle &= \Big[(a^+)^2a(a^+)^{n-1} + (a^+)^n\Big]\ |o\rangle \\ &= \Big[(a^+)^{n+1}a + n(a^+)^n\Big]\ |0\rangle \\ &= \hbar\ \omega_0\ \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\ (a^+)^n\ |0\rangle \end{aligned}$$

$$a^+a\ |n\rangle = n\ |n\rangle$$

Quantenzahloperator: $\qquad N = a^+a$

Normierung:

$$\begin{aligned} \langle n|n\rangle = 1 &= c_n^2\ \langle 0|a^n(a^+)^n|0\rangle \\ &= c_n^2\ n\ \langle 0|a^{n-1}(a^+)^{n-1}|0\rangle \\ &= c_n^2\ n! \\ \Rightarrow \qquad c_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \end{aligned}$$

$\Rightarrow \qquad$ Besetzungsdarstellung:

$$\begin{aligned} a\ |n\rangle &= \sqrt{n}\ |n-1\rangle \\ a^+\ |n\rangle &= \sqrt{n+1}\ |n+1\rangle \end{aligned}$$

Übergang zur Ortsdarstellung:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)$$
$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)$$
$$\psi_n = \frac{1}{n!}\ (a^+)^n\ \psi_0$$

Bedingung $\quad a\psi_0 = 0 \quad \rightarrow \quad$ Differentialgleichung:

$$\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\ \psi_0(\xi) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad \psi_0(\xi) = N_0\ e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi_n \sim \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n\ e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

(Äquivalent zu Rodriguez-Formel!)

5.3. Der dreidimensionale isotrope harmonische Oszillator

$$V(\vec{x}) = \frac{m}{2}\ \omega_0^2\ \vec{x}^2, \qquad \vec{x} = (x_1, x_2, x_3), \qquad \vec{x}^2 = x^2$$

Separationsansatz, da $\quad V = V(x_1) + V(x_2) + V(x_3)$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{x}) = c_{\vec{n}}\ e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{x_0^2}}\ H_{n_1}(\frac{x_1}{x_0})\ H_{n_2}(\frac{x_2}{x_0})\ H_{n_3}(\frac{x_3}{x_0})$$

$$c_{\vec{n}} = x_0^{-\frac{3}{2}}\ \pi^{-\frac{3}{4}}\ (2^{n_1+n_2+n_3}\ n_1!\ n_2!\ n_3!)^{-\frac{1}{2}}$$

$\{\psi_{\vec{n}}\}$ vollständiges Orthonormalsystem

Energieeigenwerte:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\ \omega_0\ (n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})$$

Grundzustand: $\quad n_1 = n_2 = n_3 = 0, \qquad E_0 = \frac{3}{2}\ \hbar\ \omega_0$

erster angergter Zustand: dreifach entartet

Allgemein: Zustände mit gleicher Quantensumme $n = n_1 + n_2 + n_3$ sind energetisch entartet.

Entartungsgrad:

$$\begin{aligned} \sigma_n &= 3 + 3(n-1) + \frac{1}{2}(n-1)(n-2) \\ &= \frac{1}{2}(n^2 + 3n + 2), \qquad n \geq 1 \end{aligned}$$

2	(6)	gerade
1	(3)	ungerade $\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$
0	(1)	gerade $\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x})$

III. BEWEGUNG EINES TEILCHENS IM ZENTRALFELD

Ziel: Lösung der stationären Schrödingergleichung
- a) diskretes Spektrum (gebundene Zustände)
- b) asymptotisches Verhalten von ψ (Streuzustände)

Lösung der dreidimensionalen Schrödingergleichung ist im allgemeinen nicht möglich. Eine Vereinfachung ergibt sich für Kugelsymmetrie.

6. Der Bahndrehimpuls

6.1. Separation der Winkelkoordinaten

Teilchen der Masse m im Zentralfeld $V(r)$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 \right) + V(r)$$

Kugelkoordinaten :

im Punkt $\vec{r}$ lokales Koordinatensystem (l_r , l_θ , l_ϕ)

$$\vec{\nabla} = \left(\partial_r \, , \, \frac{1}{r}\partial_\theta \, , \, \frac{1}{r \, sin\theta}\partial_\phi \right)$$

$$\vec{\nabla}^2 = \triangle = \left(\frac{1}{r}\partial_r r \right)^2 + \frac{1}{r^2 \, sin^2\theta}\left[(sin\theta \, \partial_\theta)^2 + \partial_\phi^2 \right]$$

Definition: Radiale Komponente des Impuls

$$p_r = i\hbar \left(\frac{1}{r} \partial_r \, r \right) = p^+$$

Drehimpulsoperator: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)$$

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

Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten:

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r,\theta,\phi) = E \, \psi(r,\theta,\phi)$$

Klassisch:

$$E = \frac{1}{2}m\omega_r^2 + \frac{1}{2}\frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V$$

Komponenten:

$$L_z = -i\hbar \, \partial_\phi$$
$$L_\pm = L_x \pm iL_y$$
$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \, e^{\pm i\phi}(\pm\partial_\theta + i \, cotg\theta \, \partial_\phi)$$
$$\vec{L}^2 = L_+L + L_-L_+ + L_z^2$$

im kartesischen Koordinatensystem:

$$[L_1, L_2] = i\hbar \, L_3 \qquad und \; zyklisch$$
$$[L_i, \vec{L}^2] = 0 \qquad i = 1,2,3$$

$$\Rightarrow \qquad [L_i, H] = 0 \, , \qquad [\vec{L}^2, H] = 0$$

Satz von vertauschbaren Operatoren H , $\vec{L}^2$, L_z

Bestimmung der simultanen Eigenzustände

$$\vec{L}^2\psi = \lambda_L\psi$$
$$L_z\psi = \lambda_z\psi$$
$$H\psi = E\psi$$

Ansatz für ψ : $\psi(\, r,\theta,\phi \,) = \lambda(r) \; A(\theta) \; B(\psi)$

6.2. Drehimpulseigenzustände

Eigenfunktionen von L_z

$$-i\hbar \, \partial_\phi \, B(\phi) = \lambda_z \, B(\phi) \, , \qquad B(\phi) = B(\phi + 2\pi)$$

$$B(\phi) = e^{im\phi} \qquad m = 0,1,2,3...$$

$$\lambda_z \;=\; m\hbar$$

Eigenzustände von $\vec{L}^2$

$$\left[\frac{1}{sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) \;+\; \frac{1}{sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \;+\; \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2}\right]\psi(\,\theta,\phi\,) \;=\; 0$$

Gleichung für Kugelflächenfunktionen

$$\left[\frac{1}{sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) \;+\; \frac{1}{sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \;+\; l(l+1)\right]Y_l^m(\,\theta,\phi\,) \;=\; 0$$

für $\quad \vec{L}^2 = \hbar^2\; l\;(l+1)$

$\psi \;<\; \infty \qquad \Rightarrow \qquad l = 0, 1, 2, ...$

Zu jedem Eigenwert l gehören $2l+1$ Funktionen ψ_{lm} mit magnetischen Quantenzahlen

$$m \;=\; -l,\; -l+1,\; ...\; l$$

Explizite Abhängigkeit von ϕ:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^m\left(\frac{2l+1}{4\pi}\;\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right)^{1/2} P_l^m(cos\theta)\; e^{im\phi}$$

$P_l^m(cos\theta)$: Legendrefunktionen, erfüllen die Gleichung

$$-\frac{1}{sin^2\theta}\;\Big[(sin^2\theta\;\partial_\theta)^2 \;-\; m^2\Big]\;P_l^m \;=\; l\;(l+1)\;P_l^m$$

$$P_l^m(cos\theta) = \frac{(sin\theta)^m}{2^l\;l!}\;\frac{d^{l+m}}{d(cos\theta)^{l+m}}\;\Big(cos^2\theta \;-\; 1\Big)^l$$

$$\Rightarrow \qquad \vec{L}^2\;Y_l^m = \hbar^2\;l\;(l+1)\;\psi_l^m$$

$$L_z\;Y_l^m = \hbar\;m\;Y_l^m \qquad\qquad mit\; m = -l, ..l$$

$$L_\pm\;Y_l^m = \hbar\;\sqrt{\frac{l\;(l+1)\;-\;m\;(m\pm1)}{2}}\;\;Y_l^{m\pm1}$$

Orthogonalität:

$$\int d\Omega Y_l^{m*}(\theta,\phi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$(\int d\Omega = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 4\pi)$$

Vollständigkeit:

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta,\phi)Y_l^m(\theta',\phi') = \delta(\Omega-\Omega')$$

$$= \delta(\cos\theta - \cos\theta')\delta(\phi-\phi') = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$$

Die Y_l^m bilden ein vollständiges Orthogonalsystem auf der Einheitssphäre.

<u>Eigenschaften der Y_l^m</u>

a) komplexe Konjugation

$$Y_l^{m*}(\theta,\partial) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\partial)$$

b) $m = 0$

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

$$\text{Legendrefunktionen:} \qquad P_l(u) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}\left(u^2-1\right)^l$$

c) Tabelle:

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \qquad\qquad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta a^{i\phi}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \qquad Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\phi}$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{18\pi}} \sin\theta\cos\theta e^{i\phi} \qquad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right)$$

d) Additionstheorem

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=l}^{l} Y_l^{m*}(\theta_1,\phi_1) Y_l^m(\theta_2,\phi_2)$$

e) Parität

$$P\ \psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})$$

$$P\ Y_l^m = (-1)^l Y_l^m$$

7. Die radiale Schrödingergleichung

7.1. Allgemeine Eigenschaften

$$\psi_{E,lm}(\vec{r}) = \chi_l(r) Y_l^m(\theta,\phi)$$
$$\chi_l(r) = \frac{1}{r} R_l(r)$$

Schrödingergleichung

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] \chi_l(r) = E\ \chi_l(r)$$

$$\Rightarrow \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l = E\ R_l$$

a) $\chi_l(r) < \infty \quad \Rightarrow \quad R \to 0 \qquad r \to 0$

b) $\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\ r^2 \left|\chi_l(r)\right|^2 = \int dr |R_l|^2$

Verhalten am Ursprung:

$$\text{Annahme} \qquad \lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$$

$$R'' - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \qquad r \to 0$$

$$\text{Lösung} \begin{cases} R_1 = r^{l+1} \\ R_2 = r^{-l} \end{cases}$$

Reguläre Lösung:

$$\psi_{E,lm}(\vec{r}) \sim r^l, \qquad r \to 0$$

$r > 0:$ Problem reduziert sich auf Lösung der eindim. Schrödingergl. mit "effektivem Potential"

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}, \qquad R(0) = 0$$

$\underline{V(r) < 0}$

Energiespektrum:

1) $E < 0$: abzählbar viele diskrete Eigenwerte für jedes l, Eigenfunktionen R_{nl} bilden vollständige Basis

Mittelwert der Energie:

$$\langle E\rangle = \frac{\hbar}{2m}\int dr \left\{ \left(\frac{\partial R}{\partial r}\right)^2 + \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right] R^2 \right\}$$

$$V(r) = -\frac{A}{r^n}$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle \sim \frac{\hbar}{2m}\left[\frac{1+l(l+1)}{r^2} - \frac{2mA}{\hbar^2 r^2}\right]$$

$$\left(\frac{dR}{dr} \sim \frac{R}{r}!\right)$$

$n > 2$ Minimum der Energie für $r = 0$ $\Rightarrow$ Sturz ins Zentrum.

$n < 2$ $r_{\text{min}} \neq 0$ endlich (klass. Mechanik: für alle n $r_{\text{min}} = 0$)

2) $E > 0$: eine oszilierende Eigenfunktion für jedes E

$$R_l \Rightarrow kl \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)\right), \qquad \text{für } r \to \infty$$

Wobei $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ und $\delta_l(k)$ der *Streuphasenfaktor* ist.

$$V(r) > 0 \quad \Rightarrow \quad \langle E\rangle > 0 \qquad (V(r\to\infty) = 0)$$

Teilchen kann sich vom Zentrum bis ins Unendliche entfernen $\to$ freie Bewegung im Unendlichen.

Zusammenfassung:

$H, \vec{L}^2, L_z$ bilden einen vollständigen Satz vertauschbarer Observable Die Eigenfunktionen sind:

$$\psi_{E,l,m}(\vec{r}) = \frac{1}{r}R_l(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

$\Rightarrow$ Zustand mit Drehimpuls $\hbar l$ und auf eine Achse proje zierten Drehimpuls $\hbar m$ (hier die z-Achse)

Bezeichnung:

l azimutale Quantenzahl

l	$=$	0,	1,	2,	3,
		s	p	d	f

m magnetische Quantenzahl

Entartung: diskretes Spektrum: $(2l+1)$ - fache Entartung von E_{nl}

Satz: Energieeigenwerte zu gebenen l der Größe nach ordnen: $E_{0l} < E_{1l} < E_{2l} < \cdots$

$$\Rightarrow \qquad E_{n,l} < E_{n,l+1} \qquad \forall n, l$$

Beweis: l größer $\rightarrow$ V größer $\rightarrow$ E größer.

$V(r) = 0$, keine Zentralkräfte

$$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \chi(r)_{E,l,m} Y_l^m(\theta,\phi)$$

$$\chi_l = \frac{1}{r} R_l(r)$$

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

mit $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ und der Randbedingung: $R_l(0) = 0$

Lösung der DGL:

$$1) \qquad l = 0 \qquad R_0(r) = A \sin kr \qquad \chi_{k0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}$$

$$2) \qquad l \neq 0 \qquad x := kr \qquad \chi_{kl}(r) = \bar{\chi}_{kl}(x)$$

$\Rightarrow$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + 1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right] \bar{\chi}_{kl}(x) = 0$$

Das ist die DGL der *sphärischen Besselfunktionen*

Lösungen: $j_l(x) = I_{l+\frac{1}{2}}(x)$ sphär. Bessel fkt.

$n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}(-1)^{l+1} I_{-l-\frac{1}{2}}(x)$ sphär. Neumannfkt.

Wobei I die normale normale Besselfunktion ist. Die allgemeine Lösung ist die Linearkombination:

$$\bar{\chi}(kr) = Aj_l(kr) + Bn_l(kr)$$

$$I_{l+\frac{1}{2}}(x) = (-1)^l \sqrt{\frac{\pi}{2x}} x^l \left(\frac{d}{xdx}\right)^l \left(\frac{\sin x}{x}\right)$$

$$I_{-l-\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} x^l \left(\frac{d}{xdx}\right)^l \left(\frac{\cos x}{x}\right)$$

Beispiele: niedrigste Ordnung

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

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

Asymptotik: $x \ll l \quad \Rightarrow$

$$j_l \to \frac{x^l}{3(2l+1)}$$

$$n_l \to -\frac{3(2l+1)}{x^{l+1}}$$

$x \gg l \quad \Rightarrow$

$$j_l \to \frac{1}{x}\cos\left(x\tfrac{\pi}{2}(l+1)\right)$$

$$n_l \to \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{\pi}{2}(l+1)\right)$$

Eine Fouriertransformation der DGL führt zur Legendre-DGL $\Rightarrow$ Integraldarstellung der j_l:

$$j_l(x) = \frac{(-i)^l}{2}\int\limits_{-1}^{1} P_l(u)e^{ixu}du$$

Allgemeine Lösung zur Energie E und Drehimpuls l:

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = \left[Aj_l(kr) + Bn_l(kr)\right] Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Hinweis: Falls Bewegung im gesamten Raum einschließlich $r = 0$ erfolgt ist $B = 0$

Falls freie Bewegung außerhalb von $r > r_0$ ist $A, B \neq 0$.

Satz: Das Funktionensystem der ψ_{klm} bildet eine voll- ständige Basis:

Beispiel: Entwicklung der ebenen Welle nach diesem System:

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} i^l j_l(kr) Y_l^m(\hat{k}) \cdot Y_l^m(\hat{r})$$

wobei $\hat{k} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ und $\hat{r} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$ ist.

Vergleich mit klassischer Bewegung:

$$V_eff = \frac{l(l+1)}{r^2}$$

kinetische Energie = eff. pot. Energie

$$r = r_l = \sqrt{\frac{l(l+1)}{k}}$$

$r < r_l \quad \Rightarrow \quad$ Wellenfunktion nimmt exponentiell ab $\Rightarrow$ geringe Wahrscheinlichkeit, Teilchen im Raumgebiet $r < r_l$ zu treffen.

7.3. Unendlich tiefer Kasten

kugelsym. Potential $V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases}$

$r > a$	$\psi_{klm} = 0$
$r \leq a$	freie Welle

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = Aj_l(kr)Y_{lm}(\theta, \phi), \ B = 0 \quad \text{da} \ \ r = 0 \ \ \text{zugelassen}$$

Anschlußbedingungen: $\psi_{klm}(a) = 0 \ \Rightarrow$ nur bestimmte k - Werte möglich.
$\Rightarrow$ Eigenwertgleichung $j_l(ka) = 0$
$j_l(x_{nl}) = 0$ Nullstelle x_{nl}: Bestimmen von x in Abhängigkeit von n, l; $\quad k_{n,l} = \frac{x_{nl}}{a}$

$$\Rightarrow \qquad E_{nl} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 x_{nl}^2}{2ma^2} \qquad \text{quadrat. in } \ x_{nl}$$

Termschema

8.1. Einleitung

Zwei Teilchen mit:

Masse	m_1	m_2
Ladung	$Z_1 e$	$Z_2 e$
	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$
	$\vec{p}_1$	$\vec{p}_2$

Potential im Abstand $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$
$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(r)$$

Separation der Schwerpunktsbewegung:

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \qquad \text{Schwerpkt.}$$
$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = i\hbar\nabla_R \qquad \text{Gesamtimpuls}$$
$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$
$$\vec{p} = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1 + m_2} = -i\hbar\nabla_r \qquad \text{Relativimpuls}$$

$$M = m_1 + m_2, \qquad \mu = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}$$

$$\frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$$

$$H = H_R + H_r$$
$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M} \qquad \text{freie Schwerpunktsbewegung}$$
$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \qquad \text{Relativbewegung}$$
$$H\Psi(\vec{R},\vec{r}) = E\Psi(\vec{R},\vec{r})$$
$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$$
$$H_R\phi(\vec{R}) = E_R\phi(\vec{R}) \qquad E = E_R + E_r$$
$$H_r\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r})$$

$Z_1 \cdot Z_2 < 0 \quad \Rightarrow \quad$ gebundener Zustand
Unschärferelation $\quad pr = \hbar$

$$E(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{|Z_1 Z_2 e^2|}{r}$$

r_0 : Gleichgewichtsabstand im Grundzustand

$$E'(r_0) = 0 = -\frac{\hbar^2}{\mu r_0^3} + \frac{|Z_1 Z_2 e^2|}{r_0^2}$$

$$\Rightarrow \qquad r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \cdot \frac{1}{|Z_1 Z_2|}$$

$$E_0 = E(r_0) = -\frac{1}{2}\frac{\mu e^4}{\hbar^2}(Z_1 Z_2)^2$$

atomare Einheiten: Länge $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2} = 5.3 \cdot 10^{-9}\ cm$ (Bohrscher Radius)

Energie $E_0 = \dfrac{\mu e^4}{\hbar^2} = 27.21\ eV$

Wasserstoffatom: $\qquad Z_1 = -Z_2 = 1$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \qquad E < 0$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\theta,\phi)$$

Radialgleichung:

$$R_l'' + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l = 0$$

Dimensionslose Variable:

$$k = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$
$$x = 2kr$$
$$\nu = \frac{1}{ka_0} = \frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{-\frac{\mu c^2}{2E}}$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4}\right] R_l = 0$$

reguläre Lösung $\alpha \ \to \ 0,\ R_l \sim x^{l+1}$

asymptotisch $(x \ \to \ \infty)$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} \ - \ \frac{1}{4}\right] R_l \ = \ 0, \qquad R_l \sim c_1\ e^{-\frac{x}{2}} \ + \ c_2\ e^{\frac{x}{2}}$$

$$\Rightarrow \qquad c_2 \ = \ 0$$

Ansatz:

$$R_l \ : \ x^{l+1} \ e^{-\frac{x}{2}} \ u_l(x)$$

$$\left[x \ \frac{d^2}{dx^2} \ + \ (2l+2-x) \ \frac{d}{dx} \ - (l+1-\nu)\right] u_l \ = \ 0$$

$$x \ F'' \ + \ (b-x) \ F' \ - \ a \ F \ = \ 0$$

Differentialgleichung für konfluente hypergeometrische Funktion:

$$F(a,b,x) = 1 \ + \ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a \ (a+1)...(a+n-1)}{b \ (b+1)...(b+n-1)} \ \frac{x^n}{n!} \ , \qquad b \ \in \ \mathbf{Z}$$

Für große n wird F exponentiell.

Potenzreihe muß abbrechen!

wähle $a = -n_r$, $\quad n_r = 0, 1, 2, ...$

$\Rightarrow F(a,b,x) \quad$ Polynom vom Grad n_r

$\Rightarrow \quad$ Quantisierungsbedingung:

$$l + 1 - \nu = -n_r \ , \qquad n_r = 0, 1, 2, ...$$

$$\nu = \frac{l^2}{\hbar^2} \sqrt{\frac{me^2}{-2E}}, \qquad E_{n_r,l} = -\frac{E_0}{2n^2}, \qquad E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2}$$

$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, ...$ $\qquad$ Hauptquantenzahl

$n_r = 0, 1, 2, ...$ $\qquad$ radiale Quantenzahl

Zufällige Entartung in l.

z.B.	$n = 1$	Zustand	1s
	$n = 2$		2s 2p
	$n = 3$		3s 3p 3d

Allgemein: $\quad 0 \leq l \leq n-1$

zusätzlich: $\quad (2l+1)$-fache Entartung in m

$\Rightarrow \quad$ gesamter Entartungsgrad:

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

Bohrsche Frequenzbedingung:

$$\hbar \ \omega_{mn} \ = \ E_m \ - \ E_n \ = \ \frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{m^2} \ - \ \frac{1}{n^2}\right) \qquad n > m$$

$m = 1$	Lyman	ultraviolett
$m = 2$	Balmer	sichtbar
$m = 3$	Paschen	infrarot

Für jedes l gibt es unendlich viele Energieeigenwerte, die sich bei $E = 0$ häufen.

Zufällige Entartung ist Ausdruck einer höheren Symmetrie des Hamiltonoperators mit $V(r) = \frac{1}{r}$ als der Kugelsymmetrie.

Separation der Variablen in Kugelkoordinaten als auch in parabolischen Koordinaten möglich.

Coulomb-Potential invariant unter 4-dimensionalen Drehungen.

Eigenfunktionen:

$$\left[x\frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x)\frac{d}{dx} - (l+1-\nu)\right] u_l(x) = 0$$

$$u_l = F(-n_r, 2l+2, x) \ \sim \ L_{n_r}^{2l+1}(x)$$

zugeordnete Laguerr'sche Polynome vom Grad n_r

$$L_n^b = \frac{1}{n!}x^{-b}e^x\left(\frac{d}{dx}\right)^n\left(x^{n+b}e^{-x}\right)$$

n_r : Anzahl von Knoten (Schnittpunkten mit der x-Achse)

$$L_0^b = 1, \qquad L_1^b = 1+b-x, \qquad L_2^b = \tfrac{1}{2}(b+2)(b+1) - (b+1)x + \tfrac{1}{2}x^2$$

$$X_{n_r l}(x) = a_0^{-3/2}\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}x^l e^{-\frac{x}{2}}L_{n-l-1}^{2l+1}(x), \qquad x = \frac{2r}{na_0} \ ; \ n_r = n-l-1$$

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = X_{n_r l}\left(\frac{2r}{na_0}\right)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad \text{Parität } (-1)^l$$

$$\psi_{100} = 2(a_0)^{-3/2}e^{-\frac{x}{a_0}}Y_0^0 = \langle\vec{r}|1s\rangle$$

$$\psi_{200} = 2(2a_0)^{-3/2}(1-\frac{r}{2a_0})e^{-\frac{r}{2a_0}}Y_0^0 = \langle\vec{r}|2s\rangle$$

$$\psi_{21m} = \frac{2}{\sqrt{3}}(2a_0)^{-3/2}(\frac{r}{2a_0})e^{-\frac{r}{2a_0}}Y_1^m = \langle\vec{r}|2p\rangle$$

$$E > 0 \qquad E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \qquad V(r) = \frac{Z_1Z_2e^2}{r}$$

Asymptotisches Verhalten ($r \to \infty$):

$$R_l(r) \sim C_1e^{ik\rho} + C_2e^{-ik\rho} \qquad \rho = \frac{r}{a_0}$$

$$C_1, C_2 \pm 0$$

Lösungen der Differentialgleichung: Hyperbolische Funktionen.

$$R_{kl}(\rho) = e^{\pm ik\rho}\rho^{l+1}F(l+1\pm\frac{Z_1Z_2}{ik}, 2l+2, \mp 2ik\rho)$$

Konvergiert immer $\Rightarrow$ keine Energiequantisierung

Einfacher Fall: $\delta = 0$

Streuung unabhängig von ϕ

Differentialgleichung:

$$[\triangle + k^2 - \frac{2\gamma k}{r}]\psi(\vec{r}) = 0 \ , \qquad \gamma = \frac{Z_1Z_2e^2m}{\hbar^2k} = \frac{1}{2\pi}\frac{\lambda}{a_0}$$

Ansatz:

$$\psi = e^{ikz}g(r-z)$$

$$u = ik(r-z)$$

$$f(u) = g(r-z)$$

$$[u\frac{d^2}{du^2}+(1-u)\frac{d}{du}+i\gamma]f(u)=0$$

konfluente hypergeometrische Differentialgleichung

$$\psi = Ae^{ikz}F(-i\gamma,1,ik(r-z))$$

asymptotisches Verhalten:

$$[u\frac{d^2}{du^2}+(b-u)\frac{d}{du}-a]F(a,b,u)=0$$

Ansatz:

$$\lim_{|u|\to\infty} F(a,b,u)=u^{\alpha}e^{\lambda u}$$

Bestimmung von α,λ:

$$u(\lambda^2+2\lambda\frac{a}{u})+b\lambda-\alpha-\lambda u+0(\frac{1}{u})=0$$

1) $\lambda^2-\lambda=0, \qquad \lambda_1=0, \qquad \lambda_2=1$

2) $2\lambda\alpha+b\lambda-\alpha-a=0 \qquad \alpha_1=a, \qquad \alpha_2=a-b$

$$F(a,b,u)\to C_1(-u)^{-a}+C_2u^{a-b}e^u$$

$$\left|\frac{C_2}{C_1}\right|=\gamma \qquad \text{aus Integraldarstellung}$$

$a=-i\gamma, \qquad b=1$

$$\lim_{|r-z|\to\infty} F(-i\gamma,1,ik(r-z))\to e^{i\gamma lnk(r-z)}+\gamma e^{ik(r-z)}\frac{e^{i\gamma lnk(r-z)}}{2krsin^2\frac{\theta}{2}}\frac{\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(i\gamma)} \quad ,$$

$$u=ik(r-z)=ikr(1-cos\theta)=ikr2sin^2\frac{\theta}{2}$$

$$\lim_{|r-z|\to\infty}\psi\to e^{i[kz+\gamma lnk(r-z)]}+f(\theta)\frac{e^{i(kr-\gamma ln2kr)}}{r}$$

einfallende Welle + gestreute Kugelwelle

$f(\theta)$ Streuamplitude

$$f(\theta)=\gamma\frac{e^{i[-\gamma ln(sin^2\frac{\theta}{2})]}}{2ksin^2\frac{\theta}{2}}$$

Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma(\Omega)=|f(\theta)|^2=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{sin^4\frac{\theta}{2}}$$

Rutherfordsche Streuformel:

1) $\sigma(\Omega)\sim(Z_1Z_2)$

2) für alle Energien besteht dieselbe Winkelabhängigkeit

3) $\sigma\sim E^{-2}$

9. Streutheorie

9.1. Resolvente und Schrödingersche Integralgleichung

Betrachten Schrödingergleichung:

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

Betrachte Zeitentwicklung von $\psi(t)$. Dazu einseitige Fouriertransformation:

$$\psi_z = \int_0^\infty e^{izt}\psi(t)dt = F\{\psi\}_z \qquad z \in C$$

$$\lim_{t\to\infty}\psi(t) < \infty, \qquad \psi_z \text{ analytisch für } Im(z) > 0$$

$$\begin{aligned} F\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\} &= i\hbar\int_0^\infty e^{izt}\frac{\partial\psi}{\partial t}dt \\ &= i\hbar\left(e^{izt}\psi|_0^\infty - \int \frac{\partial}{\partial t}e^{izt}\ \psi dt\right) \\ &= -i\hbar\psi(t=0) + \hbar z\psi_z \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$(\hbar z - H)\psi_z = i\hbar\psi_0$$

$$\psi_0 = \psi(t=0)$$

Rücktransformation:

$$\psi(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+i0}^{\infty+i0} e^{-izt}\psi_z dz$$

Resolvente:

$$R(z) = \frac{1}{z - H/\hbar} \qquad \Rightarrow \psi_z = iR(z)\psi_0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}H = 0, \qquad H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$R(z) = \sum_n \frac{1}{z-\omega_n}|n\rangle\langle n|, \qquad \omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

Eigenwerte von H entsprechen den Polen von $R(z)$. Die Aufspaltung von H in $H = H_0 + V$, $\quad H_0 = \frac{p^2}{2m}$ $\quad$ ergibt die freie Resolvente:

$$R^f(z) = \frac{1}{z - H_0/\hbar}$$

$$(\hbar z - H_0)\psi_z = i\hbar\psi_0 + V\psi_z \qquad \text{Schröd.gl.}$$

$$\psi_z = iR^f(z)\psi_0 + \frac{1}{\hbar}R_z^f V\psi_z$$

Die freie Bewegung wird durch den ersten Term, der Einfluß des Potentials durch den zweiten Term charakterisiert.

<u>Berechung von $R^f(z)$</u>:

$$\psi_z^f = R^f(z)\psi_0$$

1 - Dimension:

$$\left(\hbar z + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi_z^f(x) = i\hbar\psi_0(x)$$

Fouriertransformation bezüglich x:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{2\pi}\int dk e^{ikx}\psi(k) \\ \left(\hbar z - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)\psi^f(k) &= i\hbar\psi_0(k) \\ \psi^f(k) &= i\frac{1}{z - \frac{\hbar k^2}{2m}}\psi_0(k) \\ &= i\langle k|R^f(z)|k\rangle\langle k|\psi_0\rangle \end{aligned}$$

Rücktransformation:

$$\langle x|R^f(z)|x'\rangle = \int dk \langle x|k\rangle\langle k|R^f|k\rangle\langle k|x'\rangle$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x')}\frac{1}{z-\frac{\hbar k^2}{2m}}$$
$$\left(p=\sqrt{\frac{2mz}{\hbar}}, \qquad Im(p)>0, \qquad Re(p)>0\right)$$
$$= \frac{-im}{\hbar}\frac{1}{p}e^{ip|x-x'|}$$

$$\Rightarrow \qquad \psi_z(x) = \psi_z^f(x) - i\int dx'\frac{1}{p}e^{ip|x-x'|}V'(x')\psi_z'(x')$$

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

3-Dim:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{k})$$
$$\langle\vec{k}|R^f(z)|\vec{k}\rangle = \frac{1}{z-\frac{\hbar k^2}{2m}}, \qquad k^2 = k_1^2+k_2^2+k_3^2$$
$$\langle\vec{r}|R^f|\vec{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^2}\int d^3k e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}\frac{1}{z-\frac{\hbar k^2}{2m}} \qquad |\vec{r}-\vec{r}'| = R$$
$$= \frac{2m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_o^\infty k^2dk\int\limits_0^{2\pi}d\phi\int\limits_{-1}^{1}d(\cos\theta)\frac{e^{ikR\cos\theta}}{z-\frac{\hbar k^2}{2m}}$$
$$= \frac{2m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}\int\limits_0^\infty dkk\frac{e^{ikR}-e^{-ikR}}{ikR}\frac{1}{(p+k)(p-k)}$$
$$= \frac{m}{\hbar(2\pi)^2}\frac{1}{iR}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dk\frac{e^{ikR}-e^{-ikR}}{(p+k)(p-k)}$$
$$= \frac{m}{\hbar(2\pi)^2}\frac{1}{iR}(-2\pi i)\left(\frac{pe^{ipR}}{2p}-\frac{-pe^{ipR}}{2p}\right)$$
$$= \frac{m}{\hbar 2\pi}\frac{e^{ipR}}{R}$$

$$\psi_z(\vec{r}) = \psi_z^f(\vec{r}) - \int d^3r'\frac{e^{ip(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}v(\vec{r}')\psi_z(\vec{r}')$$
$$v(\vec{r}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}V(\vec{r}) \qquad \uparrow \text{Integralgleichung}$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung

9.2. Die Streuamplitude

$$\psi_z(\vec{r}) = \psi_{\vec{p}}(\vec{r}), \qquad \frac{\hbar p^2}{2m} = \hbar z$$
$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{p}}^f(\vec{r}) - \int d^3\vec{r}'\frac{e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}v(\vec{r})\psi_z(\vec{r}')$$
$$\psi_{\vec{p}}^f(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \qquad \text{freie Welle}$$

Annahme: $V(\vec{r})$ sei hinreichend stark lokalisiert:

$$\left(\lim_{r\to\infty} r^2V(r)=0,\ \text{derart, daß} \int\frac{V(r)}{r}d^3r \text{ existiert}\right)$$

Integral in Lipp.-Schwinger.-Gl. nach Potenzen in $\left(\frac{r'}{r}\right)$ entwickelbar:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{1}{r}\left(1+0\left(\frac{r'}{r}\right)\right)$$
$$|\vec{r}-\vec{r}'| = r\left|\vec{r}-\frac{\vec{r}'}{r}\right|$$
$$= r\sqrt{1-2\vec{r}'\frac{\vec{r}}{r}+\cdots}$$
$$\approx r-\vec{r}'\cdot\vec{r}+\cdots$$

Einsetzen in die Lipp.-Schw.-Gl. ergibt:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{=} e^{i\vec{r}\cdot\vec{r}} + f_{\vec{p}}(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad \text{(asympt. Form!)}$$

mit

$$f_{\vec{p}}(\Omega) = f(\vec{p}', \vec{p}) = -\int e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}'} v(\vec{r}')\psi_{\vec{p}}(\vec{r}')d^3\vec{r}'$$

$$(\vec{p}' = \hat{\vec{r}}\cdot p)$$

f heißt *Streuamplitude*.
ψ ist als Summe der ungestörten und einer gestreuten Welle darstellbar: auslaufende Welle mit Amplitude f (i.a. nicht isotrop)

Setze asymptotische Form in L–S–Gleichung ein:

$$e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} + f\frac{e^{ipr}}{r} = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} - \int d^3\vec{r}'\frac{e^{ipr}e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}'}}{r}V'(\vec{r}')$$

$$\left[e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'} + \frac{e^{ipr'}}{r'}f(\vec{p}', \vec{p})\right]$$

$\Rightarrow$ Integralgleichung für $f(\vec{p}', \vec{p})$

$$f(\vec{p}', \vec{p}) = f^0(\vec{p}', \vec{p}) - \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k f(\vec{p}', \vec{k})\frac{4\pi}{p^2 - k^2}f(\vec{k}, \vec{p})$$

mit

$$f^0(\vec{p}', \vec{p}) = \int d^3\vec{r}e^{-i(\vec{p}' - \vec{p})\cdot\vec{r}}v(\vec{r}) = -\tilde{v}(\vec{p}' - \vec{p})$$

Das ist die Fouriertransformierte des Potentials nach dem Impulsübertrag $\vec{p}' - \vec{p}$.

Aufgabe 1

Freier Fall:

$V(x) = mgx, \qquad x > 0$

elastisch reflektierende Grundfläche

$\rightarrow \qquad V(0) = \infty$

nur diskrete Spektren

Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + mgx\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

Randbedingungen:

$$\psi(0) = 0, \qquad \psi(\infty) = 0 \qquad (\psi(x) = 0,\ x \le 0)$$

charakeristische Länge:

$$\frac{2m^2g}{\hbar^2} = \frac{1}{l^3},$$

Dimensionsloser Parameter λ (Energie)

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\lambda}{l^2}$$

Längenvariable:

$$\xi = \frac{x}{l} - \lambda$$

(Zähle Koordinate nicht vom Boden sondern vom klassischen Umkehrpunkt bei

$x = \lambda l = E/mg$ aus.)

$$\Rightarrow \qquad \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \; - \; \xi \; \psi \; = \; 0$$

Randbedingungen:

$$\psi(-\lambda) = 0, \qquad \psi(\infty) = 0$$

Lösung:

$$\psi \sim \xi^{\frac{1}{2}} \qquad \xi\psi \sim \xi^{\frac{3}{2}}$$
$$\psi' \sim \xi^{-\frac{1}{2}}$$
$$\psi'' \sim \xi^{-\frac{3}{2}}$$

Lösung: Airy-Funktion:

$$\psi(\xi) = C \; Ai(\xi)$$

Im einzelnen gilt:

$\xi > 0$:

$$Ai(\xi) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\xi}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \; k_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right)$$

$k_v(z)$ modifizierte Hankelfunktion:

$$\lim_{z\to\infty} k_v(z) \; = \; \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \; e^{-z}$$

$\xi < 0 : \qquad \xi = -\xi$

$$Ai(-\xi) = \frac{1}{3}\sqrt{\xi}\Big[J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right) + J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right)\Big]$$

Randbedingungen: $\psi(-\lambda) = 0$

$$\Rightarrow \qquad J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{\frac{3}{2}}\right) + J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{\frac{3}{2}}\right) = 0$$

Bestimmungsgleichung für Energieeigenwerte

$$\lambda_1 = 2,33 \; ; \qquad \lambda_2 = 4,09 \; ; \qquad \lambda_3 = 5,52$$

Gute Näherung: Asymptotisches Verhalten der Besselfunktion

$$J_{\frac{1}{3}}(z) \to \sqrt{\frac{2}{\pi z}} cos(z - \frac{..\pi}{12})$$

$$J_{-\frac{1}{3}}(z) \to \sqrt{\frac{2}{\pi z}} cos(z - \frac{\pi}{12})$$

$$\Rightarrow \qquad J_{\frac{1}{3}}(z) + J_{-\frac{1}{3}}(z) : \qquad \sqrt{\frac{3}{\pi z}} cos(z - \frac{\pi}{4})$$

Nullstellen liegen bei:

$$z_n = \frac{2}{3}\; \lambda_n^{\frac{3}{2}} = \frac{\pi}{4} + (2n-1)\; \frac{\pi}{2} = (2n - \frac{1}{2})\; \frac{\pi}{2},$$

$$\Rightarrow \qquad \lambda_1 = 2,32; \qquad \lambda_2 = 4,08; \qquad \lambda_3 = 5,51$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ml^2}\left[\frac{3\pi}{4}\;\left(2n - \frac{1}{2}\right)\right], \qquad n = 1,2,3$$

Aufgabe 2:

Kugelsymmetrisches Problem:

Molekülpotential:

$$V(r) = -2D\Big(\frac{1}{r} - \frac{1}{2r^2}\Big)$$

$$V' = 2D\Big(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{r^3}\Big)$$

Minimum: bei $a = 1$ Gute Näherung:

$$V(r) = -D + D(r-1)^2 - ..$$

Klassische Schwingungsfrequenz für kleine Amplituden ($r - 1 << 1$):

$$\omega = \sqrt{\frac{2D}{\theta}}$$

θ Trägheitsmoment für Abstand $a = 1$

$$\theta = m\ a^2$$

$$E = -D + \hbar\omega\ (n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2\theta}\ l(l+1), \qquad n = 0, 1, 2, ..$$

Exakte Lösung:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{C}{r}\ \chi_l(r)\ \psi_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + \Big[-\beta^2 + \frac{2\gamma^2}{r} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{r^2}\Big]\ \chi_l = 0$$

$$\beta^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2}\ E, \qquad \gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}\ D$$

kleine r: $\chi_l(r) \sim r^\lambda$

$$\Rightarrow \qquad \lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l+1)$$

$$\Rightarrow \qquad \lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \big(l + \frac{1}{2}\big)^2}$$

$$r \to \infty \qquad \chi_l \to 0 \qquad \Rightarrow \qquad \chi_l \sim e^{-\beta r}$$

$$\Rightarrow \qquad \chi_l = r^\lambda\ e^{-\beta r}\ f(r)$$

$$\Rightarrow \qquad r f'' + (2\lambda - 2\beta r)\ f' - 2(\lambda\beta - \gamma^2)\ f = 0$$

Lösung: konfluente hypergeometrische Reihe

$$f(r) = F(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}, 2\lambda, 2\beta r)$$

Endliches Polynom, wenn:

$$\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta} = -n, \qquad n = 0, 1, 2, ..$$

$$\Rightarrow \qquad E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\ \frac{\gamma^4}{\big[n + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \big(l + \frac{1}{2}\big)^2}\big]^2}$$

Entwicklung nach Potenzen von $1/\gamma$:

$$(n << \gamma, \qquad l << \gamma)$$

$$E = D\Big[-1 + \frac{2}{\gamma}(n + \frac{1}{2}) + \frac{1}{\gamma^2}(l + \frac{1}{2})^2 - \frac{3}{\gamma^2}(n + \frac{1}{2})^2 - \frac{3}{\gamma^3}(n + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2})^2 + ..\Big]$$

mit

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{\hbar\omega}{2D}, \qquad \frac{1}{\gamma^2} = \frac{\hbar^2}{2\theta D}$$

$$\frac{1}{\gamma^3} = \frac{\hbar^3\omega}{4\theta D^2} = \frac{\hbar^2}{2\omega\theta D}$$

$$\Rightarrow \qquad E = -D + \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2}{2\theta}(l + \frac{1}{2})^2 - \frac{3\hbar^2}{2\theta}(n + \frac{1}{2})^2 - 6\frac{(\hbar^2/2\theta)^2}{\hbar\omega}(n + \frac{1}{2})^2(l + \frac{1}{2})^2$$

<u>Wiederholung</u>

Integralform der Schrödingergleichung:

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

$$\psi_z = \int_0^\infty e^{izt}\psi(t)dt, \qquad z: \text{komplexe Energie}, \qquad \frac{\hbar^2\vec{p}^2}{2m} = \hbar z$$

$$\Rightarrow \qquad (\hbar z - H)\psi_z = i\hbar\psi_0$$

Resolvente $\quad R(z) = \dfrac{1}{z - H/\hbar} \qquad \Rightarrow \qquad \psi_z = iR(z)\psi_0$

$$H = H_0 + V$$

$$\psi_z = iR^f(z)\psi_0 + \frac{1}{\hbar}R_z^f V\psi_z$$

$$R^f(z) = \frac{1}{z - H_0/\hbar}$$

Fouriertransformation im Ortsraum

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, \frac{e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, V(\vec{r}')\, \psi_{\vec{p}}(\vec{r}')$$

Lokalisiertes Potential: $\Rightarrow$ Entwicklung in Potenzen von $\frac{r'}{r}$

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} + f(\vec{p}',\vec{p})\frac{e^{ipr}}{r}, \qquad \text{asymptotisch für } r \to \infty$$

Streuamplitude: $f(\vec{p}',\vec{p}) = -\dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\displaystyle\int d^3r'\, e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}'}\, V(\vec{r}')\, \psi_{\vec{p}}(\vec{r}')$

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\psi^f|V|\psi\rangle$$

<u>Integralgleichung:</u>

$$f(\vec{p}',\vec{p}) = f^0(\vec{p}',\vec{p}) - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f^0(\vec{p}',\vec{k})\frac{4\pi}{p^2-k^2}f(\vec{k},\vec{p})$$

mit

$$f^0(\vec{p}',\vec{p}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}}V(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\widetilde{V}(\vec{p}'-\vec{p})$$

$\widetilde{V}$ ist die Fouriertransformierte des Potentials.

9.3. Wirkungsquerschnitt

Stromdichte der einfallenden Teilchen

$$\vec{j} = n\vec{v} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{einf}^*\nabla\psi_{einf} - \psi_{einf}\nabla\psi_{einf}^*\right)$$

$$\psi_{einf} = e^{i\vec{p}\vec{r}} \Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar\vec{p}}{m}$$

In das Raumwinkelelement $d\Omega$ pro Zeiteinheit gestreute Teilchen:

$$dN = j\sigma(\Omega)d\Omega, \qquad \sigma(\Omega): \text{diff. Streuquerschnitt}$$

$$\sigma_{tot} = \int\sigma(\Omega)d\Omega, \qquad \sigma_{tot}: \text{totaler Streuquerschnitt}$$

$$\lambda \ll l, \qquad d \gg b \qquad l \ll \text{Potentialreichweite}$$

Form des Wellenpaketes $\chi(\vec{r})$, $\int |\chi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$

$$g(\vec{k}) = \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\chi(\vec{r}), \qquad \text{um } \vec{k} \text{ konzentriert}$$

freies Wellenpaket

$$\psi^f_{\vec{b}}(\vec{r}) = \int d^3k'\ g(\vec{k}' - \vec{k})\ e^{i(\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{b})-\frac{E'}{\hbar}t)}$$

$$\left(E' = \frac{\hbar k'^2}{2m} = E + \hbar\vec{v}(\vec{k}' - \vec{k}) + \cdots\right)$$

$$= e^{-i\vec{k}\cdot\vec{b}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\frac{E}{\hbar}t} \underbrace{\int d^3k'\ g(\vec{k}' - \vec{k})\ e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot(\vec{r}-\vec{b})}\ e^{-i\vec{v}\cdot(\vec{k}'-\vec{k})}}_{\substack{\chi(\vec{r}-\vec{b}-\vec{v}t)\\ \text{Wellenpaket mit Geschwindigkeit } \vec{v}}}$$

Streuendes Wellenpaket:

$$\psi_{\vec{b}}(\vec{r},t) = \int g(\vec{k}' - \vec{k}) e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{b}} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) e^{-i\frac{E'}{\hbar}t}$$

$\psi_{\vec{k}'}(\vec{r})$ stationäre Lösung der Schrödingergleichung. Nun $t \to \pm\infty$:

$$\psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} + f_{\vec{k}}(\Omega)\frac{e^{ik'r}}{r}$$

für $t \to \infty$

$$\psi_{\vec{b}}(\vec{r},t) \to \psi^f_b(\vec{r},t) + \lim_{t\to\infty} \int g(\vec{k}' - \vec{k}) f_{\vec{k}'}(\Omega) \frac{1}{r} e^{i(k'r - \frac{E'}{\hbar}t - \vec{k}'\cdot\vec{b})} d^3k'$$

mit:

$$\vec{k}' = k + \hat{v}(\vec{k}' - \vec{k}) + \cdots; \qquad \hat{v} = \frac{\vec{v}}{v}$$

$$E' = E + \hbar\vec{v}(\vec{k}' - \vec{k}) + \cdots$$

$$f_{\vec{k}'}(\Omega) = f_{\vec{k}}(\Omega) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{s}} \qquad \vec{s}: \qquad \text{Phasenänderung}$$

$$\Rightarrow \text{Phase} \qquad k'r - \frac{E'}{\hbar}t - \vec{k}'\cdot\vec{b} + (\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{s} + \cdots$$

$$= -\vec{k}\vec{b} + kr - \frac{E}{\hbar}t + (\vec{k}' - \vec{k})(\hat{v}r - \vec{v}t - \vec{b} + \vec{s}) + 0\left[(\vec{k}' - \vec{k})^2\right]$$

$\Rightarrow$ für $t \to \infty$:

$$\psi_{\vec{b}}(\vec{r},t) \to \psi^f_b(\vec{r},t) + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{b}} f_{\vec{k}}(\Omega) \frac{e^{i(kr - \frac{E}{\hbar}t)}}{r} \chi(\hat{v}(r - vt) + \vec{s} - \vec{b})$$

Wahrscheinlichkeit für eine Streuung eines Teilchens in das Raumwinkelgebiet

$(\Omega, \Omega + d\Omega)$

$$P_G(\Omega) = \int_0^\infty r^2 dr |\psi_b(\vec{r},t)|^2$$

$$= |f_{\vec{k}}(\Omega)|^2 \int_0^\infty dr \left|\chi(\hat{v}(r - vt) + \vec{s} - \vec{b})\right|^2$$

$$\simeq |f_k(\Omega)|^2 \int_{-\infty}^\infty dz |\chi(\hat{v}z + \vec{s} - \vec{b})|^2, \qquad z = r - vt$$

Teilchenstrahl der Intensität $\frac{1}{cm^2\ sec}$ mit d^2b einfallenden Teilchen pro Flächeneinheit um $\vec{b}$ $(\perp\vec{k})$

Streuwahrscheinlichkeit pro einfallenden Strom:

$$\sigma(\Omega) = \int d^2b P_{\vec{b}}(\Omega)$$

$$= |f_k(\Omega)|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dz \int d^2b |\chi(\hat{v}z + \vec{s} - \vec{b})|^2$$

$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dz \int d^2b |\chi(\hat{v}z + \vec{s} - \vec{b})|^2 = 1$ wegen Normierung von χ und Integration über gesamtes Wellenpaket

$\Rightarrow$

$$\sigma(\Omega) = |f_k(\Omega)|^2$$

9.4. Partwellenzerlegung und Streuphasen

$V(\vec{r}) = V(r)$ Zentralpotential

Bei kugelsymmetrischen Potential ist der Drehimpuls ein Integral der Bewegung. Zustände mit verschiedenen Drehimpulsen nehmen daher unabhängig voneinander an der Streuung teil. Eine Darstellung als Überlagerung von Partialwellen mit verschiedenen Drehimpulsen wird dadurch sinnvoll.

$f_{\vec{k}}(\Omega)$ hängt nur von Ω ab.

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k', k) P_l(\cos(\theta))$$
$$= \sum_{l=o}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} f_l \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m^*}(\hat{k}') Y_l^m(\hat{k})$$

Eingesetzt in Integralgleichung:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f^0(\vec{k}', \vec{k}) - \int\limits_0^{\infty} \frac{dp}{(2\pi)^2} \frac{p^2}{k^2 - p^2 + i0} \cdot$$
$$\cdot \sum_{l,m} \sum_{l',m'} f_l^0 f_{l'} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{4\pi}{2l'+1} Y_l^{*m}(\hat{k}') Y_l^{m'}(\hat{k}) \cdot \int d\Omega_p Y_l^m(\hat{p}) Y_{l'}^{m'}(\hat{p})$$
$$\left(\text{wegen} \quad \int d\Omega_p Y_l^m(\hat{p}) Y_{l'}^{m'}(\hat{p}) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}\right)$$
$$= f^0(\vec{k}', \vec{k}) - \frac{\pi}{2} \int\limits_0^{\infty} \frac{p^2 dp}{k^2 - p^2 + i0} \sum_l \frac{1}{2l+1} f_l^0 f_l P_l(\vec{k}' \cdot \vec{k}) \qquad \hat{k}' \cdot \hat{k} = \cos\theta$$

$\Rightarrow$

$$f_l(k', k) = f_l^0(k', k) - \frac{\pi}{2(2l+1)} \int \frac{p^2 dp}{k^2 - p^2 + i0} f_l^0(k', p) f_l(p, k)$$

Integralgleichung für die l–Komponente der Streuamplitude f

$$f_l^0(k', k) = -\frac{2l+1}{2} \int\limits_{-1}^{1} d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) \frac{m}{2\pi\hbar^2} \underbrace{\int d^3r e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} V(\vec{r})}_{\widetilde{V}(\vec{k}' - \vec{k}) \quad \text{Fouriertr. von } V}$$

$$= -4\pi(2l+1) \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int\limits_0^{\infty} dr\; r^2 j_l(k'r) j_l(kr) V(r)$$

Für die letzte Gleichung entwickelt man die ebene Welle nach Kugelfunktionen.

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_l f_l(k', k)\; P_l(\cos\theta)$$

Drücke f_l durch Streuphase aus:

Einfallende ebene Welle:

$$e^{ikz} \;=\; \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\; i^l\; j_l(kr)\; P_l(\cos\theta)$$

$$r \to \infty \qquad j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} \qquad (kr >> l)$$

$$e^{ikz} \approx (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\; i^l\; P_l(\cos\theta)\; \sin(kr - \frac{l\pi}{2})$$
$$= (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\; i^l\; P_l(\cos\theta)\; \frac{i}{2}\left[e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}\right]$$

erster/zweiter Term in der eckigen Klammer: ein/auslaufende Kugelwelle

Gestreute Welle:

$$\psi(r) = (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\; i^l\; R_l(r)\; P_l(\cos\theta)$$

$R_l(r)$ ist eine Lösung der radialen Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} \;-\; \frac{l(l+1)}{r^2} \;+\; k^2\right) R_l(r) \;=\; \frac{2mV(r)}{\hbar^2}\; R_l(r)$$

$$R_l(0) = 0$$

$r \to 0 \qquad (V(r) \sim r^{+n},\; n \geq -1)$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} \;-\; \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_l = 0, \qquad R_l(r) \sim r^{l+1}$$

$r \to \infty$

$$R_l(r) = \sin(kr - \frac{l\pi}{2} \;+\; \frac{i}{2}\;(-1)^l\;(1-S_l)\; e^{ikr}$$
$$= \frac{i}{2}\left[e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})} \;-\; S_l(k)\; e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}\right]$$

Streuung ändert die Amplitude der vom Zentrum ausgehenden Welle.

Vergleiche mit

$$\psi(r) = e^{ikz} \;+\; f(\theta)\;\frac{ikr}{r}$$

$$\Rightarrow \qquad f(\theta) = \frac{i}{2k}\; \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\;(1-S_l)\; P_l(\cos\theta)$$

oder

$$f_l = \frac{2l+1}{k}\; e^{i\delta_l}\;\; \sin\delta_l$$

$$\text{mit } (S_l - 1) = 2i\; e^{i\delta_l}\;\; \sin\delta_l$$

δ_l = relle Phasenverschiebung = Streuphase

$V \to 0 \qquad \delta \to 0 \qquad \Rightarrow \qquad \delta \;\in\; (0,\pi)$ oder $\delta \in (-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2})$

Vorwärtsstreuung $(\theta = 0,\; P_l(1) = 1)$

$$f(0) = \frac{i}{2k}\; \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\;(1-S_l)$$

Differentieller Wirkungsquerscnitt:

$$\sigma(\Omega) = |\sum_{l=0}^{\infty} f_l\; P_l(\cos\theta)|^2$$

Totaler Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma_{tot} = \int d(\Omega)\; d\Omega \;=\; \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l$$

mit

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{2l+1}\;|f_l|^2$$
$$= \frac{4\pi}{k^2}\;(2l+1)\;\sin^2\sigma_l$$

$$\Rightarrow \qquad \sigma_l = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\{f_l\}$$

$\Rightarrow$ optisches Theorem:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k}\ \mathrm{Im}\{f(0)\}$$

Maximale Streuung: $|\sin\delta_l| = 1$

$$\Rightarrow \qquad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\ (2l+1)$$

erreicht bei:

$$\sigma_l^R = (2n+1)\ \frac{\pi}{2}\ , \qquad n = 0, 1, ...$$

Sei $\delta_l(E_0) = \delta_l^R$

$$\delta(E) = \delta_l^R + a(E - E_0) + ...$$

$$\Rightarrow \qquad \sin^2\delta_l = 1 - a^2(E - E_0)^2 + ...$$

Verhalten bei kleineren Frequenzen:

Reichweite des Potentials: r_0

für Energien mit $kr_0 << 1$ $\quad\Rightarrow\quad$ $\lambda = \frac{2\pi}{k} >> r_0$

$\Rightarrow$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Wellen mit $\sqrt{l(l+1)} > kr_0$ am Potential klein $\quad\Rightarrow\quad$ große l nehmen nicht an Streuung teil

$\Rightarrow$ Nur S-Wellen-Streuung (Struktur des Potentials wird nicht gesehen)

Streulänge:

$$\Rightarrow \qquad f_{\vec{k}}(\Omega) = -a$$

$$\sigma_{tot} = 4\pi\ a^2$$

Beispiel: Streuung an der harten Kugel

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

$$\psi_{klm}(\vec{r}) = \chi_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$r > a$

$$\chi_{kl}(r) = a_l\ j_l(kr)\ +\ b_l\ n_l(kr) \qquad (freieWelle)$$

Asymptotik: $\quad r \to \infty$

$$\chi_{kl}\ \to\ \frac{1}{kr}\ \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)$$

Asymptotik von $j_l,\ n_l$:

$$j_l(kr) \to \sin(kr - \frac{l\pi}{2})$$

$$n_l(kr) \to -\cos(kr - \frac{l\pi}{2})$$

$$\chi_{kl}(r) = \frac{1}{kr}\Big(\cos\delta_l\ j_l(kr)\ +\ \sin\delta_l\ n_l(kr)\Big)$$

$$tan\delta_l = \frac{b_l}{a_l}$$

Randbedingung: $\chi_{kl}(a) = 0$

$$\rightarrow \qquad a\ j_l(ka)\ +\ b\ n_l(ka) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad tan\delta_l = -\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}$$

$$\Rightarrow \qquad \sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\ \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka)\ +\ n_l^2(ka)}$$

$l = 0:$

$$\sigma_0 = 4\pi\ a^2 \Big(\frac{\sin^2 ka}{ka}\Big)^2$$

Grenzfall kleiner Energien:

$$\lim_{k\to 0} \sigma_{tot} = \lim_{k\to 0} \sigma_0 = 4\pi\ a^2$$

4-facher klassischer Wirkungsquerschnitt

Grenzfall großer Energien:

$$\lim_{k\to\infty} \sigma_{tot} = 2\pi\ a^2$$

2-facher klassischer Wirkungsquerschnitt. klassisches Phänomen der Wellenoptik:

$$\sigma_{tot} = \pi a^2(\text{Streuung}) + \pi a^2(\text{Schatten})$$

Babinetsches Prinzip

fig141.eps

IV. NÄHERUNGSMETHODEN fÜR STATIONÄRE PROBLEME

10. Störungstheorie für das diskrete Spektrum

10.1. Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

Exakte Lösung nur für einfache Probleme bekannt.

Untersuchung von atomaren, nuklearen oder Elementarteilchen-Problemen

$\rightarrow$ Näherungsverfahren zur Berechnung der Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamiltonoperators

Systeme, die sich nicht sehr von idealisierten Systemen mit bekannten Lösungen unterscheiden

Korrekturen zur exakten Lösung

Eigenzustände des Hamiltonoperators H_0 bekannt:

$$H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle, \qquad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

Zu finden seien Eigenzustände von

$$H = H_0 + V, \qquad V\text{: kleine Störung}$$

$$H|N\rangle = E_N|N\rangle$$

Annahme: Eigenzustände von

$$H_\lambda = H_0 + \lambda V \qquad \lambda\text{: dimensionloser Parameter (Kopplungskonstante)}$$

sind analytische Funktionen von λ, d.h. wenn λ von 0 nach 1 variiert wird, entwickeln sich die Eigenzustände stetig von $|n\rangle$ nach $|N\rangle$.

Dann gilt:

$$\begin{aligned} |N\rangle &= |n\rangle \ + \ \lambda|N^{(1)}\rangle \ + \ \lambda^2|N^{(2)}\rangle \ + \ ... \\ E_n &= E_n^0 \ + \ \lambda E_n^{(1)} \ + \ ... \end{aligned}$$

(Beweis der Konvergenz i.A. sehr kompliziert)

Wahl der Normierung von $|N\rangle$

$$\langle n|N\rangle = 1 = \langle n|n\rangle \ + \ \lambda\langle n|N^{(1)}\rangle \ + \ \lambda^2\langle n|N^{(2)}\rangle \ + \ ...$$

$$\Rightarrow \qquad \langle n|N^{(i)}\rangle = 0, \qquad i = 1, 2, ..$$

Bestimmung von E_n:

$$\begin{aligned} E_n|N\rangle &= (H_0 + V)|N\rangle \\ \langle n|E_n|N\rangle &= \langle n|H_0|N\rangle \ + \ \langle n|V|N\rangle \\ \Rightarrow \qquad E_n &= E_n^0 \ + \ \langle n|V|N\rangle \end{aligned}$$

Bestimmung von $|N\rangle$:

Entwicklung in Eigenfunktionen von H_0:

$$|N^{(k)}\rangle = \sum_{m\neq n} |m\rangle\langle m|N^{(k)}\rangle$$

$$(E_n^0 - H_0)\ |N\rangle = \lambda\ V\ |N\rangle \ - \ \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k\ E_n^{(k)}\ |N\rangle$$

multipliziere mit $\langle m|$:

$$\langle m|N\rangle\ (E_n^0 - E_m^0) = \lambda\langle m|V|N\rangle \ - \ \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k\ E_n^{(k)}\ \langle m|N\rangle$$

$$\sum_{l=0} \langle m|N^{(l)}\rangle(E_n^0 - E_m^0)\ \lambda^l = \sum_{l=0} \lambda^{l+1}\ \langle m|V|N^{(l)}\rangle \ - \ \sum_{k=1}\sum_{l=0} \lambda^{k+l}\ E_n^{(k)}\ \langle m|N^{(l)}\rangle$$

Koeffizientenvergleich in λ^k:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \ \langle m|N^{(k)}\rangle(E_n^0 - E_m^0) = &\langle m|V|N^{(k-1)}\rangle - \big[E_n^{(1)}\langle m|N^{(k-1)}\rangle + E_n^{(2)}\langle m|N^{(k-2)}\rangle \\ &+ ... + E_n^{(k-1)}\langle m|N^{(1)}\rangle\big] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \ |N^{(k)}\rangle = &\sum_m |m\rangle \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} \big[\langle m|V|N^{(k-1)}\rangle - E_n(1)\langle m|N^{(k-1)}\rangle \\ &- ... - \ E_n^{(k-1)}\langle m|N^{(1)}\rangle\big] \end{aligned}$$

mit $|n\rangle = |N^{(0)}\rangle$

$$|N\rangle = |n\rangle + \underbrace{\sum_{m\neq n} |m\rangle \frac{\langle m|V|n\rangle}{E_n^0 - E_m^0}}_{|N^{(1)}\rangle} + ...$$

$$E_n = E_n^0 + \underbrace{\langle n|V|n\rangle + \sum_{n\neq m}}_{E_n^{(1)}} + \underbrace{\frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}}_{E_n^{(2)}} + ...$$

Energiekorrektur

1. Ordnung: Matrixelement des Störoperators im ungestörten Zustand

2. Ordnung: Grundzustand $E_0^0 - E_m^0 < 0 \;\rightarrow\;$ Energieabsenkung

Normierung des gestörten Zustands:

$\langle N|N\rangle^{-1} = Z$, Renormierungskonstante der Wellenfunktion

$$\langle N|N\rangle = 1 + \lambda^2 \langle N^{(1)}|N^{(1)}\rangle + O(\lambda^3)$$

Normierung wird erst in 2. Ordnung geändert

10.2. Statische elektr. Polarisierbarkeit und quadratischer Stark-Effekt

Teilchen mit Ladung e in Zentralfeld, Eigenzustände :

$$|n\rangle = |n_r, l.m\rangle$$

$$\rightarrow \qquad \frac{1}{r} R_{n_r l}(r) Y_l^m(\theta,\phi)$$

$$E_n^0 = E_{n_r l}^0$$

Störung durch elektrisches Feld $\vec{E} = (0,0,E)$

$$V = -\vec{D}\cdot\vec{E} = -D_z \cdot E$$

Dipoloperator $D_z = ez = er\cos\theta$

Matrixelement von D_z:

$$\cos\theta Y_l^m(\theta,\phi) = A_{l+1}^m Y_{l+1}^m + A_l^m Y_{l-1}^m$$

$$A_l^m = \sqrt{\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}}$$

$$\langle n_{r'} l' m'|D_z|n_r l m\rangle = e\delta_{mm'}(\delta_{l',l+1}A_{l+1}^m + \delta_{l',l-1}A_l^m) r_{n_r' n_r}^{l' l}$$

(Störung z kommutiert mit $L_z \;\rightarrow \Delta m = 0$)

$$r_{n_r' n_r}^{l' l} = \int_0^\infty dr\; R_{n_r' l'}(r) r R_{n_r l}(r)$$

$$\Rightarrow \qquad \langle n|D_z|n\rangle = 0$$

$\Rightarrow$ Teilchen in Zentralfeld hat kein permamentes Dipolmoment

Störungstheorie nach $V = -D_z E$

Annahme: Eigenvektoren nicht entartet in $n_r,\ l$

$$E_{n_r,l}^0 \neq E_{n_r',l'}^0 \qquad (\text{sonst } \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} = \infty)$$

$$|N\rangle = |n_r l m\rangle + \sum_{n_r' l' \neq n_r l} |n_r' l' m\rangle (-E) \frac{\langle n_r' l' m|D_z|n_r l m\rangle}{E_{n_r' l'}^0 - E_{n_r l}^0}$$

Induziertes elektrisches Dipolmoment

$$\langle N|D_z|N\rangle = \alpha^N E + 0(E^2)$$

α^N : statische Polarisierbarkeit

$$\alpha^N = 2 \sum_{E^0_{n'} \neq E^0_n} \frac{|\langle n|D_z|n'\rangle|^2}{E^0_{n'} - E^0_n}$$
$$= 2e^2 \Big[(A^m_{l+1})^2 a^{l+1,l}_{n_r} + (A^m_l)^2 a^{l-1,l}_{n_r} \Big]$$

$$a^{l'l}_{n_r} = \sum_{n'_r} \frac{(r^{l'l}_{n'_r n_r})^2}{E^0_{n'_r l'} - E^0_{n_r l}}$$

Makroskopische Eigenschaft: statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon^0 = 1 + 4\pi N \alpha$$

Im Grundzustand: $\alpha^0 > 0$

Energieeigenwerte: Quadratischer Stark-Effekt

$$E_{n_r lm} = E^0_{n_r l} + \frac{1}{2} \alpha^{n_r lm} E^2 + O(E^3)$$

Weitgehende Aufhebung der m-Entartung

$$E_{n_r lm} = E_{n_r l-m}$$

$\rightarrow\ l + 1$ Niveaus

$fig141.epsfig141.eps$

10.3. Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie für entartete Zustände

Es sei

$$H_0|n_i\rangle = E^0_n|n_i\rangle, \qquad i = 1, 2, ...k$$

Falls $\langle n_i|V|n_j\rangle \neq 0 \qquad i \neq j$

ist die einfache Störungstheorie divergent:

$$\frac{\langle n_i|V|n_j\rangle}{E^0_{n_i} - E^0_{n_j}} \rightarrow \infty$$

Lösung: Jede Linearkombination der $|n_i\rangle$ ist ebenfalls Eigenzustand zur Energie E^0_n

$\Rightarrow$ Man wähle die Linearkombination

$$|n_\alpha\rangle = \sum_{i=0}^{k} c_{\alpha_i}|n_i\rangle, \qquad \alpha = 1, 2, ..n$$

so daß$\langle n_\alpha|V|n_\beta\rangle = 0$ für $\alpha \neq \beta$

Für hermitesche V immer möglich

Nach Diagonalisierung der Matrix $\langle n_i|V|n_j\rangle$ (des Operators V im Unterraum der $|n_i\rangle$) ist einfache Störungstheorie anwemdbar:

$$|N_\alpha\rangle = |n_\alpha\rangle + \sum_{m\neq \ alle \ n_\beta} |m\rangle \frac{\langle m|V|n_\alpha\rangle}{E_n^0 - E_m^0} + ...$$

$$E_{n_\alpha} = E_n^0 + \langle n_\alpha|V|n_\alpha\rangle + \sum_{m\neq \ alle \ n_\beta} \frac{|\langle m|V|n_\alpha\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} + ...$$

10.4. Linearer Stark-Effekt und spontanes Dipolmoment

Seien zwei Energieniveaus mit $l \neq l'$ fast entartet

$$\begin{aligned} |s\rangle : &\qquad E_s = E_0 - \Delta \\ |p\rangle : &\qquad E_p = E_0 + \Delta \end{aligned}$$

Diagonalisierung des Störoperators $V = -D_z E = -ezE$ im Unterraum der $(|s\rangle, |p\rangle)$

Mit $\langle s|V|s\rangle = \langle p|V|p\rangle = 0$

$$\langle p, m|V|s\rangle = -\delta_{m,0} DE$$

$$D = e \ A_1^0 \ r^{(10)} \ \ = = \frac{e}{\sqrt{3}} \int\limits_0^\infty dr \ R_p(r) r R_s(r)$$

Eigenwertgleichung $(H - E_\pm)|n_\alpha\rangle = 0$

$$(H_0 + V + E_\pm)|n_\alpha\rangle = 0$$

(H_0 invariant gegen Transformation im Unterraum $(|s\rangle, |p\rangle)$)

$$\begin{pmatrix} E_0 - \Delta - E_\pm & -DE \\ -DE & E_0 + \Delta - E_\pm \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\alpha_s} \\ c_{\alpha_p} \end{pmatrix} = 0$$

$det(..) = 0$

$$\Rightarrow \qquad E_\pm = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + D^2E^2} = \begin{cases} E_0 \pm \Delta \pm \frac{1}{2} D^2 E^2 + ... & |DE| << \Delta \\ E_0 \pm \underbrace{DE}_{\text{linearer Starkeffekt}} \pm \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{DE} & \Delta << |DE| \end{cases}$$

(einfache Störungstheorie für $|DE| << \Delta$)

$E_\pm$: Energieeigenwerte in 1. Ordnung

$E_\pm$ nicht analytisch in E

$fig142.epsfig142.eps$

Eigenvektoren:

$$\begin{pmatrix} c_{\alpha_s} \\ c_{\alpha_p} \end{pmatrix} = const. \begin{pmatrix} DE \\ E_0 - \Delta - E_\alpha \end{pmatrix} \to const \begin{pmatrix} DE \\ \mp DE \end{pmatrix} \qquad (|DE| >> \Delta)$$

Falls $|s\rangle$ Grundzustand, ist der neue Grundzustand:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big[|s\rangle + |p, m = 0\rangle \Big]$$

Dipolmoment:

$$\langle 0|D_z|0\rangle = D$$

Dipolmoment unabhängig vom E-Feld $\Rightarrow$ <u>spontanes Dipolmoment</u>

10.5. Rayleigh-Ritz-Variationsverfahren

Verfahren stützt sich auf Minimaleigenschaften des Grundzustands

$$E_0 = \min_\psi \Big[\langle\psi|H|\psi\rangle,\ \langle\psi|\psi\rangle = 1 \Big]$$

Variationsansatz:

$$|\psi\rangle = |\psi_0(\lambda_1, \lambda_2, ...\lambda_n)\rangle$$

$\lambda_1 ... \lambda_n$ Variationsparameter

Auffinden des Minimums von $\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$ durch Lösung des Gleichungssystems

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = 0 \qquad , i = 1..n$$

(Bei Existenz von mehreren Lösungen vergleiche $\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$)

1. angeregter Zustand:

$$E_1 = \min_\psi \Big[\langle\psi_1|H|\psi_1\rangle,\ \langle\psi_1|\psi_1\rangle = 1, \langle\psi_1|\psi_0\rangle = 0 \Big]$$

usw.

Beispiel: Eigenwerte und Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators:

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

$$\psi(x, \lambda) = A \exp(-\frac{1}{2}\lambda x^2) \to 0 \ (x \to \pm\infty)$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \qquad \Rightarrow \qquad A = \Big(\frac{\lambda}{\pi}\Big)^{\frac{1}{4}}$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int \psi H \psi dx = \frac{1}{4}\Big(\frac{\hbar^2\lambda}{m} + \frac{m\omega^2}{\lambda}\Big)$$

Minimum bei $\lambda = \dfrac{m\omega}{\hbar}$

$$\Rightarrow \qquad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \qquad \psi_0(x) = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{\frac{1}{4}} \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

Stimmt mit exaktem Ergebnis überein!

1. angeregter Zustand $\langle\psi_1|\psi_0\rangle = 0 \qquad \Rightarrow$

$$\psi_1(x, \lambda) = Bx \exp(-\frac{1}{2}\lambda x^2) \qquad , B^2 = \frac{2\lambda^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}$$

$$\langle\psi_1|H|\psi_1\rangle = \frac{3}{4}\Big[\frac{\hbar^2\lambda}{m} + \frac{m\omega^2}{\lambda}\Big]$$

Minimum bei $\lambda = \dfrac{m\omega}{\hbar}$

$$\Rightarrow \qquad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_1 = \Big(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\Big)^{\frac{1}{2}} \Big(\frac{m\omega}{\hbar}\Big)^{\frac{3}{4}} x \exp\Big(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\Big)$$

11. Born'sche Entwicklung der Streuamplitude

11.1. Born'sche Näherung

Lippman-Schwinger Gleichung:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f^0(\vec{k}', \vec{k}) - \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2 - p^2 + i0} f^0(\vec{k}', \vec{p}) f(\vec{p}, \vec{k})$$

Fouriertransformierte des Potentials

$$\begin{aligned} f^0(\vec{k}', \vec{k}) &= -V(\vec{k}' - \vec{k}) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \; e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} V(\vec{r}) \end{aligned}$$

Entwicklung von f nach Potenzen des Potentials.

1.Iteration der Lippman-Schwinger Gleichung

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f^0(\vec{k}', \vec{k}) - \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2 - p^2 + i0} f^0(\vec{k}', \vec{p}) f^0(\vec{p}, \vec{k}) + ...$$

Born'sche Näherung: (1.Ordnung Störungstheorie)

$$f = f^0 = -V(\vec{k}' - \vec{k})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \qquad \sigma(\Omega) &= |f_{\vec{k}}(\Omega)|^2 \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r \; e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} V(\vec{r}) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle\psi_b|V|\psi_a\rangle|^2 \end{aligned}$$

Streuung von Zustand b (einfallende Welle) nach Zustand a (gestreute Welle)

Born'sche Näherung: Ersetze (auslaufende) Kugelwelle durch (einlaufende) ebene Welle:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle\psi_b|V|\phi_a\rangle$$

$$\psi_b = e^{i\vec{k}_b\vec{r}} \qquad \text{einlaufende Welle}$$

$$\phi_a = e^{ik_a r} + f\frac{e^{ikr}}{r} \to e^{ik_a r} \qquad \text{auslaufende Welle}$$

Gültigkeitsbedingung:

$$|\psi_b(\vec{r})| >> \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \; \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}\,'|}}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} V(\vec{r}\,') \phi_a(\vec{r}\,') \right|$$

$$\Rightarrow \qquad E_{kin} >> \overline{V} \qquad , \overline{V} \sim \int d^3r \; \frac{1}{r} V(\vec{r})$$

Zentralpotential:

$$|\vec{k}\,'| = |\vec{k}| = k, \qquad q = |\vec{k} - \vec{k}\,'| = 2k \sin\frac{\theta}{2}$$

$$\begin{aligned} \widetilde{V}(q) &= \int d^3r \; e^{-i\vec{q}\vec{r}} V(r) \\ &= 2\pi \int_{-1}^{-1} d\cos\theta \int_0^{\infty} dr \; r^2 e^{-iqr\cos\theta} V(r) \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dr \; r^2 V(r) \frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{-iqr} \\ &= \frac{4\pi}{q} \int dr \; rV(r) \sin qr \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad \sigma(\theta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\widetilde{V}(2k\sin\frac{\theta}{2})|^2$$

Streung von Elektronen an Ladungsverteilung: Kern mit Ladung Z_K, Elektronenhülle mit Ladung Z_H

$\Rightarrow$ Ionenladung $Z_I = Z_K + Z_H$ Ladungsverteilung $e\rho(r)$

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr = Z_I$$

Potential $V(r)$ folgt aus Poissongleichung

$$\triangle V(r) = -4\pi\rho(r)e^2$$

Fouriertransformation

$$\tilde{\rho}(\vec{q}) = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \rho(\vec{r})$$

$$q^2 \widetilde{V}(\vec{q}) = 4\pi e^2 \tilde{\rho}(\vec{q})$$

$\Rightarrow$ Streuamplitude in Bornscher Näherung:

$$f^0(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2} e^2 4\pi \frac{\tilde{\rho}(\vec{k}' - \vec{k})}{(\vec{k}' - \vec{k})^2}$$

$$|\vec{k}' - \vec{k}| = 2k\sin(\frac{\theta}{2})$$

$\Rightarrow$

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{e^2}{4E_k}\right)^2 \frac{|F_k(\theta)|^2}{\sin^4(\frac{\theta}{2})}$$

Formfaktor:

$$F_k(\theta) = \tilde{\rho}\left(2k\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

Fouriertransformation der Ladungsverteilung

$F_k(\theta) = Z \quad \Rightarrow \quad$ Rutherford Formel $\quad \Rightarrow$
Messung der Abweichung $\quad \Rightarrow \quad$ Ladungsverteilung

Kleinwinkelstreung: Entwicklung nach q

$$F_k(\theta) = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) \left[1 - \frac{1}{3!}(\vec{q}\cdot\vec{r})^2 + \cdots\right] \qquad \left(\int_{-1}^{1} \cos^2\theta d\cos\theta = \frac{1}{3}\right)$$

$$F_k(\theta) = Z_I - \frac{1}{6} Z_H \left(4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}\right) r_0^2 + \cdots$$

mittlerer quadratischer Radius der Hülle:

$$r_0^2 = \frac{4\pi \int dr r^2 \rho_H(r) r^2}{4\pi \int dr r^2 \rho_H} = \frac{4\pi \int dr r^4 \rho(r)}{Z_H}$$

Neutrales Atom: $\quad Z_I = 0$

$$\lim_{\theta\to 0} \sigma(\theta) = \left(\frac{r_0}{3a_0}\right)^2 Z_H^2 r_0^2, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$$

divergiert <u>nicht</u> wie in Ruth. Formel.

V. ZEITABHÄNGIGE PROBLEME

12. Bewegungsgleichungen

12.1. Unitäre Transformationen

Betrachten Übergang Impulsdarstellung – Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \langle x|a\rangle &= \int dp \langle x|p\rangle\langle p|a\rangle \\ &= S(x,p)\langle p|a\rangle \end{aligned}$$

$S(x,p)$ Matrix mit kontinuierlichen Indices
wegen

$$\begin{aligned} \langle p|a\rangle &= \int dx \langle p|a\rangle\langle x|a\rangle \\ &= S^{-1}(p,x)\langle x|a\rangle \\ S^{-1}(p,x) &= \langle p|x\rangle = (\langle x|p\rangle)^* = (S(x,p))^* \\ &= S^\dagger(p,x) \end{aligned}$$

$$S^\dagger S = 1$$

S ist unitär

Definition: Ein linearer Operator U heißt unitär, wenn gilt $U^{-1} = U^\dagger$

Satz 1: Transformationen $U|\psi\rangle$ der Zustandsvektoren bilden H auf sich ab und laßen das Skalarprodukt invariant.

Satz 2:

$a)$ Jedem hermiteschen Operator $A \quad (A = A^\dagger)$ läßt sich eineindeutig ein unitärer Operator U zuordnen durch die Cayley-Transformation:

$$U = (A - i1)(A + i1)^{-1}$$
$$A = i(1 + U)(1 - U)^{-1}$$

Beweis:

$$U^\dagger = (A - i1)^{-1}(A + i1)$$
$$U^\dagger U = (A - i1)^{-1}(A + i1)(A - i1)(A + i1)^{-1}$$
$$= 1$$

$b)$ Die komplexen Eigenwert von U liegen auf dem Einheitskreis

Beweis:

$$A = \sum_n a_n |n\rangle\langle n|$$
$$U = \sum_n \frac{(a_n - i)}{(a_n + i)} |n\rangle\langle n|$$
$$= \sum_n e^{-i\phi_n} |n\rangle\langle n|$$
$$A^2 = \sum_n a_n^2 |n\rangle\langle n|$$
$$f(A) = \sum_n f(a_n) |n\rangle\langle n|$$

Eigenvektoren von U orthogonal

Bemerkung: Sei A ein hermitescher Operator, so ist $U = e^{iA}$ unitär.

Beweis:

$$U^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-iA)^n = e^{-iA} \quad \Rightarrow \quad UU^\dagger = 1$$

Definition: Operator B heißt zu A **unitär äquivalent**, wenn $B = A_U = UAU^{-1}$

$\Rightarrow$ Einer physikalischen Größe können unendlich viele unitär äquivalente Operatoren zugeordnet werden. Unter unitären Transformationen $A \rightarrow UAU^{-1}$ und $|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle$ bleiben invariant:

1) Linearität, Hermtizität

2) Vertauschungsrelationen $[A, B] = C$

$$[A_U, B_U] = \left(UAU^{-1}UBU{-}1 - UBU^{-1}UAU{-}1\right)$$
$$= U[A, B]U^{-1} = UCU^{-1} = C_U$$

3) Eigenwertspektrum:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$
$$A_U|\psi_U\rangle = UAU^{-1}U|\psi\rangle = aU|\psi\rangle$$
$$= a|\psi_U\rangle$$

4) Algebraische Beziehungen $A + B, \ A \cdot B$

5) Matrixelemente

$$\langle \psi_m^U | A_U | \psi_n^U \rangle = \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle$$

Bemerkung: verschiedene Schreibweise für bestimmten Zustand zu gegebenem Zeitpunkt. Verschiedene Gestalt, Zustand gleich $\Rightarrow$ zeitliche Änderung durch unitäre Transformation. Verschiedene Beschreibungsmöglichkeiten $\Rightarrow$ verschiedene Bilder.

12.2. Zeitentwicklungsoperator

zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird beschrieben durch:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H_t \psi_t$$

mit dem zeitabhängigen hermiteschen Hamiltonoperator H_t

Zu je zwei Zeitpunkten t und t_0 gibt es einen unitären Operator $U(t, t_0)$ derart, daß für alle $\psi \in H$ gilt:

$$\psi_t = U(t, t_0) \psi_{t_0}$$

U heißt **Zeitentwicklungsoperator**

Der Zeitentwicklungsoperator genügt der Differentialgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H_t U(t, t_0), \qquad U(t_0, t_0) = 1$$

bzw. der äquivalenten Integralgleichung

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int\limits_{t_0}^{t} H_{t'} U(t', t_0) dt'$$

Satz 1:

$$U(t, t') \cdot U(t', t_0) = U(t, t_0)$$

speziell

$$U(t_0, t) = U^{-1}(t, t_0) = U^{\dagger}(t, t_0)$$

Satz 2: Gegeben sei ein unitärer Operator U_t Durch:

$$\psi_t \to \psi_t^U = U_t \psi_t \qquad A_t \to A_t^U = U_t A_t U_t^{-1}$$

ist eine eineindeutige Abbildung des Vektors und des Operators in H auf sich selbst gegeben, für die gilt

$$\langle \psi_t^U | A_t^U | \psi_t^U \rangle = \langle \psi_t | A | \psi_t \rangle$$

Die physikalischen Aussagen, die aus ψ_t, A_t bzw ψ_t^U, A_t^U folgen, sind identisch.

spezielle U_t

1) Schrödingerbild der QM

$$U_t = 1$$

Zeitliche Änderung des Zustandes wird dann durch Änderung des Zustandsvektors beschrieben

$$\psi_t^S = U(t,0)\psi_0$$

Falls H nicht explizit von der Zeit abhängt $\left(\frac{\partial H}{\partial t} = 0\right)$ $\Rightarrow$

$$U(t,0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)$$

Betrachten Operatoren, deren Eigenwertspektrum sich zeitlich nicht ändert. Dann kann die Darstellung gewählt werden mit $\frac{\partial}{\partial t}A^S = 0$

2) Heisenbergbild

$$U_t = U(0,t) = U^{-1}(t,0)$$

Wellenfunktionen sind zeitunabhängig:

$$\psi_t^H = U(0,t)\psi_t^S = \psi_0^S$$

Operatoren

$$A_t^H = U(0,t)A_t^S U(t,0)$$

Zeitabhängigkeit

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}A_t^H &= -(H_t U(t,0))^\dagger A_t^S U(t,0) + U(0,t)A_t^S(H_t U(t,0)) + U(0,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_t^S\right)U^{-1} \\ &= -UH_tU^{-1}UA_t^SU^{-1} + UA_t^SU^{-1}UH_tU^{-1} + i\hbar U\left(\frac{\partial}{\partial t}A_t^S\right)U^{-1} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{d}{dt}A_t^H = \frac{1}{i\hbar}\left[A_t^H, H_t^H\right] + \left(\frac{\partial}{\partial t}A_t^S\right)^H$$

Explizit zeitunabhängige Operatoren sind im Heisenbergbild zeitunabhängig, wenn
$[A,H] = 0 \;\Rightarrow\; A^S = A^H$. Dies gilt insbesondere für den Hamiltonoperator selbst.

3) Wechselwirkungsbild

$$\begin{aligned} H_t &= H_0 + V, \qquad H_0 \text{ zeitunabhängig} \\ U_t &= U_0(0,t) = \exp(iH_0t/\hbar) \\ \psi_t^I &= \exp(iH_0t/\hbar)\psi_t^S \end{aligned}$$

macht Zeitabhängigkeit von H_0 rückgängig.

$$V_t^I = e^{iH_0t/\hbar}V_t^S e^{-iH_0t/\hbar}$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t^I = V_t^I\psi_t^I$$

Beweis:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{iH_0t/\hbar}\psi_t^S\right) &= -H_0\psi_t^I + e^{iH_0t/\hbar}(H_0+V)\psi_t^S \\ &= V_t^I\psi_t^I \end{aligned}$$

$$\psi_t^I = \psi_{t_0}^I + \frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt' V_{t'}^I\psi_{t'}^I$$

Entwicklung nach Potenzen in V durch Iteration

$$\psi_t^I = \psi_{t_0}^I + \int\limits_{t_0}^{t} dt_1 V_{t_1}^I\psi_{t_0}^I + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} dt_1 \int\limits_{t_0}^{t_1} dt_2 V_{t_1}^I V_{t_2}^I \psi_{t_0}^I + \cdots$$

1.Ordnung: $\displaystyle\int\limits_{t_0}^{t} dt_1 V_{t_1}^I\psi_{t_0}^I$

2.Ordnung: $\displaystyle\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} dt_1 \int\limits_{t_0}^{t_1} dt_2 V_{t_1}^I V_{t_2}^I \psi_{t_0}^I$ $\qquad V_{t_1}^I V_{t_2}^I$ vertauschen nicht!

Integration erfolgt zeitgeordnet in der Reihenfolge $t_1 > t_2 > t_3 > \cdots$

Einführung eines Zeitordnungsoperators T

$$T(A_{t_1}, B_{t_2}) = \begin{cases} A_{t_1}\ B_{t_2}, & \text{für } t_1 > t_2; \\ B_{t_2}\ A_{t_1}, & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases}$$

$$\int\limits_{t_0}^{t} dt_1 \int\limits_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int\limits_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_{t_1}^I V_{t_2}^I \cdots V_{t_n}^I = \frac{1}{n!} T\left(\int\limits_{t_0}^{t} dt_1 \int\limits_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int\limits_{t_0}^{t} dt_n V_{t_1}^I V_{t_2}^I \cdots V_{t_n}^I\right)$$

Formale Lösung

$$\Rightarrow \qquad \psi_t^I = T\left[\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt_1 V_{t_1}^I\right)\right]\psi_{t_0}^I$$

13. Zeitabhängige Störungstheorie

13.1. Übergange 1.Ordnung. Die goldene Regel der QM

$$H_t = H_0 + V_t, \qquad H_0 \sum_n E_n^0 |n\rangle\langle n|$$

System für $t < 0$ im Zustand $|n\rangle$, d.h. $V_t = 0$ für $t < 0$

Problem: Wahrscheinlichkeit $P_{n\to m}(t)$, daß V_t einen Übergang des Systems von $|n\rangle$ nach $|m\rangle$ verursacht ($\langle n|m\rangle = 0$)

Wahrscheinlichkeitsamplitude:

$$\begin{aligned} \langle m|\psi_t^S\rangle &= \langle m|e^{-iH_0t/\hbar}\psi_t^I\rangle \\ &= e^{-iE_m^0 t/\hbar}\langle m|\left[|n\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int\limits_0^t dt_1\ e^{iH_0t/\hbar}V_{t_1}^S e^{-iH_0t/\hbar}|n\rangle\right] \\ &= e^{-iE_m^0 t/\hbar}\frac{1}{i\hbar}\int\limits_0^t dt\ e^{i\left(E_m^0 - E_n^0\right)t/\hbar}\langle m|V_{t_1}^S|n\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad P_{n\to m}(t) = \left|\langle m|\psi_t^S\rangle\right|^2$$
$$= \left|\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt_1\; e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar}\langle m|V_{t_1}^S|n\rangle\right|^2$$

Zeitlich konstante Störung

$$V_t = \begin{cases} 0 & t < 0; \\ V & t \geq 0 \end{cases}$$

$$P_{n\to m}(t) = \left|\frac{\sin((E_m^0 - E_n^0)t/2\hbar)}{(E_m^0 - E_n^0)/2}\right|^2 |\langle m|V|n\rangle|^2$$

$P_{n\to m} \neq 0$ für alle $|m\rangle$ mit $\langle m|V|n\rangle \neq 0$
P groß für Zustände mit $\left(E_m^0 - E_n^0\right) t < 2\pi\hbar \quad \Rightarrow \quad$ Energieerhaltung bis auf $\Delta E = \dfrac{2\pi\hbar}{t}$ (Unschärferelation)

Diskretes Spektrum:

$$E_m^0 = E_n^0 \qquad \Rightarrow \; P_{n\to m} \sim t^2 \qquad (P < 1)$$
$$E_m^0 \neq E_n^0 \qquad P_{n\to m} \text{ oszilliert in } t$$

kontinuierliches Spektrum:

mit

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(xt)}{x^2 t} = \pi\delta(x)$$

$$P_{n\to m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle m|V|n\rangle|^2 \delta(E_m^0 - E_n^0)$$
$$= \Gamma_{n\to m} t$$

Übergangsrate

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle m|V|n\rangle|^2 \delta(E_m^0 - E_n^0)$$

Goldene Regel der QM

Gültigkeit: $t \gg \dfrac{2\pi\hbar}{\Delta E}$

Übergang von Zuständen mit fast gleicher Energie

zeitlich periodische Störung

$$V_t = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ Ve^{-i\omega t} & t > 0 \end{cases}$$

mit

$$\int_0^t e^{i\omega_{mn}t} e^{-i\omega t}\langle m|V|n\rangle dt \qquad \left(\omega_{mn} = \frac{E_m^0 - E_n^0}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow \qquad P_{n\to m}(t) = \left| \frac{\sin((\omega_{mn}-\omega)\frac{t}{2})}{(\omega_{mn}-\omega)/2} \right|^2 \langle |m|V|n\rangle|^2$$

Übergangsrate:

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|V|n\rangle|^2 \delta(E_m^0 - E_n^0 - \hbar\omega)$$

gilt auch für diskretes Spektrum

13.2. Lineare Antwortfunktion

Betrachten Änderung des Erwartungswertes des zeitunabhängigen Operators A unter Einfluß der Störung

$$V_t = -Bb(t)$$

B hermitescher zeitunabhängiger Operator
$b(t)$ Stärke der Störung,
$\lim\limits_{t\to\infty} b(t) = 0.$
Für $t \to -\infty$: System im Zustand $|n\rangle$

zeitabhängige Änderung von $\langle A\rangle$: Antwort

$$\langle \delta A\rangle_t^n = \langle \psi_t^n|A|\psi_t^n\rangle - \langle n|A|n\rangle$$

$$\begin{aligned}|\psi_t^{nI}\rangle &= e^{iH_0t/\hbar}|\psi_t^{nS}\rangle \\ &= |n\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{iH_0t_1/\hbar}(-B)b(t_1)e^{-iE_n^0t_1/\hbar}|n\rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned}\langle \delta A\rangle_t^n &= \frac{-1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1\ \Theta(t-t_1)\langle n|Ae^{-i(H_0-E_n^0)(t-t_1)/\hbar}B - Be^{i(H_0-E_n^0)(t-t_1)/\hbar}A|n\rangle b(t_1) \\ \langle \delta A\rangle_t^n &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\ X_{A,B}^n(t-t_1)b(t_1)\end{aligned}$$

$$X_{A,B} \qquad \text{lineare Antwortfunktion}$$

$$\begin{aligned}X_{A,B}^n(t) &= i\hbar\Theta(t)\langle n|Ae^{-i(H_0-E_n^0)t/\hbar}B - Be^{i(H_0-E_n^0)t/\hbar}A|n\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle n|\left[A_t^I, B\right]|n\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\sum_m \left[\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle e^{-i\omega_{mn}t} - \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle e^{i\omega_{mn}t}\right]\end{aligned}$$

$$X(t-t_1) = 0 \qquad t < t_1 \qquad \textbf{Kausalität}$$

Fouriertransformation:

$$b(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\ b(\omega)e^{-i(\omega+i0)t}$$

$$\langle \delta A\rangle_t^n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\ b(\omega)e^{-i\omega t}\langle \delta A\rangle_\omega^n$$

$$\langle \delta A\rangle_\omega^n = X_{A,B}^n(\omega+i0)b(\omega)$$

$$X_{A,B}(\omega+i0) = \sum_m \left[\frac{\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle}{E_m^0 - E_n^0 - \hbar\omega - i0} - \frac{\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle}{E_n^0 - E_m^0 - \hbar\omega - i0}\right]$$

1) Diskretes Spektrum: Pole bei Übergangsfrequenz: $E_m^0 - E_n^0 = \pm\hbar\omega$

2) kontinuierliches Spektrum: Verzweigungsschnitt: $X(\omega+i0) = X'(\omega) \pm iX''(\omega)$

$$\frac{1}{x+i0} = \frac{P}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

$\frac{P}{x}$: Hauptwert, $i\pi\delta(x)$: halbes Residuum

Absorbtion:

$$X''(\omega) = \pi \sum_m \left[\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle \delta(\hbar\omega - E_m^0 + E_n^0) - \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \delta(\hbar\omega - E_m^0 + E_n^0) \right]$$

Messung der Antwortfunktion: Eigenfrequenzen, Matrixelemente $\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle$

13.3. Dynamische Polarisierbarkeit

Auf ein Elektron im Zentralfeld (Atom) wirke ein zeitlich veränderliches el.mag. Feld.

Störoperator in führender Ordnung:

$B = D_z$: Dipoloperator

$b(t) = E(t)$: elektr. Feld, $\vec{E} = (0,0,E)$

Eigenzustände von H_0: $|n_r l m\rangle$

$$\langle n_r' l' m'|D_z|n_r l m\rangle \neq 0 \qquad \text{für} \quad m' = m,\ l' = l+1$$

induziertes Dipolmoment:

$$\delta\langle D_z\rangle_\omega = X_{D_z D_z}(\omega+i0)E(\omega)$$

$X_{D_z D_z}$: Polarisierbarkeit

$$\alpha(\omega+i0) = X_{PP}(\omega+i0) = \frac{e^2}{m}\sum_{n'} \frac{f_{n'n}}{\omega_{n'n}^2 - (\omega+i0)^2}$$

Oszillatorstärken: $f_{n'n} = \frac{2m}{e^2\hbar^2}\omega_{n'n} \left|\langle n'|D_z|n\rangle\right|^2$

Übergangsfrequenzen: $\omega_{n'n} = \frac{\left(E_{n'}^0 - E_n^0\right)}{\hbar}$

VI Materie im elektromagnetischen Feld

14. Stationäre Probleme

14.1. Massenpunkt im elektromagnetischen Feld

Teilchen mit Masse m, Ladung e

Observable und Vertauschungsrelationen:

Ortsoperator $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ $\quad [x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0$

Impulsoperator $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ $\quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$

Drehimpulsoperator $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ $\quad [L_1, L_2] = i\hbar L_3$

Bewegung im elektromagnetischen Feld:

elektromagnetisches Potential $\vec{A}(\vec{r}, t),\ \phi(\vec{r}, t)$

elektromagnetische Felder $\vec{B} = \text{rot}\vec{A},\ \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}$

Eichtransformation $\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi;\ \phi' = \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi$

Bewegungsgleichungen

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\vec{v} = \vec{k}, \qquad \vec{k} = e\vec{E} + \frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\vec{r}) \times \vec{B}$$

Hamiltonsche Formulierung

$$\frac{\partial}{\partial t}x_i = \frac{\partial}{\partial p_i}H, \qquad \frac{\partial}{\partial t}p_i = -\frac{\partial}{\partial x_i}H$$

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\phi$$

Übergang zur Quantenmechanik

$\vec{p} \quad \rightarrow \quad$ Impulsoperator

$\vec{A}, \phi \quad$ klassische Variable, Funktionen von $\vec{r}$ (vertauschbar)

Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + e\phi + V$$

$$\vec{p}\cdot\vec{A} - \vec{A}\cdot\vec{p} = -i\hbar\ div\vec{A}$$

Coulomb-Eichung: $\quad div\vec{A} = 0 \quad$ kommutierend

Lorentz-Eichung: $\quad div\vec{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\phi = 0 \quad$ i.a. nicht kommutierend

Satz : Ist $\psi_t(\vec{r})$ Lösung der Schrödingergleichung zu den Potentialen $\vec{A}$, ϕ, so ist

$$\psi_t'(\vec{r}) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi_t(\vec{r})}\psi_t(\vec{r}), \qquad \chi_t(\vec{r}) \text{ } reell$$

Lösung zu den mit χ umgeeichten Potentialen.
$U_\chi = e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi_t(\vec{r})}$ heißt Eichtransformation des Zustands ψ.

Beweis:

$$i\hbar\partial_t\psi_t' = U_\chi(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t - \frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi_t\psi_t)$$

$$\vec{A} \to \vec{A} + \vec{\bigtriangledown}\chi, \qquad \phi \to \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi$$

$$H\psi_t' = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\bigtriangledown}\chi)^2\psi_t' + e(\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi)\psi_t'$$

$$\vec{p}U_\chi = -i\hbar\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c} \ \ \vec{\bigtriangledown}\chi \ \ U_\chi + U_\chi\vec{p}$$

$$H\psi_t' = U_\chi[\frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\phi - \frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi_t]\psi_t \qquad q.e.d.$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_t'|A|\psi_t'\rangle &= \langle\psi_t|U_\chi^{-1}AU_\chi|\psi_t\rangle \\ &\stackrel{!}{=} \langle\psi_t|A|\psi_t\rangle\end{aligned}$$

Postulat: Beobachtbar sind nur Observable, die unter Eichtransformation invariant sind.

Beispiel:

Kanonischer Impuls: nicht beobachtbar.

$$\vec{p}_k = -i\hbar\vec{\bigtriangledown}, \qquad U_\chi^{-1}\vec{p}U_\chi = \vec{p}_k + \frac{e}{c}\vec{\bigtriangledown}\chi$$

Mechanischer Impuls: beobachtbar.

$$\vec{p}_m = \vec{p}_k - \frac{e}{c}\vec{A} = m\frac{\partial}{\partial t}\vec{r}$$

14.2. Bewegung im homogenen Magnetfeld

$\vec{B} = (0, 0, B), \qquad \vec{E} = 0$

Landaueichung $\qquad \vec{A} = (-By, 0, 0), \qquad div\vec{A} = 0$

$$H = \frac{1}{2m}(p_x + \frac{e}{c}By)^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

Freie Bewegung in z-Richtung

Ansatz

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_z z}e^{ik_x x}\chi(y)$$

$$H\psi = \Big[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} + \frac{1}{2m}(\hbar k_x + \frac{e}{c}B_y)^2\Big]\psi$$

Eindimensionaler verschobener harmonischer Oszillator

$$y_0 = -\frac{c\hbar k_x}{eB}$$

Frequenz $2\omega_L$

Lamorfrequenz

$$\omega_L = \frac{|e|B}{2mc}, \qquad \hbar\omega_L = \mu_B B$$

Bohrsches Magneton

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} \qquad \text{magnetisches Moment}$$

$$\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - 2m\omega_L^2 (y-y_0)^2]\chi(y) = 0$$

Energieeigenwerte

$$E = (2n+1)\hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \qquad n = 0, 1, 2..$$

Landau-Niveaus

$$\psi_{nk_zk_x}(x,y,z) = ce^{ik_z z} e^{ik_x x} e^{-\frac{1}{2}(y-y_0)^2/r_B^2} \qquad \underbrace{H_n\Big(\frac{y-y_0}{r_B}\Big)}_{\text{Hermitesches Polynom}}$$

$$r_B = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}}$$

14.3. Aharonow-Bohm-Effekt

$\psi(\vec{r}, t)$ Wellenfunktion eines Teilchens für

$$\vec{A} = 0, \qquad \phi = 0$$

Bei Einschalten eines wirbelfreien Vektorpotentials ($\vec{B} = 0$)

$$\vec{A} = -\vec{\nabla}\chi, \qquad \vec{B} = \text{rot}\vec{A} = 0$$

ändert sich nur die Phase der Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow e^{\frac{e}{i\hbar c}\chi(\vec{r})}\psi(\vec{r}, t)$$

Phasenänderung entlang Pfad 1/2

$$\begin{aligned} \phi_{1/2} &= \frac{e}{\hbar c}(\chi_Q - \chi_S) \\ &= \frac{e}{\hbar c}\int_{Q,1/2}^{S} \vec{\nabla}\chi \; dr \\ &= \frac{e}{\hbar c}\int_{Q,1/2}^{S} \vec{A} \; dr \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar c}{e}(\phi_2 - \phi_1) &= -\int_2 \vec{A}\; dr + \int_1 \vec{A}\; dr \\ &= \oint \vec{A}\; dr \\ &= \int_{F,12} \vec{B}\; df \\ &\neq 0 \end{aligned}$$

Meßmethode für $\vec{A}$

15. Zeitabhängige elektromagnetische Felder

15.1. Elementare Theorie der WW eines qm. Systems mit el.-magn. Strahlung

Wechselwirkungsoperator

$$V_t = -\frac{e}{mc}\vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2$$

$$div\vec{A} = 0$$

Entwicklung nach $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$

1. Ordnung $V_t = -\frac{e}{mc}\vec{A}\cdot\vec{p}$

$$\vec{A} = A_0\hat{n}\cos(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$$

A_0 bestimmt Dichte $\frac{N}{V}$ der Photonen mit $\omega,\ \vec{k},\ \hat{n}$

$$\frac{N}{V}\hbar\omega = \frac{E^2}{4\pi} = \frac{A_0^2\omega^2}{4\pi c^2}\ \overline{\sin^2(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = \frac{A_0^2\omega^2}{8\pi c^2}$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} = A_0\hat{n}\frac{\omega}{c}\sin(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$$

$$V_t = V_\omega e^{i\omega t} + V_\omega^+ e^{-i\omega t}$$

$$V_\omega = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}(\hat{n}\vec{p})$$

Übergangsrate für Emmision eines Photons mit $\hbar\omega$

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\Big|\langle n|V_\omega|m\rangle\Big|^2\delta(E_n - E_m - \hbar\omega)$$

Matrixelement

$$\langle n|V_\omega|m\rangle = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}\langle n|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}(\hat{n}\vec{p})|m\rangle$$

Im Atom: Ausdehnung der Wellenfunktion $r_A \sim 10^{-5}cm$

Sichtbares Licht:

$$kr_A \simeq \frac{2\pi r_A}{\lambda} \sim 10^{-3}$$

$$\Rightarrow \qquad e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 1 - i\vec{k}\cdot\vec{r} + ...$$

Dipolnäherung

$$\langle n|V_\omega|m\rangle \simeq -\frac{e}{m}\Big[\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}\Big]^{1/2}\langle n|\hat{n}\cdot\vec{p}|m\rangle$$

Wegen

$$\frac{\vec{p}}{m} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{r}, H]$$

$$\langle n|\vec{p}|m\rangle = -i\omega_{mn}\Big[\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}\Big]^{\frac{1}{2}}\hat{n}\cdot\vec{D}_{nm}$$

elektrisches Dipolmoment ($n \to m$)

$$\vec{D}_{nm} = e\langle n|\vec{r}|m\rangle$$

Berechne Übergangsrate für Emission eines Quants der Energie $\hbar\omega$ und Polarisation $\hat{n}$ im Raumwinkelelement $d\Omega$

$$\epsilon = \hbar\omega, \qquad p = \frac{\epsilon}{c}$$

Phasenraumelement im V-Raum:

$$d\Gamma_{n\to m}(\omega) = \frac{V\omega^2}{c^3(2\pi)^3\hbar}d\Omega\frac{2\pi}{\hbar}\Big|\langle n|V_\omega|m\rangle\Big|^2\delta(E_n - E_m - \hbar\omega)$$

Phasenraumelement im Impulsraum:

$$\frac{V\omega^2}{c^3(2\pi)^3\hbar} = \frac{Vp^2dpd\Omega}{(2\pi\hbar)^2}$$ (Dichte der Endzustände) $\cdot 2$ (Feldzustände der Photonen)

$$d\Gamma_{n\to m} = \int d(\hbar\omega)\ (d\Gamma_{n\to m}(\omega))$$
$$= \frac{N\omega_{mn}^3}{2\pi c^3\hbar}|\hat{n}\vec{D}_{nm}|d\Omega$$

Gesamtwahrscheinlichkeit

$$\Gamma_{nm} = \int_\Omega d\Gamma_{nm} = \frac{4N\omega^3}{3\hbar c^3}|D_{nm}|^2$$

$\Gamma_{n\to m} \sim N$: induzierte Emmision (proportional Zahl der Photonen im

Anfangszustand)

(Quantifiserung des elektromagnetischen Feldes:)

$N \to N+1$: spontane Emmision - Nullpunktsschwingung des elektromagnetischen Feldes

Polarisation der Strahlung und Auswahlregel:

(i) $\hat{n}||\vec{D},\ \langle n|D_z|n'\rangle \neq 0,\ m = m',\ l' = l \pm 1$

lineare Polarisation im Zentralfeld

(ii) $\hat{n} \perp D,\ \hat{n} = \hat{x} \pm i\hat{y}$ (zirkular polarisiert)

$$\langle n|x + iy|n'\rangle \sim \delta_{m',m\pm1}\delta_{l',l\pm1}$$

$$\Delta m = \pm 1$$

$$\Delta l = \pm 1$$

Höhere Multipolelemente

$$\langle n|\vec{p}\cdot\hat{n}\ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}|n'\rangle = \langle n|\vec{p}\cdot\hat{n}(1 - i\vec{k}\cdot\vec{r} + ..)|n\rangle$$

$$\hat{n}||y, \qquad \vec{k}||x$$

$$\langle n|(\vec{p}\cdot\hat{n})(\vec{k}\cdot\vec{r})|n'\rangle = -i\hbar k\langle n|x\frac{\partial}{\partial y}|n'\rangle$$
$$= -\frac{i}{2}\hbar k(\langle n|\underbrace{x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x}}_{\text{elektr. Quadrupoloperator}}|n'\rangle + \langle n|x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}|n'\rangle)$$

elektromagnetische Quadrupolstrahlung E2:

$$\Delta l = 0, \pm 2, \qquad \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$$

magnetische Dipolstrahlung M1:

$$\Delta l = 0, \qquad \Delta m = 0, \pm 1$$

<u>Auswahlregel</u>: $\vec{r} = r \cdot \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$

$$\hat{n}\cdot\vec{r} = r(n_x \sin\theta\cos\phi + n_y \sin\theta\sin\phi + n_z\cos\theta)$$

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}Y_{1,0}(\theta,\phi) = \cos\theta$$

$$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) = \mp\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}\cdot\vec{r} = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(\frac{n_x + in_y}{\sqrt{2}}Y_{1,-1} + \frac{-n_x + in_y}{\sqrt{2}}Y_{1,1} + n_z Y_{1,0}\right)$$

Winkelintegral

$$\int d\Omega\ Y^*_{l,m}\ Y_{1,0\,\pm1}(\theta,\phi)\ Y_{l\,',m\,'}$$

$i)$ $n_x = n_y = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{m = m\,', l\,' = l + 1}$

linear polarisiert im Zentralfeld

ii) $n_z = 0$ zirkular polarisiert $\Delta m = \pm 1, \Delta l = \pm 1$
Ausrichtung in Anfangszustand in z–Richtung

Betrachten Prozeß

$$\nu + a \to \nu' + b$$

ν: Photon, a: Atom

$a = b$ Rayleighstreuung (elastisch)

$a \neq b$ Ramanstreuung

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \\
&= \sum_n |n\rangle\langle n|\psi^S(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi^I(t)\rangle e^{-iE_0 t/\hbar} \\
i\hbar \frac{da_m(t)}{t} &= \sum_{n\neq m} \langle m|V_t|n\rangle a_n(t) e^{i\omega_{nm} t} \\
V_t &= V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}
\end{aligned}$$

$$\langle m|V_t|n\rangle = \begin{cases} V^\omega_{mn} e^{i\omega t} & \text{Emission} \\ V^{\dagger\omega}_{mn} e^{-i\omega t} & \text{Absorbtion} \end{cases}$$

<u>Dipolnäherung</u>

$$V^\omega_{mn} = i\omega_{mn} \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{n} \cdot \vec{D}_{mn}\right)$$

Streuung als Zweistufenprozeß

$$\begin{aligned}
a + \nu \to c \to b + \nu' &\qquad \text{erst Absorbtion} \\
a + \nu \to d + \nu + \nu' \to b + \nu' &\qquad \text{erst Emission}
\end{aligned}$$

1. Ordnung Störungstheorie für jeden Elementarprozeß

1.Stufe

$$i\hbar\frac{da_c}{dt} = V_{ca}^{\dagger\omega} e^{i(\omega_{ca}-\omega)t}$$
$$i\hbar\frac{da_d}{dt} = V_{da}^{\omega'} e^{i(\omega_{da}+\omega')t}$$
$$a_c(t) = V_{ca}^{\omega\dagger}\frac{e^{i(\omega_{ca}-\omega)t}}{\hbar(\omega-\omega_{ca})} \qquad (*)$$
$$a_d(t) = V_{da}^{\omega'}\frac{e^{i(\omega_{da}-\omega')t}}{\hbar(\omega'+\omega_{da})} \qquad (**)$$

2.Stufe

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{da_b}{dt} &= \sum_{c\neq b} V_{bc}^{\omega'} a_c(t) e^{i(\omega_{bc}+\omega')t} \\ &\quad + \sum_{d\neq b} V_{bd}^{\dagger\omega} a_d(t) e^{i(\omega_{db}-\omega)t} \\ &\overset{(*,**)}{=} M_{ba} e^{i(E_f-E_i)t/\hbar} \end{aligned} \qquad \begin{aligned} E_f &= E_b + \hbar\omega' \\ E_i &= E_a + \hbar\omega \end{aligned}$$

Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{a\nu\to b\nu'} = |a_b(t)|^2 = 4|M_{ba}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{(E_f-E_i)t}{2\hbar}\right)}{(E_f-E_i)^2}$$

Für $t \gg \dfrac{\hbar}{E_f - E_i}$ ist $P \sim t$

Übergangsrate

$$\Gamma_{a\nu\to b\nu'} = \frac{2\pi}{\hbar}|M_{ba}|^2\delta(E_f - E_i)$$

Matrixelement M_{ba}

$$M_{ba} = -2\pi e^2(\omega\omega')^{-\frac{1}{2}}\sum_{c\neq b}\omega_{bc}\omega_{ca}\left\{\frac{(\hat{n}'\cdot\vec{r}_{bc})(\hat{n}\cdot\vec{r}_{ca})}{\omega-\omega_{ca}} - \frac{(\hat{n}\cdot\vec{r}_{bc})(\hat{n}'\cdot\vec{r}_{ca})}{\omega'+\omega_{ca}}\right\}$$

Differentieller Wirkungsquerschnitt für Streung von Photonen mit Energie $\hbar\omega$ in $d\Omega$ und Endenergie $\hbar\omega' = E_a - E_b + \hbar\omega$

Einfallender Fluß: Geschwindigkeit c

Dichte der Endzustände (Energie $\hbar\omega'$): $d^3p' = \dfrac{\omega'^2}{(2\pi c)^3\hbar}d\Omega$

$$\sigma_{\nu a\to\nu' b}(\Omega) = \frac{\omega\omega'^3}{c^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\left|\sum_{c\neq b}\left\{\frac{(\hat{n}'\cdot\vec{r}_{bc})(\hat{n}\cdot\vec{r}_{ca})}{\omega-\omega_{ca}} - \frac{(\hat{n}\cdot\vec{r}_{bc})(\hat{n}'\cdot\vec{r}_{ca})}{\omega'+\omega_{ca}}\right\}\right|^2$$

Ramanstreung:	Stokesstreuung	$\omega' < \omega$
	Antistokes Streuung	$\omega' > \omega$
Rayleighstreuung:	$a = b,\ \omega' = \omega,\ \hat{n} = \hat{z}$	

isotropes System: $(\hat{n}\cdot'\vec{r}_{ac})(\hat{n}\cdot\vec{r}_{ca}) = (\hat{n}'\cdot\hat{n})|Z_{ca}|^2$

$$\sigma_{\text{Ray}}(\Omega) = \frac{\omega^4}{c^4}\left|\sum_{c\neq a}\frac{2e^2\omega_{ca}|Z_{ca}|^2}{\hbar(\omega^2 - w_{ca}^2)}\right|^2(\hat{n}'\cdot\hat{n})^2$$

$$(\hat{n}'\cdot\hat{n}) = \sin\theta$$

klass. Streuquerschnitt:

$$\sigma_{\text{Ray}}^{\text{kl}}(\Omega) = \frac{\omega^4}{c^4}\alpha^2\sin^2\theta$$

α : Polarisierbarkeit

$$\alpha = \sum_{c \neq a} \frac{2e^2 \omega_{ca} |Z_{ca}|^2}{\hbar(\omega_{ca}^2 - \omega^2)}$$

Divergiert für $\omega = \omega_{ca}$. Abhilfe: endliche Lebensdauer von $|c\rangle$

$$\omega_{ca} \to \omega_{ca} + i\frac{\gamma_{ca}}{2}$$

$$\Rightarrow \quad |a_c(t)|^2 = e^{-\gamma_{ca} t}$$

$$a_c(t) \sim e^{-\frac{\gamma_{ca}}{2} t} e^{i\omega_{ca} t}$$

Streuresonanzen bei $\omega \approx \omega_{ca}$, Breite γ_{ca}

$$\sigma_{\max}^2 = \frac{4\omega_{ca}^4}{c^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{|Z_{ca}|^2}{\gamma_{ca}^2} \sin^2\theta$$

16. Der Spin

16.1. Algebraische Behandlung des Drehimpulses

Drehimpulseigenwerte

Betrachten Hilbertraum H
geg.: 3 hermitesche Operatoren $J_1,\ J_2,\ J_3$

$$[J_1, J_2] = i\hbar J_3 \qquad \text{und zyklisch}$$

Mögliche Eigenwerte

Def.:
$$\begin{aligned} J_0 &= J_3 \\ J_\pm &= J_1 \pm iJ_2 = J_\mp^\dagger \\ \vec{J}^2 &= J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = \frac{1}{2}(J_+, J_- + J_-J_+) + J_0^2 \\ &= J_+J_- + J_0^2 - \frac{1}{2}[J_+, J_-] = J_+J_- + J_0^2 - \hbar J_0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \quad [\vec{J}^2, J_i] = 0, \qquad \vec{J}^2, J_0$ simultan meßbar

$$[J_0, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$$

Theorem:

a) $\vec{J}^2$ hat die Eigenwerte $\hbar^2 j(j+1)$, wobei
$j = 0, 1, 2\cdots$ ganzzahlig oder
$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ halbzahlig.
j heißt Drehimpuls- oder Spinquantenzahl.

b) Der Eigenraum U_j von J^2 wird aufgespannt von den $(2j+1)$ gemeinsamen Eigenvektoren von J^2 und J_0 $|jm\rangle$, wobei $J_o|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$ gilt. $m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j$ heißt Magnetquantenzahl

c) $J_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle$

Beweis:

a) Sei $|v\rangle$ gemeinsamer Eigenvektor zu $\vec{J}^2, J_0$

$$\begin{aligned} \langle v|v\rangle &= 0 \\ J^2|v\rangle &= \hbar^2\lambda|v\rangle \\ J_0|v\rangle &= \hbar\mu|v\rangle \end{aligned}$$

und sei

$$J_\pm|v\rangle = |v_\pm\rangle$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \langle v_\pm|v_\pm\rangle &= \langle v|J_\mp J_\pm|v\rangle \\ &= \langle v|J^2 - J_0^2 \mp \hbar J_0|v\rangle \\ &= \hbar^2\lambda - \hbar^2\mu^2 \mp \hbar\mu \\ &= \hbar[\lambda - \mu(\mu\pm 1)] \geq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_0|v_\pm\rangle &= J_0J_\pm|v\rangle = \hbar(\mu\pm 1)|v_\pm\rangle \\ J^2|v_\pm\rangle &= J^2J_\pm|v\rangle = J_\pm J^2|v\rangle \\ &= \hbar^2\lambda|v_\pm\rangle \end{aligned}$$

$\Rightarrow \quad \dfrac{1}{\hbar}\left(\lambda - \mu(\mu\pm 1)\right)^{\frac{-1}{2}} J_\pm|v\rangle$ ist normierter Eigenzustand von $\vec{J}^2$ und J_0 mit Eigenwerten $\hbar^2\lambda,\ \hbar(\mu\pm 1)$

b)

$$\begin{aligned}\hbar^2\lambda &= \langle v|J^2|v\rangle \\ &= \langle v|J_0^2|v\rangle + \underbrace{\langle v|J_1^2|v\rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle v|J_2^2|v\rangle}_{\geq 0} \\ &\geq \langle v|J_0^2|v\rangle = \hbar^2\mu\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \lambda \geq \mu^2$$

Schreibe $\lambda = j(j+1)$ $\Rightarrow$ größtmögliches μ zu gegebenen $\lambda = j(j+1)$ ist

$$\mu_{\max} = j$$

kleinstmögliches μ

$$\mu_{\min} = -j$$

c)

$|v\rangle$ sei Eigenvektor zu $\lambda = j(j+1)$ und $\mu = j$

N-maliges Anwenden von J_- muß kleinsten Eigenwert $\mu = -j$ ergeben,

d.h. $j - N = -j \quad \Rightarrow \quad j = N/2$

Bahndrehimpuls	l	ganzzahlig
Spin	s	halbzahlig oder ganzzahlig

<u>Spin $\frac{1}{2}$</u>

$$j = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad m = \pm\frac{1}{2}$$

Spinoperator $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$, $\quad [S_x, S_y] = i\hbar S_z$

Wahl der Quantisierungsachse: z.B. $\hat{z}$

$$\begin{aligned}\text{Eigenvektoren} \qquad S_z|\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \\ S_z|\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \\ \vec{S}^2|\uparrow/\downarrow\rangle &= \hbar^2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)|\uparrow/\downarrow\rangle \\ &= \hbar^2\frac{3}{4}|\uparrow/\downarrow\rangle\end{aligned}$$

$$\langle\sigma|\sigma'\rangle = \delta_{\sigma,\sigma'} \qquad |\sigma\rangle = |\uparrow/\downarrow\rangle$$

Jeder Zustand $|\psi\rangle$ des Spins kann nach $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ entwickelt werden.

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|\psi\rangle + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\psi\rangle$$

Matrixschreibweise: Zustand als Spinor $\begin{pmatrix}\langle\uparrow|\psi\rangle \\ \langle\downarrow|\psi\rangle\end{pmatrix}$

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

<u>Darstellung der Spinoperatoren:</u>

$$\begin{pmatrix}\langle\uparrow|S_z|\uparrow\rangle & \langle\uparrow S_z|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_z|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_Z|\downarrow\rangle\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

Aus Vertauschungsrelationen folgt:

$$\begin{aligned}\langle\uparrow|S_xS_z - S_zS_x|\uparrow\rangle &= -i\hbar\langle\uparrow|S_y|\uparrow\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}\langle\uparrow|S_x - S_x|\uparrow\rangle = 0 \\ \langle\uparrow|S_xS_z - S_zS_x|\downarrow\rangle &= -i\hbar\langle\uparrow|S_y|\backslash do\rangle \\ &= -i\hbar\langle\uparrow|S_x|\downarrow\rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & \delta\\ \delta^* & 0\end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\delta\\ i\delta^* & 0\end{pmatrix}$$

mit $|\delta| = 1$, Konvention $\delta = 1$

Darstellung der Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren durch die <u>Pauli Matrizen</u> $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$

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

Eigenschaften der Paulimatrizen:

(i) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E \quad \rightarrow$ Eigenwerte ± 1

(ii) $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ und zyklisch

(iii) Antikommutatorrelation.: $\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$

(iv) $(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})\left(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right) = \vec{a}\cdot\vec{b}\; E + i\left(a \times \vec{b}\right)\cdot\sigma$

(v) Jede komplexe 2×2 Matrix kann in E und σ_i entwickelt werden:$A_{\mu\nu} = \alpha\delta_{\mu\nu} + \vec{\beta}\cdot\vec{\sigma}$

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

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

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_- = S_x - iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad S_+\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S_-\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad S_-\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

16.2. Addition von Drehimpulsen

Betrachten zwei Spin $\frac{1}{2}$-Systeme $\vec{S}_1$ und $\vec{S}_2$

$$|\uparrow\uparrow\rangle,\ |\uparrow\downarrow\rangle,\ |\downarrow\uparrow\rangle,\ |\downarrow\downarrow\rangle$$

Gesamtspin

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

$$[S_{1x}, S_{2y}] = 0, \qquad [S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

Es gilt

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

$$S_z|\downarrow\downarrow\rangle = -\hbar|\downarrow\downarrow\rangle$$

$$S_z|\uparrow\downarrow\rangle = S_z|\downarrow\uparrow\rangle = 0$$

$\Rightarrow$ Eigenwerte von S_z : $0, \pm 1$

$S = 1$ Triplett $S_z = -1, 0, +1$

$S = 0$ Singulett $S_z = 0$

$$\vec{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar^2 S(S+1)|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$\begin{aligned}\vec{S}|\uparrow\uparrow\rangle &= (\vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{10}S_{20} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= (\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2})|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \hbar^2 S(S+1)|\uparrow\uparrow\rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad S = 1$$

$|\uparrow\uparrow\rangle$ ist Eigenvektor zu $\vec{S}^2$ mit $S = 1,\ m = 1 \quad \Rightarrow |S = 1, m = 1\rangle$
Analog
$|\downarrow\downarrow\rangle$ ist Eigenvektor zu $\vec{S}^2$ mit $S = 1,\ m = -1 \quad \Rightarrow |S = 1, m = -1\rangle$

$$|S = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Triplettzustände $S = 1$

$$|\uparrow\uparrow\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

Singulettzustände $S = 0, m = 0$

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

<u>Zwei beliebige Drehimpulse $\vec{J}_1, \vec{J}_2$</u>

$$\vec{J}_{12}|j_{12}, m_{12}\rangle = \hbar^2 j_{12}(j_{12}+1)|j_{12}, m_{12}\rangle$$

$$J_{12}^0|j_{12}, m_{12}\rangle = \hbar m_{12}|j_{12}, m_{12}\rangle$$

z.B. Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

Gesucht Eigenzustände von $\vec{J}^2, J_0, \vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Wegen

$$[\vec{j}, \vec{j}_{1,2}] = 0$$

$$\vec{J}_{12}^2|j_1 j_2 jm\rangle = \hbar^2 j_{12}(j_{12}+1)|j_1 j_2 jm\rangle$$

$$\vec{J}^2|j_1 j_2 jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j_1 j_2 jm\rangle$$

$$J_0|j_1 j_2 jm\rangle = \hbar m|j_1 j_2 jm\rangle$$

$$|j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{j_1' j_2' m_1' m_2'} |j_1' j_2' m_1' m_2'\rangle\langle j_1' j_2' m_1' m_2'|j_1 j_2 jm\rangle$$

Es gilt

$$\langle j1' j_2' m1' m2'|j_1 j_2 jm\rangle \neq 0$$

wenn $j_1' = j_1,\ j_2' = j_2,\ m_1' + m_2' = m$

$$\Rightarrow \qquad |j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1 + m_2 = m}} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|j_1 j_2 jm\rangle$$

(Clebsch-Gordon-Koeffizienten)

16.3. Spin- und Bahnfreiheitsgrade

Betrachte Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$
Zustand spezifiziert durch Wahrscheinlichkeitsamplitude, das Teilchen am Ort

$\vec{r}$ mit Spinprojektion $\uparrow$ ($\downarrow$) zu finden

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$\psi_\uparrow(\vec{r}) = \langle \vec{r}, \uparrow | \psi \rangle$$

$$\psi_\downarrow(\vec{r}) = \langle \vec{r}, \downarrow | \psi \rangle$$

Totale Wahrscheinlichkeit, das Teilchens am Punkt $\vec{r}$ zu finden

$$|\psi_\uparrow(\vec{r})|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r})|^2$$

Normierung

$$\int d^3r \; (|\psi_\uparrow(\vec{r})|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r})|^2) = 1$$

17. Der Spin im Magnetfeld

17.1. Das magnetische Moment des Spins

Klassisches Teilchen der Ladung e, Masse m und Bahndrehimpuls $\vec{L}$ hat magnetisches Moment

$$\mu_{Bahn} = \frac{e}{2mc}\vec{L}$$

Gilt auch quantenmechanisch, aber Komponenten von $\vec{\mu}$ nicht simultan meßbar
Magnetisches Moment eines Eigendrehimpulses (Spins) hat die Größe

$$\vec{\mu}_{Spin} = g\frac{e}{2mc}\vec{S}$$

g heißt Lande'scher g-Faktor
Elektron $\quad g = 2$

Proton $\quad g = 5,59$
Neutron $\quad g = -3,83$
Totales magnetisches Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_{tot} = \frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S})$$

Klassische Energie eines magnetischen Moments in Magnetfeld $\vec{B}$: $\quad -\vec{\mu}\vec{B}$
Quantenmechanisch:

$$H_{Spin} = -\vec{\mu}_{Spin}\vec{B}(\vec{r}, t)$$

17.2. Zeeman-Effekt des H-Atoms

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 - \frac{e}{mc}\vec{S}\vec{B} - \frac{e}{r^2}$$

Statisches Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$, Eichung $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \vec{\mu}_{tot}\vec{B} + 0(B^2)$$

$$\vec{\mu}_{tot} = \frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S})$$

Energieverschiebung in erster Ordnung:

$$\begin{aligned} \Delta E_{nlm\sigma} &= \langle nlm\sigma| - \vec{\mu}_{tot}\vec{B}|nlm\sigma\rangle \\ &= \mu_B B(m + 2\sigma) \qquad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} \end{aligned}$$

Aufspaltung eines p-Zustands ($l = 1$)

wird beobachtet in stationären Feldern (> 1 kGauss)

VIII. RELATIVISTISCHE QUANTENTHEORIE

Hohe Frequenzen $\Rightarrow$ relativistische Wellengleichung
Überprüfen Begriffe der nichtrelativistischen Quantenmechanik auf Brauchbarkeit.

Nichrelativistische Quantenmechanik: man kann kein Teilchen beliebig genau in Raum und Zeit lokalisieren $\Rightarrow$ Impuls-, Energieunschärfe.

Relativistische Quantenmechanik: man kann ein Teilchen nicht in einem beliebig kleinen Raumbereich lokalisieren:

$$\Delta x \; < \; \frac{\hbar}{4mc} \; \Rightarrow \; \frac{p^2}{2m} \; > \; 2mc^2$$

$\Rightarrow$ Bildung von Teilchenpaaren
$\Rightarrow$ Vorstellung von unveränderlicher Teilchenzahl verliert ihren Sinn,
z.B. bildet ein schnelles Elektron im Umfeld Photonen,
ein Photon bildet Elektron-Positron-Paare usw.
Lawinenartiges Anwachsen der Teilchenzahl $\Rightarrow$
Teilchenschauer in kosmischer Strahlung.

$\Rightarrow$ wir benötigen eine Theorie, die in relativistischer Art und Weise Erzeugung oder Vernichtung von Teilchen beschreibt
= Quantenelektrodynamik.

Hier: (erste Etappe)
relativistische Wellengleichung,

aber konstante Teilchenzahl.
p relativistisch, aber $p^2/2m < 2mc^2$.

18. Relativistische Teilchen mit Spin 0. Klein-Gordon-Gleichung

18.1. Klassisch relativistische Dynamik

Betrachten Raum-Zeit-Punkt:
$x^0 = ct$, $(x^1, x^2, x^3) = \vec{x}$
Lichtkegel: $v \leq c$
Bewegung nur innerhalb des Lichtkegels möglich.

Lichtkegel: Raumzeitpunkte, in denen ein im Weltpunkt 0 ausgesandter Lichtstrahl eintrifft.

Weltlinie von Teilchen mit $v < c$ nur innerhalb des Lichkegels möglich.
Relativistische Kausalität

Norm = relativistischer Abstand eines Viererverktors:
$|x|^2 = (x^0)^2 - \sum_{i=1}^3 (x^i)^2$.
Abstand definiert durch metrischen Tensor:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

kontravariante Vektoren: a^μ, z.B. x^μ
kovariante Vektoren: a_μ, z.B. $\partial/\partial x^\mu$.
$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$ Summationskonvention.
Skalarprodukt: $a_\mu b^\mu = a^\mu g_{\mu\nu} b^\nu = a^0 b^0 - \vec{a} \cdot \vec{b}$
Norm:

$$a_\mu a^\mu = \begin{cases} < 0 & \text{, raumartig} \\ = 0 & \text{, lichtartig} \\ > 0 & \text{, zeitartig} \end{cases}$$

Relativistische Koordinatentransformation (Änderung des Bezugssystems):
Loentztransformation:

$$x'^\mu = \Omega^\mu{}_\nu \, x^\nu$$

verallgemeinerte Drehung im 4-d Raum

reell:

$$\Omega^*_{\mu\nu} \;=\; \Omega_{\mu\nu}$$

Erhalten Norm:

$$\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\lambda} \;=\; \delta_\nu{}^\lambda$$

SO(1,3)-Transformationen "orthogonal".
raumartig → raumartig
lichtartig → lichtartig
zeitartig → zeitartig

Explizite Konstruktion für Zeit und eine Raumkoordinate:

$$\Omega^\mu{}_\nu \;=\; \begin{pmatrix} \cosh\phi & \sinh\phi \\ \sinh\phi & \cosh\phi \end{pmatrix}$$

$$\Omega_{\mu\nu} \;=\; \begin{pmatrix} \cosh\phi & \sinh\phi \\ -\sinh\phi & -\cosh\phi \end{pmatrix}$$

$$\Omega^{\mu\nu} \;=\; \begin{pmatrix} \cosh\phi & -\sinh\phi \\ \sinh\phi & -\cosh\phi \end{pmatrix}$$

$\cosh^2\phi - \sinh^2\phi = 1$
$x^\mu = (ct, vt)$, $x_\mu x^\mu = t^2(c^2 - v^2) = t^2c^2(1 - v^2/c^2)$
$x'^\mu = t(c\cosh\phi + v\sinh\phi, c\sinh\phi + v\cosh\phi)$

Teilchen der (Ruhe-)Masse m mit Geschwindigkeit $\vec{v} = d\vec{x}/dt$.
Relativistische Masse: $M = m/\sqrt{1 - v^2/c^2}$
mechanischer Impuls: $\vec{\pi} = M\vec{v}$
Energie: $E = Mc^2$
mechanischer Viererimpuls: $\pi^\mu = (Mc = E/c, \vec{\pi})$
Norm: $\pi_\mu\pi^\mu = m^2c^2/(1 - v^2/c^2) - v^2m^2/(1 - v^2/c^2) = m^2c^2$
Lorentzkovarianz!

Relativistische Energie-Impulsbeziehung:

$$E \;=\; \sqrt{\vec{\pi}^2c^2 \;+\; m^2c^4} \;\approx\; mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Eigenzeit (Zeit im Ruhesystem)

$$d\tau \;=\; (dx_\mu dx^\mu)^{1/2} \;=\; \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\;\; dt$$

(Bewegte Uhren gehen langsamer)
Vierergeschwindigkeit: $u^\mu \;=\; dx^\mu/d\tau \;=\; \pi^\mu/m$

18.3. Teilchen der Ladung e im elektrischen Feld

(Potential $\phi, \vec{A}$, Felder $\vec{E}$ und $\vec{B}$)

$$\frac{d\vec{\pi}}{dt} \;=\; e(\vec{E} \;+ \frac{1}{c}\;\vec{v}\times\vec{B})$$

$$\frac{d}{dt}\;(\pi_\mu\pi^\mu) = 0 = c^2M\frac{d}{dt}M - \vec{\pi}\frac{d}{dt}\vec{\pi}$$

$$\Rightarrow\; \frac{d}{dt}M \;=\; \frac{1}{c^2}\frac{\vec{\pi}}{M}\cdot\frac{d\vec{\pi}}{dt} \;=\; \frac{e}{c^2}\;(\vec{v}\cdot\vec{E})$$

Hamiltontransformation:

kanonischer Impuls: $\vec{p} = \vec{\pi} + e\vec{A}/c$
kanonischer Viererimpuls: $p^\mu = (Mc + e\phi/c, \vec{p})$
Hamiltonfunktion:

$$H(\vec{x}, \vec{p}) \;=\; e\phi \;+\; c\sqrt{\left(\vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + m^2c^2}$$

Bewegungsgleichungen:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} \;=\; \vec{v} \;=\; \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \;=\; \frac{\vec{\pi}}{M}$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} \;=\; -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \;=\; e\left(\vec{E} \;+\; \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right) \;+\; \frac{e}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}$$

18.4. Klein-Gordon-Gleichung

Quantenmechanik: Phasenänderung der Wellenfunktion in Raum und Zeit hängt mit Impuls $\vec{p}$ und Energie E (eines Teilchens) zusammen:

$$\psi(\vec{r}, t) \;=\; e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar}$$

Aus Energie-Impuls-Relation $E = p^2/2m$ folgt die Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r}, t) \;=\; \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2\;\psi(\vec{r}, t)$$

Korrespondenzprinzip:

$$E \;\to\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$
$$\vec{p} \;\to\; \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

Relativistische Energie-Impulsbeziehung:

$$E \;=\; \sqrt{\vec{p}^2c^2 \;+\; m^2c^4}$$

$\Rightarrow$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\;\psi(\vec{r}, t) \;=\; \underbrace{c\sqrt{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 c^2 \;+\; m^2c^4}\;\;\psi(\vec{r}, t)}_{\text{nichtlokaler Operator}}$$
$$=\; \int d^3r'\; K(\vec{r} - \vec{r}\,')\;\psi(\vec{r}\,', t)$$

$$K(\vec{r} - \vec{r}\,') \;=\; \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\; e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')/\hbar}\; c\sqrt{\vec{p}^2 + \; m^2c^2}$$

nichtlokale Gleichung; verknüpft $\psi(\vec{r}, t)$ mit $\psi(\vec{r}\,', t)$.
Für $|\vec{p}| \le mc$ ist der Term $\sqrt{\vec{p}^2 + \; m^2c^2}$ ungefähr konstant
$\Rightarrow$ Beiträge zum Integral für $|\vec{r} - \vec{r}\,'| \ge \hbar/|\vec{p}| \ge \hbar/mc$.
$\partial\psi(\vec{r}, t)/\partial t$ hängt ab von $\psi(\vec{r}\,', t)$ <u>außerhalb des Lichtkegels</u>:
<u>relativistische Kausalität</u> ist verletzt.

Ausweg: Quadrieren der $E(\vec{p})$-Relation:

$$E^2 \;=\; \vec{p}^2c^2 \;+\; m^2c^4$$

$$\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\;\psi(\vec{r}, t) \;=\; \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2\;\psi(\vec{r}, t) \;+\; m^2c^2\;\psi(\vec{r}, t)$$

Klein-Gordon-Gleichung
Kopplung an elektromagnetische Felder:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi$$
$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}$$

$$\boxed{\frac{i}{c^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)^2\psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}, t)\right)^2\psi(\vec{r}, t) + m^2c^2\psi(\vec{r}, t)}$$

Verhalten unter Lorentztransformation

$$\Big[\underbrace{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2}_{\partial_\mu\partial^\mu}+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Big]\psi(\vec{r},t)=0$$

invariant unter Lorentztransvormationen

Invarianz der Wellengleichung $\Rightarrow \psi'(\vec{r}',t')=\psi(\vec{r},t)$: Transformationsverhalten eines Skalars

18.5. Eigenschaften der Klein-Gordon-Gleichung

(i) Differentialgleichung 2. Ordnung in der Zeit
Anfangsbedingung für ψ und $\partial\psi/\partial t \quad\Rightarrow\quad$ Zusätzlicher Freiheitsgrad – Antiteilchen

$$\psi=e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar}$$

2 Lösungen für E: $E=\pm c\sqrt{p^2+m^2c^2}$
positive und negative Energie.
Teilchen mit negativer Energie $=$ Antiteilchen

(ii) $\rho=\psi^*\psi$ keine gute Wahrscheinlichkeitsdichte mehr,
da $\int d^3r\psi^*\psi\neq \text{const}$
Konstitution einer anderen Kontinuitätsgleichung. Der Differentialoperator der Klein-Gordon-Gleichung ist reell.

$\Rightarrow$ Wenn ψ Lösung ist, so ist auch ψ^* Lösung

$$\Rightarrow\qquad \psi^*\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\psi-\psi\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\psi^*=0$$

Kontinuitätsgleichung

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t)=0}$$

Dichte

$$\rho(\vec{r},t)=\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)$$

Stromdichte:

$$\vec{j}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

$$\int d^3r\rho(\vec{r},t)=\text{const}=\begin{cases}>0\\<0\end{cases}$$

kovariante Schreibweise

$$j^\mu=(c\rho,\vec{j})$$

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu}j^\mu=0$$

$\rho(\vec{r},t)$ kann nicht als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden

$$\begin{aligned}e\rho(\vec{r},t)&\ :\text{Ladungsdichte}\\ \vec{j}(\vec{r},t)&\ :\text{elektrische Stromdichte}\end{aligned}$$

Für neutrale Teilchen $\psi(\vec{r},t)$ reell $\Rightarrow\ \rho,\vec{j}=0$
$\rho,\vec{j}$ im elektromagnetischen Feld

$$\rho(\vec{r},t)=\frac{1}{2mc^2}\left[\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)\psi+\psi\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)\psi^*\right]$$

$$\vec{j}=\frac{1}{2m}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi+\psi\left(-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi^*\right]$$

Zustände negativer Energie und Antiteilchen

positive Energie: Betrachten freies Teilchen in Ruhe ($\vec{p} = 0$):

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-imc^2 t/\hbar} \qquad \Rightarrow \ \rho = 1, \vec{j} = 0$$

Im Koordinatensystem bewegt mit $-\vec{v}$:

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \qquad E_p = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\psi'(\vec{r}', t') = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}' - E_p t')/\hbar} = \psi(\vec{r}, t) = e^{-imc^2 t/\hbar}$$

$$\Rightarrow \rho(\vec{r}', t') = \frac{E_p}{mc^2} > 1$$

$$\vec{j}(\vec{r}', t') = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{p}c^2}{E_p}\rho(\vec{r}', t')$$

Lösungen negativer Energie

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{imc^2 t/\hbar}, \quad E = -mc^2 \quad \Rightarrow \rho = -1, \qquad \vec{j} = 0$$

Interpretation: positive Dichte von Antiteilchen mit Energie $+mc^2$

Im Koordinatensystem bewegt mit $-\vec{v}$:

$$\psi'(\vec{r}', t') = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}' - E_p t')/\hbar}$$

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \qquad E_p = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\rho(\vec{r}', t') = -\frac{E_p}{mc^2}$$

$$\vec{j}(\vec{r}', t') = -\frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{p}c^2}{E_p}\rho(\vec{r}', t')$$

Teilchen mit Ladung e

$$e\rho(\vec{r}, t) \quad \text{Ladungsdichte} \begin{cases} > 0 & \text{Teilchen} \\ < 0 & \text{Antiteilchen} \end{cases}$$

Koppeln Antiteilchen ans elektromagnetische Feld mit der Ladung $-e$

Konjugiert komplexe Klein-Gordon-Gleichung:

$$\frac{1}{c^2}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi\right]^2 \psi^*(\vec{r}, t) = \left[\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + m^2c^2\right]\psi^*(\vec{r}, t)$$

$\Rightarrow$ Wenn ψ Lösung der K.-G.-Gleichung mit Ladung e ist, dann ist ψ^* Lösung mit Ladung $-e$. Die Wellenfunktion eines Antiteilchens ist die konjugiert komplexe einer Lösung negativer Energie:

$$\psi(E > 0) = \psi^*(E < 0)$$

Beispiel: geladene π-Mesonen: π^+, $-\pi^-$

Übergang K.-G.-Gleichung zur Schrödingergleichung

Nichtrelativistischer Grenzfall

Unitäre Transformation: $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t)e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}$

Nichtrelativistische Näherung:

$$E = E' + mc^2, \qquad E' \ll mc^2$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi \sim E'\phi \ll mc^2\phi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{\partial}{\partial t}\phi - \frac{imc^2}{\hbar}\phi\right)e^{-imc^2 t/\hbar}$$

$$\approx -\frac{imc^2}{\hbar}\ \phi\ e^{-imc^2 t/\hbar}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi \approx \left(\frac{2imc^2}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\phi + \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\phi\right)e^{-imc^2 t/\hbar}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\phi}$$

$$\rho \to \phi^*\phi$$

$$\vec{j} \to \frac{\hbar}{2mi}\left(\phi^*\vec{\nabla}\phi - \phi\vec{\nabla}\phi^*\right)$$

19. Propagatortheorie – Kausalität

Huygensches Prinzip:
Wenn die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ bekannt ist zur Zeit t, kann $\psi(x',t')$ gefunden werden, indem man jeden Raumpunkt x zur Zeit t als Quelle einer Kugelwelle ansieht. Die Amplitude der vom Punkt x zur Zeit t' am Punkt x' angekommene Welle ist proportional zu $\psi(x,t)$

Proportionalitätskonstante: $i\ G(x',t';x,t)$

$$\psi(x',t') = i\int d^3x\ dt\ G(x',t';x,t)\ \psi(x,t)$$

$G(x',t';x,t)$: Greensfunktion, Propagator

$$G(x',t';x,t)\begin{cases}\neq 0 & t'>t \text{ Kausalität (Keine Wirkung ohne Ursache)}\\ =0 & t'<t\end{cases}$$

Retadierte Greensfunktion

Betrachten Schrödingergleichung:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'} - H\right)\ \psi(x',t') = 0$$

Greenfunktion:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'} - H\right)\ G(x',t';x,t) \ = \ \delta(t-t')\delta(x-x')$$

Gesucht: $G(x',t';x,t)$
Überprüfe Kausalität:

Störungstheorie : $H = H_0 + V$

$$\psi(t) = \psi(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 V(t_1)\psi(t_0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1)V(t_2)\psi(t_0)$$
$$+\cdots$$

Zeitordnug $t_1 > t_2 > t_3$

$$= T\left[e^{\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 V(t_1)\right)}\right]\psi(t_0)$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow\ G(x',t';x,t) \ &= \ G_0(x',t';x,t)\\ &+ \int_{t'>t_1>t} dt_1 dx_1\ G_0(x',t';x_1,t_1)V(t_1,x_1)G_0(x_1,t_1;x,t)\\ &+ \int_{t'>t_2>t_1>t} dt_1 dt_2 dx_1 dx_2\ G_0(x',t';x_1,t_1)V(x_1,t_1)G_0(x_1,t_1;x_2,t_2)\\ &\qquad V(x_2,t_2)G_0(x_2,t_2;x,t)+\cdots\end{aligned}$$

$\Rightarrow G(x',t';x,t) = 0 \qquad t'<t$

wenn $\quad G_0(x',t';x,t) = 0 \qquad t'<t$

freie Bewegung:

$$G_0(x',t';x,t) \sim \theta(t'-t)$$

$$\theta(t) = \lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{-1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\epsilon}\right)$$

$$H_0(x') = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}'^2}$$

$$G_0(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t)$$

$$G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) \;=\; \int \frac{d^3p}{(2\pi)^4} d\omega \; e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} e^{-i\omega(t'-t)} \; G_0(\vec{p}, w)$$

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}'^2}\right) G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) \;=$$

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^4} \; d\omega \; \left(\omega - \frac{\vec{p}^2}{2m}\right) \; G_0(\vec{p}, w) \; e^{-i\omega(t'-t)} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})}$$

$$\Rightarrow \; \left(\omega - \frac{\vec{p}^2}{2m}\right) \; G_0 \;=\; 1 \qquad \left(\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t}\right)$$

$$\boxed{G_0(\vec{p}, \omega) = \frac{1}{\omega \pm i\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}}}$$

Singularität im Nenner wird durch Retardierungsbedingung festgelegt.

$$\Rightarrow \; G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega(t'-t)}}{\omega - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\epsilon}$$

$$= -i\theta\left(\pm(t' - t)\right) \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \; e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}'-\vec{x}) - i\frac{\vec{p}^2}{2m}(t'-t)}$$

$$= \begin{cases} \text{Retadierte Greensfunktion} \\ \text{Avancierte Greensfunktion} \end{cases}$$

Klein-Gordon Gleichung und freie Propagatoren

$$\frac{1}{c}^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \;-\; \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \;=\; \Box$$

$$(\;\Box + m^2\;)\; G(x, y) \;=\; \delta^4(x - y)$$

$m^2c^2/\hbar^2 \;=\; m^2$ in einem Einheitensystem, in dem $c = \hbar = 1$.

$$G(x - y) \;=\; \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p \; e^{-ip\cdot(x-y)} \; G(p)$$

$$(-p^2 + m^2) G(p) \;=\; 1$$

$$G(p) \;=\; \frac{-1}{(p_0 \pm i\epsilon)^2 - \vec{p}^2 - m^2}$$

$$G_{\substack{ret\\adv}}(x) \;=\; -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p \frac{e^{-ip\cdot x}}{(p_0 \pm i\epsilon)^2 - \vec{p}^2 - m^2}$$

Lorentzinvariante Distribution?

$$m^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad G(x) \;=\; \frac{1}{2\pi}\; \theta(\pm x_0)\; \delta^4(x_\mu x^\mu)$$

Nichtverschwindender Träger nur auf dem Lichtkegel!

$m^2 = 0 \quad \Rightarrow$

Nichtverschwindender Träger innerhalb des

Vorwärtslichtkegels für Teilchen mit $\omega > 0$

Rückwärtslichtkegels für Teilchen mit $\omega < 0$

Einfache Interpretation der Klein-Gordon-Gleichung durch Zerlegung in zwei Differentialgleichungen 1. Ordnung in der Zeit

$$D_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \qquad \vec{D}_r = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}$$

$$D_t^2\psi = c^2\vec{D}_r^2\psi + m^2c^4\psi$$

$$\phi = \frac{1}{2}[\psi + \frac{1}{mc^2}D_t\psi]$$

$$\chi = \frac{1}{2}[\psi - \frac{1}{mc^2}D_t\psi]$$

$$\Rightarrow \qquad \psi = \phi + \chi, \qquad D_t\psi = mc^2(\phi - \chi)$$

$$D_t\psi = D_t(\phi + \chi) = mc^2(\phi - \chi)$$

$$\frac{1}{mc^2}D_t^2\psi = D_t(\phi - \chi) = \frac{1}{m}\vec{D}_r^2(\phi + \chi) + mc^2(\phi + \chi)$$

$$\Rightarrow \qquad D_t\phi = \frac{1}{2m}\vec{D}_r^2(\phi + \chi) + mc^2\phi$$
$$D_t\chi = -\frac{1}{2m}\vec{D}_r^2(\phi + \chi) - mc^2\chi$$

2 gekoppelte Differentialgleichungen

Spinorschreibweise

$$\underline{\psi}(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \phi(\vec{r},t) \\ \chi(\vec{r},t) \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2(\tau_3 + i\tau_2) + mc^2\tau_3 + e\Phi 1\right]\underline{\psi}$$

2x2-Matrix-Gleichung

Ladungsdichte:

$$\rho(\vec{r},t) = |\phi(\vec{r},t)|^2 - |\chi(\vec{r},t)|^2 = \underline{\psi}^\dagger\tau_3\psi$$

mit

$$\underline{\psi}^\dagger = (\phi^*, \chi^*)$$

Strom:

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\underline{\psi}^\dagger\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\underline{\psi}^\dagger)\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\underline{\psi}\right] - \frac{e}{mc}\vec{A}\underline{\psi}^\dagger\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\underline{\psi}$$

Normierungsbedingung:

$$\int d^3r\ \rho(\vec{r},t) = \int d^3r\ \underline{\psi}^\dagger\tau_3\underline{\psi} = \pm 1$$

Skalarprodukt:

$$\langle\underline{\psi}|\underline{\psi}'\rangle = \int d^3r\ \underline{\psi}^\dagger\tau_3\underline{\psi}'$$

Hamiltonoperator

$$i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial t} = H\underline{\psi}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2(\tau_3 + i\tau_2) + e\Phi + mc^2\tau_3$$

H ist hermitesch bezüglich des eingeführten Skalarprodukts

$$\langle\underline{\psi}|H\underline{\psi}'\rangle = (\langle\underline{\psi}'|H\underline{\psi}\rangle)^*$$

da $\tau_3(\tau_3 + i\tau_2) = (\tau_3 - i\tau_2)\tau_3$

$\Rightarrow$ Eigenvektoren reell, Eigenfunktionen orthogonal

Ladungskonjugierter Zustand (Vorzeichen der Ladung umgedreht)

$$D_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi$$

wegen $\phi(e) = \chi^*(-e)$ und $\chi(e) = \phi^*(-e)$

$$\underline{\psi}_c = \begin{pmatrix} \chi^* \\ \phi^* \end{pmatrix} = \tau_1 \underline{\psi}^*$$

τ_1 ist der Operator der Ladungskonjugation

$$\tau_1 H^*(e)\tau_1 = -\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 (\tau_3 + i\tau_2) - e\Phi + mc^2\tau_3\right] = -H(-e)$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\psi}\right)^* = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\psi}^* = H^*(e)\underline{\psi}^* = -\tau_1 H(-e)\tau_1\underline{\psi}^*$$

$$\Rightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underline{\psi}_c = H(-e)\underline{\psi}_c$$

Normierte Wellenfunktion freier Teilchen

Teilchen:

$$\psi^{(+)}_{\vec{p}}(\vec{r},t) = \sqrt{\frac{mc^2}{E_p}}e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - E_p t)/\hbar}$$

Teilchenspinor

$$\underline{\psi}^{(+)}_{\vec{p}}(\vec{r},t) = \underline{\psi}^{(+)}_p e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - E_p t)/\hbar}$$

$$\psi^{\dagger}_p = \frac{1}{2\sqrt{E_p mc^2}}\begin{pmatrix} mc^2 + E_p \\ mc^2 - E_p \end{pmatrix}$$

Antiteilchenspinor

$$\psi^{(-)}_{\vec{p}}(\vec{r},t) = \psi^{(-)}_{\vec{p}} e^{-i(\vec{p}\cdot\vec{r} - E_p t)/\hbar}$$

$$\psi^{(-)}_p = \frac{1}{2\sqrt{E_p mc^2}}\begin{pmatrix} mc^2 - E_p \\ mc^2 + E_p \end{pmatrix} = \tau_1\underline{\psi}^{(+)}_{\vec{p}}$$

Grenzfall kleiner Geschwindigkeiten:

$$E_p = mc^2 + \frac{m}{2}v^2$$

$$\underline{\psi}^{(+)}_p = \begin{pmatrix} 1 \\ -v^2/(2c^2) \end{pmatrix} \qquad \underline{\psi}^{(-)}_p = \begin{pmatrix} -v^2/(2c^2) \\ 1 \end{pmatrix}$$

Orthogonalität:

$$\left(\underline{\psi}^{(+)}_p\right)^{\dagger}\tau_3\underline{\psi}^{(-)}_p = 0$$

Entwicklung von $\underline{\psi}$ nach freien Teilchen- bzw. Antiteilchenzuständen

$$\underline{\psi}(\vec{r},t) = \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\underline{\psi}_{\vec{p}}(t)$$

$$\underline{\psi}_p(t) = u_p(t)\underline{\psi}^{(+)}_p + v^*_{-p}\underline{\psi}^{(-)}_{-p}$$

$$\underline{\psi}(\vec{r},t) = \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left[u_p(t)\underline{\psi}^{(+)}_p e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + v^*_p(t)\underline{\psi}^{(-)}_p e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\right]$$

u_p, v_p: Amplituden der Teilchen- bzw. Antiteilchenzustände

$$u_p(t) = \int d^3r\left(\underline{\psi}^{(+)}_p\right)^{\dagger}\tau_3\underline{\psi}(\vec{r},t)e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$$v^*_p(t) = -\int d^3r\left(\underline{\psi}^{(-)}_p\right)^{\dagger}\tau_3\underline{\psi}(\vec{r},t)e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

(Normierung: $\int(\underline{\psi}^{(-)}_p)^{\dagger}\tau_3\psi^{(-)}_p) = 1$)

Falls $\underline{\psi}(\vec{r},t)$ normiert

$$\int d^3r\underline{\psi}^{\dagger}\tau_3\underline{\psi} = \int\frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^3}(|u_p|^2 - |v_p|^2) = \pm 1$$

Amplituden $u_p,\ v_p$ können beliebig groß sein

$\Rightarrow$ viele Teilchen-Antiteilchenpaare

Stationäre Klein-Gordon-Gleichung in einer Dimension

$$(E_p - V)^2\psi(x) = c^2(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + mc^2)\psi(x)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{ipx/\hbar} + be^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ de^{-ikx/\hbar} & x > 0 \end{cases}$$

$$c^2k^2 = (E_p - V)^2 - m^2c^4$$

Anschlußbedingung: ψ und $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ stetig bei $x = 0$

$$a + b = d \qquad p(a - b) = kd$$

$$\Rightarrow \qquad b = \frac{p-k}{p+k}a \qquad d = \frac{2p}{p+k}a$$

(i)
$$E_p > V + mc^2$$

$$k = \frac{1}{\hbar^2}\sqrt{(E_p - V)^2 - m^2c^4}$$

Reflexion und Transmission, b und d endlich

Reflexionskoeffizient

$$\frac{b}{a} = \frac{p-k}{p+k}$$

Transmissionskoeffizient

$$\frac{d}{a} = \frac{2p}{p+k}$$

k reell, $b/a,\ d/a \neq 1$

(ii)
$$E_p - mc^2 < V < E_p + mc^2 \qquad d.h.\ V < 2mc^2$$

$$k = i\kappa, \qquad \kappa = \frac{1}{c}\sqrt{m^2c^4 - (E_p - V)^2}$$

Totalreflexion: $|b/a| = 1$

(iii)
$$V > E_p + mc^2 \qquad (V > 2mc^2)$$

k reell, Teilchenstrom für $x > 0$ mit Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{\partial E_p}{\partial k} = \frac{\hbar^2c^2k}{E_p - V} = -\frac{\hbar^2 k}{m}$$

$v_g > 0$ für $k < 0$ $\quad\Rightarrow\quad$ Reflexionsamplitude $b/a > 1$
Ladungsdichte $x > 0$

$$\rho(x) = \frac{E_p - V}{mc^2}|d|^2 < 0$$

Interpretation: Erzeugung von Teilchen-Antiteilchenpaaren an der Potentialschwelle (Ladungserhaltung)
Teilchen fließen nach links ($x < 0$) - abstoßendes Potential
Antiteilchen nach rechts ($x > 0$) - anziehendes Potential
Medium wird polarisiert
Folgerung: Einteilchenbild versagt, wenn das Potential $V > 2mc^2$ $\Rightarrow$
Vielteilchenproblem mit Wechselwirkung $\Rightarrow$
relativistische Quantenfeldtheorie

Gebundener Zustand der Energie E

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r})$$

Ladungsdichte

$$\rho(\vec{r}) = \frac{e[E - e\phi(r)]}{mc^2}|\psi(\vec{r})|^2$$

$\rho > 0$ für $E > e\phi$ (klassisch erlaubter Bereich)

$\rho < 0$ für $E < e\phi$

Spin-0-Teilchen im Coulomb-Potential:

z.B. π^- (Pion) im Feld des Atomkerns

$$e\phi(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

Klein-Gordon-Gleichung:

$$\left[\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 + \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 - mc^4\right]\psi(\vec{r}) = 0$$

Drehimpulseigenfunktionen:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_l^m(\theta,\phi)\varphi(r)$$

$$\left[\left(\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2\right) + \hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{l(l+1)-(Z\alpha)^2}{r^2}\right) + \frac{2Ze^2}{r}\frac{E}{c^2}\right]\varphi(r) = 0$$

$$m' = \frac{E}{c^2} \qquad \Rightarrow \qquad 2m'E' = \frac{E^2}{c^2} - m^2c^2$$

$$l'(l'+1) = l(l+1) - (Z\alpha)^2, \qquad \text{l' nicht ganzzahlig}$$

$$\left[2m'E' + \hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right) + \frac{2m'Ze^2}{r}\right]\varphi(r) = 0$$

dimensionslose Variable

$$r_0' = \left(\frac{\hbar}{2m'|E'|}\right)^{1/2}, \qquad x = \frac{r}{r_0}$$

Wechselwirkungsparameter

$$\epsilon = \frac{2m'Ze^2}{\hbar^2} \qquad r_0' = Z\alpha\left(\frac{2m'c^2}{|E'|}\right)^{1/2}$$

$$\left[\frac{1}{x}\frac{d^2}{dx^2}x - \frac{l'(l'+1)}{x^2} + \frac{\epsilon}{x} - 1\right]\varphi = 0$$

Verhalten für $x \to \infty$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 1\right)\phi(x) = 0 \qquad \to \phi(x) \sim e^{-x}$$

Potenzreihenansatz:

$$\phi(x) = e^{-x}x^s\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

Einsetzen in DGL ergibt:

$$e^{-x}\sum_{n=0}^{\infty} a_n\big[x^{n+s} - 2(n+s-1)x^{n+s-1} + (n+s+1)(n+s) - l'(l'+1)x^{n+s-2} + \epsilon x^{n+s-1} - x^{n+s}\big] = 0$$

Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} x^{s-2} \quad &: s(s+1) = (l'(l'+1) \qquad \Rightarrow s = l' \\ x^{n+s-1} \quad &: [-2(n+s+1)+\epsilon]a_n \\ &\quad + [(n+s+2)(n+s+1) - l'(l'+1)]a_{n+1} = 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ rekursiv:

$$a_{n+1} = \frac{-2(n+s+1)+\epsilon}{(n+s+2)(n+s+1) - l'(l'+1)}a_n$$

Normierbarkeit der gebundenen Zustände ist nur dann gewährleistet, wenn die Reihe abbricht, d.h. wenn $a_n = 0$ für $n > \nu$ (Reihe bricht ab mit $x^{s+\nu}$)

$$\epsilon = \epsilon_\nu = 2(\nu + l' + 1), \qquad \nu = 0, 1, 2$$

mit $n' = \nu + l' + 1$

$$\boxed{E'_{n'} = -m'c^2 \frac{Z^2\alpha^2}{2n'^2}}$$

Das ist dieselbe Formel wie bei nichtrelatistischer Rechnung des Wasserstoffatoms

Drehimpulsquantenzahl

$$l'_\pm = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$$

Entwicklung nach $Z\alpha \ll 1$

$$l'_\pm = \begin{cases} l - \frac{1}{2}\frac{(Z\alpha)^2}{l+\frac{1}{2}} + \cdots \\ -l - 1 + \frac{1}{2}\frac{(Z\alpha)^2}{l+\frac{1}{2}} + \cdots \end{cases}$$

Verhalten der Wellenfunktion am Ursprung:

$$\psi_{l'}(r) \sim e^{l'}$$

l'_- ist auszuschließen, da $\psi_{l'}(r)$ nicht normierbar ($l \neq 0$) bzw. (auch für $l = 0$) der radiale Strom wie $\frac{1}{r^2}$ divergiert, d.h. eine Quelle bei $r = 0$ existieren würde

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

angenommen $\psi_{l'_+} + i\psi_{l'_-}$ ist Lösung:

$$j_r \sim \psi_{l'_+} \frac{\partial}{\partial r}\psi_{l'_-} - \psi_{l'_-}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{l'_+} = \frac{r^{l'_+} \cdot r^{l'_-}}{r} = \frac{1}{r^2}$$

Energieeigenwerte:

$$\begin{aligned} E'_{n'} &= -\frac{1}{2}\gamma_{\nu l} E_{\nu l} \\ \gamma_{\nu l} &= \frac{Z^2\alpha^2}{n'^2} = \frac{Z^2\alpha^2}{\left(\nu + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2} \\ &= \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n(l+\frac{1}{2})} + 0(Z^4\alpha^4)\right] \end{aligned}$$

Hauptquantenzahl

$$n = \nu + l + 1$$

$$\boxed{E_{\nu l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1+\gamma_{\nu l}}} = mc^2 - mc^2\frac{|Z\alpha|^2}{2n^2}\left[1 + \frac{|Z\alpha|^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right) + 0(Z^4\alpha^4)\right]}$$

Spektrum π–mesonischer Atome

(i) $\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} > 0 \quad \Rightarrow$ Niveauabsenkung

(ii) l - Entartung wird in Ordnung $(Z\alpha)^4$ aufgehoben - Feinstruktur

(iii) $(Z\alpha)^2 > l(l+1) \quad \Rightarrow \quad l'$ komplex

Interpretation: effektives Zentrifugalpotential $V_{\text{eff}} = \frac{l(l+1)-(Z\alpha)^4}{r^2}$ negativ $\Rightarrow$ Teilchen stürzt ins Zentrum. Aber Teilchen- Antiteilchenerzeugung

20. Relativistische Teilchen mit Spin 1/2 – Dirac Gleichung

20.1. Drehungen im Orts- und Spinraum

Ortsraum: Ortsoperator $\vec{r}$

Eigenzustände des Ortsoperators

$$\vec{r}|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0|\vec{r}_0\rangle$$

infinitesimale Drehung um Achse $\widehat{\omega}$ mit Winkel $d\omega$:

$$\delta\vec{\omega} = \widehat{\omega}\delta\omega$$

$$\vec{r}\,' = \vec{r} + \delta\vec{\omega} \times \vec{r} = \vec{r} + \frac{i}{\hbar}[\delta\hat{\omega}\cdot\vec{L},\vec{r}]$$

Drehimpulsoperator: $\quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$[L_i, r_k] = \epsilon_{ijl}[r_j p_l, r_k] = \epsilon_{ijl} r_j \frac{\hbar}{i}\delta_{lk}$$
$$[\delta\vec{\omega} \times \vec{r}]_n = \epsilon_{nik}\delta\omega_i r_k$$

Kommutator legt Darstellung als unitäre Transformation nahe (♣)

$$\boxed{\vec{r}\,' = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)\cdot\vec{r}\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)}$$

gilt auch für endliche Drehwinkel ω, denn:

$$\vec{r}\,'(\omega + \delta\omega) = \vec{r}\,'(\omega) + \delta\omega\hat{\omega} \times \vec{r}\,'(\omega)$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{d\vec{r}\,'(\omega)}{d\omega} = \hat{\omega} \times \vec{r}\,'(\omega)$$

diese Differentialgleichung wird gelöst durch ♣ :

$$\frac{d\vec{r}\,'}{d\omega} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)\left[\frac{i}{\hbar}(\hat{\omega}\cdot\vec{L})\vec{r} - \vec{r}\frac{i}{\hbar}(\hat{\omega}\cdot\vec{L})\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right) \; = \; \hat{\omega}\times\vec{r}\,'$$

Transformation von Ortseigenzuständen

$$\vec{r}\,'|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0\,'|\vec{r}_0\rangle$$

$$\vec{r}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0\,'\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)|\vec{r}_0\rangle$$

$$\Rightarrow \qquad \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0\,'\rangle$$

infinitesimal:

$$\begin{aligned}|\vec{r}_0\,'\rangle &= |\vec{r}_0 + \delta\vec{\omega}\times\vec{r}_0\rangle \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}\right)|\vec{r}_0\rangle\end{aligned}$$

Drehimpulsoperator ist Generator (Erzeuger) von Drehungen im Ortsraum

<u>Spinraum</u>:

Eigenzustände des Spinoperators:

$$\vec{S}\cdot\widehat{n}|\widehat{n}\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\widehat{n}\uparrow\rangle \qquad \widehat{n} \text{ ist } \underline{\text{Quantisierungsachse}}$$
$$\vec{S}\cdot\widehat{n}|\widehat{n}\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\widehat{n}\downarrow\rangle$$

Infinitesimale Drehung der Quantisierungsachse $\widehat{m}$ nach $\widehat{n}$

$$\widehat{n} = \widehat{m} + \delta\vec{\omega}\times\widehat{m}$$

$$\vec{S}\cdot\widehat{n} = \vec{S}\cdot\widehat{m} + \vec{S}(\delta\vec{\omega}\times\vec{m}) = \vec{S}\cdot\widehat{m} + \epsilon_{ijk}\delta\omega_i m_j S_k$$

Spinvertauschungsrelationen:

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

Unitäre Transformation

$$\boxed{\vec{S}\cdot\widehat{n} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{S}\right)\vec{S}\cdot\widehat{m}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{S}\right)}$$

Darstellung von $\vec{S}$ durch die Paulimatrizen (Spin $\frac{1}{2}$):

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

Drehoperator:

$$\begin{aligned} d(\vec{\omega}) &= \exp\left(-\frac{i}{2}\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}\right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{2}\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}\right)^n \\ &= \cos\frac{\omega}{2} - i\hat{\omega}\cdot\vec{\sigma}\ \sin\frac{\omega}{2} \end{aligned}$$

Transformation von Spineigenzuständen (♣) :

$$\boxed{|n\uparrow\rangle = \exp\left(-\frac{i}{h}\vec{\omega}\cdot\vec{S}\right)|m\uparrow\rangle}$$

$$\begin{aligned} \vec{S}\cdot\widehat{n}\ d(\vec{\omega})|m\uparrow\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{S}\right)\vec{S}\cdot\widehat{m}|m\uparrow\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2}\ d(\vec{\omega})|m\uparrow\rangle \end{aligned}$$

d.h. $(d(\vec{\omega})|m\uparrow\rangle)$ ist Eigenzustand $|n\uparrow\rangle$ von $\vec{S}\cdot\widehat{n}$.

infinitesimal:

$$|n\uparrow\rangle = |\hat{m}+\delta\vec{\omega}\times\hat{m}\uparrow\rangle = (1 - i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{S}/\hbar\ |m\uparrow\rangle$$

$\Rightarrow$ Spinoperator ist Generator von Drehungen im Spinraum.

Eigenwert der Spin-1/2 Darstellung der Drehgruppe: Drehung um 2π: $d(2\pi\hat{\omega}) = -1$

Die Darstellungen $d(\vec{\omega})$ und $d(\vec{\omega}+2\pi\hat{\omega})$ sind physikalisch gleichwertig
$\Rightarrow$ Darstellung ist doppelwertig.

20.2. Lorentztransformation des Spins

Betrachte zuerst Lorentztransformation des Bahndrehimpulses:

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}, \qquad \text{Produkt zweier Vektoren}$$

$$L^{ij} = x_i p_j - x_j p_i = \begin{pmatrix} 0 & L_3 & -L_2 \\ -L_3 & 0 & L_1 \\ L_2 & -L_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Erweiterung auf vierdimensionale Vektoren:

$$L^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \\ -\mu_1 & 0 & L_3 & -L_2 \\ -\mu_2 & -L_3 & 0 & L_1 \\ -\mu_3 & L_2 & -L_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Zeitartige Komponenten:

$$\vec{\mu} = x^0\vec{p} - p^0\vec{r} = ct\vec{p} - \frac{E}{c}\vec{r}$$

Der Operator

$$\vec{\mu} = ct\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{1}{c}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\vec{r}$$

ist Erzeuger von infinitesimalen Lorentztransformationen

Lorentztransformation in Koordinatensystem, das sich mit Geschwindigkeit $-\vec{v}$ bewegt

$$L'^{\mu\nu} = \Omega^\mu_\alpha \Omega^\nu_\beta L^{\alpha\beta}$$

In Richtung $\vec{v}$:

$$L'_{||} = L_{||}, \qquad \mu'_{||} = \mu_{||}$$

transversale Richtung:

$$\vec{L}'_\perp = \frac{\vec{L}_\perp + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{\mu}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\vec{\mu}'_\perp = \frac{\vec{\mu}_\perp - \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{L}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

(Gleiche Transformation wie elektromagnetisches Feld)

Verhalten bei räumlicher Spiegelung

$$\vec{r} \to -\vec{r}, \qquad \vec{p} \to -\vec{p}$$

$$\vec{L} \to \vec{L}, \qquad \vec{\mu} \to -\vec{\mu}$$

Lorentztransformation des Spins (Eigendrehimpuls)

$$\vec{L} \to \vec{S}, \qquad \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \qquad (\sigma\ Operator)$$

$$\vec{\mu} \to \frac{i\hbar}{2}\vec{\alpha}$$

$\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3$ neuer Satz dynamischer Freiheitsgrade (Erzeuger von Lorentztransformationen im Spinraum)

(Erwartungswert von $\alpha \to 0$ bei $v/c \to 1$)

$$\sigma^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & i\alpha_1 & i\alpha_2 & i\alpha_3 \\ -i\alpha_1 & 0 & \sigma_3 & -\sigma_2 \\ -i\alpha_2 & -\sigma_3 & 0 & \sigma_1 \\ -i\alpha 3 & \sigma_2 & -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Lorentztransformation von $\sigma^{\mu\nu}$

$$\sigma'_{||} = \sigma_{||}, \qquad i\alpha'_4 = i\alpha_4$$

$$\vec{\sigma}'_\perp = \frac{\vec{\sigma}_\perp + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{i\alpha}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\vec{\alpha}'_\perp = \frac{i\vec{\alpha}_\perp - \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{\sigma}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Algebraische Eigenschaften

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \qquad und\ zyklisch$$

$$\sigma_i^2 = 1 \qquad \sigma_j\sigma_k - \sigma_k\sigma_j = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$$

Algebraische Eigenschaften der $\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3$ ergeben sich aus

(i) Algbraische Eigenschaften des Spinoperators

$$\sigma_j \sigma_k = i\epsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{jk}$$

(ii) der Eigenschaft, daß $\vec{\sigma}$ Rotation der inneren Freiheitsgrade erzeugt und $\vec{\alpha}$ sich unter Rotation wie ein Vektor transformiert

Infinitisimale Drehung von $\vec{\alpha}$

$$e^{i\delta\vec{\omega}\vec{\sigma}/2}\vec{\alpha}e^{-i\delta\vec{\omega}\vec{\sigma}/2} = \vec{\alpha} + \frac{i}{2}\left[(\delta\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma})\vec{\alpha} - \vec{\alpha}(\vec{\sigma}\cdot\delta\vec{\omega})\right]$$

(äquivalent zu $\vec{\alpha} \to \vec{\alpha} + \delta\vec{\omega} \times \vec{\alpha}$)

$$\Rightarrow \qquad \alpha_j\sigma_k - \sigma_k\alpha_j = 2i\epsilon_{jkl}\alpha_l$$

(iii) der Invarianz der Spinvertauschungsrelation bei Lorentztransformation $\vec{v}$ in z-Richtung

$$\vec{\sigma}_x'^2 = \left(\frac{\sigma_x - i\frac{v}{c}\alpha_y}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 = \frac{\sigma_x^2 - i\frac{v}{c}(\sigma_x\alpha_y + \alpha_y\sigma_x) - \frac{v^2}{c^2}\alpha_y^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = \sigma_x^2 = 1$$

$$\Rightarrow \qquad \sigma_i\alpha_j + \alpha_j\sigma_i = 0, \qquad \alpha_j^2 = 1$$

$$\sigma_y'\sigma_z' = i\sigma_x' = \frac{(\sigma_y + i\frac{v}{c}\alpha_x)\sigma_z}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \frac{i\sigma_x + \frac{v}{c}\alpha_x\sigma_z}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} == i\frac{\sigma_x - \frac{v}{c}\alpha_y}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\Rightarrow \qquad \alpha_j\sigma_k = i\epsilon_{jkl}\alpha_l$$

$$\sigma_x'\sigma_y' + \sigma_y'\sigma_x' = (\sigma_x - i\frac{v}{c}\alpha_y)(\sigma_y + i\frac{v}{c}\alpha_x) + (\sigma_y + i\frac{v}{c}\alpha_x)(\sigma_x - i\frac{v}{c}\alpha_y) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0 \qquad i \neq j$$

Ergebnis: Die α_i genügen der gleichen Algebra wie die σ_i

Aber $\vec{\sigma}$ und $\vec{\alpha}$ verhalten sich verschieden bei Raumspiegelung

$\vec{\sigma} \to \vec{\sigma}$ Pseudovektor

$\vec{\alpha} \to -\vec{\alpha}$ Vektor

Definieren Paritätsoperator im Spinraum (β)

$$\beta^{-1}\vec{\sigma}\beta = \vec{\sigma} \qquad oder \qquad \beta\vec{\sigma} = \vec{\sigma}\beta$$

$$\beta^{-1}\vec{\alpha}\beta = -\vec{\alpha} \qquad oder \qquad \beta\vec{\alpha} = -\vec{\alpha}\beta$$

Es gilt $\beta^2 = 1$, $\beta = \pm 1$ Eigenwerte

Matrixdarstellung von $\vec{\alpha}$, $\vec{\sigma}$, β:

Dimension der Darstellung ist geradzahlig $N = 2, 4, ...$

Beweis:

$$\det(\beta^{-1}\alpha_i\beta) = \det(\alpha_i\beta\beta^{-1}) = \det(\alpha_i) = \det(-\alpha_i) = (-1)^N \det(\alpha_i)$$

$\Rightarrow$ N gerade

$N = 2:$ $(\vec{\sigma})_{2dim}$ und 1 spannen vollständiges System auf

$$\beta\vec{\sigma} = \sigma\beta \qquad \Rightarrow \qquad \beta \sim 1$$

$$\beta\vec{\alpha} = -\vec{\alpha}\beta \qquad \Rightarrow \qquad \vec{\alpha} = 0$$

Darstellung im nichttrivialen Fall ausgeschlossen

$N = 4:$ kleinste mögliche Darstellung

Explizit:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \vec{T} & 0 \\ 0 & \vec{T} \end{pmatrix}, \qquad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{T} \\ \vec{T} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

mit den 2x2 Matrizen

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad T_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Eigenschaften: wie die Paulimatrizen sind auch die $\vec{\alpha}$, $\vec{\sigma}$, β spurlos

$$tr\vec{\sigma} = \sum_{\alpha=1}^{4} \vec{\sigma}_{\alpha\alpha} = tr\vec{\alpha} = tr\beta = 0$$

Interpretation von $\vec{\alpha}$ als Erzeugende von Lorentztransf. im Spinraum

Der Operator L_v, der eine Lorentztransformation in ein mit der Geschwindigkeit $-\vec{v}$ bewegtes Koordinatensystem bewirkt, ist

$$L_v = e^{i(i\vec{\alpha}\cdot\vec{\phi})/2}$$

$$\vec{\phi} = \vec{v}\phi, \qquad \tanh\phi = \frac{v}{c}$$

Transformation von $\vec{\sigma}$: $\vec{\sigma}' = L\vec{\sigma}L^{-1}$

$$\sigma'_{||} \;=\; \vec{\sigma}'\cdot\vec{v} \;=\; L\sigma_{||}L^{-1} = \sigma_{||}$$

$$\begin{aligned} \sigma'_{\perp} &= e^{\alpha_{||}\phi/2}\vec{\sigma}_{\perp}e^{-\alpha_{||}\phi/2} \\ &= e^{\alpha_{||}\phi}\vec{\sigma}_{\perp} \\ &= (1\cosh\phi + \alpha_{||}\sin\phi)\vec{\sigma}_{\perp} \\ &= \frac{\vec{\sigma}_{\perp} + \frac{v}{c}\alpha_{||}\vec{\sigma}_{\perp}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \\ &= \frac{\vec{\sigma}_{\perp} - \frac{i}{c}\vec{v}\times\vec{\alpha}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

mit

$$\frac{1}{c}(\vec{v}\cdot\vec{\alpha})\sigma_{\perp} = -\frac{i}{c}\vec{v}\times\vec{\alpha}$$

Lorentztransformation von β

$$\beta' = e^{\alpha_{||}\phi/2}\beta e^{-\alpha_{||}\phi/2} = e^{\alpha_{||}\phi/2}\beta = \frac{\beta - \frac{i}{c}\vec{v}\cdot\beta\vec{\alpha}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$Def.:$ β Zeitkomponenten von $(\beta, \beta\vec{\alpha})$

$$\beta'\vec{\alpha}'_{\perp} = L_v\beta\vec{\alpha}_{\perp}L_v^{-1} = \beta\vec{\alpha}_{\perp}$$

$$\beta'\alpha_{||} = e^{\alpha_{||}\phi}\beta\alpha_{||} = \frac{\beta\alpha_{||} - \frac{v}{c}\beta}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$\Rightarrow$ $(\beta, \beta\vec{\alpha})$ ist Vierervektor (transformiert sich unter Lorentztransformation wie Vierervektor)

$$\gamma^{\mu} = (\beta, \beta\vec{\alpha})$$

$$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{T} \\ -\vec{T} & 0 \end{pmatrix}$$

Eigenschaften der γ^{μ}:

(i) Hermitizität

$$\gamma^0 = (\gamma^0)^+, \qquad \vec{\gamma} = -(\vec{\gamma})^+$$

(ii)

$$(\gamma^0)^2 = 1, \qquad (\gamma^i)^2 = -1, \qquad i = 1,2,3$$

(iii)

$$(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) = 2g^{\mu\nu}, \qquad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(iv)

$$\frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] = 0^{\mu\nu}$$

(v) Jede 4x4 Matrix läßt sich als Linearkombination der 16 Matrizen

$$1,\ \gamma^\mu,\ \sigma^{\mu\nu},\ \gamma_\tau\gamma^\mu,\ \gamma_\tau$$

darstellen mit

$$\gamma_\tau = \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$$

Es gilt

$$[\gamma_\tau, \alpha_i] = 0$$

γ_τ ist invariant unter eigentlicher Lorentztransformation, aber

$$\beta\gamma_\tau\beta = -\gamma_\tau$$

Klassifikation der Basisvektoren

γ_τ	ist Pseudoskalar
$\gamma_\tau\gamma^\mu$	ist Pseudovektor
γ^μ	ist Vektor
$\sigma^{\mu\nu}$	ist (antisymmetrischer) Tensor
1	ist Skalar

Ziel: Relativistische kovariante DGL 1.Ordnung in der Zeit aus Energie-Impuls-Relation

$$p^\mu p_\mu = m^2c^2,$$

die mit Hilfe der Ersetzung $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \to \frac{h}{i}\nabla$ folgt.
Kann $p^\mu p_\mu$ als Quadrat eines Operators geschrieben werden? Ja, mit Hilfe der γ_μ

$$\begin{aligned}(p_\mu p^\mu)^2 &= p_\mu\gamma^\mu p_\nu\gamma^\nu = p_\mu p_\nu\frac{1}{2}\left(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\nu\right) \\ &= p_\mu p_\nu g^{\mu\nu} = p_\mu g^{\mu\nu} p_\nu = p_\mu p^\nu\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \sqrt{p_\mu p^\mu} = p_\mu\gamma^\mu = \pm mc$$

Wähle + Vorzeichen (willkürliche Konvention). Damit

$$p_\mu\gamma^\mu\Psi = mc\Psi$$

$\Rightarrow$ Ψ :vierkomponentiger Spinor. Nach Multiplikation mit β

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}\frac{\hbar}{i}\nabla + \beta mc^2\right]\Psi$$

Diracgleichung

Hamiltonop. $H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2$ wirkt auf 4-komponentigen Spinor.

Kopplung ans el.mag. Feld:$(\phi, \vec{A})$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{t} - e\phi, \qquad \frac{\hbar}{i}\nabla \to \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{t} - e\phi\right]\Psi = \left[c\vec{\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2\right]\Psi$$

Vektorpotential koppelt direkt an innere Freiheitsgrade (Spin)

Magnetische Kopplungskonstante $g = 2$ des Spins an ein Magnetfeld ergibt sich aus der Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Limes.
mit

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Φ hat zwei Spineinstellungen:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_\uparrow \\ \phi_\downarrow \end{pmatrix}, \qquad \chi = \begin{pmatrix} \chi_\uparrow \\ \chi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\begin{pmatrix} 0 & \vec{\tau} \\ \vec{\tau} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} + c\phi\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

2 Komponenten.:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\chi + \left(e\phi + mc^2\right)\Phi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi = c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\chi + \left(e\phi + mc^2\right)\chi$$

<u>im nichtrel. Limes:</u>
Wellenfunktion

$$\Psi \sim e^{-imc^2t/\hbar}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi \sim mc^2\chi \approx c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\Phi - mc^2\chi$$

$$\chi = \frac{1}{2mc}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\Phi$$

Eingesetzt in die Gleichung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi = \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\right]^2\Phi + \left(e\phi + mc^2\right)\Phi$$

wegen $\tau_j\tau_k = \delta_{ij} + i\epsilon_{jkl}\tau_l$

gilt dann: $\left[\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\tau}\right]^2\Phi = \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\Phi - \frac{e\hbar}{c}\left(\nabla\times\vec{A} + \vec{A}\times\nabla\right)\cdot\vec{\tau}\Phi$

$$\left(\nabla\times\vec{A} + \vec{A}\times\nabla\right)\Phi = \mathrm{rot}\vec{A}\;\Phi - \vec{A}\times\;\nabla\Phi + \vec{A}\times\;\nabla\Phi = \vec{H}\Phi$$

$$\Rightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\Phi - \frac{e}{2mc}2\vec{S}\cdot\vec{H}\Phi + \left(e\phi + mc^2\right)\Phi$$

Spinoperator $\vec{S} = \frac{\hbar}{c}\vec{\tau}$
$\rightarrow$ Pauligleichung mit gyromagnetischen Faktor $g = 2$, d.h. magnetisches Moment
eines Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen ist

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc}\vec{S}$$

<u>Wahrscheinlichkeitsdichte und -Strom</u>
Da $\vec{\alpha}$ und β hermitesch sind, genügt der adjungierte Spinor der Gleichung:

$$\Psi^\dagger = (\Phi^*, \chi^*)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\Psi^\dagger = c\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi^\dagger\vec{\alpha} + mc^2\Psi^\dagger\beta$$

($\Psi^\dagger$ Diracgl. $-$ Ψ adj. Diracgl.)
$\Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^\dagger\Psi) + \nabla(\Psi^\dagger c\vec{\alpha}\Psi) = 0$$

Kontinuitätsgleichung

$$\rho = \Psi^\dagger\Psi = |\phi_\uparrow|^2 + |\phi_\downarrow|^2 + |\chi_\uparrow|^2 + |\chi_\downarrow|^2 \geq 0$$

ρ kann hier wieder als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden (nicht mehr als Ladungsdichte)

$$\vec{j} = c\Psi^\dagger\vec{\alpha}\Psi \cdots \text{Wahrscheinlichkeitsstrom}$$

($c\vec{\alpha}\cdots$ Geschwindigkeitsoperator)

Verhalten der Dirac-Gleichung bei Lorentz-Transformation:

$$(\vec{r}, t) \to (\vec{r}\,', t\,')$$
$$(\vec{\alpha}, \beta) \to (\vec{\alpha}\,', \beta\,')$$
$$\Psi(\vec{r}, t) \to \Psi\,'(\vec{r}\,', t\,')$$

$$L_v \beta L_v^{-1} i\hbar \frac{\partial}{\partial t\,'} \Psi\,'(\vec{r}\,', t\,') = L_v \beta c \vec{\alpha} L_v^{-1} \frac{\hbar}{i} \nabla\,' \Psi\,'(\vec{r}\,', t\,') + mc^2 \Psi\,'(\vec{r}\,', t\,')$$

$\Rightarrow$
$$\Psi\,'(\vec{r}\,', t\,') = L_v^{-1} \Psi(\vec{r}, t)$$

20.4. Lösung der Diracgleichung für freies Teilchen

Im Ruhesystem des Teilchens

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} u$$

$u \cdots$ Spinor unabhängig von $\vec{r}, t$ in die Dirac-Gleichung eingesetzt

$$Eu = \beta mc^2 u \qquad \text{Eigenwerte von } \beta = \pm 1$$

Energieeigenwerte	$E = mc^2$	(Teilchen)
	$E = -mc^2$	(Antiteilchen)

Vier linear unabhängige Lösungen

$$u_{0\uparrow}^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{0\downarrow}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{0\downarrow}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{0\uparrow}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenzustände zu β und σ_z

$$\beta u_{0\uparrow\downarrow}^{(\pm)} = \pm u_{0\uparrow\downarrow}^{(\pm)}$$

$$\sigma_z u_{0\uparrow}^{(+)} = u_{0\uparrow}^{(+)} \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z u_{0\downarrow}^{(+)} = -u_{0\downarrow}^{(+)}$$

$$\sigma_z u_{0\downarrow}^{(-)} = u_{0\downarrow}^{(-)} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z u_{0\uparrow}^{(-)} = -u_{0\uparrow}^{(-)}$$

(Bei Antiteilchen Spinoreinstellung entgegengesetzt zu Eigenwerten)

Lorentz-Transformation in KS mit Geschwindigkeit $\vec{v} = -\frac{\vec{p}c^2}{E_p}$, $E_p = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$

$$\Psi\,'(\vec{r}\,', t\,') = L_v^{-1} \Psi(\vec{r}, t) = e^{-\vec{\alpha}\cdot\vec{\phi}/2} e^{\mp imc^2 t/\hbar} u_{0\sigma}^{\pm}$$

Bemerkung: Skalar $E_p' t\,' - \vec{p} \cdot \vec{r}\,' = mc^2 t$

$$\Psi\,'(\vec{r}\,', t\,') = e^{\pm i(\vec{p}\cdot\vec{r}\,' - E_p' t\,')/\hbar} e^{-\vec{\alpha}\cdot\vec{\phi}/2} u_{0\sigma}^{\pm}$$

$$u_{\vec{p}\sigma}^{(\pm)} = e^{-\vec{\alpha}\cdot\vec{\phi}/2} u_{0\sigma}^{(\pm)} = \left[\cosh\frac{\phi}{2} - \vec{\alpha}\cdot\hat{v}\sinh\frac{\phi}{2}\right] u_{0\sigma}^{(\pm)}$$

$$\frac{v}{c} = \tanh\phi = \frac{-pc}{E_p}, \quad \cosh\frac{\phi}{2} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}}, \quad \tanh\frac{\phi}{2} = \frac{-pc}{E_p + mc^2}$$

$$u^{(\pm)}_{\vec{p}\sigma} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}} \left(1 + \frac{c\vec{p}\cdot\vec{\alpha}}{E_p + mc^2}\right) u^{(\pm)}_{0\sigma}$$

$$u^{(+)}_{p\uparrow} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z c}{E_p+mc^2} \\ \frac{c(p_x+ip_y)}{E_p+mc^2} \end{pmatrix}$$

$$u^{(+)}_{p\downarrow} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x-ip_y)}{E_p+mc^2} \\ -\frac{p_z c}{E_p+mc^2} \end{pmatrix}$$

$$u^{(-)}_{p\downarrow} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} -\frac{p_z c}{E_p+mc^2} \\ -\frac{c(p_x+ip_y)}{E_p+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$u^{(-)}_{p\uparrow} = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} -\frac{c(p_x-ip_y)}{E_p+mc^2} \\ \frac{p_z c}{E_p+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Spinorientierung nur bei Bewegung in z-Richtung erhalten

Normierung:
adjungierter Spinor $u^\dagger = (u_1^*, u_2^*, u_3^*, u_4^*)$

$$u^{(b)\dagger}_{\vec{p}\vec{\sigma}} u^{(b')}_{\vec{p}\vec{\sigma}'} = \frac{E_p}{mc^2} \delta_{bb'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

nicht Lorentz-invariant, Zeitkomponente eines 4-Vektors. Daher Einführung eines Lorentz-invarianten Skalarproduktes mittels eines modifizierten adjungierten

Spinors:

$$\bar{u} = u^\dagger \beta$$

Das Produkt $\bar{u}_1 u_2 = u_1^\dagger \beta u_2$ ist Lorentz-invariant

$$\bar{u}^{(b)}_{\vec{p}\sigma} u^{(b')}_{\vec{p}\sigma'} = b\ \delta_{bb'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_{b=+/-} \sum_{\sigma=\uparrow/\downarrow} b u^{(b)}_{\vec{p}\sigma} \bar{u}^{(b)}_{\vec{p}\sigma} = \mathbf{1}$$

Jeder 4-komponentige Spinor läßt sich nach den vier Basisspinoren $u^{(b)}_{\vec{p}\sigma}$, $b = \pm 1$, $\sigma = \uparrow\downarrow$ entwickeln. Die Spinoren $u^{(b)}_{\vec{p}\sigma}$ und $\bar{u}^{(b)}_{\vec{p}\sigma}$ genügen den Gleichungen:

$$\left(\beta E_p - c\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) u^{(\pm)}_{\vec{p}\sigma} = \pm mc^2 u^{(\pm)}_{\vec{p}\sigma}$$

$$\bar{u}^{(\pm)}_{\vec{p}\sigma} \left(\beta E_p - c\beta\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) = \pm mc^2 \bar{u}^{(\pm)}_{\vec{p}\sigma}$$

20.5. Teilchenstrom

$$\bar{\Psi}(\vec{r},t)\gamma^\mu\Psi(\vec{r},t) = \left(\rho(\vec{r},t), \frac{1}{c}\vec{j}(\vec{r},t)\right)$$

Verhalten unter Lorentz-Transformation:

$$\Psi'(\vec{r}',t') = L^{-1}\Psi(\vec{r},t)$$
$$\bar{\Psi}'(\vec{r}',t') = \bar{\Psi}(\vec{r},t)L$$

$$\Rightarrow \quad \bar{\Psi}'(\vec{r}',t')\gamma^\mu\Psi'(\vec{r}',t') = \bar{\Psi}(\vec{r},t)L\gamma^\mu L^{-1}\Psi(\vec{r},t) \qquad L\gamma^\mu L^{-1} = \gamma^{\mu\,\prime}$$

$\Rightarrow \quad \bar{\Psi}(\vec{r},t)\gamma^\mu\Psi(\vec{r},t)$ ist Vierervektor

Viererdivergenz:

$$c\partial_\mu(\Psi\gamma^\mu\psi) = \frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\vec{j} = 0$$

Kontinuitätsgleichung

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $\rho = \Psi^\dagger(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$

Stromdichte: $\vec{j} = c\Psi^\dagger(\vec{r},t)\vec{\alpha}\Psi(\vec{r},t)$

Aus Kontinuitätsgleichung folgt :

$$\int \rho(\vec{r},t)d^3r = const > 0$$

<u>"Gordon"-Zerlegung von Dichte und Strom</u>:

$$j_i = c\Psi^\dagger\alpha_i\Psi = \frac{1}{2mc}\Psi^\dagger\alpha_i\left\{\beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\Psi - \beta\vec{\alpha}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi\right\}$$
$$+\frac{1}{2mc}\left\{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\Psi^\dagger\beta + \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi^\dagger\beta\vec{\alpha}\right\}\alpha_i\Psi$$

$\frac{\partial}{\partial t}$ -Terme: $\frac{-\hbar}{2mc}\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\Psi}i\alpha_i\Psi\right)$

mit $\alpha_i\beta\alpha_j = -\beta\alpha_i\alpha_j = -\beta(i\epsilon_{ijk}\sigma_k + \delta_{ij})$

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left\{\bar{\Psi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi + \left[\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\bar{\Psi}\right]\Psi\right\}$$
$$+\frac{\hbar}{2m}\left\{\nabla\times(\Psi\sigma\Psi) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{P}sii\vec{\alpha}\Psi\right)\right\}$$
$$= \vec{j}_{\text{Konvektion}} + \vec{j}_{\text{int}}$$

$$\rho(\vec{r},t) = \Psi^\dagger(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$
$$= \frac{1}{2m}\left\{\bar{\Psi}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\Psi + \left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\bar{\Psi}\right]\Psi\right\}$$
$$+\frac{\hbar}{2mc}\nabla\left[\bar{\Psi}i\vec{\alpha}\Psi\right]$$
$$= \rho_{\text{Konvektion}} + \rho_{\text{int}}$$

Aufspaltung in konvektiven und inneren Anteil.
$\vec{j}_{\text{Konv}}$, ρ_{Konv} gleiche Form wie für Klein-Gordon-Gleichung bis auf $\Psi^\dagger \to \bar{\Psi}$

$$\vec{j}_{\text{int}} = c\nabla\times\vec{\mu} + \frac{\partial\vec{P}}{\partial t},$$
$$\rho_{\text{int}} = -\nabla\cdot\vec{P}$$
$$\vec{\mu} = \frac{\hbar}{2mc}\bar{\Psi}\vec{\sigma}\Psi,\ e\vec{\mu}\cdots \text{Magnetisierungsdichte des Teilchens}$$
$$\vec{P} = \frac{\hbar}{2mc}\bar{\Psi}(-i\vec{\alpha})\Psi,\ e\vec{P}\cdots \text{Polarisierungsdichte des Teilchens}$$

$\bar{\Psi}\sigma^{\mu\nu}\Psi$ transformiert sich wie Tensor 2. Stufe unter Lorentz-Transformation.

mit el.-mag. Feldstärketensor:

$$\frac{\hbar}{2mc}\bar{\Psi}F^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\Psi = e\left(\vec{\mu}\cdot\vec{H} + \vec{P}\cdot\vec{E}\right)$$

Energiedichte, Lorentz-Skalar

Innerer und konvektiver Anteil Anteil von ρ sind getrennt erhalten:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\text{int}} + \text{div}\vec{j}_{\text{int}} = 0$$

Ebene Welle:

$$\rho_{\text{int}} = 0,\quad j_{\text{int}} = 0,\quad \rho_{\text{Konv}} = \frac{E_p}{mc^2},\quad \vec{j}_{\text{Konv}} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{p}c^2}{E_p}\cdots \text{Gruppengeschwindigkeit}$$

Nur höhere Ordnung

$$\left(\frac{v^2}{c^2}\right)$$

$$\underline{\psi} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\tau}\chi + (e\phi + mc^2)\varphi$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = c\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\tau}\varphi + (e\phi + mc^2)\varphi$$

$$\chi \sim e^{-imc^2t/\hbar}$$

$$\Rightarrow \qquad \chi = \frac{1}{2mc}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\tau}\varphi - \frac{1}{2mc^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\chi$$

$$\varphi \sim e^{-imc^2 \cdot\cdot ??}$$

$$\Rightarrow \qquad \chi \cong \frac{1}{2mc}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\tau}\phi - \frac{1}{2mc^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - mc^2 - e\phi\right)??$$

$$??\frac{1}{2mc}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\tau}\varphi + 0\left(\frac{v^4}{c^4}\right)$$

Korrekturen zur Pauligleichung

$$mit \qquad \vec{P}_{kan} = \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}, \qquad \vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$$

$$-\frac{1}{4m^2c^2}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - mc^2 - e\phi\right]\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma}\varphi$$

Korrekturen zur φ-Gleichung

$$= -\frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{P}_{kan}\vec{\sigma}\right)^2\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - mc^2 - e\phi\right)\varphi - \frac{ie\hbar}{4m^2c^2}\left(\vec{P}_{kan}\vec{\sigma}\right)\left(\vec{E}\vec{\sigma}\right)\varphi$$

mit

$$(\vec{a}\vec{b})(\vec{b}\vec{\sigma}) = \vec{a}\vec{b} + i\vec{\sigma}(\vec{a}\times\vec{b})$$

$$\left(\vec{P}_{kan}\vec{\sigma}\right)^2 = \vec{p}^2 - \frac{e\hbar}{ic}i\vec{\sigma}rot\vec{A}$$

Korrekturen zum g-Faktor vernachlässigen

$$\left(\vec{P}_{kan}\vec{\sigma}\right)\left(\vec{E}\vec{\sigma}\right) = \vec{P}\vec{E} - i\vec{\sigma}\left(\frac{\hbar}{i}rot\vec{E}\right) + i\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right)$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - mc^2 - e\phi\right)\varphi = \frac{p^2}{2m}\varphi$$

$$\Rightarrow \qquad -\left[\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{??}{4m^2c^2}\vec{p}\vec{E}\right]\varphi$$

Korrektur zur φ-Gleichung
φ ist Ordnung $\frac{v^2}{c^2}$ nicht normiert

$$\psi = \left(1 + \frac{P_{kan}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3r\ \underline{\psi}^+\underline{\psi} \\ &= \int d^3r\ (\varphi^+\varphi + \chi^+\chi) \\ &\simeq \int d^3r\ (\varphi^+\varphi + \varphi^+\frac{P_{kan}^2}{4m^2c^2}\varphi) \\ &\simeq \int d^3r\ \underline{\psi}^+\underline{\psi} \end{aligned}$$

Multiplikation der φ-Gleichung mit

$$\left(1+\frac{P_{kan}^2}{8m^2c^2}\right)$$

$$\frac{1}{8m^2c^2}\left[p^2, e\phi\right]\frac{i\hbar e}{4m^2c^2}\vec{p}\vec{E}=\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla e\phi$$

$\Rightarrow$ Pauligleichung mit relativistischer Korrektur

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[mc^2+\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right]\psi$$
$$-\left[\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{H}+\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right)\right]\psi+\left[e\phi+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\bigtriangledown^2 e\phi\right]\psi$$

$\frac{p^4}{8m^3c^2}$	`rel. kinet. Energiekor.`
$\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{H}$	`Pauliterm`
$\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right)$	`Spin-Bahn-Kopplung`
$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\bigtriangledown^2 e\phi$	`???term`

<u>???-Term</u>

Poisson-Gleichung:

$$\bigtriangledown^2 e\phi=-4\pi Q(\vec{r})$$

z.B. Coulomb-Potential:

$$\phi=-\frac{Ze^2}{r}$$

$\Rightarrow$???-Term:

$$\frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}Ze^2\delta(\vec{r})$$

$\Rightarrow$ führt zur positiven Verschiebung des S-Energieniveaus (?? Wechselwirkung)

Pseudo-Erklärung des ???-Terms (Zitterbewegung):

Relativistisches Teilchen ist ausgeschmiert über räumlichen Bereich $\frac{\hbar}{mc}$ (Comptonwellenlänge)

$$e\phi(\vec{r})\ \rightarrow\ e\phi(\vec{r}+\delta\vec{r})=e\phi(\vec{r})+\frac{1}{2}(\delta\vec{r}\nabla)^2 e\phi(\vec{r})$$

(ein Term fällt weg: Zittern isotrop)

$$=e\phi(r)+\frac{1}{2}\frac{1}{3}(\delta\vec{r})^2\nabla^2 e\phi(r)$$
$$=e\phi(r)+\frac{1}{6}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2\nabla^2 e\phi(r)$$

<u>Spin-Bahn-Kopplung</u>

Spin-abhängige Terme:

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\left[\vec{H}+\frac{\vec{E}\times\vec{p}}{2mc}\right]$$

$\vec{H}$ ... Magnetfeld im Laborsystem

Magnetfeld im Ruhesystem des Teilchens

$$\vec{H}'=\vec{H}+\frac{\vec{E}\times\vec{p}}{mc}$$

$$??=-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\left[\vec{H}+\frac{\vec{E}\times\vec{p}}{mc}\right]+\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{E}\times\vec{p}\right)$$

2. Term: Ruhesystem des Teilchens kein Inertialsystem (gekrümmte Bahn)

Klassisch: Eigendrehimpuls eines Teilchens auf einer gekrümmten Bahn präzediert mit Rate (Thomas-Präzession)

$$d\vec{\Omega}=\frac{\vec{v}\times\vec{v}}{2c^2}$$

Gebundene Zustände

$$\underline{\psi}(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(vr)$$

$$E\underline{\psi}(\vec{r}) = H\underline{\psi}(\vec{r}), \qquad H = c\vec{\alpha}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) + \beta mc^2 + e\phi(\vec{r})$$

$$e\phi(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Erhaltungsgrößen:

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

$$[p_i, L_j] = \frac{\hbar}{i}\epsilon_{ijk}p_k$$

$$[\vec{L}, H] = c[\vec{L}, \vec{\alpha}\vec{p}] = \frac{c}{i}\hbar\vec{p}\times\vec{\alpha}$$

$$\left[\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}, H\right] = c\frac{\hbar}{2}[\vec{\sigma}, \vec{\alpha}\vec{p}] = -\frac{c}{i}\hbar\partial p\times\vec{\alpha}$$

$$[\alpha_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\alpha_k$$

$$\Rightarrow \qquad [\vec{J}, H] = 0$$

Gesamtdrehimpuls ist Erhaltungsgröße
Genauso: $[J_z, H] = 0$
J_z ist Erhaltungsgröße
Operator

$$K = \beta\left(1 + \frac{\vec{\sigma}\vec{L}}{\hbar}\right)$$

$[K, H] = 0 \qquad \to \qquad K$ ist Erhaltungsgröße
Die Operatoren K, $\vec{J}^2$, J_z bilden einen Satz vertauschbarer Observabler für

Kugelsymmetrie, spinunabhängige Potentiale
Eigenwerte von $\vec{J}^2$ und J_z sind

$$\hbar^2 j(j+1), \qquad \hbar M \qquad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.., \qquad M = -j, -j+1, ..j$$

Eigenwerte von K sind k

$$K^2 = 1 + \left(\frac{\vec{\sigma}\vec{L}}{\hbar}\right)^2 + \frac{2\vec{\sigma}\vec{L}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar^2}\vec{J}^2 + \frac{1}{4}$$

$$\Rightarrow \qquad k^2 = j(j+1) + \frac{1}{4} = \left(j + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$\Rightarrow \qquad k = \pm\left(j + \frac{1}{2}\right) = \pm 1, \pm 2, ...$$

<u>Umschreibung der Dirac-Gleichung in Gleichung 2.Ordnung in $\partial/\partial t$</u>
Definiere Operator

$$P = \frac{1}{2mc^2}\beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) + 1$$

$$P\beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\underline{\psi} = \left[\frac{1}{c^2}(i\hbar - e\phi)^2 - \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 - m^2c^2 - \frac{e\hbar}{c}(-i\vec{\alpha}\vec{E})\right]\underline{\psi} = 0$$

dabei benutzt:

$$\left[\frac{\hbar}{i}\nabla, i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right] = -i\hbar e\vec{E}$$

Lösungen der Dirac-Gleichung sind automatisch Lösungen der Gleichung 2. Ordnung (nicht umgekehrt)
Lösungen der Dirac-Gleichung ergeben sich aus den Lösungen der Gleichung 2.

Ordnung durch

$$\underline{\psi}_{Dirac} = P\underline{\psi}_{2.Ordn.}$$

<u>Beweis</u>

$$P\beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\underline{\psi} = \beta\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)P\underline{\psi} = 0$$

$$\left[\frac{1}{c^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)^2 - \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 - m^2c^2 - \frac{e\hbar}{c}(-i\vec{\alpha}\vec{E})\right]\underline{\psi} = 0$$

Coulomb-Potential

$$\left[\frac{1}{c^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 - \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 - m^2c^2 + \frac{i\hbar Ze^2}{r^2c}\vec{\alpha}\hat{r}\right]\underline{\psi} = 0$$

mit

$$\left(\frac{\hbar\nabla}{i}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \qquad \alpha_r = \vec{\alpha}\hat{r}$$

$$\left[\frac{E^2 - m^2c^4}{c^2} + \frac{2EZe^2}{rc^2} + \frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\vec{L}^2\left(\frac{Ze^2}{c}\right)^2 - i\hbar\frac{Ze^2}{c}\alpha_r}{r^2}\right]\psi = 0$$

Eigenwerte?

Definiere Operator

$$\Lambda = -\beta K - \frac{iZe^2}{\hbar c}\alpha_r = -1 - \frac{\vec{\sigma}\vec{L}}{\hbar} - i\frac{Ze^2}{\hbar c}\alpha_r$$

Es gilt

$$[\Lambda, K] = 0 \qquad mit\ \vec{r}\vec{L} = 0,\ \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0$$

$$[\Lambda, \vec{J}] = 0 \qquad mit\ [\vec{L}, \vec{r}\vec{\alpha}] = \frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\alpha}) \qquad \frac{\hbar}{2}[\vec{\sigma}, \vec{r}\vec{\alpha}] = -\frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\alpha})$$

$$\Lambda^2 = K^2 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2, \qquad \alpha_r^2 = 1$$

Betrachte simultane Eigenzustände von Λ und K sowie $\vec{J}^2$ und J_z

$$\Lambda\underline{\psi} = \pm\lambda\underline{\psi} \qquad \lambda = \sqrt{k^2 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2}$$

mit

$$\hbar^2\Lambda(\Lambda+1) = \vec{L}^2 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 - i\hbar\frac{Ze^2}{c}\alpha_r$$

$\Rightarrow$ Ersetze Term in Differentialgleichung duurch $\hbar^2\Lambda(\Lambda+1)$

$$\left[\frac{E^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2} + \frac{2EZe^2}{r\hbar^2c^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right]\psi = 0$$

$$l'(l'+1) = \pm\lambda(\pm\lambda+1)$$

Gleiche Gleichung wie Klein-Gordon-Gleichung

$\Rightarrow$ Energieeigenwerte

$$E = \frac{mc^2}{\left[1 + \left(\frac{Ze^2}{\hbar c n'}\right)^2\right]^{1/2}}$$

$$n' = l' + 1 + v, \qquad v = 0, 1, 2, ...$$

Zulässige Werte von l'

$$\Lambda_+ = \lambda \qquad l' = \lambda \qquad (l' = -\lambda - 1)$$

$$\Lambda_- = -\lambda \qquad (l' = -\lambda) \qquad l' = \lambda - 1$$

$l' = -\lambda - 1,\ -\lambda$ sind auszuschließen, da die zugehörige Eigenfunktionen nicht normierbar sind bzw. der radiale Strom bei $r = 0$ divergiert

Definiere Hauptquantenzahl

$$\Lambda = -\lambda, \qquad n = |k|, |k| + 1$$

$$\Lambda = \lambda, \qquad n = |k| + 1, |k| + 2$$

$\Rightarrow$ Energieeigenwerte

$$E = mc^2 \left\{ 1 + \frac{(Ze^2/\hbar c)^2}{n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2}} \right\}^{-1/2}$$

- $?(j+1)$-fache Entartung bzgl. der magnetischen Quantenzahl
- Entartung in j aufgehoben
- Reelle Eigenwerte für $Ze^2/\hbar c < 1$, $Z < 137$
- Zwei Energieleitern für jeden Wert von $j - |k| - \frac{1}{2}$
  Gesamtzahl der Energieniveaus doppelt so großwie bei Spin 0
  Nichtrelativistisch

$$\frac{\vec{L}^2}{\hbar} \simeq K(K-1) \qquad \Rightarrow \qquad l(l+1) = k(k-1)$$

$l = k - 1 = j - \frac{1}{2}$ für $k > 0$
$l = |k| = j + \frac{1}{2}$ für $k < 0$
Nichtrelativistischer Limes

$$E = mc^2 - \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + ... \right]$$

Termschema

Feinstruktur:

$$2P_{3/2} - 2P_{1/2} = \frac{Z\alpha^2}{16} = 10^4 MHz$$

Ersetze l durch i bei Klein-Gordon-Gleichung