

QUANTENMECHANIK I

Prof. Günter Sigl

II. Institut für Theoretische Physik der Universität Hamburg

Luruper Chaussee 149

D-22761 Hamburg

Germany

email: guenter.sigl@desy.de

tel: 040-8998-2224

8. November 2010

Zusammenfassung

Ziel dieser Vorlesung ist eine systematische Darstellung der theoretischen Grundlagen der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Dabei soll auch ein Verständnis der grundsätzlichen Erweiterung physikalischer Begriffsbildung gegenüber der klassischen Physik erzielt werden.

web-page zur Vorlesung:

<http://www.desy.de/~sigl/lehre/SS10/ThPhysik-II/ThPhysik-II.htm>

Inhaltsverzeichnis

1	Historische Ursprünge der Quantenmechanik	4
1.1	Ultraviolett katastrophe des Schwarzkörperstrahlers	4
1.2	Photoelektrischer Effekt	5
1.3	Comptoneffekt	5
1.4	Stern-Gerlach Experiment	5
1.5	Materiewellen, de Broglie	6
1.6	Stabilität von Atomen und Molekülen	6
2	Wellenfunktionen und Schrödingergleichung	7
2.1	Freie Teilchen und ebene Wellen	7
2.2	Operatoren	10
2.3	Schrödingergleichung und Korrespondenzprinzip	12
2.4	Postulate der Quantenmechanik	12
2.5	Ehrenfest'sches Theorem	13
2.6	Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte	14
2.7	Stationäre Lösungen, Eigenwerte und vollständige Orthonormalsysteme	15
2.8	Dirac-Formalismus und Darstellungen	18
2.9	Die Dichtematrix	20
3	Eindimensionale Quantensysteme	22
3.1	Potentialstufen	22
3.2	Potentialschwellen und Tunneleffekt	24
3.3	Der Potentialtopf	26
3.3.1	Bindungszustände	26
3.3.2	Streuzustände	28
3.4	Der Quantenoszillator	29
4	Unschärferelationen	32
5	Drehimpuls	34
5.1	Drehungen im Ortsraum und ihre Erzeugenden	34
5.2	Eigenwertspektrum der Drehimpuls-Operatoren	35
5.3	Eigenfunktionen des Bahn-Drehimpulses	36
6	Drei-dimensionale Probleme: Zentralpotential	39
6.1	Kugelkoordinaten	39
6.2	Coulomb-Potential	41
7	Bewegung im elektromagnetischen Feld	47
7.1	Normaler Zeeman-Effekt	49
8	Spin	50
9	Addition von Drehimpulsen	54

10 Stationäre Störungstheorie	56
11 Zeitabhängige Störungstheorie	60
12 Streckenweise konstantes Zentralpotential	63
12.1 Lösung der stationären Schrödingergleichung	63
12.2 Der sphärische Potentialtopf	64
13 Streutheorie	65
13.1 Streuamplitude und optisches Theorem	65
13.2 Streuphasen und Streulänge	69
13.3 Bornsche Näherung	70
14 Mehrteilchensysteme, Fermionen und Bosonen	71
15 Bellsche Ungleichung und verschränkte Zustände	72

1 Historische Ursprünge der Quantenmechanik

Überblick über Grenzen und Probleme der klassischen Physik

1.1 Ultraviolett katastrophe des Schwarzkörperstrahlers

In einem quadratischen Kasten der Kantenlänge L sind die diskreten Moden des elektromagnetischen Feldes gegeben durch die Wellenzahlen

$$\mathbf{k} = \frac{\pi}{L} (n_1, n_2, n_3), \quad n_i = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

wobei $\omega = c_0 k$, wobei die Vakuumlichtgeschwindigkeit $c_0 = 1$ in natürlichen Einheiten. Die Anzahl der Moden pro Frequenzintervall sind damit

$$dN = \frac{d^3\mathbf{k}}{8(\pi/L)^3} = L^3 \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \left(\frac{L}{c_0}\right)^3 \frac{4\pi\omega^2}{(2\pi)^3} d\omega = \frac{L^3\omega^2}{2\pi^2 c_0^3} d\omega. \quad (2)$$

Da es pro Mode zwei Photonpolarisationen gibt und in der klassischen Thermodynamik jede Oszillator-Mode die mittlere Energie $k_B T$ enthält (nach dem Gleichverteilungssatz $\frac{1}{2}k_B T$ jeweils für die kinetische und die potentielle Energie), hätte man für die Energiedichte

$$u(\omega)d\omega = \frac{k_B T}{\pi^2 c_0^3} \omega^2 d\omega, \quad (3)$$

so daß die Gesamtenergiedichte divergiert. Planck postulierte nun daß die Energie in jeder Mode des Strahlungsfeldes nur die diskreten Werte

$$E_{i,n} = n\hbar\omega_i = nh\nu_i, \quad n = 0, 1, \dots \quad (4)$$

annehmen, wobei Frequenz ν und Kreisfrequenz ω über $\omega = 2\pi\nu$ zusammenhängen und $h = 2\pi\hbar \simeq 6.626 \times 10^{-34}$ Js die *Plancksche Konstante* ist. Die einzelnen Energiequanten $\hbar\omega$ werden dann als *Photonen* interpretiert. Da der Impuls eines masselosen Teilchens $p = E/c_0$ ist, ist auch der Impuls quantisiert,

$$p_{i,n} = n\hbar k_i, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (5)$$

Nach der Thermodynamik ist dann die mittlere Energie in Mode i

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_n E_{i,n} e^{-\beta E_{i,n}}}{\sum_n e^{-\beta E_{i,n}}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (6)$$

mit $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$ und der Zustandssumme

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_{i,n}} \quad (7)$$

Mit Gl. (4) ergibt dies

$$Z = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad \langle E_i \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (8)$$

Damit wird aus Gl. (3)

$$u(\omega)d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c_0^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega, \quad (9)$$

Der Limes $\hbar\omega \ll k_B T$ heisst *Rayleigh-Jeans Gesetz*, während der entgegengesetzte Grenzfall $\hbar\omega \gg k_B T$ das *Wiensche Gesetz* darstellt.

1.2 Photoelektrischer Effekt

Die aus einer Metallfolie herausgeschlagenen Elektronen haben die Energie

$$E_e = \frac{1}{2} m v_e^2 = \hbar\omega - W, \quad (10)$$

was nicht von der Intensität abhängt, die in der klassischen Physik durch die *Energiestromdichte* $\mathbf{S} = \frac{c_0}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ repräsentiert wird.

1.3 Comptoneffekt

Die Streuung eines Photons an einem Elektron der Masse m_e wird durch Energie-Impulserhaltung beschrieben:

$$\hbar k + m_e c_0 = \hbar k' + [m_e^2 c_0^2 + (p')^2]^{1/2} \quad (11)$$

$$\hbar \mathbf{k} = \hbar \mathbf{k}' + \mathbf{p}', \quad (12)$$

wobei \mathbf{k} und \mathbf{k}' die Wellenzahl des Photons vor bzw. nach der Streuung ist und \mathbf{p}' der Impuls des gestreuten Elektrons. Subtraktion der gestrichenen Größen und Bildung des Vierer-Skalarprodukts, d.h. Quadrieren und Subtraktion der Raum- von den Zeitkomponenten ergibt

$$k - k' = \frac{\hbar}{m_e c_0} k k' (1 - \cos \theta) \quad (13)$$

oder

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_e c_0} \sin^2 \frac{\theta}{2} = 4\pi\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (14)$$

wobei $\lambda = 2\pi/k$ und $\lambda' = 2\pi/k'$ die Photonwellenlängen des Photons vor bzw. nach der Streuung, θ der Streuwinkel, also der Winkel zwischen \mathbf{k} und \mathbf{k}' , und $\lambda_c = \hbar/(m_e c_0)$ die Compton Wellenlänge des Elektrons sind..

1.4 Stern-Gerlach Experiment

Stern und Gerlach schossen 1922 einen Strahl paramagnetischer Atome mit magnetischem Moment $\boldsymbol{\mu}$ durch ein variables transversales Magnetfeld. Die Strahlrichtung sei entlang der x -Achse und das Magnetfeld $\mathbf{B} = B_z \mathbf{e}_z$. Dann ist die auf die Atome wirkende Kraft

$$\mathbf{F} = -\nabla V_m = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = \mu_z \nabla(B_z) \mathbf{e}_z, \quad (15)$$

wobei die magnetische Wechselwirkungsenergie $V_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Klassisch wäre μ_z und die Auffächerung damit kontinuierlich, experimentell beobachtete man jedoch nur diskrete Teilstrahlen, was auf eine Quantisierung von $\boldsymbol{\mu}$ und damit des Spins der Atome hindeutete.

1.5 Materiewellen, de Broglie

Nach de Broglie 1923 ist jedem Teilchen mit Energie E und Impuls \mathbf{p} eine *Materiewelle* zuzuordnen, deren Frequenz und Wellenlänge durch

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{E}{\hbar} \\ \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}\end{aligned}\tag{16}$$

gegeben ist. Da die Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ folgt auch hier, wie bei Photonen

$$p = \hbar k.\tag{17}$$

1.6 Stabilität von Atomen und Molekülen

Ein Elektron im Orbit um einen Atomkern sollte nach Maxwells Theorie der Elektrodynamik kontinuierlich Energie abstrahlen. Stabile Atome und Moleküle wären damit nicht möglich. Stattdessen beobachtet man Übergänge zwischen *diskreten Zuständen*, in denen Photonen der Frequenz ν mit

$$h\nu = \hbar\omega = |E_i - E_f|,\tag{18}$$

wobei E_i und E_f die Energien des Anfangs- bzw. Endzustands sind. Diese diskreten Zustände wurden historisch zunächst durch die Bohrschen Quantisierungsbedingungen bestimmt: In der klassischen Mechanik beschreibt man ein System durch die *Hamilton-Funktion*

$$H(q_1, \dots, q_D, p_1, \dots, p_D),\tag{19}$$

wobei die Impulse p_ν zu den entsprechenden Koordinaten q_ν kanonisch konjugiert sind, $1 \leq \nu \leq D$. Die zeitliche Entwicklung wird durch die *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen*

$$\dot{q}_\nu = \frac{\partial H}{\partial p_\nu}, \quad \dot{p}_\nu = -\frac{\partial H}{\partial q_\nu}\tag{20}$$

beschrieben. Dabei lässt jede *kanonische Transformation* $(q_\nu, p_\nu) \rightarrow (Q_\nu, P_\nu)$, d.h. jede Transformation welche die kanonischen Poissonklammern

$$\{Q_\nu, Q_\mu\} = 0 = \{P_\nu, P_\mu\} \quad \{Q_\nu, P_\mu\} = \delta_{\nu\mu}\tag{21}$$

respektiert, mit der Poissonklammer

$$\{F, G\} \equiv \sum_{\nu=1}^D \left(\frac{\partial F}{\partial q_\nu} \frac{\partial G}{\partial p_\nu} - \frac{\partial F}{\partial p_\nu} \frac{\partial G}{\partial q_\nu} \right),\tag{22}$$

die Form der Hamiltonschen Gleichungen unverändert.

Für ein integrables System, d.h. ein System, das die Wahl geeigneter kanonischer Variablen (q_ν, p_ν) erlaubt, die alle periodisch sind, lauten die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen nun

$$\oint p_\nu dq_\nu = n_\nu h \quad n_\nu = 0, 1, \dots, \quad \nu = 1, \dots, D\tag{23}$$

2 Wellenfunktionen und Schrödingergleichung

2.1 Freie Teilchen und ebene Wellen

Wie aus der klassischen Physik bekannt, kann eine ebene, monochromatische Welle mit Wellenzahl \mathbf{k} und Kreisfrequenz ω durch die komplexe Funktion

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t+\delta)} \quad (24)$$

beschrieben werden, wobei A die Amplitude und δ die Phase bei $(\mathbf{r}, t) = 0$ ist. Im allgemeinen besteht eine *Dispersionsrelation*

$$\omega = \omega(\mathbf{k}) \quad (25)$$

zwischen Frequenz und Wellenzahl. Elektromagnetische Wellen werden durch solche Ausdrücke beschrieben und da sie Lösungen von linearen Differentialgleichungen sind, können sie auch linear überlagert werden. Dies ist das wichtige *Superpositionsprinzip* der Quantenmechanik. Eine wichtige Erkenntnis der Quantenmechanik besteht darin, daß auch Teilchen durch *Wellenfunktionen* $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben werden, wobei die Wahrscheinlichkeitsverteilung, das Teilchen am Ort \mathbf{r} zu finden, durch

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (26)$$

gegeben ist falls die Wellenfunktion auf Eins normiert ist, d.h.

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1. \quad (27)$$

Man beachte, daß die ebenen Wellen Gl. (24) eigentlich nicht normierbar sind; in der Praxis beschränkt man diese ebenen Wellen daher oft auf ein großes aber endliches Volumen. Das wohl berühmteste Experiment zur Überlagerung von Wellenfunktionen ist wohl das Doppelspalt-Experiment. Hier wird ein Elektronenstrahl mit Wellenzahl k auf eine Blende mit zwei Spalten gelenkt, deren Position durch \mathbf{r}_1 bzw. \mathbf{r}_2 gegeben seien. Die beiden Teile der Wellenfunktion, die dem Durchgang des Elektrons durch Spalt 1 bzw. 2 entsprechen, werden zu gegebener Zeit durch

$$\psi_i(\mathbf{r}, t) \propto \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}, \quad i = 1, 2, \quad (28)$$

bis auf ortsunabhängige Faktoren. Hier hängen die Wellenfunktionen nur von den Beträgen von Wellenzahl und Radiusvektor vom jeweiligen Spalt ab, da wir es bei Durchgang durch eine Blende bzw. einen Spalt mit Kugelwellen bzw. axi-symmetrischen Wellen zu tun haben. Falls *nicht* beobachtet wird durch welchen Spalt das Elektron propagiert ist, wird die Wellenfunktion des Elektrons hinter der Blende durch

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t), \quad (29)$$

was zu Interferenzen in der Verteilung der Elektronen

$$\rho(\mathbf{r}) \propto \left| \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} + \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} \right|^2 \simeq \left| \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} + e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{r} \right|^2 \quad (30)$$

auf einem hinter der Blende aufgestellten Schirm führt, wobei die Näherung für $r \gg |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ gilt. Wird dagegen gemessen durch welchen Spalt das Elektron gelaufen ist, wird die Verteilung durch

$$\rho(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 \propto \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^2} + \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|^2} \simeq \frac{2}{r^2} \quad (31)$$

beschrieben und es gibt keine Interferenzen.

Freie Teilchen der Masse m haben die Dispersionsrelation

$$E(\mathbf{k}) = \hbar\omega(\mathbf{k}) = \pm (m^2 c_0^4 + \hbar^2 |\mathbf{k}|^2 c_0^2)^{1/2}, \quad (32)$$

wobei wir die de Broglie Relation Gl. (17) verwendet haben. In der nichtrelativistischen Quantenmechanik beschränkt man sich auf die positive Lösung (die negative entspräche den Anti-Teilchen) und entwickelt bis zur ersten Ordnung in $k = |\mathbf{k}|$,

$$E(\mathbf{k}) = \hbar\omega(\mathbf{k}) \simeq mc_0^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (33)$$

wobei der erste, k -unabhängige Term als uninteressanter Phasenfaktor meist weggelassen wird. Das allgemeinste drei-dimensionale Wellenpaket entspricht dann einer Überlagerung ebener Wellen Gl. (24) und damit einer drei-dimensionalen Fouriertransformation,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}, \quad (34)$$

welche die Umkehrtransformation

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3 \mathbf{r}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \quad (35)$$

besitzt. In D Dimensionen definiert man den Raum $L^2(\mathbb{R}^D)$ der quadratintegrablen, komplexwertigen Funktionen, für die

$$\int d^D \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 < \infty \quad (36)$$

ist. Man kann dies in mathematisch strengen Sinn definieren, in dem die Funktionen $\psi(\mathbf{x})$ nur bis auf eine Menge des Lebesgue-Masses Null definiert sind und das Integral in Gl. (36) im Sinne von Lebesgue verstanden wird. $L^2(\mathbb{R}^D)$ ist ein Vektorraum. Man kann beweisen daß für jedes $\psi \in L^2(\mathbb{R}^D)$ ein $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ existiert so daß

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) &= \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^{D/2}} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ \tilde{\psi}(\mathbf{k}) &= \int \frac{d^D \mathbf{x}}{(2\pi)^{D/2}} \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ \int d^D \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 &= \int d^D \mathbf{k} |\tilde{\psi}(\mathbf{k})|^2, \text{ (Parsevalsche Gleichung)}, \end{aligned} \quad (37)$$

mit $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \sum_{\nu=1}^D k_{\nu} x_{\nu}$. Mit dem D -dimensionalen Analogon zu Gl. (27) kann nach der Parseval Gleichung daher $|\tilde{\psi}(\mathbf{k})|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte für die Wellenzahl \mathbf{k} interpretiert werden. Der *Erwartungswert* einer orts- bzw. Wellenzahl-abhängigen Größe $f(\mathbf{x})$ bzw. $f(\mathbf{k})$ ist damit gegeben durch

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int d^D \mathbf{x} f(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x})|^2, \quad \langle f(\mathbf{k}) \rangle = \int d^D \mathbf{k} f(\mathbf{k}) |\tilde{\psi}(\mathbf{k})|^2. \quad (38)$$

Dabei kann $\langle f(\mathbf{k}) \rangle$ auch als Integral über den Ortsraum ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{k}) \rangle &= \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} f(\mathbf{k}) \int d^D \mathbf{x}' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \psi^*(\mathbf{x}') \int d^D \mathbf{x} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) = \\ &= \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \int d^D \mathbf{x}' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \psi^*(\mathbf{x}') \int d^D \mathbf{x} [f(i\nabla) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}] \psi(\mathbf{x}) = \\ &= \int d^D \mathbf{x} \int d^D \mathbf{x}' \psi^*(\mathbf{x}') [f(-i\nabla) \psi(\mathbf{x})] \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} = \\ &= \int d^D \mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}) [f(-i\nabla) \psi(\mathbf{x})], \end{aligned} \quad (39)$$

wobei wir im dritten Schritt partiell integriert haben und im vierten Schritt die delta-Funktionsdarstellung $\int d^D \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})} = (2\pi)^D \delta^D(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$ verwendet haben. Daraus folgt daß der Impuls- bzw. Wellenzahloperator im Ortsraum durch

$$\mathbf{k} = -i\nabla, \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (40)$$

gegeben sind.

Beispiel: Das eindimensionale Gaußsche Wellenpaket kann geschrieben werden als

$$\tilde{\psi}(k) = C \exp [-(k - k_0)^2 d^2], \quad (41)$$

wobei C eine Normierungskonstante, k_0 der Erwartungswert der Wellenzahl und d eine Längenskala sind. Mit Hilfe Gaußscher Integrationen der Form

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \quad (42)$$

für $\alpha \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re}(\alpha) > 0$ kann man dann leicht zeigen daß Gl. (34) zur Wahrscheinlichkeitsverteilung im Ortsraum

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|C|^2}{2 \left[d^4 + \left(\frac{\hbar t}{2m}\right)^2 \right]^{1/2}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{2 \left[d^2 + \left(\frac{\hbar t}{2md}\right)^2 \right]} \right] \quad (43)$$

führt. Der Erwartungswert $\langle x \rangle$ bewegt sich also mit Geschwindigkeit $\hbar k_0/m$ während das Wellenpaket gleichzeitig breiter wird. Vergleich von Gl. (43) und $|\tilde{\psi}(k)|^2$ aus Gl. (41) mit einer normierten Gaußverteilung mit Mittelwert x_0 und Standardabweichung σ ,

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (44)$$

ergibt

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \Delta x = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle^{1/2} = \left[d^2 + \left(\frac{\hbar t}{2md} \right)^2 \right]^{1/2}, \\ \sigma_p &= \Delta p = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle^{1/2} = \frac{\hbar}{2d},\end{aligned}\quad (45)$$

also

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.\quad (46)$$

Dies ist ein erstes Beispiel für die *Heisenbergsche Unschärferelation*, die wir später noch systematischer behandeln werden.

2.2 Operatoren

Gl. (40) ist ein erstes wichtiges Beispiel für das Konzept des *Operators*: Allgemein ist ein Operator A definiert als eine Abbildung in $L^2(\mathbb{R}^D)$:

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow A\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^D), \quad \forall \psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^D)\quad (47)$$

In der Quantenmechanik hat man es meist mit *linearen Operatoren* zu tun, für die

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1A\psi_1 + c_2A\psi_2, \quad \forall \psi_1, \psi_2 \in L^2(\mathbb{R}^D), \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}\quad (48)$$

ist. Die wichtigsten Beispiele sind Funktionen des Gradienten, $f(\nabla)$, und Multiplikation mit orts-abhängigen Funktionen $f(\mathbf{x})$. Dabei wird f als analytische Funktion angenommen, so daß man definieren kann

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n.\quad (49)$$

Operatoren können addiert und mit komplexen Zahlen multipliziert werden. Spezielle Operatoren sind der Einheitsoperator, $1\psi = \psi$ und der Null-Operator, $0\psi = 0$. Der *Umkehroperator* A^{-1} zu einem Operator A ist definiert durch $A^{-1}A = AA^{-1} = \mathbf{1}$.

Der *Kommutator* zweier Operatoren A und B ist definiert durch

$$[A, B] \equiv AB - BA.\quad (50)$$

Nach Gl. (40) ist zum Beispiel

$$[x_\nu, x_\mu] = 0, \quad [p_\nu, p_\mu] = 0, \quad [x_\nu, p_\mu] = i\hbar\delta_{\nu\mu}, \quad \mu, \nu, = 1, \dots, D\quad (51)$$

Operatoren, die solchen Vertauschungsrelationen genügen, nennt man *kanonisch*. In der klassischen Mechanik entspricht das konjugierten Variablen, die den Relationen Gl. (21) genügen. Das *Skalarprodukt* zweier Wellenfunktionen $\phi(\mathbf{x})$ und $\psi(\mathbf{x})$ ist definiert durch

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int d^D \mathbf{x} \phi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}),\quad (52)$$

wobei $\phi^*(\mathbf{x})$ die komplex konjugierte Funktion ist. Das Skalarprodukt ist *bilinear* und hat folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned}\langle \phi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \phi \rangle \\ \langle \phi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle &= c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \\ \langle c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 | \psi \rangle &= c_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle\end{aligned}$$

für alle $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Ferner ist das Skalarprodukt *positiv definit*, d.h.

$$\|\psi\| \equiv \langle \psi | \psi \rangle^{1/2} = 0 \Leftrightarrow \psi \equiv 0, \quad (53)$$

wobei $\|\psi\|$ als die *Norm* von ψ bezeichnet wird. In der Mathematik bezeichnet man einen *vollständigen Vektorraum*, d.h. einen Vektorraum, in denen jede *Cauchyfolge* konvergiert, mit einem positiv definiten Skalarprodukt als *Hilbertraum* \mathcal{H} . Zum Beispiel ist $L^2(\mathbb{R}^D)$ damit ein Hilbertraum. Der zu einem Operator A *hermitesch konjugierte* Operator A^\dagger ist definiert durch

$$\begin{aligned}\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle &= \langle \phi | A \psi \rangle \\ \int d^D \mathbf{x} (A^\dagger \phi)^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) &= \int d^D \mathbf{x} \phi^*(\mathbf{x}) A \psi(\mathbf{x}),\end{aligned} \quad (54)$$

$\forall \phi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^D)$. Ein Operator A heisst *hermitesch* oder auch *selbstadjungiert*, falls $A^\dagger = A$. Ein umkehrbarer Operator heisst *unitär* wenn $U^\dagger = U^{-1}$, wenn also $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$.

Beispiele:

- Ein Operator, der aus Multiplikation der Wellenfunktion mit einer reellen Funktion besteht,

$$A\psi(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}),$$

mit $V(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$, ist hermitesch.

- Wenn die Wellenfunktionen im Unendlichen verschwinden, was wegen der Normierbarkeit Gl. (36) im allgemeinen der Fall ist, ist der Impulsoperator Gl. (40) selbstadjungiert, wie man durch partielle Integration verifiziert,

$$\int d^D \mathbf{x} (-i \nabla \phi)^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = \int d^D \mathbf{x} \phi^*(\mathbf{x}) (-i \nabla \psi)(\mathbf{x}).$$

- In einem D -dimensionalen komplexen Vektorraum \mathbb{C}^D kann jeder Operator A durch eine $D \times D$ -Matrix ausgedrückt werden: Sei $\psi = \sum_{i=1}^D \psi_i e_i$ mit den Vektorkomponenten ψ_i in einer Basis e_i , $i = 1, \dots, n$. Dann wird A durch die Matrix A_{ij} , $i, j = 1, \dots, D$ charakterisiert,

$$(A\psi)_i = \sum_{j=1}^D A_{ij} \psi_j.$$

Bilden die e_i ferner eine Orthonormalbasis, d.h. ist $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$, so kann man mit Hilfe der Definition Gl. (54) leicht zeigen daß die Komponenten des hermitesch konjugierten Operators A^\dagger durch

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* \quad (55)$$

gegeben sind.

2.3 Schrödingergleichung und Korrespondenzprinzip

Gl. (40) ist ein Beispiel für das *Korrespondenzprinzip*, nach dem jeder physikalischen Größe in der Quantenmechanik ein Operator zugeordnet wird, der auf die den Quantenzustand beschreibende *Wellenfunktion* wirkt. Ferner sieht man am Beispiel der allgemeinen Wellenfunktion Gl. (34) für freie Teilchen daß

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (56)$$

Die *Schrödingergleichung* für freie Teilchen erhalten wir dann direkt durch Einsetzen der Korrespondenzen Gl. (40) und Gl. (56) in die Dispersionsrelation für freie Teilchen,

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t). \quad (57)$$

Im relativistischen Fall würde das Quadrat der Dispersionsrelation Gl. (32) zur *Klein-Gordon-Gleichung*

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = m^2 c_0^4 \psi - \hbar^2 c_0^2 \Delta \psi \quad (58)$$

führen, die aber eine Wellengleichung zweiter Ordnung in der Zeit wäre, die man aufgrund negativer Energielösungen nur innerhalb der Quantenfeldtheorie konsistent behandeln kann.

Für ein nicht-relativistisches Teilchen, das sich in einem Potential $V(\mathbf{r})$ bewegt, ist die klassische Energie gegeben durch

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (59)$$

was mit dem Korrespondenzprinzip auf die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (60)$$

führt. Dies wird häufig in der Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H \psi(\mathbf{r}, t) \quad (61)$$

mit dem *Hamilton-Operator*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}), \quad (62)$$

der hermitesch ist, wenn das Potential $V(\mathbf{r})$ reell ist.

2.4 Postulate der Quantenmechanik

1. Der Zustand eines Systems, das durch D Ortskoordinaten, zusammengefasst in einen Ortsvektor \mathbf{x} , beschrieben wird, wird durch eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t) \in L^2(\mathbb{R}^D)$ beschrieben, wobei $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^D \mathbf{x}$ die Wahrscheinlichkeit beschreibt, daß sich das

System in einem Intervall $d^D \mathbf{x}$ um den Ortsvektor \mathbf{x} befindet. Mathematische Anmerkung: Die quantenmechanischen Zustände eines Systems bilden immer einen Hilbertraum, den wir oft mit \mathcal{H} bezeichnen werden. Da die Zuordnung zwischen quantenmechanischem Zustand und Wellenfunktion nur bis auf Multiplikation mit einer komplexen Zahl $c \in \mathbb{C} \neq 0$ bestimmt ist und ein Zustand damit einem *Strahl* im Hilbertraum entspricht, hat die mathematische Beschreibung der Quantenmechanik einen starken Bezug zur *projektiven Geometrie*.

2. Den Messgrößen (Observablen) der klassischen Physik entsprechen in der Quantenmechanik hermitesche Operatoren.
3. Der *Erwartungswert* eines Operators A in einem Zustand ψ ist in Verallgemeinerung von Gl. (38) gegeben durch

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A \psi \rangle \equiv \int d^D \mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}, t) A \psi(\mathbf{x}, t). \quad (63)$$

4. Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H \psi(\mathbf{x}, t), \quad \text{mit} \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}). \quad (64)$$

beschrieben. Der Hamilton-Operator H ist hermitesch und entspricht der Energie.

Die Schrödingergleichung ist eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Es gilt damit das Superpositionsprinzip, d.h. wenn zwei Wellenfunktionen $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ und $\psi_2(\mathbf{x}, t)$ Lösungen sind, so sind auch beliebige Linearkombinationen $c_1 \psi_1(\mathbf{x}, t) + c_2 \psi_2(\mathbf{x}, t)$ Lösungen, wobei $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Ferner ist die Schrödingergleichung *deterministisch*, d.h. die zeitliche Entwicklung ist durch Vorgabe der Wellenfunktion zu einer Zeit $t = t_0$ (Anfangsbedingung) eindeutig festgelegt.

Obige Postulate gelten für beliebig-dimensionale Systeme, also auch dreidimensionale Systeme bestehend aus N Teilchen, für welche $D = 3N$ und $\Delta = \nabla^2 = \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$, wobei ∇_i der dreidimensionale Gradient für Teilchen i ist. Die potentielle Energie $V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ hängt im allgemeinen von den Ortskoordinaten \mathbf{r}_i aller Teilchen ab.

Da beispielsweise für zwei Teilchen im allgemeinen $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \neq \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2)$ gilt, kann es zu *Verschränkungen* (englisch *entanglement*) der Wellenfunktionen kommen, mit interessanten Auswirkungen, die etwas später noch etwas genauer besprochen werden.

2.5 Ehrenfestsches Theorem

Wir können nun die Zeitableitung des Erwartungswertes Gl. (63) eines Operators berechnen,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int d^D \mathbf{x} \left(\dot{\psi}^* A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \dot{\psi} \right). \quad (65)$$

Einsetzen der Schrödingergleichung Gl. (64) und ihrer komplex konjugierten

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = H \psi^* \quad (66)$$

führt zu

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (67)$$

In der klassischen Physik entspricht dies der Zeitableitung einer Funktion $f(q_\nu, p_\nu, t)$, die von den Orts- und Impulskoordinaten und eventuell der Zeit abhängen,

$$\frac{d}{dt} f(q_\nu, p_\nu, t) = \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (68)$$

wobei die Poissonklammer in Gl. (22) definiert wurde. Wir können nun die Kommutatoren in Gl. (64) leicht berechnen,

$$[H, x_\mu] = \left[\sum_{\nu=1}^D \frac{p_\nu^2}{2m} + V(\mathbf{x}), x_\mu \right] = \frac{1}{m} \sum_{\nu=1}^D p_\nu \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\nu} = -\frac{i\hbar p_\mu}{m}, \quad (69)$$

$$[H, p_\mu] = \left[\sum_{\nu=1}^D \frac{p_\nu^2}{2m} + V(\mathbf{x}), p_\mu \right] = \left[V(\mathbf{x}), \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_\mu}, \quad (70)$$

wobei wir Gl. (51) verwendet haben. Mit Definition der Kraft $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$ erhalten wir schließlich

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m}, \quad (71)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle. \quad (72)$$

Das *Ehrenfestsche Theorem* besagt also daß die klassischen Gleichungen für die quantenmechanischen Mittelwerte gelten. Beachte jedoch, daß im allgemeinen $\langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle \neq \mathbf{F}(\langle \mathbf{x} \rangle)$, so daß $\langle \mathbf{x} \rangle$ und $\langle \mathbf{p} \rangle$ im allgemeinen *nicht* den klassischen Bewegungsgleichungen gelten, außer wenn

$$\langle F_\lambda(\mathbf{x}) \rangle \simeq F_\lambda(\langle \mathbf{x} \rangle) \Leftrightarrow \sum_{\nu, \mu=1}^D \frac{\partial^2 F_\lambda}{\partial x_\nu \partial x_\mu} \langle \Delta x_\nu \Delta x_\mu \rangle \ll F_\lambda, \quad \forall \lambda, \mu, \nu = 1, \dots, n.$$

2.6 Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

Mit Hilfe der Schrödingergleichung Gl. (64) und Gl. (66) können wir nun auch die zeitliche Änderung der lokalen Wahrscheinlichkeitsdichte berechnen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} = \frac{1}{i\hbar} [\psi^* (H\psi) - (H\psi^*) \psi] = \frac{\hbar}{2mi} [(\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi)]. \quad (73)$$

Mit Definition der *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi] = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi^* \nabla \psi] \quad (74)$$

kann man Gl. (73) als Kontinuitätsgleichung schreiben,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (75)$$

Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes kann man die zu dieser differentiellen Form äquivalente integrale Form schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^D \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_{\partial V} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t), \quad (76)$$

für jedes beliebige Teilvolumen V , wobei sich das Oberflächenintegral auf der rechten Seite über die das Volumen V berandende Fläche ∂V erstreckt und \mathbf{n} die nach außen zeigende Normale bezeichnet. Als Spezialfall für das Gesamtvolumen, $V = \mathbb{R}^D$ folgt daraus die Erhaltung der Norm Gl. (36),

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^D \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = 0. \quad (77)$$

Dies folgt weil $\psi \in L^2(\mathbb{R}^D)$ für $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ mindestens wie $|\mathbf{x}|^{-D/2}$ abfallen muß, womit wegen Gl. (74) \mathbf{j} mindestens wie $|\mathbf{x}|^{-D-1}$ abfällt, so daß das Oberflächenintegral in Gl. (76) verschwindet.

2.7 Stationäre Lösungen, Eigenwerte und vollständige Orthornormalsysteme

Für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren kann man die Schrödingergleichung durch Separation der Variablen lösen:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = f(t)\psi(\mathbf{x}),$$

was zu

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \frac{1}{\psi(\mathbf{x})} H\psi(\mathbf{x}) = E = \text{const}. \quad (78)$$

führt. Daraus folgt

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (79)$$

und die *Eigenwertgleichung* für den Hamilton-Operator zum *Eigenwert* E

$$H\psi_E(\mathbf{x}) = E\psi_E(\mathbf{x}). \quad (80)$$

Die resultierende Gesamtwellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_E(\mathbf{x}) \exp(-iEt/\hbar)$ heißt *stationär* weil die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ zeit-unabhängig ist. Die Normierungsbedingung $\psi_E(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^D)$ bestimmt die erlaubten Eigenwerte E .

Allgemein zeigt man leicht daß die Eigenwerte a_n zu einem hermiteschen Operator A ,

$$A\psi_n = a_n\psi_n$$

reell sind, $a_n^* = a_n$, und daß die Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind,

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad \text{falls } a_n \neq a_m.$$

Die gilt im allgemeinen *nicht* für mehrere *entartete* Eigenfunktionen zum selben Eigenwert. Jedoch kann man diese durch unitäre Transformationen so wählen daß sie paarweise

orthogonal sind. Ferner kann man die Funktionen durch Multiplikation mit einer geeigneten Konstanten auf Eins normieren, so daß die *Orthonormalitätsrelation*

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (81)$$

gilt. Unitäre Operatoren U lassen diese Relationen wegen $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$ unverändert,

$$\langle U \psi_n | U \psi_m \rangle = \langle \psi_n | U^\dagger U \psi_m \rangle = \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}.$$

Der Index n kann in diesen Relationen über diskrete oder auch über kontinuierliche Werte laufen (z.B. für ebene Wellen). Um die Notation einfach zu halten nehmen wir im folgenden zunächst diskrete Eigenwerte an. Wir versuchen nun eine beliebige Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^D)$ in Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators A zu *entwickeln*,

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}). \quad (82)$$

Aus Gl. (81) folgt sofort

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle. \quad (83)$$

Ferner kann man damit schreiben

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \int d^D \mathbf{x}' \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') = \int d^D \mathbf{x}' \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') = \int d^D \mathbf{x}' \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}'),$$

wobei wir im zweiten Schritt annehmen, daß die Integration und die im allgemeinen unendliche Summe vertauschbar sind. Dies kann nur dann für alle $\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^D)$ gelten, wenn die *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}') = \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (84)$$

gilt. Bilden die Eigenfunktionen $\psi_n(\mathbf{x})$ demnach ein vollständiges System, auch genannt eine *Orthonormalbasis*, so folgt aus Gl. (81) auch

$$\|\psi\|^2 = \int d^D \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \sum_n |c_n|^2. \quad (85)$$

Anwendung dieser Relationen auf den Hamilton-Operator H führt nun zur allgemeinen Lösung der Schrödingergleichung

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{x}) \quad \text{mit } c_n = \langle \psi_n | \psi(t=0) \rangle, \quad (86)$$

wobei wir die Energie-Eigenwerte mit E_n bezeichnen.

Wir interessieren uns nun für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $w_\psi(a)$ daß die durch einen hermiteschen Operator A dargestellte physikalische Messgröße in einem beliebigen, gegebenen Quantenzustand $\psi(\mathbf{x})$ einen Wert a annimmt, $-\infty < a < \infty$. In diesem Quantenzustand wird A damit eine *Zufallsvariable* A_ψ mit Verteilung $w_\psi(a)$. Dabei gilt für den Erwartungswert einer Funktion $F(A_\psi)$ dieser Zustandsvariable

$$\langle F(A_\psi) \rangle = \langle \psi | F(A) \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} da F(a) w_\psi(a). \quad (87)$$

Insbesondere definieren wir das k -te Moment

$$m_{\psi,k} \equiv \langle A_{\psi}^k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} da a^k w_{\psi}(a) \quad (88)$$

und die *charakteristische Funktion*

$$\chi_{\psi}(\tau) \equiv \langle e^{-iA_{\psi}\tau} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} da e^{-ia\tau} w_{\psi}(a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \tau^k m_{\psi,k}, \quad (89)$$

wobei wir in der letzten Identität die Taylorentwicklung der Exponentialfunktion verwendet haben.

Für einen Zustand der Form Gl. (82) folgt nun aus den Orthonormalitätsrelationen Gl. (81) sofort

$$m_{\psi,k} = \langle \psi | A^k \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n^k \quad (90)$$

und mit Hilfe von Gl. (89) und der Umkehrtransformation

$$w_{\psi}(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{2\pi} e^{ia\tau} \chi_{\psi}(\tau)$$

$$\chi_{\psi}(\tau) = \sum_n |c_n|^2 e^{-ia_n\tau} \implies w_{\psi}(a) = \sum_n |c_n|^2 \delta(a - a_n). \quad (91)$$

Eine Messung der dem Operator A entsprechenden Observablen führt also immer zu einem Eigenwert a_n , mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$. Insbesondere misst man im Eigenzustand ψ_n mit Sicherheit den Wert a_n . Darüberhinaus befindet sich das System nach einer idealen Messung mit dem Resultat c_n im Eigenzustand ψ_n , was auch als *Kollaps oder Reduktion der Wellenfunktion* bekannt ist.

Einige der bereits diskutierten Operatoren wie der Orts- und der Impulsoperator haben ein *kontinuierliches Spektrum*, sind aber eigentlich nicht quadratintegrierbar. So gilt für die Impulseigenfunktionen

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \exp\left[\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right] \quad (92)$$

die Orthogonalitätsrelation

$$\int d^D \mathbf{x} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) = \delta^D(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (93)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\int d^D \mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (94)$$

Die Gl. (82) und (83) entsprechende Entwicklung nach Impuls-Eigenfunktionen ist nichts anderes als die Fouriertransformation,

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d^D \mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \frac{\exp[i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar]}{(2\pi\hbar)^{D/2}}. \quad (95)$$

Die Entsprechung zwischen diskreter und kontinuierlicher Eigenwertspektren ergibt sich somit als

$$c_n \longrightarrow \tilde{\psi}(\mathbf{p}), \quad \sum_n \longrightarrow \int d^D \mathbf{p}. \quad (96)$$

Man kann zu normierbaren Impuls-Eigenfunktionen übergehen, indem man die innerhalb eines endlichen Volumens V definierten Funktionen

$$\psi_{\mathbf{p}}^V = \frac{1}{V^{1/2}} \exp \left[\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar} \right], \quad \text{mit} \quad \mathbf{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}(n_1, \dots, n_D), \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad (97)$$

welche den diskreten Orthonormalitätsrelation Gl. (81) genügen.

Schließlich sind die *Ortseigenfunktionen* gegeben durch

$$\mathbf{x}\psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\xi}\psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}), \quad \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = \delta^D(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) \quad (98)$$

und erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\langle \psi_{\boldsymbol{\xi}} | \psi_{\boldsymbol{\xi}'} \rangle = \int d^D \mathbf{x} \psi_{\boldsymbol{\xi}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\boldsymbol{\xi}'}(\mathbf{x}) = \delta^D(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}') \quad (99)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\int d^D \boldsymbol{\xi} \psi_{\boldsymbol{\xi}}^*(\mathbf{x}') \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (100)$$

Die Gl. (82) und (83) entsprechende Entwicklung nach Orts-Eigenfunktionen ist

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d^D \boldsymbol{\xi} \psi(\boldsymbol{\xi}) \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}), \quad (101)$$

so daß die Entwicklungskoeffizienten einfach $\psi(\boldsymbol{\xi})$ sind.

2.8 Dirac-Formalismus und Darstellungen

Bisher hatten wir Wellenfunktionen bzw. Zustände implizit immer in einer bestimmten Basis bzw. Darstellung geschrieben. In der *Dirac-Notation* abstrahiert man davon und schreibt

$$\psi(\mathbf{x}) \longrightarrow |\psi\rangle. \quad (102)$$

Ferner schreibt man für die oben diskutierten Eigenfunktionen of abkürzend

$$\begin{aligned} \psi_n(\mathbf{x}) &\longrightarrow |\psi_n(\mathbf{x})\rangle \longrightarrow |n\rangle \\ \psi_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) &\longrightarrow |\boldsymbol{\xi}\rangle, \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) \longrightarrow |\mathbf{p}\rangle. \end{aligned} \quad (103)$$

Über das Skalarprodukt ist der *duale Vektorraum* dann definiert durch die linearen Funktionale

$$\langle \psi | : f_{\psi}(\phi) \equiv \langle \psi | \phi \rangle, \quad \forall \phi \in \mathcal{H}. \quad (104)$$

Die Vektoren $\langle\psi|$ und $|\phi\rangle$ werden dabei als *bra*- bzw. *ket*-Vektoren bezeichnet und bilden im Skalarprodukt ein *bracket*. Viele der obigen Relationen lassen sich damit abkürzen,

$$\begin{aligned}\langle\xi|\xi'\rangle &= \delta^D(\xi - \xi'), & \langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle &= \delta^D(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\ \langle\xi|\mathbf{p}\rangle &= \psi_{\mathbf{p}}(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \exp\left[\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}\right], & \langle\mathbf{p}|\xi\rangle &= \langle\xi|\mathbf{p}\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \exp\left[\frac{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}\right]. \\ \langle\xi|n\rangle &= \psi_n(\xi)\end{aligned}\tag{105}$$

Die Orthonormalitätsrelation Gl. (81) lautet dann

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}.\tag{106}$$

Die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}\tag{107}$$

ist äquivalent zu ihrer Formulierung in der Ortsdarstellung Gl. (84): Falls Gl. (107) gilt, so folgt

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{x})\psi_n^*(\mathbf{x}') = \sum_n \langle\mathbf{x}|n\rangle\langle n|\mathbf{x}'\rangle = \langle\mathbf{x}|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\mathbf{x}'\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Gilt andererseits Gl. (84) so folgt

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d^D\mathbf{x}' \sum_n \psi_n(\mathbf{x})\psi_n^*(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}') = \sum_n \psi_n(\mathbf{x})\langle\psi_n|\psi\rangle$$

und damit

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle, \forall\psi \in \mathcal{H},$$

also Gl. (107). Ferner kann man mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation Gl. (107) die Wirkung eines beliebigen Operators A auf den dualen Zustandsraum definieren durch

$$\langle\phi|A \equiv \sum_n \langle\phi|A|n\rangle\langle n|\tag{108}$$

womit die Wirkung eines Operators auf den Hilbertraum und den dualen Hilbertraum assoziativ ist,

$$(\langle\phi|A)|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle) \equiv \langle\phi|A|\psi\rangle, \forall\phi, \psi \in \mathcal{H}$$

Damit lässt sich ein Operator A auch schreiben als

$$A = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|A|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle |n\rangle\langle m| = \sum_{n,m} A_{nm} |n\rangle\langle m|, \tag{109}$$

wobei A_{nm} die *Matrixelemente von A in der Basis* $|n\rangle$ sind. Für den adjungierten Operator gilt damit

$$\langle\phi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle.\tag{110}$$

In Dirac-Notation kann die Schrödinger-Gleichung Gl. (61) nun abstrakt als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (111)$$

geschrieben werden. Verschiedene *Darstellungen* erhält man nun durch Projektion dieser Gleichung auf den dualen Vektor einer Basis, d.h. durch Multiplikation mit den dualen Zuständen einer Basis von links. Für die Entwicklungskoeffizienten $c_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$ in einer diskreten Basis $|n\rangle$ folgt damit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = \sum_m \langle n|H|m\rangle \langle m|\psi(t)\rangle = \sum_m H_{nm} c_m(t), \quad (112)$$

und analog für kontinuierliche Basen. In der Ortsdarstellung ist damit z.B.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{\xi\xi'} &= \langle \xi|\mathbf{x}|\xi'\rangle = \int d^D \mathbf{x} \delta^D(\mathbf{x} - \xi) \mathbf{x} \delta^D(\mathbf{x} - \xi') = \xi \delta^D(\xi - \xi') \\ \mathbf{p}_{\xi\xi'} &= \langle \xi|\mathbf{p}|\xi'\rangle = \int d^D \mathbf{x} \delta^D(\mathbf{x} - \xi) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}} \delta^D(\mathbf{x} - \xi') = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\xi} \delta^D(\xi - \xi'), \end{aligned} \quad (113)$$

wobei das Subskript von ∇ angibt auf welche Variable der Gradient wirkt. Damit folgt aus Gl. (111) sofort

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}|\psi(t)\rangle = \int d^D \mathbf{x}' \langle \mathbf{x}|H|\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\psi(t)\rangle = \\ &= \int d^D \mathbf{x}' \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + V(\mathbf{x}) \delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \psi(\mathbf{x}', t) = \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

die wohlbekannte Schrödinger-Gleichung Gl. (61) im Ortsraum. Ähnlich folgt in Impulsdarstellung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) + \int d^D \mathbf{p}' \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tilde{\psi}(\mathbf{p}'), \quad (114)$$

wobei $\tilde{V}(\mathbf{p})$ und $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ die Fouriertransformierten von $V(\mathbf{x})$ bzw. $\psi(\mathbf{x})$ sind.

Die formale Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (86) läßt sich damit nun auch schreiben als

$$|\psi(t)\rangle = e^{iHt/\hbar} |\psi(t=0)\rangle = \sum_n \langle n|\psi(t=0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle, \quad (115)$$

was als *Schrödingerbild* bezeichnet wird.

2.9 Die Dichtematrix

Man kann den Erwartungswert einer Observablen A , Gl. (63) auch schreiben als

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A), \quad (116)$$

mit der *Dichtematrix*

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (117)$$

und der Definition der *Spur* einer beliebigen Matrix X ,

$$\text{Tr}(X) = \sum_n \langle n|X|n\rangle, \quad (118)$$

mit einem vollständigen Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}$. Die Dichtematrix Gl. (117) beschreibt einen *reinen Zustand* und enthält keine über $|\psi\rangle$ hinausgehende Information. Der Vorteil von Dichtematrizen besteht darin, daß sie auch *gemischte Zustände* beschreiben können:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (119)$$

wobei $|\psi : i\rangle$ paarweise unterschiedliche, normierte, aber nicht notwendigerweise orthogonale Zustände sind und p_i die statistischen Wahrscheinlichkeiten sind, daß Zustand ψ_i realisiert ist, mit $\sum_i p_i = 1$. In dieser allgemeinsten Form hat die Dichtematrix folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr}(\rho A) = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \\ \text{Tr}(\rho) &= 1 \\ \rho^\dagger &= \rho \\ \rho^2 &= \rho \Leftrightarrow \rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad \text{ist reiner Zustand} \\ \text{Tr}(\rho^2) &= 1 \Leftrightarrow \rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad \text{ist reiner Zustand.} \end{aligned} \quad (120)$$

Diese Eigenschaften folgen aus

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho A) &= \sum_n \sum_i p_i \langle \psi_i | A | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle, \\ \rho^2 &= \sum_i \sum_j p_i p_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \langle\psi_i|\psi_j\rangle \langle\psi_j|, \end{aligned}$$

$$\text{Tr}(\rho^2) = \sum_n \sum_{ij} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle = \sum_{ij} p_i p_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 \leq \sum_i p_i \sum_j p_j = 1.$$

Aus der Schrödingergleichung Gl. (111) und ihrer adjungierten folgt schließlich die *Von-Neumann Gleichung* für die Zeitentwicklung der Dichtematrix,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]. \quad (121)$$

Für die formale Lösung der Schrödingergleichung,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (122)$$

ergibt sich für die Zeitentwicklung der Dichtematrix

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0). \quad (123)$$

3 Eindimensionale Quantensysteme

Wir betrachten in diesem Kapitel die ein-dimensionale stationäre Schrödingergleichung Gl. (80),

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi_E(x). \quad (124)$$

3.1 Potentialstufen

Wir beobachten zunächst daß die Wellenfunktion und ihre erste Ableitungen an einer Sprungstelle x_0 des Potentials $V(x)$ aufgrund der Stetigkeit der rechten Seite von Gl. (124) stetig sein müssen, während die zweite Ableitung einen Sprung haben kann, so daß die *Anschlußbedingungen* bei $x = x_0$ lauten

$$\psi_-(x_0) = \psi_+(x_0), \quad \psi'_-(x_0) = \psi'_+(x_0), \quad (125)$$

wobei wir $\psi' = (d\psi/dx)$ setzen und $\psi_{\pm}(x_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0, \epsilon > 0} \psi(x_0 \pm \epsilon)$ etc.

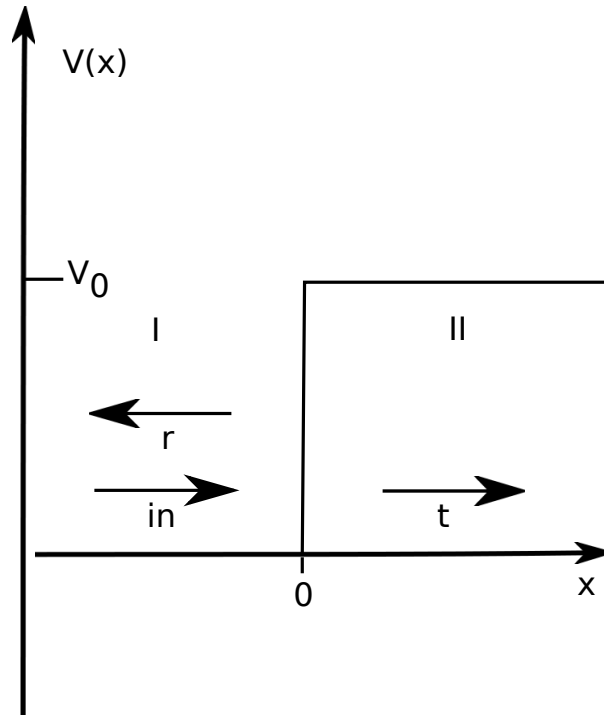


Abbildung 1: Eindimensionale Potentialstufe.

Wir betrachten die Potentialstufe in Fig. 1,

$$V(x) = V_0 \Theta(x); \quad \Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}, \quad (126)$$

mit $V_0 > 0$. Damit nimmt Gl. (124) die Form

$$\text{I: } x < 0: \quad \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = -k^2\psi_E(x); \quad k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar} \quad (127)$$

$$\text{II: } x > 0 : \quad \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = -q^2\psi_E(x); \quad q = \frac{[2m(E - V_0)]^{1/2}}{\hbar}$$

an, deren Lösungen Linearkombinationen von $e^{\pm ikx}$ bzw. $e^{\pm iqx}$ im Bereich I bzw. II sind. Wir nehmen zunächst $E > V_0$ an, d.h. $q \in \mathbb{R}$. Fallen die Teilchen nur von links, $x < 0$, ein, so kann es im Bereich II, $x > 0$, nur eine nach rechts laufende Welle $\propto e^{i(qx - Et/\hbar)}$ geben. Bis auf eine globale Normierungskonstante ist dann

$$\psi_E(x) = (e^{ikx} + Re^{-ikx})\Theta(-x) + Te^{iqx}\Theta(x). \quad (128)$$

Die Anschlussbedingungen Gl. (125) ergeben $1 + R = T$ und $ik(1 - R) = iqT$, mit der Lösung

$$R = \frac{k - q}{k + q}, \quad T = \frac{2k}{k + q}. \quad (129)$$

Mit Gl. (74) lässt sich nun leicht zeigen, daß die Stromdichte in Bereichen I und II durch

$$\begin{aligned} j_I(x) &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} [(e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) ik(e^{ikx} - Re^{-ikx})] = \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = j_{\text{in}} - j_r \\ j_{II}(x) &= \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = j_t, \end{aligned} \quad (130)$$

wobei j_{in} , j_r und j_t die einfallenden, reflektierten bzw. transmittierten Stromdichten sind. Tatsächlich folgt aus Gl. (129)

$$j_I = \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = j_{II} = \frac{\hbar q}{m} |T|^2, \quad \text{also } j_{\text{in}} = j_r + j_t, \quad (131)$$

was Teilchenzahlerhaltung entspricht. Ferner kann man schreiben

$$\frac{j_r}{j_{\text{in}}} \equiv r = |R|^2, \quad \frac{j_t}{j_{\text{in}}} \equiv t = \frac{q}{k} |T|^2, \quad (132)$$

mit den *Reflexions- und Transmissionskoeffizienten* r bzw. t . Die Reflexion mit Wahrscheinlichkeit r ist ein quantenmechanischer Effekt, der klassisch nicht stattfinden würde. Ferner hat man für $E \rightarrow \infty, E \gg V_0$ daß $q \rightarrow k$ und damit vollständige Transmission, $R \rightarrow 0, T \rightarrow 1$.

Für $E < V_0$ kann man in den obigen Formeln

$$q = i\kappa, \quad \text{mit } \kappa = \frac{[2m(V_0 - E)]^{1/2}}{\hbar} \in \mathbb{R} \quad (133)$$

substituieren. Damit wird

$$\psi_{II}(x) = Te^{-\kappa x}, \quad j_{II}(x) = 0 \quad (134)$$

und

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad T = \frac{2k}{k + i\kappa}, \quad (135)$$

so daß $|R|^2 = 1$ und damit $j_I = 0$, so daß die Teilchen vollständig reflektiert werden. Im Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ hat man $\kappa \rightarrow \infty, T \rightarrow 0, R \rightarrow -1$, womit

$$\psi_I(x) = e^{ikx} - e^{-ikx}, \quad j_I(0) = 0, \quad (136)$$

so daß die Wellenfunktion an einer unendlich hohen Barriere verschwinden muss.

3.2 Potentialschwellen und Tunneleffekt

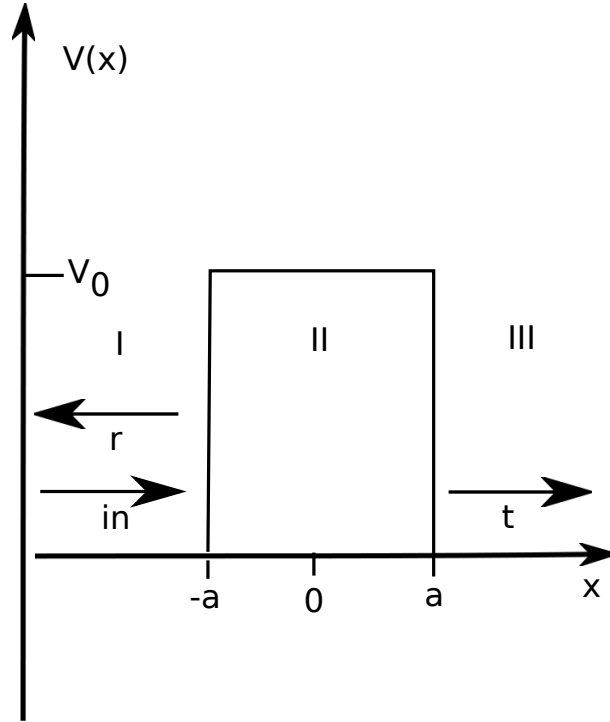


Abbildung 2: Eindimensionale Potentialschwelle.

Wir betrachten die Potentialschwelle in Fig. 2,

$$V(x) = V_0 \Theta(a - |x|), \quad (137)$$

mit $a > 0$, $V_0 > 0$ für $E < V_0$. Der Ansatz für die Wellenfunktion, die für $x > a$ nur aus einer auslaufenden Welle besteht, lautet

$$\psi_E(x) = (e^{ikx} + Re^{-ikx}) \Theta(-a-x) + (Ae^{-\kappa x} + Be^{+\kappa x}) \Theta(a-|x|) + Te^{ikx} \Theta(x-a), \quad (138)$$

mit

$$k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{[2m(V_0 - E)]^{1/2}}{\hbar}. \quad (139)$$

Nach längerer aber einfacher Rechnung ergibt sich

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\kappa a + (i/2) (\kappa/k - k/\kappa) \sinh 2\kappa a} \\ R(E) &= -\frac{i}{2} T(E) (\kappa/k + k/\kappa) \sinh 2\kappa a. \end{aligned} \quad (140)$$

In den allermeisten Anwendungen, so z.B. Kernzerfälle bei langen Lebensdauern, befindet man sich im Grenzfall einer sehr hohen und/oder breiten Barriere mit $\kappa a \gg 1$, in dem man $\sinh 2\kappa a \simeq e^{2\kappa a}/2$ setzen kann, so daß mit Hilfe von Gl. (139)

$$|T(E)|^2 \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} [2m(V_0 - E)]^{1/2} \right\} \simeq \exp \left\{ -\frac{4a}{\hbar} [2m(V_0 - E)]^{1/2} \right\}, \quad (141)$$

wobei wir in der zweiten Näherung den algebraischen Faktor gegenüber dem sehr viel kleineren Exponentialfaktor vernachlässigt haben. Kontinuierliche Potentialstufen $V(x)$, die sich auf einem Intervall $x \in [a, b]$ erstrecken, kann man sich als aus diskreten Potentialstufen zusammengesetzt denken, womit aus Gl. (141) folgt

$$|T(E)|^2 \simeq \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx [2m(V(x) - E)]^{1/2} \right\}. \quad (142)$$

Anwendungsbeispiel: Der α -Zerfall

Für den Zerfall eines Kerns in zwei Teilkerne mit Ladungszahl Z_1 und Z_2 , wobei $Z_2 = 2$ für den α -Zerfall, ist $V(x) = Z_1 Z_2 e^2 / x$, mit der Elementarladung e . Die Integrationsgrenzen in Gl. (142) sind dabei $a = R$, die Reichweite der Kernkraft, und $b = Z_1 Z_2 e^2 / E$, wo $V(b) = E$. Damit wird das Integral im Exponenten von Gl. (142)

$$\begin{aligned} \int_a^b dx [2m(V(x) - E)]^{1/2} &= (2mE)^{1/2} \int_R^b dx \left(\frac{b}{x} - 1 \right)^{1/2} = \\ &= (2mE)^{1/2} \left[(b-x)^{1/2} x^{1/2} + b \arctan \left(\frac{b}{x} - 1 \right)^{-1/2} \right]_R^b = \\ &= (2mE)^{1/2} b \left[\frac{\pi}{2} - \arctan \left(\frac{b}{R} - 1 \right)^{-1/2} - \left(1 - \frac{R}{b} \right)^{1/2} \left(\frac{R}{b} \right)^{1/2} \right] \\ &\simeq (2mE)^{1/2} b \left[\frac{\pi}{2} - 2 \left(\frac{R}{b} \right)^{1/2} \right], \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt eine Reihenentwicklung bis zur ersten Ordnung in der kleinen Größe R/b mit Benutzung von $\arctan x = x + \mathcal{O}(x^3)$ gemacht haben. Insgesamt erhalten wir damit für Gl. (142)

$$|T(E)|^2 \simeq \exp \left\{ -\frac{\pi(2m)^{1/2} Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \left[E^{-1/2} - \frac{4}{\pi} \left(\frac{R}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^{1/2} \right] \right\}. \quad (143)$$

Für α -Zerfall erhält man dann mit $R \simeq 1.5 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm} \simeq 2 \times 10^{-13} Z_1^{1/3} \text{ cm}$,

$$\log_{10} |T(E)|^2 \sim -64 \left(\frac{Z_1}{92} \right) \left(\frac{6 \text{ MeV}}{E} \right)^{1/2} + 37 \left(\frac{Z_1}{92} \right)^{2/3}, \quad (144)$$

wobei wir als charakteristisches Element Uran mit $Z_1 = 92$ gewählt haben. Daran sieht man noch einmal deutlich, daß die Näherung grosser negativer Exponenten in Gl. (141) sehr gut erfüllt ist.

Die Zerfallsrate kann man dann abschätzen als Produkt der Stoßfrequenz gegen die Potentialwand mit der Tunnelwahrscheinlichkeit $|T(E)|^2$. Die Stoßfrequenz ist $\simeq 2R/v_i$, wobei wir die Abhängigkeit von der Geschwindigkeit des α -Teilchens im betrachteten Kern gegenüber Unsicherheiten des sehr viel wichtigeren Exponentialfaktors vernachlässigen können und für schwere Kerne $v_i \simeq 10^9 \text{ cm s}^{-1}$ setzen. Für die *Halbwertszeit* erhalten wir damit

$$\log_{10} \left(\frac{\tau}{\text{yr}} \right) \sim -29 + 64 \left(\frac{Z_1}{92} \right) \left(\frac{6 \text{ MeV}}{E} \right)^{1/2} - 37 \left(\frac{Z_1}{92} \right)^{2/3}. \quad (145)$$

Diese Abhängigkeit von E ist grob mit experimentellen Daten konsistent und ist auch als *Geiger-Nuttall Relation* bekannt. So zerfällt z.B. Uran 230 in Thorium 226 und ein α -Teilchen mit der Energie $E \simeq 6 \text{ MeV}$ mit einer Halbwertszeit $\tau \simeq 20.8 \text{ Tage}$, während aus Gl. (145) $\tau \sim 0.05 \text{ yr} \simeq 18 \text{ Tage}$, was recht gut mit der gemessenen Halbwertszeit übereinstimmt.

3.3 Der Potentialtopf

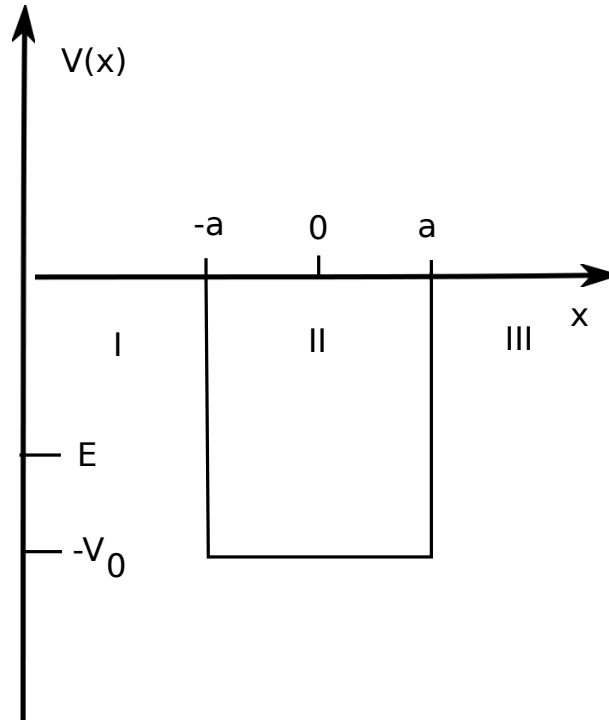


Abbildung 3: Eindimensionaler Potentialtopf.

Wir betrachten nun noch den Potentialtopf in Fig. 3,

$$V(x) = -V_0 \Theta(a - |x|), \quad (146)$$

mit $a > 0$, $V_0 > 0$.

3.3.1 Bindungszustände

Wir interessieren uns zunächst für *Bindungszustände*, für welche $-V_0 \leq E_b \leq 0$. Wir machen dazu zunächst folgende allgemeine Beobachtung: Der *Paritätsoperator*

$$P\psi(x) = \psi(-x) \quad (147)$$

kommutiert mit dem Hamiltonoperator falls das Potential paritätsinvariant ist, $PV(x) = V(-x) = V(x)$,

$$[P, H] = 0. \quad (148)$$

Ist damit $\psi_E(x)$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert E , so ist auch $\psi_E(-x)$ eine Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert E . Wir können uns daher auf gerade und ungerade Eigenfunktionen beschränken. Die Eigenfunktion zu einem entarteten Eigenwert ist damit automatisch gerade oder ungerade. Da ferner die Eigenwertgleichung (124) auch für die komplex konjugierte Eigenfunktion $\psi_E^*(x)$ gilt, kann man die Eigenfunktionen reell wählen. Für den spiegelsymmetrischen Potentialtopf Gl. (146) können wir demnach gerade und ungerade Eigenfunktionen ansetzen,

$$\psi_E^+(x) = e^{\kappa x} \Theta(-a - x) + A \cos qx \Theta(a - |x|) + e^{-\kappa x} \Theta(x - a), \quad (149)$$

bzw.

$$\psi_E^-(x) = -e^{\kappa x} \Theta(-a - x) + A \sin qx \Theta(a - |x|) + e^{-\kappa x} \Theta(x - a), \quad (150)$$

mit

$$q = \frac{[2m(E_b + V_0)]^{1/2}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{(-2mE_b)^{1/2}}{\hbar}, \quad (151)$$

womit die Energie-Eigenwerte in Beziehung stehen durch

$$E_b = -V_0 + \frac{(\hbar q)^2}{2m} = -V_0 \left[1 - \frac{(qa)^2}{\chi^2} \right], \quad (152)$$

wobei wir den die Stärke des Potentialtopfes charakterisierenden dimensionslosen Parameter

$$\chi \equiv \frac{(2mV_0)^{1/2} a}{\hbar} \quad (153)$$

eingeführt haben.

Für *gerade Symmetrie* lauten die Stetigkeitsbedingungen Gl. (125) bei $x = \pm a$ nun $A \cos qa = e^{-\kappa a}$ und $Aq \sin qa = \kappa e^{-\kappa a}$, was auf die transzendente Gleichung

$$\tan qa = \frac{\kappa}{q} = \frac{[\chi^2 - (qa)^2]^{1/2}}{qa}, \quad \text{mit } 0 \leq qa \leq \chi, \quad (154)$$

führt. Man sieht daraus leicht, daß die Anzahl der Lösungen von Gl. (154) für qa durch den ganzzahligen Teil von $\chi/\pi + 1$ gegeben ist.

Für *ungerade Symmetrie* lauten die Stetigkeitsbedingungen Gl. (125) bei $x = \pm a$ nun $A \sin qa = e^{-\kappa a}$ und $Aq \cos qa = -\kappa e^{-\kappa a}$, was auf die transzendente Gleichung

$$-\cot qa = \frac{\kappa}{q} = \frac{[\chi^2 - (qa)^2]^{1/2}}{qa}, \quad \text{mit } 0 \leq qa \leq \chi, \quad (155)$$

führt. Die Anzahl der Lösungen von Gl. (155) für qa ist dann durch den ganzzahligen Teil von $\chi/\pi + \frac{1}{2}$ gegeben. Insbesondere gibt es ungerade Lösungen nur für $\chi \geq \pi/2$, oder wegen Gl. (153) für

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}. \quad (156)$$

3.3.2 Streuzustände

Betrachten wir nun noch den Fall $E > 0$, d.h. *Streuzustände*. Für diesen Fall können wir in den Ergebnissen Gl. (138)-(140) für die Potentialstufe das Vorzeichen von V_0 invertieren. Damit wird $\kappa = iq$ mit

$$k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar}, \quad q = \frac{[2m(V_0 + E)]^{1/2}}{\hbar}. \quad (157)$$

und wegen $\cosh iq = \cos q$ und $\sinh iq = i \sin q$

$$T(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos 2qa - (i/2)(q/k + k/q) \sin 2qa} \quad (158)$$

Daraus folgt

$$|T(E)|^2 = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \sin^2(2qa) \right]^{-1} = \left[1 + \frac{V_0^2}{E(E + V_0)} \sin^2(2qa) \right]^{-1}, \quad (159)$$

wobei wir im letzten Ausdruck $[(q/k) - (k/q)]^2 = (q^2 - k^2)^2/(q^2k^2) = V_0^2/[E(E + V_0)]$ verwendet haben. Für $E > 0$ ist damit $0 \leq |T(E)|^2 \leq 1$, wobei $|T(E)|^2 = 1$ für

$$2qa = n\pi \Leftrightarrow E = E_r = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - V_0 \geq 0, n \in \mathbb{N}. \quad (160)$$

An diesen *Resonanzenergien* ist der Potentialtopf also vollständig durchlässig. Die Taylor-Entwicklung

$$\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \tan 2qa = \frac{2}{\Gamma} (E - E_r) + \dots$$

um die Resonanzenergie Gl. (160), wobei

$$\frac{2}{\Gamma} \equiv \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \frac{d(2qa)}{dE} \right]_{E_r} = \left(\frac{m}{2} \right)^{1/2} \frac{a}{\hbar} \frac{2E_r + V_0}{E_r^{1/2}(E_r + V_0)} \quad (161)$$

führt Gl. (158) über in

$$T(E)e^{2ika} \simeq (-1)^n \frac{i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2}. \quad (162)$$

Dabei ist Γ die *Breite* der Resonanz. Die resultierende Form des Transmissionskoeffizienten

$$|T(E)|^2 \simeq \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (163)$$

ist die bekannte *Breit-Wigner-Funktion*. Man beachte daß für tiefe Potentialtöpfe, $E_r \ll V_0$, aus Gl. (161) $\Gamma \simeq 2(2E_r/m)^{1/2}(\hbar/a)$. Insbesondere für sehr breite Potentialtöpfe, $\hbar/a \ll (V_0m)^{1/2}$ wird die Breite der Resonanz sehr klein im Vergleich zur Resonanzenergie, $\Gamma \ll E_r$.

Betrachten wir nun die Pole von $T(E)$. Nach Gl. (158) treten Pole auf falls $\cot 2qa = (i/2)(q/k + k/q)$, oder wegen $\cot 2qa = (\cot qa - \tan qa)/2$,

$$\cot qa - \tan qa = i \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \Leftrightarrow \tan qa = -\frac{ik}{q} \text{ oder } \cot qa = \frac{ik}{q}. \quad (164)$$

Wenn sowohl q als auch k entweder reell oder imaginär sind, also wenn entweder $E < -V_0$ oder $E > 0$ ist, haben diese Gleichungen keine Lösungen. Lediglich wenn $-V_0 < E < 0$, wenn also q reell und $k = i\kappa$ imaginär ist mit $\kappa = (2m|\kappa|)^{1/2}/\hbar$ reell, dann gibt es die Lösungen

$$\tan qa = \frac{\kappa}{q} \text{ und } \cot qa = -\frac{\kappa}{q}. \quad (165)$$

Dies sind aber gerade die Bedingungen für die geraden bzw. ungeraden Bindungszustände Gl. (154) bzw. Gl. (155). $T(E)$ hat also gerade bei den Bindungsenergien $E = E_b$ Pole.

3.4 Der Quantenoszillator

Wir betrachten nun die stationäre Schrödinger Gleichung (124) für ein quadratisches Potential,

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (166)$$

welche dem klassischen Oszillator mit der natürlichen Frequenz $\omega = (k/m)^{1/2}$ entspricht. Wir führen folgende Linearkombinationen von Orts- und Impulsoperator x bzw. p ein,

$$a = \frac{\omega mx + ip}{(2\hbar\omega m)^{1/2}} = \frac{1}{2^{1/2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right), \quad a^\dagger = \frac{\omega mx - ip}{(2\hbar\omega m)^{1/2}} = \frac{1}{2^{1/2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right), \quad (167)$$

wobei wir die charakteristische Länge $x_0 = [\hbar/(\omega m)]^{1/2}$. Die Operatoren a und a^\dagger sind hermitesch konjugiert zueinander. Die Umkehrung lautet

$$x = \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^{1/2} (a + a^\dagger) = \frac{x_0}{2^{1/2}} (a + a^\dagger), \quad p = -i \left(\frac{\hbar\omega m}{2} \right)^{1/2} (a - a^\dagger) = -\frac{i\hbar}{2^{1/2}x_0} (a - a^\dagger). \quad (168)$$

Aus den Kommutationsrelationen Gl. (51) folgt nun

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (169)$$

Die Hamilton-Funktion lässt sich damit schreiben als

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (170)$$

wobei im dritten Schritt der Kommutator Gl. (169) verwendet wurde. Damit ist das Problem auf das Auffinden der Eigenfunktionen zum *Besetzungszahl-Operator*

$$N = a^\dagger a \quad (171)$$

reduziert. Zunächst gilt für die Eigenwerte n von N zum Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ daß $n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a^\dagger a \psi_n \rangle = \langle a \psi_n | a \psi_n \rangle \geq 0$, also $n \geq 0$. Für $n = 0$ gilt

$$a |\psi_0\rangle = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{d}{dx} + \frac{x}{x_0^2} \right) \psi_0(x) = 0, \quad (172)$$

mit der normierten Lösung

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(\pi^{1/2} x_0)^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right]. \quad (173)$$

Daraus ist sofort offensichtlich, daß der Grundzustand eine endliche Ortsunschärfe $\langle (\Delta x)^2 \rangle > 0$ und damit wegen der Unschärferelation Gl. (46) auch eine Impulsunschärfe besitzt. Dies bedeutet, daß auch der Grundzustand eine positive Energie haben muss, die nach Gl. (170) gleich $\frac{1}{2} \hbar \omega$ ist und auch als *Nullpunktsenergie* bezeichnet wird.

Nach Gl. (169) ist

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a, \quad (174)$$

woraus wegen $N a^\dagger |\psi_n\rangle = (n+1) a^\dagger |\psi_n\rangle$ folgt, daß $a^\dagger |\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand von N zum Eigenwert $n+1$ ist, falls $|\psi_n\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert n ist. Ferner ist $\langle a^\dagger \psi_n | a^\dagger \psi_n \rangle = \langle \psi_n | a a^\dagger \psi_n \rangle = \langle \psi_n | (a^\dagger a + 1) \psi_n \rangle = (n+1) \langle \psi_n | \psi_n \rangle$, womit für $\langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle = 1$ gilt

$$a^\dagger |\psi_n\rangle = (n+1)^{1/2} |\psi_{n+1}\rangle. \quad (175)$$

Damit kann man $|\psi_n\rangle$ aus $|\psi_0\rangle$ von Gl. (173) konstruieren,

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}} (a^\dagger)^n |\psi_0\rangle, \quad \text{mit } H |\psi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega |\psi_n\rangle. \quad (176)$$

Schließlich folgt aus Gl. (169) daß $[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}$, womit aus Gl. (176) folgt

$$a |\psi_n\rangle = n^{1/2} |\psi_{n-1}\rangle \quad \text{für } n \geq 1 \quad \text{und } a |\psi_0\rangle = 0, \quad (177)$$

wobei die zweite Gleichung mit Gl. (172) übereinstimmt. Aufgrund der Beziehungen Gl. (175) und Gl. (177) werden a und a^\dagger auch als *Absteige- oder Vernichter-Operatoren* bzw. als *Aufsteige- oder Erzeuger-Operatoren*, und manchmal auch als *Leiter-Operatoren* bezeichnet.

Man kann nun noch zeigen daß es neben den Zuständen Gl. (176) keine weiteren Eigenzustände zu N gibt: Sei $|\psi_\nu\rangle$ eine Eigenfunktion von N mit Eigenwert $\nu = n + \alpha$ mit $n \in \mathbb{N}_0$ und $0 < \alpha < 1$, $N |\psi_\nu\rangle = \nu |\psi_\nu\rangle$. Aus Gl. (174) folgt daß $[N, a^m] = -m a^m$, so daß $N(a^m |\psi_\nu\rangle) = (\alpha + n - m)(a^m |\psi_\nu\rangle)$ für $m \in \mathbb{N}_0$. Ferner ist

$$\langle a^{m+1} \psi_\nu | a^{m+1} \psi_\nu \rangle = \langle a^m \psi_\nu | (a^\dagger a) a^m \psi_\nu \rangle = (\alpha + n - m) \langle a^m \psi_\nu | a^m \psi_\nu \rangle,$$

woraus durch Iteration folgt daß die Zustände $a^m |\psi_\nu\rangle$ für $m \leq n+1$ positive Norm haben. Der Zustand $a^{n+1} |\psi_\nu\rangle$ ist aber Eigenzustand von N zum negativen Eigenwert $\alpha - 1$, was der oben abgeleiteten Positivität der Eigenwerte widerspricht.

Mit Hilfe von Gl. (167) und Gl. (173) kann man die Eigenfunktionen Gl. (176) schreiben als

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \frac{1}{(2^n n! \pi^{1/2} x_0)^{1/2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right] = \\ &= \frac{1}{(2^n n! \pi^{1/2} x_0)^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right] H_n \left(\frac{x}{x_0} \right),\end{aligned}\quad (178)$$

mit den *Hermite-Polynomen*

$$H_n(x) \equiv e^{x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2}.\quad (179)$$

Wir betrachten nun noch Eigenfunktionen des Vernichters a ,

$$a|\phi_\alpha\rangle = \alpha|\phi_\alpha\rangle.\quad (180)$$

mit komplexen Eigenwerten $\alpha \in \mathbb{C}$. Wegen

$$\langle \psi_n | \phi_\alpha \rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}} \langle (a^\dagger)^n \psi_0 | \phi_\alpha \rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}} \langle \psi_0 | a^n \phi_\alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} \langle \psi_0 | \phi_\alpha \rangle$$

lautet die Entwicklung nach Energie-Eigenfunktionen

$$|\phi_\alpha\rangle = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} |\psi_n\rangle = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |\psi_0\rangle = C e^{\alpha a^\dagger} |\psi_0\rangle.\quad (181)$$

Für auf Eins normiertes $|\phi_\alpha\rangle$ ist die Normierungskonstante

$$C = e^{-|\alpha|^2/2}.\quad (182)$$

Für die Zeitentwicklung folgt wegen $|\psi_n(t)\rangle = \exp[-i\hbar\omega(n + \frac{1}{2})]|\psi_n(t=0)\rangle$ daraus sofort

$$|\phi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\phi_\alpha(t)\rangle,\quad (183)$$

weshalb diese Zustände als *kohärente Zustände* bezeichnet werden. Mit Hilfe von Gl. (168) kann man dann zeigen daß

$$\langle x \rangle = \langle \phi_{\alpha(t)} | x \phi_{\alpha(t)} \rangle = \frac{x_0}{2^{1/2}} \langle \phi_{\alpha(t)} | (a + a^\dagger) \phi_{\alpha(t)} \rangle = \frac{x_0}{2^{1/2}} [\alpha(t) + \alpha^*(t)],$$

was mit $\alpha = |\alpha|e^{i\delta}$ zu

$$\langle x \rangle = 2^{1/2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta)\quad (184)$$

wird. Dies entspricht einer klassischen Schwingung ! Man kann leicht zeigen, daß $|\phi_\alpha(t)\rangle$ einem Gaußschen Wellenpaket mit aufgrund der speziellen Phasenbeziehung zwischen den Termen in Gl. (181) zeitlich konstanter Breite. Ferner betrachten wir die Größe der

Koeffizienten in der Entwicklung Gl. (181) für $n \gg 1$ und bezeichnen ihren Logarithmus mit $f(n)$. Aufgrund der Stirlingschen Näherung $n! \simeq (2\pi n)^{1/2}(n/e)^n$ ist

$$\begin{aligned} f(n) &\equiv \ln \frac{|\alpha|^n}{(n!)^{1/2}} \simeq n \ln |\alpha| - \frac{1}{4} \ln 2\pi - \frac{1}{4} \ln n + \frac{n}{2}(1 - \ln n) \\ f'(n) &\simeq \ln |\alpha| - \frac{1}{4n} - \frac{1}{2} \ln n \simeq \ln |\alpha| - \frac{1}{2} \ln n \\ f''(n) &\simeq \frac{1}{4n^2} - \frac{1}{2n} \simeq -\frac{1}{2n}. \end{aligned}$$

Wir sehen daraus daß die Koeffizienten ein Maximum bei $f'(n_0) = 0$, also bei $n = n_0 \simeq |\alpha|^2$, haben. Die Breite Δn dieses Maximums ist wegen

$$|\langle \psi_n | \phi_\alpha \rangle| \propto \exp[f(n)] = \exp \left[f(n_0) + \frac{1}{2} f''(n_0)(n - n_0)^2 \right] \propto \exp \left[-\frac{(n - n_0)^2}{4n_0} \right]$$

gegeben durch $(\Delta n)^2/(4n_0) \simeq 1$, also $\Delta n \simeq 2n_0^{1/2} \simeq |\alpha|$ und somit $\Delta n/n_0 \simeq 2n_0^{-1/2}$. Das Maximum wird also mit wachsendem n_0 zunehmend schärfer. Ferner ist der Erwartungswert der Energie

$$\langle \phi_\alpha | H | \phi_\alpha \rangle \simeq \hbar\omega |\alpha|^2 = \frac{m\omega^2}{2} A,$$

wobei $A = 2^{1/2}x_0|\alpha|$ die Amplitude der Schwingung Gl. (184) ist. Die Energie entspricht also genau der klassischen Schwingungsenergie !

4 Unschärferelationen

Wir bemerken zunächst daß für zwei hermitesche Operatoren A und B und einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ gilt

$$\langle \psi | A^2 \psi \rangle \langle \psi | B^2 \psi \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [A, B] \psi \rangle|^2. \quad (185)$$

Dies folgt durch Anwendung der Schwarzschen Ungleichung auf die Zustände $|A\psi\rangle$ und $|B\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \psi | A^2 \psi \rangle \langle \psi | B^2 \psi \rangle = \langle A\psi | A\psi \rangle \langle B\psi | B\psi \rangle &\geq |\langle \psi | AB\psi \rangle|^2 = \\ &= \frac{1}{4} (|\langle \psi | \{A, B\} \psi \rangle|^2 + |\langle \psi | [A, B] \psi \rangle|^2), \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben daß sich AB in Anti-Kommutator und Kommutator zerlegen lässt, $AB = \frac{1}{2}\{A, B\} + \frac{1}{2}[A, B]$, deren Erwartungswerte reell bzw, imaginär sind. Anwendung von Gl. (185) auf $A - \langle A \rangle$ und $B - \langle B \rangle$ ergibt damit die *allgemeine Heisenbergsche Unschärferelation*,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (186)$$

Für $A = x_i$ und $B = p_j$ erhält man natürlich wieder Gl. (46).

Es gibt auch eine *Energie-Zeit-Unschärfe*, die jedoch weniger fundamental ist als Gl. (186), da die Zeit in der Quantenmechanik ein Parameter und kein Operator ist. Im wesentlichen kommt sie dadurch zustande daß der Zeitunschärfe Δt beim Impuls $p = mv$ eine Ortsunschärfe $\Delta x \simeq v\Delta t = p\Delta t/m$ entspricht, womit

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = m \frac{\Delta x}{p} \geq \frac{\hbar m}{2p\Delta p} = \frac{\hbar}{2\Delta E}. \quad (187)$$

In der zeitabhängigen Störungstheorie werden wir dann auch sehen daß ein Zustand mit Lebensdauer τ eine Energie-Unschärfe

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}. \quad (188)$$

Aus Gl. (186) folgt insbesondere daß es für kommutierende Operatoren A und B Zustände geben muss, in denen A und B beliebig genau messbar sind. In der Tat zeigen wir nun daß

$$[A, B] = 0 \Leftrightarrow A \text{ und } B \text{ haben ein gemeinsames System von Eigenfunktionen.} \quad (189)$$

Aus der zweiten Annahme folgt natürlich die erste trivialerweise weil $[A, B]|\psi_n\rangle = 0$ für alle gemeinsame Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$, von denen wir annehmen daß sie vollständig sind, also den gesamten Hilbertraum aufspannen und damit eine *Basis* von A und B bilden. Sei umgekehrt $[A, B] = 0$ so ist für jeden Eigenzustand $|\psi_i\rangle$ zum Eigenwert a von A auch $B|\psi_i\rangle$ Eigenzustand von A zum Eigenwert a , allerdings im allgemeinen nicht Eigenzustand von B . Für einen n -fach entarteten Eigenwert a mit einer Orthonormalbasis $|\psi_i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ ist

$$B|\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^n C_{ij}|\psi_j\rangle, \quad \text{mit } C_{ij} = \langle\psi_j|B\psi_i\rangle = C_{ji}^*.$$

Dann gibt es eine unitäre $n \times n$ -Matrix U , die die hermitesche Matrix C_{ij} diagonalisiert, $U^\dagger C U = \text{diag}(C_{ii}^d)$ und damit $U^\dagger C = \text{diag}(C_{ii}^d) U^\dagger$, oder $\sum_{j=1}^n C_{ji}^* C_{jk} = C_{ii}^d U_{ki}^*$. Damit sind die orthonormierten Zustände $|\tilde{\psi}_i\rangle \equiv \sum_{j=1}^n U_{ji}^* |\psi_j\rangle$ Eigenzustände von A und B , weil

$$B|\tilde{\psi}_i\rangle = \sum_{j=1}^n U_{ji}^* B|\psi_j\rangle = \sum_{j,k=1}^n U_{ji}^* C_{jk} |\psi_k\rangle = \sum_{k=1}^n C_{ii}^d U_{ki}^* |\psi_k\rangle = C_{ii}^d |\tilde{\psi}_i\rangle.$$

In diesen Zuständen sind A und B *gleichzeitig messbar*. Schließlich bezeichnet man einen Satz von Operatoren A, B, \dots, L , die paarweise kommutieren und eine gemeinsame Basis von Eigenfunktionen besitzt, die nicht mehr entartet sind, als *vollständig*. Dies bedeutet daß für alle Paare von verschiedenen Eigenfunktionen ψ_1 und ψ_2 aus der gemeinsamen Basis $O\psi_1 = o_1\psi_1$ und $O\psi_2 = o_2\psi_2$ mit $o_1 \neq o_2$ für mindestens einen Operator O aus dem Satz von Operatoren A, B, \dots, L ist. Man kann dann leicht zeigen daß wenn ein Operator O eine Funktion des vollständigen Satzes A, B, \dots, L ist, dann hat O die Basis des vollständigen Satzes auch als Basis. Ferner muss ein Operator O , der mit dem vollständigen Satz kommutiert, eine Funktion dieser Operatoren sein, da er deren Basis hat und seine Eigenwerte damit eine Funktion deren Eigenwerte sein muss. In D -dimensionalen Systemen bilden z.B. die Orts-Operatoren x_ν , $1 \leq \nu \leq D$ oder die Impuls-Operatoren p_ν einen vollständigen Operator-Satz.

5 Drehimpuls

5.1 Drehungen im Ortsraum und ihre Erzeugenden

Der *Bahndrehimpuls-Operator* ist definiert durch

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla, \quad L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k, \quad (190)$$

wobei im zweiten Ausdruck gemäß der *Einsteinschen Summationskonvention* über doppelt auftretene Indizes summiert wird und der vollständig anti-symmetrische Tensor durch

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Permutationen von } (1, 2, 3) \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen von } (1, 2, 3) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (191)$$

gegeben ist. Durch Benutzung von Gl. (51) erhält man die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, r_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} r_k \\ [L_i, p_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} p_k. \end{aligned} \quad (192)$$

Der Kommutator der Komponenten L_j , r_j und p_j , die jeweils einen Vektor bilden, haben also immer die gleiche Struktur. Dies ist kein Zufall und wir werden später sehen, daß dies für alle Vektor-Operatoren gilt.

Der Drehimpuls-Operator \mathbf{L} ist die *Erzeugende* von Drehungen um einen Winkel ϕ . Dies bedeutet daß der Operator

$$U_\phi \equiv \exp \left[\frac{i}{\hbar} \phi \cdot \mathbf{L} \right] \quad (193)$$

unitär ist, da $U_\phi^\dagger = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \phi \cdot \mathbf{L} \right] = U_\phi^{-1}$ wegen der Hermitizität von \mathbf{L} , und daß

$$U_\phi \psi(\mathbf{r}) = \psi(O_\phi \mathbf{r}) \quad (194)$$

gilt, wobei O_ϕ die orthogonale Matrix ist, die einer Drehung um den Winkel $|\phi|$ um die Achse ϕ entspricht. Letzteres kann man für eine infinitesimale Rotation $\phi = \delta\phi$ mit $|\delta\phi| \ll 1$, leicht zeigen,

$$U_{\delta\phi} \psi(\mathbf{r}) \simeq \left[1 + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \cdot \left(\mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \right] \psi(\mathbf{r}) = [1 + (\delta\phi \times \mathbf{r}) \cdot \nabla] \psi(\mathbf{r}) \simeq \psi(\mathbf{r} + \delta\phi \times \mathbf{r}),$$

wobei wir benutzt haben daß $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$ (Spatprodukt). Dabei ist zu beachten daß der Gradient immer nur auf $\psi(\mathbf{r})$ wirkt und daher rechts stehen bleiben muss. Dies entspricht nun tatsächlich einer infinitesimalen Drehung, welche \mathbf{r} in $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\phi \times \mathbf{r}$ überführt. Beispiel: Für eine Drehung um die z -Achse ist $\delta\phi = \delta\phi \mathbf{e}_z$ und somit

$$\begin{aligned} x' &= x - \delta\phi y \simeq x \cos \delta\phi - y \sin \delta\phi \\ y' &= y + \delta\phi x \simeq x \sin \delta\phi + y \cos \delta\phi \\ z' &= z. \end{aligned}$$

Da $\delta\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{L}$ mit sich selbst kommutiert, können wir jede Drehung um einen endlichen Winkel aus infinitesimalen Drehungen um die gleiche Achse zusammensetzen, so daß Gl. (194) für alle Drehungen gilt.

Ferner wird damit für $A\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r})$ die Wirkung eines Operators A im gedrehten Bezugssystem beschrieben durch

$$A' = UAU^\dagger, \quad A'\psi(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r}'), \quad (195)$$

was für infinitesimale Drehungen zu

$$A' \simeq A + \frac{i}{\hbar} \delta\boldsymbol{\phi} \cdot [\mathbf{L}, A] = A + \frac{i}{\hbar} \delta\phi_j [L_j, A] \quad (196)$$

wird. Insbesondere ist für einen skalaren Operator

$$A' = A, \quad [\mathbf{L}, A] = 0, \quad (197)$$

und für einen vektoriellen Operator A_i mit einem räumlichen Index muss $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{A}$ oder $A'_i = A_i + \epsilon_{ijk} \delta\phi_j A_k$ gelten, woraus durch Vergleich mit Gl. (196) folgt

$$[L_i, A_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} A_k, \quad (198)$$

was Gl. (192) entspricht.

5.2 Eigenwertspektrum der Drehimpuls-Operatoren

Im folgenden werden wir nur die Vertauschungsrelationen Gl. (192) benutzen und nicht ihre spezielle Realisierung durch den Bahn-Drehimpuls Gl. (190) voraussetzen. Unsere Schlussfolgerungen werden daher auch auf den *Spin* zutreffen, während wir auf den Bahn-Drehimpuls im nächsten Abschnitt zurückkommen werden.

Zunächst folgt aus Gl. (197)

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0, \quad (199)$$

was natürlich auch direkt z.B. aus $[\mathbf{L}^2, L_1] = \{L_2, [L_2, L_1]\} + \{L_3, [L_3, L_1]\} = -i\hbar\{L_2, L_3\} + i\hbar\{L_3, L_2\} = 0$ folgt. Man kann also \mathbf{L}^2 und eine der Komponenten L_i gleichzeitig diagonalisieren. Für letztere verwenden wir ohne Einschränkung der Allgemeinheit $L_z = L_3$ und bezeichnen die Eigenfunktionen mit $|l, m\rangle$, mit

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ L_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle. \end{aligned} \quad (200)$$

Wir führen ferner die *Drehimpuls-Leiter-Operatoren*

$$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y \quad (201)$$

ein, welche die folgenden wichtigen Eigenschaften haben,

$$\begin{aligned} L_\pm^\dagger &= L_\mp \\ [L_z, L_\pm] &= \pm\hbar L_\pm \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar L_z \\ [\mathbf{L}^2, L_\pm] &= 0 \\ L_+ L_- &= L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z \\ \mathbf{L}^2 &= L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z. \end{aligned} \quad (202)$$

Aus diesen Relationen folgt sofort daß $L_{\pm}|l, m\rangle$ eine Eigenfunktion $|l, m \pm 1\rangle$ zu L_z mit Eigenwert $\hbar m \pm 1$ und zu \mathbf{L}^2 mit unverändertem Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ ist. Wegen

$$\begin{aligned} \|L_{\pm}|l, m\rangle\|^2 &= \langle l, m|L_{\mp}L_{\pm}|l, m\rangle = \langle l, m|\mathbf{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z|l, m\rangle = \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m^2 \mp m] \langle l, m|l, m\rangle \end{aligned} \quad (203)$$

ist ferner

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} |l, m \pm 1\rangle = \hbar [(l \mp m)(l \pm m + 1)]^{1/2} |l, m \pm 1\rangle \quad (204)$$

wenn die Zustände $|l, m\rangle$ für alle Eigenwerte normiert sind. Da die Norm Gl. (203) nicht-negativ ist, folgt außerdem $l(l+1) \geq m(m+1)$ und $l(l+1) \geq m(m-1) = (-m)(-m+1)$ und damit $l(l+1) \geq |m|(|m|+1)$ oder $|m| \leq l$. Schließlich muss der größte Eigenwert m von L_z gleich l sein, sonst gäbe es ein $l-1 < m < l$ für welches nach Gl. (204) $L_+|l, m\rangle$ eine nicht-verschwindende Eigenfunktion von L_z zum Eigenwert $m+1 > l$ wäre, im Widerspruch zu $|m| \leq l$. Analog zeigt man daß der kleinste Eigenwert von L_z gleich $-l$ sein muss. Durch k -malige Anwendung von L_- auf $|l, l\rangle$, mit $k \in \mathbb{N}$, muss man also auf $|l, -l\rangle$ kommen, weshalb $l-k = -l$, womit $l = k/2$ halbzahlig oder ganzzahlig sein muss. Die zugehörigen $2l+1$ Werte von m sind

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (205)$$

5.3 Eigenfunktionen des Bahn-Drehimpulses

Kartesische Koordinaten (x, y, z) und Polarkoordinaten (r, θ, ϕ) hängen über $\mathbf{r} = (x, y, z) = r(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) = r\mathbf{e}_r$ zusammen, wobei \mathbf{e}_r der radiale Einheitsvektor ist. In Polarkoordinaten ist der Gradient gegeben durch

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (206)$$

wobei \mathbf{e}_θ und \mathbf{e}_ϕ die Einheitsvektoren in θ - bzw. ϕ -Richtung sind. Daraus erhält man nach einfacher Rechnung

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \\ L_{\pm} &= \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \mathbf{L}^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \end{aligned} \quad (207)$$

Den Zuständen $|l, m\rangle$ entsprechen normierten Wellenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ in Polarkoordinaten, die als *Kugelfunktionen* bekannt sind. Mit dem Separations-Ansatz

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) \quad (208)$$

führen die Eigenwert-Gleichungen (200) in der Polarkoordinaten-Darstellung Gl. (207) auf

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] \Theta_{lm}(\theta) = 0. \quad (209)$$

Wir konstruieren zunächst $Y_u(\theta, \phi)$ aus der Beziehung

$$0 = L_+ Y_u(\theta, \phi) = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Theta_u(\theta) e^{il\phi},$$

wobei Gl. (207) verwendet wurde. Dies ergibt

$$\frac{\partial \Theta_u(\theta)}{\partial \theta} = l \cot \theta \Theta_u(\theta),$$

mit der Lösung $\Theta_u(\theta) = C_l \sin^l \theta$ mit einer Normierungskonstanten C_l , also

$$Y_u(\theta, \phi) = C_l \sin^l \theta e^{il\phi}.$$

Mit Hilfe des Raumwinkelements $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi = d\chi d\phi$ mit $\chi \equiv \cos \theta$ kann man C_l aus der Normierungsbedingung

$$\int d\Omega |Y_u(\theta, \phi)|^2 = 2\pi |C_l|^2 \int_{-1}^{+1} d\cos \theta \sin^{2l} \theta = 4\pi |C_l|^2 I_l,$$

erhalten, wobei man durch partielle Integration die Rekursionsformel

$$I_l = \int_0^1 d\chi (1 - \chi^2)^l = 2l \int_0^1 d\chi \chi^2 (1 - \chi^2)^{l-1} = 2l(I_{l-1} - I_l)$$

erhält, welche mit $I_0 = 1$ zu

$$\begin{aligned} I_l &= \frac{2l}{2l+1} I_{l-1} = \frac{2l}{2l+1} \frac{2(l-1)}{2(l-1)+1} \cdots \frac{2 \cdot 1}{2+1} = \frac{2l(2l-2) \cdots 2}{(2l+1)(2l-1) \cdots 3} = \\ &= \frac{[2l(2l-2) \cdots 2]^2}{(2l+1)!} = \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!} \end{aligned}$$

führt. Damit kann man

$$Y_u(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \sin^l \theta e^{il\phi} \quad (210)$$

als normierte Wellenfunktion wählen. Durch $(l-m)$ -malige Anwendung von Gl. (204) erhält man

$$\begin{aligned} L_-^{l-m} |l, l\rangle &= [2l \cdot 1 \cdot (2l-1) \cdot 2 \cdots (l+m+1)(l-m)]^{1/2} \hbar^{l-m} |l, m\rangle = \\ &= \left[\frac{(2l)!(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} \hbar^{l-m} |l, m\rangle, \end{aligned}$$

also

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \left[\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!} \right]^{1/2} \left(\frac{L_-}{\hbar} \right)^{l-m} Y_{ll}(\theta, \phi). \quad (211)$$

Es bleibt, $L_-^{l-m} Y_{ll}(\theta, \phi)$ zu berechnen. Dazu stellen wir zunächst fest daß für eine beliebige Funktion $f(\theta)$ und $n \in \mathbb{N}$ aufgrund von Gl. (207) gilt

$$\begin{aligned} \frac{L_-}{\hbar} f(\theta) e^{in\phi} &= e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) f(\theta) e^{in\phi} = -e^{i(n-1)\phi} [f'(\theta) + n f(\theta) \cot \theta] = \\ &= -\frac{e^{i(n-1)\phi}}{\sin^n \theta} \frac{d[f(\theta) \sin^n \theta]}{d\theta} = \frac{e^{i(n-1)\phi}}{\sin^{n-1} \theta} \frac{d[f(\theta) \sin^n \theta]}{d \cos \theta}, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt $(\partial/\partial \theta) = -\sin \theta (\partial/\partial \cos \theta)$ verwendet wurde. Durch Iteration folgt hieraus

$$\left(\frac{L_-}{\hbar} \right)^k f(\theta) e^{in\phi} = \frac{e^{i(n-k)\phi}}{\sin^{n-k} \theta} \frac{d^k [f(\theta) \sin^n \theta]}{(d \cos \theta)^k}.$$

Anwendung auf $n = l$, $k = l - m$ und $f(\theta) = \sin^l \theta$ ergibt

$$\left(\frac{L_-}{\hbar} \right)^{l-m} \sin^l \theta e^{il\phi} = \frac{e^{im\phi}}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m} [\sin^{2l} \theta]}{(d \cos \theta)^{l-m}},$$

und somit folgt aus Gl. (211) mit Gl. (210)

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left[\frac{(l+m)!(2l+1)}{(l-m)!4\pi} \right]^{1/2} \frac{e^{im\phi}}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m} [\sin^{2l} \theta]}{(d \cos \theta)^{l-m}}. \quad (212)$$

Oft werden diese Kugelfunktionen durch die auf dem Intervall $-1 \leq \chi \leq 1$ definierten *assozierten Legendre-Funktionen*

$$P_l^m(\chi) \equiv \frac{(1-\chi^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{d\chi^{l+m}} (\chi^2 - 1)^l = (1-\chi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\chi^m} P_l(\chi) \quad (213)$$

ausgedrückt, die ihrerseits aus den *Legendre-Polynomen*

$$P_l(\chi) \equiv \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\chi^l} (\chi^2 - 1)^l \quad (214)$$

abgeleitet sind. Man erkennt aus Gl. (212), daß $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} P_l^{-m}(\cos \theta)$. Damit muss $P_l^{\pm m}(\cos \theta)$ Gl. (209) genügen, was man in die Differentialgleichung

$$\left[(1-\chi^2) \frac{d^2}{d\chi^2} - 2\chi \frac{d}{d\chi} - \frac{m^2}{1-\chi^2} + l(l+1) \right] P_l^m(\chi) = 0 \quad (215)$$

umschreiben kann. Da diese nicht vom Vorzeichen von m abhängt und beide $P_l^{\pm m}$ regulär sind, muss $P_l^{-m} \propto P_l^m$. Die Proportionalitätskonstante findet man leicht durch Vergleich des Koeffizienten von χ^{l+m} der beiden Polynome $(1-\chi^2)^{m/2} P_l^m(\chi)$ und $(1-\chi^2)^{m/2} P_l^{-m}(\chi)$ und man erhält

$$P_l^{-m}(\chi) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\chi). \quad (216)$$

Damit lässt sich Gl. (212) schließlich schreiben als

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (217)$$

Daraus folgt insbesondere

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi). \quad (218)$$

Die Kugelfunktionen Y_{lm} bilden ein vollständiges Orthogonalsystem. Mit der Abkürzung $\Omega = (\theta, \phi)$ gilt daher

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) Y_{l'm'}(\Omega) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (219)$$

und

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega') = \delta^2(\Omega - \Omega') = \frac{\delta(\theta - \theta')}{\sin \theta} \delta(\phi - \phi'). \quad (220)$$

Aus Gl. (219) und Gl. (217) folgt insbesondere

$$\int_{-1}^{+1} d\chi P_l^m(\chi) P_{l'}^m(\chi) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad \text{für } m \geq 0. \quad (221)$$

Ferner folgt aus Gl. (213)

$$P_l^m(-\chi) = (-1)^{l+m} P_l^m(\chi). \quad (222)$$

Da unter einer Paritätstransformation P wie $\theta \rightarrow \pi - \theta$, also $\chi \rightarrow -\chi$ und $\phi \rightarrow \phi + \pi$ transformieren, folgt aus Gl. (217) die wichtige Paritätseigenschaft

$$PY_{lm}(\Omega) = Y_{lm}(-\Omega) = (-1)^l Y_{lm}(\Omega). \quad (223)$$

Die niedrigsten Kugelfunktionen lauten explizit

$$\begin{aligned} Y_{00}(\Omega) &= \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}, & Y_{10}(\Omega) &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta, & Y_{11}(\Omega) &= -\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{i\phi}, \\ Y_{20}(\Omega) &= \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1), \\ Y_{21}(\Omega) &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}, & Y_{22}(\Omega) &= \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{2i\phi}. \end{aligned} \quad (224)$$

6 Drei-dimensionale Probleme: Zentralpotential

6.1 Kugelkoordinaten

Wir drücken zunächst den in der Schrödingergleichung auftretenden quadrierten Impulsoperator \mathbf{p}^2 durch den quadrierten Drehimpuls-Operator \mathbf{L}^2 aus,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= L_i L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k \epsilon_{irs} r_r p_s = r_j p_k r_j p_k - r_j p_k r_k p_j = \\ &= \mathbf{r}^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - r_j r_k p_k p_j + 3i\hbar r_j p_j = \\ &= \mathbf{r}^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - r_j p_j r_k p_k - i\hbar r_j p_j + 3i\hbar r_j p_j, \end{aligned} \quad (225)$$

wobei wir die Einsteinsche Summenkonvention sowie die Identitäten $\epsilon_{ijk}\epsilon_{irs} = \delta_{jr}\delta_{ks} - \delta_{js}\delta_{kr}$, $p_k r_j = r_j p_k - i\hbar\delta_{jk}$ und die summierte Version $p_k r_k = r_k p_k - 3i\hbar$ verwendet haben. Wegen Gl. (206) ist in Kugelkoordinaten

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \cdot \nabla = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}, \quad (226)$$

womit aus Gl.(225) folgt

$$\mathbf{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}. \quad (227)$$

Die stationäre Schrödingergleichung im radial-symmetrischen Potential $V(r)$ hat damit die Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_E(r, \theta, \phi) = E\psi_E(r, \theta, \phi). \quad (228)$$

Mit dem Separationsansatz

$$\psi_E(r, \theta, \phi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (229)$$

folgt mit Gl. (200) die Differentialgleichung für den Radialanteil,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = ER_l(r). \quad (230)$$

Wegen $[H, \mathbf{L}] = [H, \mathbf{L}^2] = 0$ bilden H , \mathbf{L}^2 und L_z einen vollständigen Satz von gleichzeitig diagonalisierbaren hermiteschen Operatoren. Wegen der Identität

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2$$

folgt mit der Substitution

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} \quad (231)$$

die Differentialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_l(r) = Eu_l(r). \quad (232)$$

Damit ist das Problem des Zentralpotentials auf ein eindimensionales Problem mit effektivem Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (233)$$

zurückgeführt. Die Normierung hat damit auch ein-dimensionale Form,

$$\int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty dr |u_l(r)|^2 < \infty \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{r \rightarrow \infty} |u_l(r)| \leq \frac{c}{r^{1/2+\epsilon}}, \epsilon > 0. \quad (234)$$

Ferner enthält $\Delta\psi(\mathbf{r})$ für $u(0) \neq 0$ einen Anteil der Form $u(0)\Delta(1/r) = -4\pi u(0)\delta^3(\mathbf{r})$, was mit Gl. (228) nur für Potentiale mit einem Delta-Funktionsanteil $\propto \delta^3(\mathbf{r})$ vereinbar ist. Im allgemeinen ist daher $u(0) = 0$. Die Bindungszustände im drei-dimensionalen radialsymmetrischen Potential $V(r)$ mit $0 \leq r \leq \infty$ entsprechen damit genau den Bindungszuständen im eindimensionalen Potential

$$V_1(x) = \begin{cases} V_{\text{eff}}(x) & \text{für } x > 0 \\ \infty & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (235)$$

für $-\infty < x < \infty$. Der Grundzustand des Potentials $V_1(x)$ ist der niedrigste ungerade Bindungszustand des eindimensionalen symmetrischen Potentials $\tilde{V}_1(x) = V_{\text{eff}}(|x|)$. Für die Existenz von drei-dimensionalen Bindungszuständen ist damit eine gewisse Mindeststärke erforderlich. Existiert schon für $l = 0$ kein Bindungszustand, so gibt es auch keine Bindungszustände für $l > 0$.

Im allgemeinen dominieren für $r \rightarrow 0$ die ersten beiden Terme in Gl. (232) mit der allgemeinen Lösung

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

wobei der zweite Term mit $u(0) = 0$ unvereinbar und damit verboten ist, womit

$$u_l(r) = r^{l+1}(a_0 + a_1r + \dots) \quad (236)$$

Für $r \rightarrow \infty$ ist im allgemeinen $V_{\text{eff}}(r) \rightarrow 0$ und damit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_l}{dr^2} = E u_l,$$

mit der normierbaren Lösung

$$u_l(r) = C e^{-\kappa r}, \quad \text{mit} \quad \kappa \equiv \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar} \quad \text{für} \quad r \rightarrow \infty \quad (237)$$

für Bindungszustände mit $E < 0$.

6.2 Coulomb-Potential

Wir betrachten nun das *Coulombpotential*

$$V(r) = -\frac{Z e_0^2}{r} \quad (238)$$

mit $e_0 = 4.803 \times 10^{-10}$ esu = 1.602×10^{-19} Coulomb der Elementarladung. Wir führen die Variable $\rho = \kappa r$ ein, sowie

$$\rho_0 \equiv \frac{Z e_0^2 \kappa}{-E} = \frac{Z e_0^2}{\hbar} \left(\frac{2m}{-E} \right)^{1/2}, \quad (239)$$

womit Gl. (232) wegen $V/E = \rho_0/\rho$ zu

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right] u_l(\rho) = 0 \quad (240)$$

wird. Wir projizieren nun das asymptotische Verhalten von Gl. (236) und Gl. (237) bei $r \rightarrow 0$ bzw. $r \rightarrow \infty$ heraus und schreiben

$$u_l(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w_l(\rho). \quad (241)$$

Damit wird aus Gl. (240)

$$\rho \frac{d^2 w_l}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dw_l}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] w_l = 0. \quad (242)$$

Wir setzen die Lösung dieser Differentialgleichung als Potenzreihe an

$$w_l(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (243)$$

und erhalten aus Gl. (242)

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + [\rho_0 - 2(l+1)]\rho^k\} = 0.$$

Für den Koeffizienten von ρ^k folgt daraus

$$[(k+1)k + 2(l+1)(k+1)] a_{k+1} + \{-2k + [\rho_0 - 2(l+1)]\} a_k = 0,$$

was zu der Rekursionsformel

$$a_{k+1} = \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \quad (244)$$

führt. Daraus folgt das asymptotische Verhalten

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{2}{k} \quad \text{für } k \rightarrow \infty \quad \Leftrightarrow \quad w_l(\rho) \propto e^{2\rho} \quad \text{für } \rho \rightarrow \infty$$

und somit wegen Gl. (241) $u_l(r) \propto e^{\kappa r}$ für $r \rightarrow \infty$. Da dies nicht normierbar ist, muss die Reihe Gl. (243) abbrechen, d.h. es muss ein $n_r \in \mathbb{N}_0$ geben so daß $a_k = 0$ für $k > n_r$. Das ist nach Gl. (244) genau dann der Fall wenn

$$\rho_0 = 2(n_r + l + 1) = 2n, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (245)$$

wobei n_r *radiale Quantenzahl* und

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (246)$$

Hauptquantenzahl genannt werden. Aus Gl. (239) und Gl. (245) folgen daraus sofort die Energie-Eigenwerte,

$$E_n = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad (247)$$

welche nur von $n = n_r + l + 1$ abhängen und daher $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n(n-1) + n = n^2$ -fach entartet sind. Die Entartung bzgl. m stammt von der Kommutation $[H, L_{\pm}] = 0$, während

die Entartung bzgl. l ein Spezialfall des Coulomb-Potentials ist für das der *Lenzsche Vektor*,

$$\mathbf{A} \equiv \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}}{2m} - e_0^2 \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (248)$$

eine zusätzliche ErhaltungsgröÙist, $[\mathbf{A}, H] = 0$.

Für diese Eigenwerte, für welche Gl. (245) gilt, schreiben wir nun Gl. (242) noch um in

$$(2\rho) \frac{d^2 w}{d(2\rho)^2} + [(2l+1) + 1 - (2\rho)] \frac{dw}{d(2\rho)} + [(n+l) - (2l+1)] w = 0. \quad (249)$$

Dies hat die Form der Differentialgleichung für die *zugeordneten Laguerre-Polynome*

$$x(L_r^s)'' + (s+1-x)(L_r^s)' + (r-s)L_r^s = 0 \quad (250)$$

für $s = 2l+1$ und $r = n+l$,

$$w_l(\kappa r) = CL_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r). \quad (251)$$

Man kann nun zeigen daß Gl. (250) gelöst wird durch

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k. \quad (252)$$

Dazu schreiben wir

$$x(L_r^s)'' = \sum_{k'=2}^{r-s} \frac{(-1)^{k'+s}(r!)^2}{(k'-2)!(k'+s)!(r-k'-s)!} x^{k'-1} = \sum_{k=0}^{r-s} \frac{(-1)^{k+s+1}(r!)^2}{(k-1)!(k+s+1)!(r-k-s-1)!} x^k.$$

Dabei haben wir im zweiten Schritt $k = k' - 1$ substituiert und die Summe um die Terme $k = 0$ und $k = r - s$ erweitert, welche wegen $(-1)! = \infty$ keinen Beitrag liefern. Analog hat man

$$(L_r^s)' = \sum_{k'=1}^{r-s} \frac{(-1)^{k'+s}(r!)^2}{(k'-1)!(k'+s)!(r-k'-s)!} x^{k'-1} = \sum_{k=0}^{r-s} \frac{(-1)^{k+s+1}(r!)^2}{k!(k+s+1)!(r-k-s-1)!} x^k.$$

Damit sieht man leicht daß der Koeffizient von x^k der linken Seite von Gl. (250) durch

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^{k+s+1}(r!)^2}{k!(k+s+1)!(r-k-s)!} [k(r-k-s) + (s+1)(r-k-s) + \\ & \quad k(k+s+1) - (r-s)(k+s+1)] = \\ & \frac{(-1)^{k+s+1}(r!)^2}{k!(k+s+1)!(r-k-s)!} [(k+s+1)(r-k-s) - (k+s+1)(r-k-s)] = 0 \end{aligned}$$

gegeben ist so daß Gl. (252) in der Tat Gl. (250) erfüllt. Man kann auch direkt sehen daß die Koeffizienten von ρ^k der Lösung Gl. (251) die Rekursionsrelationen Gl. (244) erfüllen. Ohne Beweis geben wir noch an daß die zugeordneten Laguerre-Polynome auch folgende Darstellung haben,

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} \left[e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r \right] \quad (253)$$

und die Normierungsrelationen

$$\int_0^\infty dx x^{s+1} e^{-x} [L_r^s(x)]^2 = \frac{(2r-s+1)(r!)^3}{(r-s)!} \quad (254)$$

erfüllen. Zusammenführung von Gl. (229), Gl. (231), Gl. (241), Gl. (251) und der Normierung Gl. (254) ergibt schließlich die auf Eins normierten Eigenfunktionen

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \\ \text{mit } R_{nl}(r) &= \frac{u_l(\kappa r)}{\kappa r} = (\kappa r)^l e^{-\kappa r} w_l(\kappa r) = \\ &= - \left[\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3} \right]^{1/2} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r). \end{aligned} \quad (255)$$

Diese Eigenfunktionen sind orthonormiert,

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}) \psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{n'l'}(r) \int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) Y_{l'm'}(\Omega) = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (256)$$

Die in Gl. (255) auftretende Längenskala ist wegen Gl. (237) und Gl. (247)

$$\kappa = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar} = \frac{mZe_0^2}{\hbar^2 n} = \frac{Z}{na}, \quad (257)$$

wobei für $m = m_e$

$$a \equiv \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (258)$$

der *Bohrsche Radius* genannt wird. Zusammen mit der *Sommerfeldschen Feinstrukturkonstante*

$$\alpha \equiv \frac{e_0^2}{\hbar c_0} = \frac{1}{137.037} \quad (259)$$

kann man die Bindungsenergien Gl. (247) auch als

$$E_n = -\frac{(Ze_0)^2}{2an^2} = -\alpha^2 \frac{mc_0^2 Z^2}{2n^2} \quad (260)$$

schreiben. Insbesondere ist die Bindungsenergie des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand

$$E_1(Z=1) = -13.6 \text{ eV} = -1 \text{ Ry (Rydberg)}. \quad (261)$$

Der Übergang zwischen zwei durch die Hauptquantenzahlen m und n charakterisierten Zuständen geht einher mit der Absorption bzw. Emission eines Photons mit der Differenz der Bindungsenergien dieser Zustände,

$$\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n = Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ Ry} \quad (262)$$

Die niedrigsten radialen Eigenfunktionen lauten explizit

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a}, & R_{20}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{2a} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a} \right) e^{-Zr/(2a)}, \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{3^{1/2}} \left(\frac{Z}{2a} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-Zr/(2a)}. \end{aligned} \quad (263)$$

Die radialen Eigenfunktionen $R_{nl}(r)$ haben $n_r = n - l - 1$ positive Nullstellen. Wir betrachten nun noch den Fall $n_r = 0$, $n = l + 1$. Laut Gl. (255) ist dann

$$\psi_{n,n-1,m}(r, \Omega) = \frac{(2\kappa)^{n+\frac{1}{2}}}{[(2n)!]^{1/2}} r^{n-1} e^{-\kappa r} Y_{n-1,m}(\Omega), \quad (264)$$

da nach Gl. (252) $L_{2n-1}^{2n-1}(r) = \text{const.}$ Für die Normierung Gl. (256) haben wir die allgemeine Relation

$$\int_0^\infty dr r^k e^{-\kappa r} = \frac{k!}{\kappa^{k+1}}$$

verwendet. Mit Gl. (257) folgt daraus dann auch

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{n,n-1} &= \int_0^\infty dr r^2 |R_{n,n-1}(r)|^2 = \frac{a}{2Z} (2n+1)n \\ \langle r^2 \rangle_{n,n-1} &= \int_0^\infty dr r^4 |R_{n,n-1}(r)|^2 = \frac{a^2}{Z^2} n^2 (n+1) \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \Delta r_{n,n-1} &= [\langle r^2 \rangle_{n,n-1} - \langle r \rangle_{n,n-1}^2]^{1/2} = \frac{an}{Z} \left[\frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2} \\ \left(\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} \right)_{n,n-1} &= \frac{1}{(2n+1)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (265)$$

so daß die relative Unschärfe mit großen n gegen Null geht und die Zustände zunehmend klassisch werden.

Wir betrachten noch kurz das *Zweikörperproblem* für zwei Teilchen der Masse m_1 und m_2 , für welche der Hamiltonian die Form

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (266)$$

hat. Wir führen die *reduzierte Masse*

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (267)$$

und die Koordinaten und Impulse

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_r &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, & \mathbf{p}_r &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{M} \\ \mathbf{r}_c &= \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{M}, & \mathbf{p}_c &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \end{aligned} \quad (268)$$

mit $M = m_1 + m_2$ ein. Aufgrund der Kommutationsrelationen Gl. (51) von Ort und Impuls der beiden Teilchen sind auch \mathbf{r}_r und \mathbf{p}_r sowie \mathbf{r}_c und \mathbf{p}_c jeweils kanonisch konjugiert,

$$[x_{r,\mu}, p_{r,\nu}] = \delta_{\mu\nu} = [x_{c,\mu}, p_{c,\nu}], \quad (269)$$

womit

$$\mathbf{p}_r = -i\hbar\nabla_r, \quad \mathbf{p}_c = -i\hbar\nabla_c. \quad (270)$$

Mit

$$\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\mathbf{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{p}_c^2}{2M}$$

zerfällt die stationäre Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_c + V(\mathbf{r}_r) \right] \psi_{\tilde{E}}(\mathbf{r}_r, \mathbf{r}_c) = \tilde{E}\psi_{\tilde{E}}(\mathbf{r}_r, \mathbf{r}_c)$$

durch den Separationsansatz

$$\psi_{\tilde{E}}(\mathbf{r}_r, \mathbf{r}_c) = e^{i\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r}_c} \psi_E(\mathbf{r}_r) \quad (271)$$

in eine ebene Welle für die Bewegung des Massenzentrums mit einer kinetischen Energie $E_{\text{kin}} = \mathbf{k}_c^2/(2M)$ und in eine stationäre Schrödingergleichung für die Relativbewegung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(\mathbf{r}_r) \right] \psi_E(\mathbf{r}_r) = E\psi_E(\mathbf{r}_r) \quad (272)$$

mit

$$\tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_c^2}{2M}. \quad (273)$$

Da in Gl. (272) die reduzierte Masse μ auftaucht, ändern sich dadurch insbesondere die Bindungsenergien des Wasserstoffatoms Gl. (247) um einen Faktor

$$\frac{\mu}{m_e} = \frac{1}{1 + m_e/m_K}, \quad (274)$$

wobei m_K die Kernmasse ist. Wegen $m_K \gtrsim 2 \times 10^3 m_e$ ist diese Korrektur weniger als ein halbes Promille. Für *Positronium*, Bindungszustände eines Elektrons und eines Positrons, ist dieser Korrekturfaktor jedoch $\frac{1}{2}$! Ferner gibt es in der Atomphysik relativistische Korrekturen, die sogenannte *Feinstruktur* von der Größenordnung α^2 , wozu relativistische Korrekturen der Elektronenmasse, *Spin-Bahn Kopplung* und *Darwin-Term* gehören. Schließlich gibt es noch den quantenfeldtheoretischen Effekt der *Lamb-shift* der von Modifikationen des Coulombpotentials durch Elektron-Positron Paarerzeugung herrührt, sowie die *Hyperfeinstruktur*, die von der Wechselwirkung der Spins des Kerns und des Elektrons hervorgerufen wird und einen Faktor $\simeq m_e/m_K$ kleiner als die Feinstruktur ist.

Die bisher aufgetretenen verschiedenen atomaren Längenskalen lassen sich mit Hilfe der Feinstrukturkonstante Gl. (259) zueinander in Beziehung setzen:

1. Die für die Wellenlängen-Änderung der Photonen bei Comptonstreuung relevante *Compton-Wellenlänge des Elektrons* ist

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c_0},$$

siehe Gl. (14).

2. Der *Bohrsche Radius* Gl. (258)

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} = \frac{\lambda_c}{\alpha}$$

charakterisiert den Radius der niedrigsten Bindungszustände im Wasserstoffatom.

3. Die typische Wellenlänge des bei atomaren Übergängen emittierten oder absorbierten Lichts ist nach Gl. (260)

$$\bar{\lambda} \simeq \frac{c_0}{\omega} = \frac{\hbar c_0}{\Delta E} = \frac{\hbar c_0}{e_0^2} a = \frac{a}{\alpha}.$$

4. Der *klassische Elektronenradius* r_e ist die Längenskala auf der man eine Elementarladung einschließen müsste damit die elektrostatische Energie von der Größenordnung der Ruheenergie des Elektrons ist, $e_0^2/r_e = m_e c_0^2$,

$$r_e = \frac{e_0^2}{m_e c_0^2} = \alpha \lambda_c.$$

Damit erhalten wir die Hierarchie

$$r_e : \lambda_c : a : \bar{\lambda} = \alpha^3 : \alpha^2 : \alpha : 1. \quad (275)$$

7 Bewegung im elektromagnetischen Feld

Betrachten wir zunächst die klassische Bewegung eines Teilchens der Masse m und Ladung e in einem durch das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ und das skalare Potential $\phi(\mathbf{r}, t)$ beschriebenen elektromagnetischen Feld. Man sieht leicht, daß die Lagrange-Funktion

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{e}{c_0} \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (276)$$

die Bewegungsgleichungen reproduziert: Für $i = 1, 2, 3$ ist

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m\dot{r}_i + \frac{e}{c_0} A_i, \quad \frac{\partial L}{\partial r_i} = \frac{e}{c_0} \sum_{j=1}^3 \dot{r}_j \frac{\partial A_j}{\partial r_i} - e \frac{\partial \phi}{\partial r_i}, \quad (277)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m\ddot{r}_i + \frac{e}{c_0} \sum_{j=1}^3 \dot{r}_j \frac{\partial A_i}{\partial r_j} + \frac{e}{c_0} \frac{\partial A_i}{\partial t},$$

wobei p_i der zu r_i kanonisch konjugierte Impuls ist. Da die Feldstärken durch

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

gegeben sind, folgt aus der Lagrangeschen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}}$$

die Newtonsche Bewegungsgleichung in Anwesenheit der Lorentzkraft,

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c_0} \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}.$$

Ferner folgt aus Gl. (277) die Beziehung zwischen Geschwindigkeit und kanonischem Impuls \mathbf{p} ,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c_0} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right],$$

und mit der Legendre-Transformation von $\dot{\mathbf{r}}$ nach \mathbf{p} für die Hamilton-Funktion

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) - L[\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{p}), t] = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c_0} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 + e\phi(\mathbf{r}, t). \quad (278)$$

Da laut Korrespondenzprinzip $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, folgt aus Gl. (278) in *Coulomb-Eichung*, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{i\hbar e}{mc_0} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc_0^2} \mathbf{A}^2 + e\phi. \quad (279)$$

In konstantem Magnetfeld kann man \mathbf{A} wählen als

$$\mathbf{A} = -\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{B}}{2}. \quad (280)$$

Wegen $\mathbf{A} \cdot \nabla = -\frac{1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) = i/(2\hbar)\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$ und $\mathbf{A}^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{r}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})^2) = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)B^2$, wobei wir $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ gewählt haben, folgt für Gl. (279)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e}{2mc_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2 B^2}{8mc_0^2} (x^2 + y^2) + e\phi. \quad (281)$$

Der zweite Term ist der Bahndrehimpulsanteil zum *Paramagnetismus*, während der dritte Term den *Diamagnetismus* beschreibt. Ersterer führt bei Anlegen eines Magnetfeldes zu einem magnetischen Moment welches parallel zum externen Magnetfeld ist und dieses damit verstärkt, während letzterer ein entgegengesetztes magnetisches Moment induziert welches das externe Feld damit abschwächt und Abstoßung verursacht. Dies folgt aus der allgemeinen Definition des magnetischen Moments

$$\boldsymbol{\mu} \equiv -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}}, \quad (282)$$

was für Gl. (281) auf

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_d = \frac{e}{2mc_0} \mathbf{L} - \frac{e^2 \mathbf{B}}{4mc_0^2} \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{e}{e_0} \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} - \frac{e^2 \mathbf{B}}{4mc_0^2} \langle x^2 + y^2 \rangle, \quad (283)$$

wobei $\boldsymbol{\mu}_p$ und $\boldsymbol{\mu}_d$ den para- bzw. diamagnetischen Anteil bezeichnen und im zweiten Ausdruck das *Bohrsche Magneton*

$$\mu_B \equiv \frac{e_0 \hbar}{2mc_0} \quad (284)$$

verwendet wurde. Der Proportionalitätskoeffizient $e/(2mc_0)$ in $\boldsymbol{\mu}_p = \boldsymbol{\mu}_L = e/(2mc_0) \mathbf{L}$ wird dabei oft als *gyromagnetisches Verhältnis* bezeichnet. Damit kann man Gl. (281) auch als

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_d \cdot \mathbf{B} + e\phi. \quad (285)$$

schreiben. Aus Gl. (283) folgt nun sofort daß das diamagnetische Moment immer antiparallel zum äußern Magnetfeld ist, während im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur T sich das paramagnetische Moment aufgrund des Boltzmann-Faktors $\exp[-H/(k_B T)] \propto \exp[\boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B}/(k_B T)]$ in der Zustandswahrscheinlichkeit bevorzugt parallel zum äußeren Magnetfeld ausrichtet. Die relative Größe des para- und diamagnetischen Terms kann zu

$$\frac{eB}{4c_0} \frac{\langle x^2 + y^2 \rangle}{\langle L_z \rangle} \simeq \frac{\alpha}{4} \frac{B}{E_a} \simeq 10^{-10} \left(\frac{B}{\text{Gauss}} \right),$$

abgeschätzt werden, wobei wir im zweiten Schritt $\langle x^2 + y^2 \rangle \simeq a^2$ und $\langle L_z \rangle \simeq \hbar$ verwendet haben und $E_a = e/a^2$ eine typische atomare elektrische Feldstärke ist.

Es ist wichtig anzumerken daß Para- und Diamagnetismus reine Quantenphänomene sind: Da die Lorentzkraft in einem äußeren Magnetfeld \mathbf{B} , $\mathbf{F} = e(\mathbf{v}/c_0) \times \mathbf{B}$ senkrecht zur Geschwindigkeit \mathbf{v} der Ladung ist, kann die klassische Energie E und damit der Boltzmann Faktor $\exp[-E/(k_B T)]$ nicht vom äußeren Magnetfeld abhängen, womit das thermodynamische Ensemble unverändert bleiben muss und daher keine magnetischen Effekte induziert werden können.

7.1 Normaler Zeeman-Effekt

Für $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ wird der zweite Term in Gl. (281) zu

$$-\frac{eB}{2mc_0} L_z = m_l \hbar \omega_L,$$

wobei wir die Eigenwerte von L_z im folgenden als $m_l \hbar$ schreiben, um Verwechslung mit der Teilchenmasse m zu vermeiden. Dieser Term hebt die Entartung der Energie-Eigenwerte Gl. (260) bezüglich der Quantenzahl m_l auf und führt zu den Energie-Eigenwerten

$$H\psi_{nlm} = \left(-\frac{Ry}{n^2} + \hbar \omega_L m_l \right) \psi_{nlm}, \quad (286)$$

wobei wir die Elektronenladung $e = -e_0$ verwendet und die *Larmor-Frequenz*

$$\omega_L \equiv \frac{e_0 B}{2mc_0} \quad (287)$$

eingeführt haben. Damit ist

$$E_{nlm} = \left[-\frac{1}{n^2} + 4 \times 10^{-10} \left(\frac{B}{\text{Gauss}} \right) m_l \right] \cdot 13.6 \text{ eV}. \quad (288)$$

Diese äquidistante Aufspaltung der Energie-Niveaus wird als *normaler Zeeman-Effekt* bezeichnet und ist das Analogon zum *Stark-Effekt* in einem äußeren elektrischen Feld. Der vom im nächsten Kapitel zu besprechenden *Spin* von geladenen Elementarteilchen herrührende Beitrag zum paramagnetischen Moment führt zum *anomalen Zeeman-Effekt*, von dem der normale Zeeman-Effekt eigentlich ein Spezialfall ist.

8 Spin

Nach Gl. (283) ist das dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} entsprechende magnetische Moment

$$\boldsymbol{\mu}_L = \frac{e}{2mc_0} \mathbf{L} = \frac{e}{e_0} \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}. \quad (289)$$

Wäre der Bahndrehimpuls der einzige Beitrag zum Gesamtdrehimpuls so sollte sich der Atomstrahl im Stern-Gerlach Experiment Gl. (15) daher in eine ungerade Anzahl $2l + 1$ Teilstrahlen aufspalten. Experimentell findet man aber oft zwei Teilstrahlen mit einem Abstand, der doppelt so groß ist als man nach dem gyromagnetischen Verhältnis für den Bahndrehimpuls aus Gl. (289) erwarten würde. Daraus folgt daß Elektronen einen inneren Drehimpuls $s = 1/2$ besitzen, der auch *Spin* genannt wird und ein gyromagnetisches Verhältnis $e/(mc_0)$ hat. Nach Gl. (15) haben die Projektionen des zugehörigen Spinoperators $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ auf einen beliebigen Einheitsvektor \mathbf{e} die Eigenwerte $\pm\hbar/2$, mit den zugehörigen Zuständen $|\mathbf{e}, \pm\rangle$,

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{S} |\mathbf{e}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\mathbf{e}, \pm\rangle. \quad (290)$$

Für $\mathbf{e} = \mathbf{e}_3$ verwenden wir im folgenden die Bezeichnung

$$|\mathbf{e}_3, +\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |\mathbf{e}_3, -\rangle = |\downarrow\rangle, \quad (291)$$

also insbesondere

$$S_3 |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_3 |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle, \quad (292)$$

Die Spin-Operatoren \mathbf{S} erfüllen natürlich die Vertauschungsrelationen Gl. (192) des allgemeinen Drehimpuls-Operators und insbesondere folgt aus G. (200) mit $l \rightarrow 1/2$,

$$\mathbf{S}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\uparrow\rangle \quad \mathbf{S}^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\downarrow\rangle. \quad (293)$$

Analog zu Gl. (201) definiert man Auf- und Absteigeoperatoren

$$S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y, \quad (294)$$

für welche aufgrund von Gl. (204) mit $l \rightarrow 1/2$, $m \rightarrow \pm 1/2$

$$\begin{aligned} S_+|\uparrow\rangle &= 0, & S_-|\uparrow\rangle &= \hbar|\downarrow\rangle \\ S_+|\downarrow\rangle &= \hbar|\uparrow\rangle, & S_-|\downarrow\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (295)$$

gilt. Wir verwenden nun $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ als Basis einer Darstellung der Spinzustände durch zwei-dimensionale Spaltenvektoren,

$$\chi_+ = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (296)$$

Der allgemeine Spinzustand $|\chi\rangle = \alpha_+|\uparrow\rangle + \alpha_-|\downarrow\rangle$ wird dann durch den *Spinor*

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad \alpha_+ = \chi_+^\dagger \chi, \quad \alpha_- = \chi_-^\dagger \chi. \quad (297)$$

dargestellt. Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \mathbb{1}, \quad \chi_+\chi_+^\dagger + \chi_-\chi_-^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (298)$$

In der Spinor-Darstellung werden die Spin-Operatoren durch die Matrizen

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (299)$$

dargestellt. Mit der Umkehrung $S_x = (S_+ + S_-)/2$, $S_y = (S_+ - S_-)/(2i)$ von Gl. (294) folgt

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (300)$$

mit den *Paulimatrizen*

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (301)$$

Die Pauli-Matrizen haben folgende wichtige Eigenschaften:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} \quad (302)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (303)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (304)$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (305)$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i\mathbb{1} \quad (306)$$

$$\text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \quad (307)$$

$$\det(\boldsymbol{\sigma}) = 0, \quad (308)$$

wobei Tr und det die Spur bzw. die Determinante bezeichnen.

Das dem Spin \mathbf{S} eines Teilchens der Masse m und Ladung e entsprechende magnetische Moment wird allgemein geschrieben als

$$\boldsymbol{\mu}_S = g \frac{e}{2mc_0} \mathbf{S} = \frac{e}{e_0} g \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar}, \quad (309)$$

mit dem *Landé-Faktor* oder *gyromagnetischen Faktor* g . Wie bereits erwähnt ergibt sich experimentell aus dem Stern-Gerlach Experiment für Elektronen

$$g_e \simeq 2. \quad (310)$$

Die relativistische Wellengleichung für Spin-1/2 Fermionen, die Dirac-Gleichung sagt exakt $g = 2$ voraus. Dazu gibt es quantenfeldtheoretische Korrekturen, so daß die theoretische Vorhersage

$$g_{e,\text{th}} = 2,0023193048(8) \quad (311)$$

ist, während experimentell

$$g_{e,\text{ex}} = 2,0023193043622(22). \quad (312)$$

Die Abweichung $(g - 2)/2$ wird als *anomales magnetisches Moment* bezeichnet. Das gesamte paramagnetische Moment des Elektrons ist damit

$$\boldsymbol{\mu}_p = \boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{2mc_0} (\mathbf{L} + g\mathbf{S}) = \frac{e}{2mc_0} \left(\mathbf{L} + \frac{g}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \right), \quad (313)$$

womit die paramagnetische Wechselwirkungsenergie mit dem Magnetfeld nach Gl. (285)

$$H_p = -\boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{e_0} \mu_B \left(\frac{\mathbf{L}}{\hbar} + \frac{g}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{B}. \quad (314)$$

Wir erwähnen noch das für den Kern-Magnetismus relevante *Kern-Magneton*

$$\mu_K = \frac{e_0 \hbar}{2m_p c_0}. \quad (315)$$

Da Nukleonen aus Quarks und Gluonen zusammengesetzt sind, ist z.B. für das Neutron

$$\mu_n \simeq -3.83 \mu_K \frac{\mathbf{S}}{\hbar}. \quad (316)$$

Der Spin ist ein innerer Freiheitsgrad, der damit mit den räumlichen Freiheitsgraden kommutiert,

$$[\mathbf{S}, \mathbf{r}] = [\mathbf{S}, \mathbf{p}] = [\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0. \quad (317)$$

Die nicht-relativistische Wellenfunktion eines Spin-1/2 Fermions ist dann gegeben durch das *Tensorprodukt* von Orts- und Spin-Eigenfunktionen,

$$|\psi\rangle = \int d^3 \mathbf{r} [\psi_+(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle | \uparrow \rangle + \psi_-(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle | \downarrow \rangle], \quad (318)$$

mit den Projektionen

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \psi \rangle &= \psi_+(\mathbf{r}) | \uparrow \rangle + \psi_-(\mathbf{r}) | \downarrow \rangle \\ \langle \uparrow | \langle \mathbf{r} | \psi \rangle &= \psi_+(\mathbf{r}), \quad \langle \downarrow | \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi_-(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (319)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Fermion am Ort \mathbf{r} mit Spin up bzw. down anzutreffen ist damit $|\psi_{\pm}(\mathbf{r})|^2$. In Spinor-Darstellung ist dann

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (320)$$

In einem konstanten Magnetfeld \mathbf{B} und einem Potential $V(\mathbf{r})$ wird nun der Hamiltonian Gl. (285) mit Gl. (314) zu

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e}{e_0}\mu_B \left(\frac{\mathbf{L}}{\hbar} + \frac{g}{2}\boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{B} + V(\mathbf{r}). \quad (321)$$

Die Schrödingergleichung Gl. (111) lautet dann

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e}{e_0}\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{e_0}g\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (322)$$

wobei alle Terme außer dem Term mit den Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}$ proportional zur (nicht explizit geschriebenen) Einheitsmatrix $\mathbb{1}$ sind. Diese Gleichung wird als *Pauli-Gleichung* bezeichnet. Verallgemeinert zu einem variablen elektromagnetischen Feld lautet diese Gleichung aufgrund von Gl. (278)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} - \frac{e}{c_0}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{e_0}g\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (323)$$

Für mathematisch Interessierte machen wir hier noch folgende Beobachtung bezüglich der Spin-Darstellungen des Drehimpulses: Aufgrund von Gl. (193) wird ein Eigenzustand zum Eigenwert σ von J_k bei einer Drehung um 2π um die k -Achse mit dem Phasenfaktor $e^{2\pi i\sigma}$ multipliziert, und ein halbzahlgiger Spin-Zustand ändert damit das Vorzeichen. Angesichts der Tatsache, daß eine Drehung um 2π die Identität sein sollte, ist dies auf den ersten Blick überraschend. Man beachte jedoch, daß normierte Zustände in der Quantenmechanik nur bis auf einen Phasen-Faktor womit eine allgemeine unitäre *projektive Darstellung* $U(g)$ einer Symmetriegruppe S mit $g \in S$ auf dem Hilbertraum der Zustände in der Regel auch Phasenfaktoren in den Kompositions-Regeln beinhalten können. Dies ist in der Tat der Fall für die Gruppe der Drehungen $SO(3)$, die isomorph ist zu S_3/Z_2 , der drei-dimensionalen Kugel im euklidischen vier-dimensionalen Raum, mit entgegengesetzten Punkten identifiziert, und somit *doppelt zusammenhängend* ist. Dies bedeutet, daß Kurven, die einen geschlossenen Pfad n Mal durchlaufen, nur dann kontinuierlich auf einen Punkt kontrahierbar sind wenn n gerade ist. Halbzahlige Spins entsprechen dann Darstellungen, für die $U(g_1)U(g_2) = (-)^n U(g_1g_2)$, wobei n die Windungszahl des Pfads von $\mathbb{1}$ nach g_1 , nach g_1g_2 und zurück nach $\mathbb{1}$ ist, während ganzzahlige Spins keinen Phasenfaktor produzieren.

9 Addition von Drehimpulsen

Oft stellt sich bei Kombination zweier Quantensysteme mit Drehimpulsen \mathbf{J}_1 bzw. \mathbf{J}_2 die Frage nach dem Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 . \quad (324)$$

Sind die Teilsysteme unabhängig so ist

$$[J_{1,i}, J_{2,j}] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (325)$$

womit auch die Operatoren \mathbf{J} eine Darstellung der Drehimpuls-Algebra mit den Kommutationsrelationen Gl. (192) ist. Die Produktzustände

$$|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (326)$$

sind Eigenzustände von $\mathbf{J}_1^2, J_{1,z}, \mathbf{J}_2^2, J_{2,z}$, welche einen vollständigen Satz von Operatoren bilden, zu den Eigenwerten $\hbar j_1(j_1 + 1), \hbar m_1, \hbar j_2(j_2 + 1)$ bzw. $\hbar m_2$. Die Zustände Gl. (326) sind auch Eigenzustände von J_z zum Eigenwert $\hbar(m_1 + m_2)$, im allgemeinen jedoch nicht von \mathbf{J}^2 , da

$$[\mathbf{J}^2, J_{1,z}] = 2[\mathbf{J}_1, J_{1,z}] \cdot \mathbf{J}_2 = i\hbar(J_{1,x}J_{2,y} - J_{1,y}J_{2,x}) \neq 0$$

und analog für $[\mathbf{J}^2, J_{2,z}]$. Wir suchen nun Eigenfunktionen

$$|j, m, j_1, j_2\rangle \quad (327)$$

zum vollständigen Satz von Operatoren $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2$ und \mathbf{J}_2^2 . Aufgrund der Vollständigkeit der beiden Operatorensätze müssen die Zustände Gl. (327) Linearkombinationen der Zustände Gl. (326) sein. Aus der Hermitizität der Operatoren folgt zunächst

$$\begin{aligned} j'_i(j'_i + 1)\langle j'_1, m_1, j'_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle &= \langle j'_1, m_1, j'_2, m_2 | \mathbf{J}_i^2 | j, m, j_1, j_2 \rangle = \\ &= j_i(j_i + 1)\langle j'_1, m_1, j'_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle, \end{aligned}$$

so daß nur Koeffizienten mit $j'_1 = j_1$ und $j'_2 = j_2$ beitragen. Ähnlich ist

$$\begin{aligned} (m_1 + m_2)\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle &= \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | J_z | j, m, j_1, j_2 \rangle = \\ &= m\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle, \end{aligned}$$

so daß nur Koeffizienten mit $m = m_1 + m_2$ beitragen. Die Entwicklung von $|j, m, j_1, j_2\rangle$ nach $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ hat daher die Form

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2 = m - m_1} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \quad (328)$$

wobei $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle$ als *Clebsch-Gordan Koeffizienten* bekannt sind. Dabei laufen die m_i über $-j_i \leq m_i \leq j_i$. Dabei sieht man sofort daß es jeweils einen Zustand mit $m = j_1 + j_2$ und $m = -j_1 - j_2$ gibt. Setzen wir ohne Einschränkung der Allgemeinheit $j_1 \geq j_2$ voraus, so gibt es für $j_1 - j_2 \leq |m| \leq j_1 + j_2$ für positives und negatives m jeweils

$j_1 + j_2 - |m| + 1$ Zustände, und für $|m| \leq j_1 - j_2$ jeweils $2j_2 + 1$ Zustände. Diese entsprechen gerade den möglichen Gesamtdrehimpulsen $j \geq |m|$. Damit ist

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (329)$$

Damit hat man insgesamt

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = \sum_{k=0}^{2j_2} [2(j_1-j_2+k)+1] = (2j_1-2j_2+1)(2j_2+1) + 2j_2(2j_2+1) = (2j_1+1)(2j_2+1),$$

wobei wir $\sum_{k=0} = k(k+1)/2$ benutzt haben. Dies entspricht gerade der Anzahl der Zustände $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$.

Wir betrachten zunächst den Fall $j_1 = j_2 = 1/2$, also Spin-1/2,

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2. \quad (330)$$

Die vier möglichen Zustände $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ bezeichnen wir mit $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$, wobei das erste bzw. zweite Symbol den ersten bzw. zweiten Spin bezeichnen. Es gilt

$$\begin{aligned} S_z |\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar |\uparrow\uparrow\rangle, & S_z |\uparrow\downarrow\rangle &= 0 \\ S_z |\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\downarrow\rangle, & S_z |\downarrow\uparrow\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (331)$$

Ferner ist

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2S_{1,z}S_{2,z} + S_{1,+}S_{2,-} + S_{2,+}S_{1,-}, \quad (332)$$

woraus folgt

$$\mathbf{S}^2 |\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \mathbf{S}^2 |\downarrow\downarrow\rangle = 2\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (333)$$

also $s = 1, m = \pm 1$. Den dritten Zustand mit $s = 1$ und $m = 0$ erhält man als

$$\frac{1}{2^{1/2}\hbar} S_- |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2^{1/2}\hbar} (S_{1,-} + S_{2,-}) |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{2^{1/2}}, \quad (334)$$

wobei der Zustand auf Eins normiert wurde, also in der abgekürzten Notation $|s, m\rangle \equiv |s, m, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$,

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle}{2^{1/2}}, \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (335)$$

Mit Gl. (332) folgt sofort daß für die orthogonale Kombination

$$|0, 0\rangle = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}{2^{1/2}} \quad (336)$$

gilt

$$\mathbf{S}^2 |0, 0\rangle = 0, \quad S_z |0, 0\rangle = 0. \quad (337)$$

Die Projektoren auf die *Tripletzustände* Gl. (335), P_1 , und auf den *Singulettzustand* Gl. (336) sind gegeben durch

$$P_1 = \frac{3}{4} + \frac{\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{\hbar^2}, \quad P_0 = 1 - P_1 = \frac{1}{4} - \frac{\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{\hbar^2}. \quad (338)$$

Schließlich betrachten wir noch den Fall $j_1 = 1, j_2 = 1/2$, der für die Spin-Bahn-Kopplung relevant ist,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (339)$$

Wir verwenden im folgenden die abgekürzte Notation $|j, m, l\rangle \equiv |j, m, l, \frac{1}{2}\rangle$. Mit Hilfe von

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+ \quad (340)$$

und der allgemeinen Gl. (204) für die Wirkung der Drehimpuls- Leiter-Operatoren zeigt man leicht daß die Zustände mit $j = l \pm \frac{1}{2}$ und m gegeben sind durch

$$\left| l \pm \frac{1}{2}, m, l \right\rangle = \pm \left(\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{1/2} \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle | \uparrow \rangle + \left(\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l + 1} \right)^{1/2} \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle | \downarrow \rangle. \quad (341)$$

10 Stationäre Störungstheorie

Wir betrachten nun Hamilton-Operatoren welche aus einem exakt lösbaeren Teilen H_0 mit Eigenwerten $E_{n,0}$ und zugehörige Eigenfunktionen $|n_0\rangle$,

$$H_0 |n_0\rangle = E_{n,0} |n_0\rangle \quad (342)$$

und einem "Störterm" λH_1 , mit $\lambda \ll 1$. Gesucht sind Eigenwerte E_n und zugehörige Eigenfunktionen $|n\rangle$ von H ,

$$H |n\rangle = (H_0 + \lambda H_1) |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (343)$$

Wir wählen die Normierung $\langle n_0 | n_0 \rangle = 1$ und

$$\langle n_0 | n \rangle = 1 \quad (344)$$

für alle n , womit die Entwicklung von $|n\rangle$ nach dem vollständigen System der ungestörten Eigenfunktionen $|n_0\rangle$ die Form

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \sum_{m \neq n} \langle m_0 | n \rangle |m_0\rangle \quad (345)$$

hat. Multiplikation von Gl. (343) mit $\langle n_0 |$ und Verwendung von Gl. (342) ergibt dann

$$E_n = E_{n,0} + \lambda \langle n_0 | H_1 | n \rangle, \quad (346)$$

und Multiplikation von Gl. (343) mit $\langle m_0 | \neq \langle n_0 |$ ergibt

$$(E_n - E_{m,0}) \langle m_0 | n \rangle = \lambda \langle m_0 | H_1 | n \rangle,$$

womit Gl. (345)

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | H_1 | n \rangle}{E_n - E_{m,0}} |m_0\rangle. \quad (347)$$

Gl. (346) und Gl. (347) sind implizite Gleichungen, da auf der rechten Seite jeweils der unbekannt Zustand $|n\rangle$ und Eigenwert E_n auftreten. Diese Gleichungen können durch Iteration gelöst werden, indem man auf der rechten Seite $|n\rangle$ und E_n immer wieder durch die gesamte rechte Seite ersetzt. Die resultierenden Reihen heißen *Brillouin-Wigner Reihen*. Man kann diese Reihen bei einer bestimmten Ordnung von λ abbrechen, indem man auf der rechten Seite $|n\rangle = |n_0\rangle$ und $E_n = E_{n,0}$ setzt. So erhält man zum Beispiel in zweiter Ordnung in λ

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | H_1 | n_0 \rangle}{E_n - E_{m,0}} |m_0\rangle + \lambda^2 \sum_{j, m \neq n} \frac{\langle m_0 | H_1 | n_0 \rangle \langle j_0 | H_1 | m_0 \rangle}{(E_n - E_{m,0})(E_n - E_{j,0})} |j_0\rangle \quad (348)$$

und

$$E_n = E_{n,0} + \lambda \langle n_0 | H_1 | n_0 \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m_0 | H_1 | n_0 \rangle|^2}{E_n - E_{m,0}}. \quad (349)$$

Setzt man in diesen Ausdrücken $E_n = E_{n,0}$, so erhält man die Entwicklungen der *Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie*. Falls einige der Eigenwerte $E_{n,0}$ entartet sind, muss man zunächst im Vektorraum der zum Eigenwert $E_{n,0}$ gehörigen Eigenzuständen $|n_i^0\rangle$ eine Basis $|n_\alpha^0\rangle$ finden, in der H_1 diagonal ist,

$$\langle n_\alpha^0 | H_1 | n_\beta^0 \rangle = H_\alpha^1 \delta_{\alpha\beta}, \quad (350)$$

was immer möglich ist, da die auf der linken Seite auftretende Matrix hermitesch ist: Mit

$$|n_\alpha^0\rangle \equiv \sum_i c_{i\alpha} |n_i^0\rangle$$

ist

$$H_{\alpha\beta}^1 \equiv \langle n_\alpha^0 | H_1 | n_\beta^0 \rangle = \sum_{ij} c_{i\alpha}^* H_{ij}^1 c_{j\beta}.$$

Gleichsetzen mit Gl. (350) und Multiplikation mit $c_{k\alpha}$ und Summation über α ergibt wegen der Unitarität, $\sum_\alpha c_{i\alpha}^* c_{k\alpha} = \delta_{ik}$,

$$\sum_j H_{kj}^1 c_{j\beta} = H_\beta^1 c_{k\beta}. \quad (351)$$

Die Eigenwerte H_β^1 erhält man wie üblich aus

$$\det (H_{kj}^1 - H_\beta^1 \delta_{kj}) = 0.$$

Damit ist sichergestellt, daß in den Summen in Gl. (348) und Gl. (349) nur Terme auftreten für die $E_{n,0} \neq E_{m,0}$ ist.

Man kann die Grundzustandsenergie E_0 eines Systems mit Hilfe des *Ritzschen Variationsprinzips* abschätzen: Da in einer Orthonormalbasis $|n\rangle$ für jeden Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n E_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle \geq E_0 \sum_n |\langle \psi | n \rangle|^2 = E_0 \langle \psi | \psi \rangle,$$

also

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (352)$$

Für ‘‘Testfunktionen’’ $|\psi(\mu)\rangle$, welche von einem oder mehreren Parametern μ abhängen, kann man dann E_0 durch

$$E_0 \leq \min_{\alpha} \frac{\langle \psi(\mu) | H | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle}. \quad (353)$$

abschätzen. Falls

$$|\psi\rangle = |n\rangle + |\mu\rangle$$

mit $\langle n | \mu \rangle = 0$, ist

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = E_n + \mathcal{O}(\mu^2).$$

Als **Beispiel** betrachten wir noch die zwei wichtigsten relativistischen Korrekturen in Ein-Elektronen Atomen oder Ionen. Die niedrigste relativistische Korrektur zur kinetischen Energie,

$$E = (\mathbf{p}^2 + m^2 c_0^4)^{1/2} = m c_0^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m^3 c_0^2} + \dots,$$

lautet

$$H_1 = -\frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m^3 c_0^2} = -\frac{1}{2m c_0^2} \left(H_0 + \frac{Z e_0^2}{r} \right)^2, \quad (354)$$

wobei

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Z e_0^2}{r}. \quad (355)$$

der Hamiltonian des Wasserstoffatoms in niedrigster Ordnung ist. In erster Ordnung Störungstheorie, Gl. (349), folgt

$$\langle H_1 \rangle_{nlm} = -\frac{1}{2m c_0^2} \left(E_n^2 + 2E_n Z e_0^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + (Z e_0^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right) \quad (356)$$

mit $E_{n,0} = E_n$ aus Gl. (260). Nach Berechnung der Erwartungswerte in den ungestörten Zuständen Gl. (255) folgt

$$\langle H_1 \rangle_{nlm} = \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) E_{n,0}. \quad (357)$$

Dabei ist die Bedingung Gl. (350) für entartete Zustände erfüllt, da

$$\langle nlm | H_1 | n'l'm' \rangle \propto \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Dies folgt aus $[H_1, \mathbf{L}^2] = 0$, womit

$$\hbar^2 [l'(l'+1) - l(l+1)] \langle nlm | H_1 | n'l'm' \rangle = 0.$$

Analog folgt aus $[H_1, L_z] = 0$

$$\hbar [m' - m] \langle nlm | H_1 | n'l'm' \rangle = 0.$$

Gl. (356) bricht also die Entartung der Eigenwerte $E_{n,0}$ bezüglich l . Im Ruhesystem des Elektrons induziert die Bewegung des Kerns mit Geschwindigkeit \mathbf{v} das Magnetfeld $\mathbf{B} = -(\mathbf{v}/c_0) \times \mathbf{E}$, wobei das Coulomb-Feld $\mathbf{E} = -\nabla\phi = -(\mathbf{r}/r)d\phi/dr$ ist. Dieser Ausdruck für \mathbf{B} folgt aus der relativistischen Transformation elektromagnetischer Felder und gilt nur näherungsweise, da das Ruhesystem des Elektrons kein Inertialsystem ist. Nach Gl. (313) und Gl. (314) ist die Wechselwirkungsenergie damit

$$-\frac{e}{mc_0} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{mc_0^2} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \phi(r) = \frac{1}{m^2 c_0^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \phi(r).$$

Dies ist bis auf einen Faktor 2 das korrekte Resultat, das man aus der Dirac-Gleichung im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik erhält,

$$H_2 = \frac{1}{2m^2 c_0^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \phi(r) = \frac{1}{2m^2 c_0^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{Z e_0^2}{r^3}, \quad (358)$$

für das Coulomb-Potential Gl. (238). Aufgrund von

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$$

folgt daß die Eigenzustände von \mathbf{J}^2 von Gl. (341) auch Eigenzustände von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ sind,

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \left| l \pm \frac{1}{2}, m, l \right\rangle \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left| l \pm \frac{1}{2}, m, l \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} \left| l \pm \frac{1}{2}, m, l \right\rangle, \quad (359)$$

Der vollständige Satz von Operatoren in dem H_2 diagonal ist, ist H , \mathbf{J}^2 , J_z , \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 . Die störungstheoretische Korrektur in den Eigenzuständen dieser Operatoren ist damit

$$\langle H_2 \rangle_{n,j=l \pm \frac{1}{2}, m, l} = \frac{1}{2m^2 c_0^2} \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} Z e_0^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl},$$

was nach Berechnung des Erwartungswertes

$$\langle H_2 \rangle_{n,j=l \pm \frac{1}{2}, m, l} = \frac{m c_0^2 (Z\alpha)^4}{4n^3 l(l+1/2)(l+1)} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix}. \quad (360)$$

Da im Falle des Coulombpotentials $\langle r^{-3} \rangle$ für $l = 0$ divergiert, ist dieser Ausdruck nur für $l > 0$ korrekt und verschwindet aufgrund des Faktors l in Gl. (359) für $l = 0$, $j = 1/2$ für realistische Potentiale, die i.a. zu endlichem $\langle r^{-3} \rangle$ führen. Allerdings führt eine dritte Korrektur, der von der relativistischen *Zitterbewegung* herrührende *Darwin-Term*, zu einem Term $\propto \delta_{l,0}$, der genau die Form Gl. (360) für $l = 0$ hat. Man kann dies nun leicht mit Gl. (357) zusammenfassen zu der relativistischen Gesamtkorrektur

$$\langle H_{\text{rel}} \rangle_{n,j=l \pm \frac{1}{2}, m, l} = \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) E_{n,0}, \quad (361)$$

welche für alle $l \geq 0$ gilt.

11 Zeitabhängige Störungstheorie

Der Hamilton-Operator H in der Schrödingergleichung Gl. (64) ist im allgemeinen zeitabhängig,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle . \quad (362)$$

In der stationären Störungstheorie haben wir uns bisher auf zeitunabhängige H beschränkt; jetzt behandeln wir den zeitabhängigen Fall. Formal kann man die Lösung von Gl. (362) schreiben als

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle , \quad (363)$$

wobei der unitäre Operator $U(t, t_0)$ mit der Anfangsbedingung

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad (364)$$

die Operator-Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (365)$$

erfüllt und die zeitliche Entwicklung eines beliebigen Anfangszustands $|\psi(t_0)\rangle$ beschreibt. Formal wird Gl. (365) gelöst durch

$$U(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right] , \quad (366)$$

wobei der *Zeitordnungsoperator* T die in der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion unter den Integralen auftretenden Faktoren $H(t')$ in zeitlich aufeinanderfolgender Reihenfolge von rechts nach links anordnet. Für den stationären Fall mit zeitunabhängigem H folgt insbesondere

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0) \right] . \quad (367)$$

Bisher haben wir die zeitliche Entwicklung der Zustände betrachtet, was dem *Schrödingerbild* entspricht. Wir gehen jetzt zum *Heisenbergbild* oder *Heisenberg-Darstellung* über und definieren dazu den *Heisenberg-Operator*

$$A_H(t) \equiv U(t, t_0)^\dagger A U(t, t_0) , \quad (368)$$

wobei A der entsprechende Operator im Schrödingerbild ist. Dieser Operator erfüllt die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H_H(t), A_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} A_H(t) , \quad (369)$$

wobei der letzte Term, $(\partial A_H / \partial t) \equiv U(t, t_0)^\dagger (\partial A / \partial t) U(t, t_0)$ nur bei expliziter Zeitabhängigkeit auftritt. Der zugehörige *Heisenberg-Zustand* ist

$$|\psi\rangle_H \equiv U(t, t_0)^\dagger |\psi(t)\rangle . \quad (370)$$

Wegen Gl. (363) ist $|\psi\rangle_H$ zeitunabhängig, während nun die Operatoren $A_H(t)$ zeitabhängig sind.

Wir nehmen nun an daß $H(t) = H_0 + V(t)$ mit einer kleinen zeitabhängigen Störung $V(t)$, welche gleich Null ist für $t \leq t_0$. Die Lösung $|\psi_0(t)\rangle$ der ungestörten Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_0(t)\rangle = H_0 |\psi_0(t)\rangle \quad (371)$$

sei bekannt und gesucht wird die Lösung der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = [H_0 + V(t)] |\psi(t)\rangle \quad (372)$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_0(t)\rangle \quad \text{für } t \leq t_0. \quad (373)$$

In der *Wechselwirkungsdarstellung* spaltet man den von H_0 herrührenden Teil der zeitlichen Entwicklung von $|\psi(t)\rangle$ ab,

$$|\psi(t)\rangle_I \equiv e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle. \quad (374)$$

In dieser Darstellung lautet die Schrödingergleichung aufgrund von Gl. (372)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = V_I(t) |\psi(t)\rangle_I, \quad (375)$$

mit der Störung in Wechselwirkungsdarstellung

$$V_I(t) \equiv e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (376)$$

Als Integralgleichung dargestellt lautet Gl. (375)

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(t_0)\rangle_I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi(t')\rangle_I, \quad (377)$$

welche zu

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(t_0)\rangle_I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') |\psi(t_0)\rangle_I - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') |\psi(t_0)\rangle_I + \dots, \quad (378)$$

iteriert werden kann, was als *Neumann-Reihe* bekannt ist. Die Eigen-Zustände $|n_0\rangle$ von H_0 zum Eigenwert $E_{n,0}$ haben die triviale Zeitentwicklung

$$|n_0(t)\rangle = e^{-iE_{n,0} t/\hbar} |n_0\rangle. \quad (379)$$

Wir wählen nun $|\psi_0(t)\rangle = |m_0(t)\rangle$ für den Anfangszustand in Gl. (373) und interessieren uns für die Wahrscheinlichkeitsamplitude für einen Übergang in einen anderen Eigenzustand $|n_0(t)\rangle$ von H_0 zum Zeitpunkt $t > t_0$,

$$\langle n_0(t) | \psi(t) \rangle = \langle n_0 | e^{iH_0 t/\hbar} | \psi(t) \rangle = \langle n_0 | \psi(t) \rangle_I. \quad (380)$$

Für den letzten Ausdruck erhalten wir durch Multiplikation von Gl. (378) mit dem zeitunabhängigen Zustand $\langle n_0 |$

$$\langle n_0(t) | \psi(t) \rangle = \delta_{nm} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n_0 | V_I(t') | m_0 \rangle = \delta_{nm} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_{n,0} - E_{m,0})t'/\hbar} \langle n_0 | V(t') | m_0 \rangle. \quad (381)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{m \rightarrow n}(t)$ von $|m_0\rangle$ nach $|n_0\rangle$ mit $n \neq m$ ist damit

$$P_{m \rightarrow n}(t) = |\langle n_0(t) | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_{n,0} - E_{m,0})t'/\hbar} \langle n_0 | V(t') | m_0 \rangle \right|^2. \quad (382)$$

Für eine instantan eingeschaltete Störung, die ansonsten zeitlich konstant ist,

$$V(t) = V\Theta(t) \quad (383)$$

folgt aus Gl. (382)

$$\begin{aligned} P_{m \rightarrow n}(t) &= \frac{|\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_{n,0} - E_{m,0})t'/\hbar} \right|^2 = \frac{|\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin(\omega_{nm}t/2)}{\omega_{nm}/2} \right]^2 = \\ &= t \frac{\pi}{\hbar^2} \delta_t(\omega_{nm}/2) |\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2, \end{aligned} \quad (384)$$

wobei wir die Übergangsfrequenz

$$\omega_{nm} \equiv \frac{E_{n,0} - E_{m,0}}{\hbar}. \quad (385)$$

und die Funktionenfolge

$$\delta_t(\alpha) \equiv \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} \quad (386)$$

eingeführt haben. Diese hat den Grenzwert

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \delta_t(\alpha) = \delta(\alpha), \quad (387)$$

was man leicht daran sieht daß $\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \delta_t(\alpha) = 1$ und $\delta_t(\alpha)$ für große t immer schärfer um $\alpha = 0$ konzentriert ist. Im Grenzfall $\omega_{nm}t \simeq \Delta E t / \hbar \gg 2\pi$, mit ΔE die Breite der Energieverteilung der Endzustände, ist also Gl. (387) proportional zu t und die *Übergangsrate* wird

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_{n,0} - E_{m,0}) |\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2, \quad (388)$$

was als *Fermis goldene Regel* bekannt ist. Solange die Breite von $\delta_t[(E_{n,0} - E_{m,0})t/(2\hbar)]$ groß gegen den Abstand δE benachbarter Zustände ist, kann man die Zustände als Kontinuum auffassen und eine Zustandsdichte pro Energie-Intervall $\rho(E)$ verwenden, womit

$$\sum_n \Gamma_{m \rightarrow n} \simeq \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_m) |\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2. \quad (389)$$

Dies gilt also für Zeiten t mit

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \ll t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta E}. \quad (390)$$

Wir betrachten schließlich noch periodische Störungen,

$$V(t) = (F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t}) \Theta(t), \quad (391)$$

wobei F ein Operator ist. Ein Beispiel stellt ein Atom in einem periodischen elektromagnetischen Feld dar: Sind $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}, t) \propto e^{\pm i\omega t}$ so haben die in der Pauli-Gleichung (323) auftretenden Terme die Form Gl. (391). Die Übergangsrates ist damit ganz analog zu Gl. (388) mit einem um $\pm \hbar\omega$ verschobenen Argument der Delta-Funktion, wobei es für hinreichende Zeiten keinen Interferenzterm gibt, da die Argumente der Delta-Funktionen nicht gleichzeitig verschwinden können,

$$\Gamma_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_{n,0} - E_{m,0} - \hbar\omega) |\langle n_0 | F | m_0 \rangle|^2 + \delta(E_{n,0} - E_{m,0} + \hbar\omega) |\langle n_0 | F^\dagger | m_0 \rangle|^2 \right]. \quad (392)$$

12 Streckenweise konstantes Zentralpotential

12.1 Lösung der stationären Schrödingergleichung

Wir betrachten Gl. (230) für ein konstantes Potential $V(r) = V_0$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_0 \right] R_l(r) = E R_l(r). \quad (393)$$

Wir definieren in diesem stückweise konstanten Potential die Wellenzahl

$$k = \frac{[2m(E - V_0)]^{1/2}}{\hbar}, \quad (394)$$

das für $E \geq V_0$ positiv genommen und für $E < V_0$ ähnlich wie in Abschnitt 3.3 als $k = i\kappa$ mit $\kappa > 0$ geschrieben wird. Damit kann man Gl. (393) nach Substitution von $\rho \equiv kr$ umschreiben in

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right] R_l(\rho) = 0. \quad (395)$$

Nach Substitution von

$$R_l(\rho) \equiv \rho^l \chi_l(\rho) \quad (396)$$

erhalten wir die Differentialgleichung für χ_l ,

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{d}{d\rho} + 1 \right] \chi_l(\rho) = 0. \quad (397)$$

Man zeigt nun leicht daß wenn $\chi_l(\rho)$ Gl. (397) genügt, dann genügt

$$\chi_{l+1} \equiv \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \chi_l$$

Gl. (397) mit $l \rightarrow l+1$. Wir erhalten damit die Rekursionsrelation

$$\chi_l = \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \chi_0. \quad (398)$$

Für $l = 0$ hat Gl. (397) die beiden linear unabhängigen Lösungen

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}. \quad (399)$$

Nach Wieder-Einsetzen in den Ansatz Gl. (396) und aufgrund der Rekursionsrelation Gl. (398) sind für $l \geq 0$ die beiden linear unabhängigen Lösungen der radialen Schrödingergleichung (395) damit gegeben durch die *sphärischen Bessel-Funktionen*

$$j_l(\rho) \equiv (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}. \quad (400)$$

und die *sphärischen Neumann-Funktionen*

$$n_l(\rho) \equiv -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (401)$$

wobei die Vorzeichenfaktoren nur Konvention sind. Ferner definiert man die *ersten und zweiten sphärischen Hankel-Funktionen* durch

$$h_l^{(1,2)}(\rho) \equiv j_l(\rho) \pm i n_l(\rho). \quad (402)$$

Für große $\rho \gg 1, l$ haben diese Funktionen folgendes asymptotisches Verhalten,

$$j_l(\rho) \rightarrow \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l(\rho) \rightarrow -\frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right), \quad h_l^{(1,2)}(\rho) \rightarrow \mp \frac{i}{\rho} e^{\pm i(\rho - l\pi/2)}. \quad (403)$$

Für $l = 0$ sind diese asymptotischen Ausdrücke aufgrund von Gl. (399) exakt und gelten für alle ρ .

12.2 Der sphärische Potentialtopf

Wir betrachten nun ein sphärisch symmetrisches Kastenpotential der Form

$$V(r) = -V_0 \Theta(a - r) \quad (404)$$

mit $a > 0, V_0 > 0$. Für die Bindungszustände mit Energie $E_b, -V_0 \leq E_b \leq 0$, können wir die Lösungen aus dem letzten Abschnitt gemäß

$$R_l(r) = A j_l(qr) \Theta(a - r) + B h_l^{(1)}(i\kappa r) \Theta(r - a), \quad (405)$$

zusammensetzen, wobei, völlig analog zu Gl. (151), die reellen Wellenzahlen

$$q = \frac{[2m(E_b + V_0)]^{1/2}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{(-2mE_b)^{1/2}}{\hbar}, \quad (406)$$

auftreten und in Gl. (405) wegen der Normierbarkeit der Bindungszustände für $r > a$ nur die exponentiell abfallende Hankel-Funktion $h_l^{(1)}(i\kappa r)$ auftreten kann. Division der Stetigkeitsbedingungen $A j_l(qa) = B h_l^{(1)}(i\kappa a)$ und $A q j_l'(qa) = B i \kappa h_l^{(1)'}(i\kappa a)$ führt auf

$$q \frac{d \ln j_l}{d\rho}(qa) = i \kappa \frac{d \ln h_l^{(1)}}{d\rho}(i\kappa a). \quad (407)$$

Für $l = 0$ ist aufgrund von Gl. (399) und (402)

$$u_0(r) = rR_0(r) = A' \sin qr \Theta(a - r) + B' e^{-\kappa r} \Theta(r - a),$$

so daß die Stetigkeitsbedingungen auf

$$-\cot qa = \frac{\kappa}{q}, \quad (408)$$

führen, welche identisch mit der Stetigkeitsbedingung Gl. (155) für ungerade Bindungszustände im eindimensionalen Potentialtopf Gl. (146) ist. Insbesondere benötigen Bindungszustände im dreidimensionalen Potentialtopf eine Mindeststärke des Potentials von

$$V_0 > \frac{\pi^2}{8} \frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (409)$$

wie in Gl. (156).

13 Streutheorie

13.1 Streuamplitude und optisches Theorem

Wir bringen die stationäre Schrödingergleichung $H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit H aus Gl. (62) in die Form

$$(\nabla^2 + \mathbf{k}^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (410)$$

Mit Hilfe einer *Greenschen Funktion* $G(\mathbf{r})$ der freien Wellengleichung,

$$(\nabla^2 + \mathbf{k}^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (411)$$

können wir Gl. (410) in die Integralform

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \quad (412)$$

bringen, was der Summe einer einlaufenden ebenen Welle $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ und einer durch den zweiten Term beschriebenen gestreuten Welle entspricht. Da wir an physikalisch auslaufenden Streuwellen interessiert sind, wählen wir die *retardierte Greensche Funktion*, welche aus der Elektrodynamik bekannt ist,

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = -\frac{e^{i\mathbf{k}r}}{4\pi r}. \quad (413)$$

Man erhält diese Form durch Fourier-Transformation von Gl. (411),

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{q}^2} = -\frac{1}{(2\pi)^2 i r} \int_0^\infty dq q \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{q^2 - k^2} = -\frac{1}{(2\pi)^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dq q \frac{e^{iqr}}{q^2 - k^2}, \quad (414)$$

wobei wir Polarkoordinaten mit $\mathbf{r} = r\mathbf{e}_z$ verwendet haben. Das verbleibende Integral kann man wegen $r > 0$ in der oberen komplexen Halbebene schließen, so daß die Singularität bei $q = k$ im Gegenuhrzeigersinn umlaufen wird was nach dem Residuensatz der Funktionentheorie tatsächlich zu Gl. (413) führt. Einsetzen in Gl. (412) und Verwenden der Näherung $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r$ für Radien r groß gegen die Reichweite des Potentials führt zu $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \simeq -e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}/(4\pi r)$ mit der Wellenzahl $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$ des in die Richtung \mathbf{r} gestreuten Teilchens. Damit wird

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}, k\mathbf{r}/r) \equiv \psi_{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \psi_{\text{s}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (415)$$

mit der *Streuamplitude*

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \quad (416)$$

wobei $k = k'$. Man beachte daß $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ die Dimension einer Länge hat. Andererseits lautet die allgemeine Lösung von Gl. (410) für ein radialsymmetrisches Potential, $V(\mathbf{r}) = V(r)$,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} C'_l R_l(r) Y_{l0}(\mathbf{r}/r) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_l(r) P_l(\cos\theta), \quad (417)$$

wobei C_l und C'_l Konstanten sind und benutzt wurde daß für ein radialsymmetrisches Potential einlaufende und gestreute Wellenfunktionen nicht vom Azimutwinkel ϕ um die Richtung der einlaufenden Welle \mathbf{k} abhängen können (die Kugelkoordinaten sind so gewählt daß $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_z$). Dabei gilt $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = kk' \cos\theta$. Die radiale Wellenfunktion $R_l(r)$ genügt dabei der Differentialgleichung (393) und wir wissen von der Diskussion aus dem vorhergehenden Kapitel daß die Lösung für $V(r) \rightarrow 0$ eine Linearkombination aus sphärischen Bessel- und Neumann- oder Hankel-Funktionen sein muß. Da für jedes realistische Potential $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$ muß das asymptotische Verhalten von $R_l(r)$ wegen Gl. (403) zwangsläufig die Form

$$R_l(r) \propto \frac{1}{r} \sin \left[kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k) \right] \quad (418)$$

haben, wobei wir gleichzeitig wissen, daß für verschwindendes Potential $\delta_l(k) \equiv 0$ sein muß, da die bei $r = 0$ reguläre Lösung der freien radialen Schrödingergleichung $R_l(r) \propto j_l(kr)$ ist. Die Phase $\delta_l(k)$ wird daher als *Streuphase* der Partialwelle l bezeichnet. Die generelle Asymptotik Gl. (418) folgt auch aus der Tatsache daß die radiale Gleichung für $u_l(r) \equiv rR_l(r)$ [siehe Gl. (231)], Gl. (232),

$$u_l''(r) + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_{\text{eff}}(r) \right] u_l(r) = 0, \quad (419)$$

mit $V_{\text{eff}}(r)$ aus Gl. (233) für $r \rightarrow \infty$, $V_{\text{eff}}(r) \rightarrow 0$ eine freie Wellengleichung mit der allgemeinen Lösung der Form

$$u_l(r) \propto \sin \left[kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k) \right]$$

ist.

Einsetzen von Gl. (418) in Gl. (417) führt damit auf

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{e^{-ikr}}{2ir} \sum_{l=0}^{\infty} C_l e^{-i\delta_l(k)} e^{il\pi/2} P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{2ir} \sum_{l=0}^{\infty} C_l e^{i\delta_l(k)} e^{-il\pi/2} P_l(\cos \theta). \quad (420)$$

Wir wollen dies nun mit Gl. (415) vergleichen. Dazu verwenden wir ohne Beweis die Entwicklung der ebenen Welle in Kugelfunktionen

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \simeq \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} P_l(\cos \theta), \quad (421)$$

wobei im zweiten Ausdruck der Limes der sphärischen Besselfunktion $j_l(kr)$ für $r \rightarrow \infty$ eingesetzt wurde. Einsetzen in Gl. (415) und Vergleich der Koeffizienten von $e^{\pm ikr}$ mit Gl. (420) ergibt

$$C_l = \frac{i^l}{k} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \quad (422)$$

und

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2i} (2l+1) P_l(\cos \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) (2l+1) P_l(\cos \theta). \quad (423)$$

Gl. (423) ist als *Partialwellenentwicklung* der Streuamplitude bekannt. Man sieht insbesondere daß die Streuamplitude verschwindet wenn die Streuphasen verschwinden.

Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* pro Raumwinkel-Element, $d\sigma/d\Omega$, ist definiert als

$$\Gamma_s(\Omega) = \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \mathbf{j}_s(\Omega) \cdot \mathbf{e}_r = j_{\text{in}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega), \quad (424)$$

wobei $\Gamma_s(\Omega)$ die Rate der in Richtung Ω gestreuten Teilchen pro Raumwinkel ist, j_{in} die Stromdichte der einlaufenden Teilchen und j_r die Stromdichte der gestreuten Teilchen in radialer Richtung. Diese Stromdichten erhält man durch Anwendung von Gl. (74) auf den einlaufenden bzw. gestreuten Teil der Wellenfunktion Gl. (415),

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{\text{in}} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi_{\text{in}}^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla \psi_{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{r})] = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \\ \mathbf{j}_s(\Omega) \cdot \mathbf{e}_r &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\psi_s^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \psi_s(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \right] = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\frac{f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{ikr}}{r} \right] \\ &\simeq \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2}{r^2}, \end{aligned} \quad (425)$$

wobei letzteres für $r \rightarrow \infty$ gilt. Vergleich mit der Definition Gl. (424) ergibt nun

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2. \quad (426)$$

Aus der Orthonormalitätsrelation Gl. (221) folgt nun für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma(k) = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (427)$$

Dabei tragen für ein Potential der Reichweite a nur Terme mit $l \lesssim ka$ bei, da die Wellenfunktion aufgrund der Drehimpulsbarriere $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ für $r \lesssim [l(l+1)]^{1/2}/k$ exponentiell abfällt.

Man sieht an der Definition der Legendre-Polynome, Gl. (214), leicht daß $P_l(1) = 1$. Vergleich von Gl. (423) mit Gl. (427) ergibt das *optische Theorem*,

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}' = \mathbf{k}), \quad (428)$$

welches den Imaginärteil der Vorwärts-Streuamplitude zum Gesamtwirkungsquerschnitt in Beziehung setzt. Man kann dies auch allgemeiner für inelastische Streuung zeigen, wobei sich $\sigma(k)$ in Gl. (428) dann auf den Gesamtwirkungsquerschnitt, die Summe aus elastischem und inelastischem Wirkungsquerschnitt, bezieht: Für den Fall daß das Potential für $r > a$ verschwindet oder mindestens wie $1/r^2$ abfällt ist die radiale Wellenfunktion für $r > a$ durch

$$R_l^{>a}(r) = \frac{1}{2} [h_l^*(kr) + s_l(k) e^{2i\delta_l(k)} h_l(kr)] \quad (429)$$

gegeben, wobei $h_l(\rho) \equiv h_l^{(1)}(\rho)$ die erste Hankelfunktion ist und die Amplitude $0 \leq s_l(k) \leq 1$ den nicht-absorbierten Teil der Wellenfunktion beschreibt. Unter Ausnutzung der Asymptotik aus Gl. (403) für $r \rightarrow \infty$ erhält man

$$\begin{aligned} j_r(\Omega) &= \frac{\hbar}{m} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \operatorname{Im} \left[R_l^*(r) \frac{dR_l(r)}{dr} \right] \\ &\rightarrow -\frac{\hbar\pi}{mkr^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - s_l^2(k)], \end{aligned}$$

wobei im letzten Ausdruck bereits über die Raumwinkel gemittelt wurde. Damit ist der *absorbierte Fluss*

$$\Gamma_r = - \int d\Omega r^2 j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - s_l^2(k)],$$

was dem inelastischen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{inel}}(k) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - s_l^2(k)] \quad (430)$$

entspricht. Andererseits kann man Γ_r aus Gl. (415) berechnen und erhält neben den Raumwinkel-Integralen von Gl. (425), von denen das erste verschwindet, einen Interferenzterm, der schließlich wieder auf Gl. (428) mit $\sigma(k) = \sigma_{\text{inel}}(k) + \sigma_s(k)$ führt. Dies entspricht Erhaltung der Zahl der gestreuten Teilchen. Der totale *elastische Wirkungsquerschnitt* ist für diesen allgemeinen Fall

$$\sigma_{\text{el}}(k) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 + s_l^2(k) - 2s_l(k) \cos 2\delta_l(k)] \quad (431)$$

13.2 Streuphasen und Streulänge

Für elastische Streuung, $s_l = 1$ wird aus Gl. (429)

$$R_l^{>a}(r) = e^{i\delta_l(k)} [j_l(kr) \cos \delta_l(k) - n_l(kr) \sin \delta_l(k)] , \quad (432)$$

wobei $h_l(\rho) \equiv h_l^{(1)}(\rho)$ die erste Hankelfunktion ist. Aus der Stetigkeit von $R_l(r)$ und $R_l'(r)$ bei $r = a$ folgt dann

$$\cot \delta_l(k) = \frac{k n_l'(ka) - \alpha_l(k) n_l(ka)}{k j_l'(ka) - \alpha_l(k) j_l(ka)} , \quad (433)$$

wobei

$$\alpha_l(k) \equiv \left. \frac{d \ln R_l^{<a}}{dr} \right|_{r=a} \quad (434)$$

worin $R_l^{<a}(r)$ die radiale Wellenfunktion für $r \leq a$ darstellt. Daraus folgt auch

$$e^{2i\delta_l(k)} - 1 = 2 \frac{k j_l'(ka) - \alpha_l(k) j_l(ka)}{\alpha_l(k) h_l(ka) - k h_l'(ka)} . \quad (435)$$

Unter Verwendung der Asymptotik der sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen für kleine Argumente in Gl. (433) zeigt man leicht daß

$$\tan \delta_l(k) \simeq \frac{2l+1}{[(2l+1)!!]^2} \frac{l - a\alpha_l(k)}{l+1 + a\alpha_l(k)} (ka)^{2l+1} \quad \text{für } k \rightarrow 0 \quad (436)$$

gilt, wobei $(2l+1)!! \equiv 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)$ ist. Dies stellt auch die Konvergenz von Streuamplitude Gl. (423) und Wirkungsquerschnitt Gl. (427) für kleine Energien sicher. Insbesondere folgt aus Gl. (436) daß man die *Streulänge* a_0 definieren kann als

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{a_0} , \quad (437)$$

woraus für die Streuamplitude

$$f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f_0(k) \simeq -\frac{a_0}{ika_0 + 1} \quad \text{für } k \ll a_0^{-1} \quad (438)$$

folgt und damit für den Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) \simeq \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \simeq a_0^2 , \quad \sigma \simeq 4\pi a_0^2 , \quad (439)$$

was um einen Faktor 4 größer ist als der klassische Wirkungsquerschnitt einer Kugel mit Radius a_0 . Man sieht leicht daß Gl. (439) quantenmechanischer Streuung an einer harten Kugel mit Radius $a = a_0$ entspricht: In diesem Falle ist $R_l^{<a}(a) = 0$ und damit nach Gl. (434) $\alpha_l(k) = \infty$, somit nach Gl. (433)

$$\cot \delta_l(k) = \frac{n_l(ka)}{j_l(ka)} . \quad (440)$$

Insbesondere gilt für s-Wellen

$$\delta_0(k) = -ka = -ka_0, \quad (441)$$

wobei letzteres aus Gl. (437) für $k \rightarrow 0$ und damit $\delta_0(k) \ll 1$ folgt. Für ein schwaches anziehendes Potential (ohne Bindungszustand) ist die Streuphase positiv, da die Wellenfunktion bildlich gesprochen zum Zentrum "hingezogen" wird (die effektive Wellenzahl k ist größer bei kleinen r), womit aufgrund von Gl. (437) die Streulänge negativ ist. Für ein abstoßendes Potential ist es genau umgekehrt; die Wellenfunktion wird vom Zentrum "weggedrückt". Ferner ist für einen Bindungszustand $k = i\kappa$ und somit

$$R_l^{>a}(r) \propto h_l(i\kappa r), \quad \text{mit } \kappa = \frac{(-2mE_b)^{1/2}}{\hbar},$$

womit Gl. (434)

$$\alpha_l(k) = i\kappa \frac{h'_l(i\kappa a)}{h_l(i\kappa a)} \quad (442)$$

ergibt. Daraus folgt nach Gl. (435) daß $e^{2i\delta_l(k)} - 1$ und damit $f_0(k)$ bei $k = i\kappa = i/a_0$ eine Singularität hat. Damit ist $a_0 = 1/\kappa > 0$ bei Existenz eines Bindungszustands; insbesondere ist a_0 positiv und die Streuphase negativ bzw. größer als $\pi/2$. Im Grenzfall hoher Energien folgt für Streuung an einer harten Kugel mit Radius a aus Gl. (440) und der Asymptotik aus Gl. (403)

$$\delta_l(k) = -ka + \frac{l\pi}{2}$$

und man kann zeigen daß

$$\sigma(k) \simeq 2\pi a^2 \quad \text{für } ka \gg 1. \quad (443)$$

Aufgrund von Beugungseffekten ist dies doppelt so groß wie der klassische Streuquerschnitt.

13.3 Bornsche Näherung

Die *Bornsche Näherung* für den Wirkungsquerschnitt erhält man indem man $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ in Gl. (416) mit der ungestörten einlaufenden Welle annähert. Die Streuamplitude Gl. (416) wird damit zu

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (444)$$

wobei $\tilde{V}(\mathbf{q})$ die Fourier-Transformierte des Potentials ist. Für ein *Yukawa-Potential*

$$V(r) = g \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (445)$$

mit $\tilde{V}(\mathbf{q}) = 4\pi g/(q^2 + \mu^2)$ folgt wegen

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) = \left(2k \sin\frac{\theta}{2}\right)^2$$

($k = k'$) mit dem Streuwinkel θ für den Wirkungsquerschnitt, Gl. (426),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{g^2}{[4E_k \sin^2 \theta/2 + \hbar^2 \mu^2/(2m)]^2} \quad (446)$$

mit der kinetischen Energie $E_k = k^2/(2m)$. Für $\mu = 0$ beschreibt dies die Streuung an einem Coulomb-Potential. Die Näherung ist in diesem Falle sogar exakt und ist auch identisch mit dem klassischen Streuquerschnitt.

14 Mehrteilchensysteme, Fermionen und Bosonen

Wir betrachten den unitären *Permutationsoperator*

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P_1}, \dots, \mathbf{r}_{P_N}), \quad (447)$$

der auf eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ wirkt, welche N identische Teilchen beschreibt. Jeder Operator A , der eine sinnvolle physikalische Observable beschreibt, muss mit dem Permutationsoperator vertauschen,

$$[U(P), A] = 0. \quad (448)$$

Dies gilt insbesondere für den Hamilton-Operator, $A = H$. Die Matrixelemente eines solchen Operators sind in den Zuständen ψ und $U(P)\psi$ identisch,

$$\langle U(P)\psi | A | U(P)\psi \rangle = \langle \psi | U(P)^\dagger A U(P) | \psi \rangle = \langle \psi | U(P)^\dagger U(P) A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle,$$

womit ψ und $U(P)\psi$ physikalisch ununterscheidbar sind. In der Natur sind nun die vollständig symmetrischen und vollständig anti-symmetrischen Zustände realisiert. Die symmetrischen Wellenfunktionen,

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P_1}, \dots, \mathbf{r}_{P_N}) = \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (449)$$

entsprechen dabei den *Bosonen*, während die anti-symmetrischen Zustände,

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P_1}, \dots, \mathbf{r}_{P_N}) = (-1)^{\text{sign}(P)}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (450)$$

den *Fermionen* entsprechen. Wegen $[U(P), H] = 0$ sind diese Symmetrie-Eigenschaften zeitlich invariant. Das *Spin-Statistik-Theorem* besagt dabei, daß Bosonen ganzzahligen Spin haben, während Fermionen halbzahligen Spin besitzen.

Wir betrachten insbesondere den Fall nicht-wechselwirkender Teilchen,

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i), \quad (451)$$

wobei die Einteilchen-Zustände $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ die Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonians sind,

$$h(\mathbf{r}, \mathbf{p})\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{n}}\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}), \quad (452)$$

welche durch eine Quantenzahl \mathbf{n} charakterisiert sind, die für einen drei-dimensionalen Ortsraum im allgemeinen aus drei Komponenten besteht. Die bosonischen und fermionischen N -Teilchenzustände werden nun durch Symmetrisierung bzw. Anti-Symmetrisierung der Produktzustände

$$\begin{aligned}\psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \prod_{i=1}^N \psi_{\mathbf{n}_i}(\mathbf{r}_i) \\ H(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) \psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_i) &= E_{\underline{n}} \psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_i) \quad \text{mit} \quad E_{\underline{n}} = \sum_{i=1}^N \epsilon_{\mathbf{n}_i} = \sum_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}(\underline{n}) \epsilon_{\mathbf{n}}\end{aligned}\quad (453)$$

gebildet, wobei wir die N -Teilchen Quantenzahl

$$\underline{n} = (\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N) \quad (454)$$

und die *Besetzungszahlen*

$$N_{\mathbf{n}}(\underline{n}) = \# \{i \in \{1, \dots, N\}, \mathbf{n}_i = \mathbf{n}\} \quad (455)$$

der Ein-Teilchenzustände $\psi_{\mathbf{n}}$ eingeführt haben. Der auf Eins normierte bosonische Zustand ist damit

$$|\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^+ = \psi_{\{N_{\mathbf{n}}\}}^+(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \left(\frac{\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!}{N!} \right)^{1/2} \sum_P' \psi_{\mathbf{n}_{P1}}(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{PN}}(\mathbf{r}_N), \quad (456)$$

wobei sich die Summe \sum_P' über alle Permutationen erstreckt, die zu den $N!/(\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!)$ orthonormalen Termen führen, was auch den Normierungsfaktor begründet. Der auf Eins normierte fermionische Zustand ist

$$\begin{aligned}|\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^- &= \psi_{\{N_{\mathbf{n}}\}}^-(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \sum_P \text{sign}(P) \psi_{\mathbf{n}_{P1}}(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{PN}}(\mathbf{r}_N) = \\ &= \frac{1}{(N!)^{1/2}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{r}_N) \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (457)$$

was auch als *Slater-Determinante* bekannt ist.

15 Bellsche Ungleichung und verschränkte Zustände

Der Singulettzustand gebildet aus zwei Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, Gl. (336), spielt eine wichtige Rolle im *Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) Paradoxon*: Präpariert man diesen Zustand, z.B. durch Zerfall eines Spin-0 Systems, und lässt sich die beiden Teilchen beliebig weit entfernen, so würde eine Messung des Spins eines der beiden Teilchen entlang einer bestimmten Richtung \mathbf{n} zu $\pm\hbar/2$ so würde instantan feststehen, daß die Spinprojektion des anderen Teilchens entlang der gleichen Richtung gleich $\mp\hbar/2$ ist, was scheinbar die Kausalität verletzt. Allerdings ergibt eine genauere Analyse dieser Situation daß damit keine Information übertragen werden kann, so daß die Kausalität *nicht* verletzt ist.

Man kann auch leicht zeigen daß sich Quantenzustände wie der Singulettzustand klassisch *nicht* durch *verborgene Parameter* beschreiben lassen: Betrachten wir einen Detektor, der Teilchen 1 genau dann registriert wenn die Projektion seines Spins auf eine Achse \mathbf{n}_1 positiv ist und einen zweiten Detektor, der Teilchen 2 genau dann registriert wenn die Projektion seines Spins auf eine andere Achse \mathbf{n}_2 positiv ist. Befinden sich die beiden Teilchen im *verschränkten* Singulettzustand, so sagt die Quantenmechanik voraus daß die relative Anzahl von Versuchsausgängen in denen beide Detektoren ansprechen durch

$$\begin{aligned}
N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_2) &= \langle 0, 0 | \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}_1) \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{n}_2) | 0, 0 \rangle = \\
&= \langle 0, 0 | \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}_1) \frac{1}{2}(1 - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}_2) | 0, 0 \rangle = \\
&= \frac{1}{4}(1 - \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)
\end{aligned} \tag{458}$$

gegeben ist. Dabei haben wir im ersten Schritt die Projektoren auf die positiven Spin-komponenten verwendet, im zweiten Schritt haben wir verwendet daß der Singulettzustand anti-symmetrisch unter Vertauschung von Teilchen 1 und Teilchen 2 ist, und im dritten Schritt wurde $\langle 0, 0 | \boldsymbol{\sigma}_1 | 0, 0 \rangle = 0$ und $(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}_1)^2 = 1$ verwendet. Würde sich der Singulettzustand klassisch durch einen verborgenen Parameter, z.B. durch den Wert der Spinprojektion von Teilchen 1 auf eine Referenzachse \mathbf{n}_r , beschreiben lassen, so müsste gelten

$$N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_2) = N_1(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2) + N_1(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_r, \mathbf{n}_2), \tag{459}$$

wobei $N_1(\dots|\dots)$ die Wahrscheinlichkeit ist daß Teilchen 1 positive Spinprojektion auf die Achsen links des Balkens und negative Spinprojektion auf die Achsen rechts des Balkens haben. Gl. (459) gilt da negative Projektion des Spins von Teilchen 1 auf eine gegebene Achse wegen der Antisymmetrie des Singulettzustands gleichbedeutend ist mit positiver Projektion des Spins von Teilchen 2 auf die gleiche Achse und da die beiden Projektionen auf \mathbf{n}_r sämtliche Möglichkeiten ausschöpfen. Analog zu Gl. (459) gilt nun

$$N_{12}(\mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2) = N_1(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2) + N_1(\mathbf{n}_r|\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2),$$

und damit $N_1(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2) \leq N_{12}(\mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2)$ da alle Wahrscheinlichkeiten nicht-negativ sind. Analog ist $N_1(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_r, \mathbf{n}_2) \leq N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_r)$ und durch Einsetzen in Gl. (459) folgt schließlich die *Bellsche Ungleichung*

$$N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_2) \leq N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_r) + N_{12}(\mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2). \tag{460}$$

Wählen wir nun die koplanaren Richtungen $\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_x$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_y$, und $\mathbf{n}_r = (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)/2^{1/2}$, so ist $N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_2) = 1/4$, $N_{12}(\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_r) = N_{12}(\mathbf{n}_r|\mathbf{n}_2) = (1 - 2^{-1/2})/4$, was die Bellsche Ungleichung (460) verletzt.

Literatur

- [1] Walter Greiner, Ludwig Neise, Horst Stöcker, *Quantenmechanik*, Thun und Frankfurt am Main: Harri Deutsch, 1993. Enthält viele Beispiele und Aufgaben mit Lösungen.
- [2] Eyvind H. Wichmann, *Quantenphysik*, Berkeley Physics Course Band 4, deutsche Ausgabe Braunschweig: Vieweg & Sohn 1985. Enthält viele anschauliche Beispiele.
- [3] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik III: Quantenmechanik*, Akademie-Verlag Berlin 1984.
- [4] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Berlin, Springer, 4. Auflage 1993.
- [5] Torsten Fliessbach, *Lehrbuch zur Theoretischen Physik III: Quantenmechanik*, Spektrum Lehrbuch, 5. Auflage, Spektrum-Akademischer Verlag 2008.
- [6] Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5: Quantenmechanik*, Springer-Lehrbuch 7. Auflage, Springer 2009.
- [7] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*, Addison-Wesley
- [8] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *Feynman Lectures on Physics: Volume III: Quantum mechanics*, deutsch-englisch, Addison-Wesley 1971.