25.10.05

Wellenbeschreibung eines freien Teilchens

$\vec p = \hbar \vec k$ $\qquad E = \hbar\omega$ $\qquad E = \frac{\vec p^{\,2}}{2m}$

$$\Rightarrow \quad \omega = \frac{\hbar \vec k^2}{2m}$$

Gruppengeschw.: $\quad v_g = \frac{d\omega}{dk}$

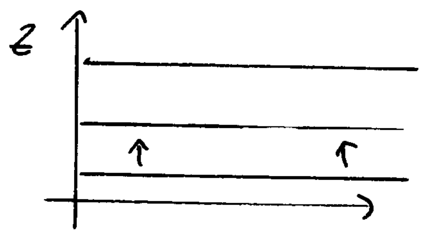
Wellenpaket: Überlagerung ebener Wellen bzw Fouriertransform.

$$\psi(\vec x,t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \varphi(k)\, e^{i(\vec k\vec x - \omega(\vec k)\cdot t)} \qquad \omega(k) = \frac{\hbar}{2m}\vec k^2$$

ebene Welle: $\vec k = k\cdot z$ $\qquad$ Phase $= kz - \omega t$

Wellenfront wird beschrieben durch Phase = const

$\Rightarrow$



Wellenfronten sind parallel und senkrecht auf z

Gaußsches Wellenpaket in einer Dimension

$$\varphi(k) = A\cdot e^{-(k-k_0)^2 d^2}$$

$$\rightsquigarrow \psi(x,t) = \frac{A}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{d^2+i\tau}}\, \exp\left[\frac{-x^2/4 + i d^2 k_0 (x - k_0\tau)}{d^2+i\tau}\right]$$

$$\tau = \frac{\hbar}{2m} t$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{A^2}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{d^4+\tau^2}}\, \exp\left[-\frac{(x-2k_0\tau)^2}{2(d^2+\tau^2/d^2)}\right]$$

für $t=0$, $\tau=0$

$$|\psi(x,0)|^2 = \frac{A^2}{4\pi}\frac{1}{d^2}\, e^{-x^2/2d} \qquad \text{gaußsche Verteilung}$$

mit fortschreitender Zeit bewegt sich das Wellenpaket mit $\bar x = 2k_0\tau = \frac{k_0}{m}t = v_0 t$ fort und zerfließt

Herleitung durch Betrachtung und Vergleich mit allg. Form

$$|\psi(x,t)|^2 \propto \exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2}{2(\Delta x)^2}\right]$$

genauer Ausdruck für die Breite

$$(\Delta x)^2 = d^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 d^2}$$

Schrödingergleichung
lässt sich aus ebener Welle "herleiten", d.h. ebene Welle $A \cdot e^{i(kx-\omega(k)t)}$ ist eine Lsg der SG

$\Rightarrow$ alle Wellenpakete (Überlagerungen ebener Wellen) sind ebenfalls Lsg. (Linearität)

<u>Doppelspaltexperiment</u> 27.10.05

klassisch:
$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$$
$$P = P_1 + P_2$$

Quantenmech.:
$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

$$|\psi|^2 = (\psi_1 + \psi_2)(\psi_1^* + \psi_2^*)$$
$$= \psi_1\psi_1^* + \psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^* + \psi_2\psi_2^*$$
$$= |\psi_1|^2 + \underbrace{\psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^*}_{\text{Interferenz}} + |\psi_2|^2$$

<u>Erwartungswerte</u>

$$\langle x \rangle = \int dx\, x \cdot P(x) = \int dx^3\, x\, |\psi(x,t)|^2$$
$$= \int \psi^* x\, \psi\, dx^3$$

Unschärferelation für den harmonischen Oszi

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi_n , \hat{x} \psi_n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \langle \psi_n , (\hat{a} + \hat{a}^+) \psi_n \rangle = 0$$

da $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$

$$\rightarrow (\Delta x)^2 = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n , (\underbrace{\hat{a}^2}_{0} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \underbrace{(\hat{a}^+)^2}_{0}) \psi_n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$ Nachrechnen!

analog:

$$(\Delta p)^2 = \hbar^2 \frac{m\omega}{\hbar} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\rightarrow \Delta x \, \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \geq \frac{\hbar}{2}$$ Unschärferelation ist erfüllt

Übergang zur klassischen Welt durch
Kohärente Zustände

betrachte $\hat{a}(\alpha) = e^{-\alpha \hat{a}^+} \hat{a} \, e^{\alpha \hat{a}^+}$ $\qquad \hat{a} = \hat{a}(0)$

Taylorreihe $\hat{a}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \left.\frac{d\hat{a}(\alpha)}{d\alpha}\right|_{\alpha=0} + \dots$

mit $\frac{d\hat{a}(\alpha)}{d\alpha} = e^{-\alpha \hat{a}^+} \underbrace{(-\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)}_{= [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1} e^{\alpha \hat{a}^+} = 1$

$$\Rightarrow \hat{a}(\alpha) = \hat{a} + \alpha + 0$$ Operator ist nur verschoben

Definiere $\psi_\alpha = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha \hat{a}^+} \psi_0$ $\quad , \langle \psi_\alpha , \psi_\alpha \rangle = 1$

$$\hat{a} \psi_\alpha = e^{-|\alpha|^2/2} \underbrace{e^{\alpha \hat{a}^+} e^{-\alpha \hat{a}^+}}_{=1} \underbrace{\hat{a} \, e^{\alpha \hat{a}^+}}_{\hat{a}(\alpha)} \psi_0$$

$$= e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha \hat{a}^+} \underbrace{(\hat{a}+\alpha)\,\psi_0}_{\to 0}$$

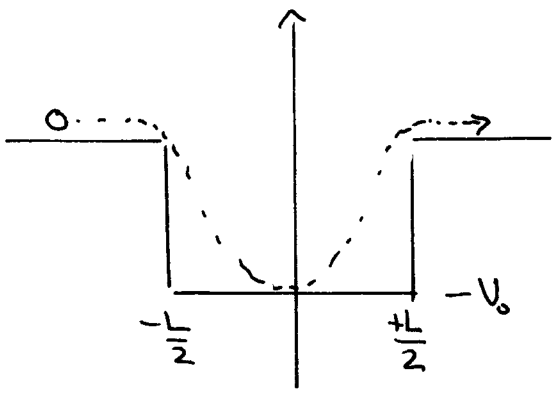
$$= \alpha \cdot e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha \hat{a}^+}\, \psi_0 = \alpha\, \psi_\alpha$$

$\Rightarrow$ ψ_α ist eine Eigenfunktion des Vernichtungsoperators

Die Unschärfe ist hier minimal!

$\Delta x\, \Delta p = \frac{\hbar}{2}$

<u>Streuzustände im Potentialtopf</u>



$E > 0$

klassisch: Teilchen rollt nach unten, und wieder hoch

$\rightarrow$ läuft unbeeinflusst weiter

quantenmechanisch: Transmission + <u>Reflexion</u>

- Beachte Stetigkeitsbed.

$\psi_I(x) = A \cdot e^{iqx} + B \cdot e^{-iqx}$ $\qquad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E$

$\psi_{II}(x) = C \cdot e^{ikx} + D \cdot e^{-ikx}$ $\qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$

$\psi_{III}(x) = F \cdot e^{iqx} + G \cdot e^{-iqx}$

$\hookrightarrow = 0$ auf phys. Interpretation

$$A = e^{iqL}\left[\cos kL - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin kL\right] F$$

$$\frac{F}{A} \equiv S \quad , \quad |S|^2 : \text{Transmissionskoeffizient}$$

$$\left(|S|^2\right)^{-1} = \left|\cos kL - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin kL\right|^2$$

$$= \cos^2 kL + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)^2 \sin^2 kL$$

$$= 1 + \frac{1}{4}\underbrace{\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)^2}_{= \frac{q^2}{k^2} - 2 + \frac{k^2}{q^2} = \frac{V_0^2}{E(E+V_0)}} \sin^2 kL$$

$$= 1 + \frac{1}{4}\sin^2 kL \cdot \frac{1}{E/V_0\,(1+E/V_0)}$$

$$\rightarrow \boxed{|S|^2 = \left(1 + \frac{1}{4}\,\cancel{\sin}\,\frac{\sin^2 kL}{E/V_0(1+E/V_0)}\right)^{-1}}$$

$|S|^2 = 1$ für $\sin^2 kL = 0 \rightarrow k = \frac{n\pi}{L}$

vollständige Transmission

$\boxed{\text{„Resonanz"}}$

$$\rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0 = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} - V_0 \overset{!}{>} 0 \quad \text{(Beschränkung von } n\text{)}$$

Energie im Resonanzfall

In der Nähe der Resonanzenergie: Breit-Wigner-Funktion durch Taylor in 1. Ordnung von $e^{iqL}S$

$$\rightarrow |S(E)|^2 \simeq \frac{(\Gamma/2)^2}{(E-E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

<u>Potentialbarriere</u>

wird prinzipiell wie der Potentialtopf behandelt:

- Unterteilung in 3 Gebiete
- Exakt gleiche Situation in I und III (vor u. hinter der Barriere)
- Im Gebiet II: $\psi_{II}(x) = C\cdot e^{-\varkappa x} + D e^{\varkappa x}$

  vgl.: $\psi_{II}^{Topf}(x) = C\cdot e^{ikx} + D\cdot e^{ikx}$

$$\Rightarrow \boxed{k \to i\varkappa}$$ Potentialtopf → Potentialbarriere

ohne zu rechnen: Transmissionkoeff.

$$|S(E)|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{i\varkappa} - \frac{i\varkappa}{q}\right)^2 \sin^2(i\varkappa L)\right]^{-1}$$

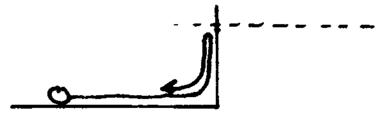
$$= \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{q}{\varkappa} + \frac{\varkappa}{q}\right)^2 \sinh^2(\varkappa L)\right]^{-1}$$

$$\left(\frac{q}{\varkappa} + \frac{\varkappa}{q}\right)^2 = \dots = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}$$

Topf: +

Vergleich mit der Klassik:

klassisch: totale Reflexion



quantenmech.: Tunneleffekt:

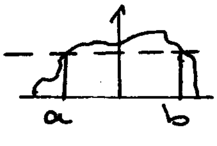
exponentieller Abfall in der Barriere, "Dämpfung" der Aufenthaltswahrscheinlichkeit hinter der Barriere $|S(E)|^2$ Tunnelwahrsch.

Spezialfall: hohe Barriere $\varkappa L \gg 1 \to \sinh \varkappa L \approx \frac{1}{2} e^{\varkappa L}$

$$|S(E)|^2 \simeq \frac{16\,E(V_0 - E)}{V_0^2}\, e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\cdot L}$$

klassischer Grenzfall $\lim_{\hbar \to 0} |S(E)|^2 = 0$

Lässt sich auch auf <u>beliebige</u> Potentialb. anwenden!



a, b klassische Umkehrpunkte $|S(E)|^2 \propto \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx \sqrt{2m(V(x)-E)}\right]$

"Gamow-Faktor"

Drehimpuls

in einer Dimension: Translation durch $\hat{p}$

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar} a \hat{p}\right] \psi(x) = \exp\left[a \cdot \frac{d}{dx}\right] \psi(x) = \sum_{n \geq 0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(a \frac{d}{dx}\right)^n \psi(x)$$
$$= \psi(x) + a \cdot \frac{d}{dx}\psi(x) + \frac{1}{2} a^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \dots$$
$$= \psi(x+a)$$

Drehimpuls: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ mit $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k$ (mit ESK)

$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad \rightarrow \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$

$$[\hat{L}_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$$
$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k$$

analog zu oben: $\exp[i/\hbar\, \vec{\phi} \cdot \vec{L}]\, \psi(\vec{x})$ mit Drehachse in $\vec{e}_z$: $\vec{\phi} = \phi \cdot \vec{e}_z$

in Kugelkoord.: $\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \cdot \frac{1}{r \sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$

$\Rightarrow \hat{\vec{L}} = -i\hbar\, \vec{x} \times \nabla = -i\hbar\left(\vec{e}_r \times \vec{e}_\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_r \times \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$

$= -i\hbar\left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$; $\vec{e}_\varphi = -\sin\varphi\, \vec{e}_x + \cos\varphi\, \vec{e}_y$

$\vec{e}_\vartheta = \cos\vartheta \cos\varphi\, \vec{e}_x + \cos\vartheta \sin\varphi\, \vec{e}_y + (-\sin\vartheta)\, \vec{e}_z$

nur $\vec{e}_z$ interessiert

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(-\frac{1}{\sin\vartheta}\right)(-\sin\vartheta)\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$\rightarrow$ vgl. oben

$\rightarrow \exp\left[\frac{i}{\hbar}\phi \hat{L}_z\right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + \phi)$

allgemein (ohne Beweis):

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\vec{L}\right] \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} + \vec{\phi} \times \vec{x})$$

Leiteroperatoren für den Drehimpuls

$\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, gewählt, sodass $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = i\hbar L_y \pm \hbar \hat{L}_x$

$= \pm\hbar \hat{L}_\pm$

$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0$

$\hat{\vec{L}}$ ist hermitesch → hat reelle Eigenwerte

$L_z \psi_m = \hbar m \psi_m$

Die Leitereigenschaften beruhen wie bei a, a^+ auf dem Kommutator!

$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm \psi_m) = \ldots = \hbar(m\pm1)(L_\pm \psi_m) \longrightarrow \hat{L}_\pm \psi_m \propto \psi_{m\pm1}$

Nach längerer Rechnung erhält man für $\hat{\vec{L}}^2$:

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

was auf die Legendre / Kugelflächenfunktionen führt

→ Legendresche Differentialgleichung

$$\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi_{lm}(\vartheta,\varphi) = -l(l+1)\psi_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

... Separationsansatz : $\psi_{lm}(\vartheta,\varphi) = \Theta_{lm}(\vartheta)\,\phi_m(\varphi)$

aus der Eindeutigkeit $\phi_m(\varphi + 2\pi) \stackrel{!}{=} \phi(\varphi)$ folgt die Ganzzahligkeit m ganzzahlig → $l = 0, 1, 2, \ldots$

Zentralpotential

Separationsansatz: $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

Y_{lm} sind die Kugelflächenfunktionen ✓

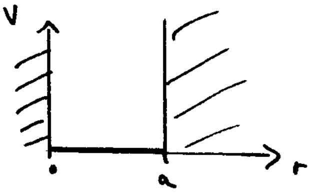
$R(r) = \frac{u(r)}{r}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right] u(r) = E\, u(r)$$; Normierbarkeit! wird im Weiteren nicht beachtet

$$\boxed{\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0 \quad ; \quad \lim_{r\to 0} u(r) \sim r^{l+1}}$$ Grenzverhalten

Kugelförmiger Kasten

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r > a \end{cases}$$



RB:

$u(0) = u(a) = 0$

$\rho := q \cdot r \; ; \; q^2 = \frac{2mE}{\hbar}$

$E > 0$

$$0 \le r \le a: \left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1\right] u(\rho) = 0$$

$$l = 0: \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + 1\right) u(\rho) = 0 \;\rightarrow\; u_0(\rho) \propto \sin\rho \overset{\rho\to 0}{\sim} \rho \; ✓$$

Ansatz: $u_l = \rho^{l+1} \chi_l(\rho)$ Prinzip für den Ansatz: bekannten Anteil als Vorfaktor

$$\rightarrow \chi_l'' + \frac{2(l+1)}{\rho}\chi_l' + \chi_l = 0 \;(1) \xrightarrow{l\to l+1} \chi_{l+1}'' + 2\frac{l+2}{\rho}\chi_{l+1}' + \chi_{l+1} = 0 \;(5)$$

Beh.: $\chi_{l+1} = \frac{1}{\rho}\chi_l' \;(2) \quad \rightarrow \quad \chi_{l+1}' = \frac{-1}{\rho^2}\chi_l' + \frac{1}{\rho}\chi_l'' \;(3)$

$$\chi_{l+1}'' = \frac{2}{\rho^3}\chi_l' - \frac{2}{\rho^2}\chi_l'' + \frac{1}{\rho}\chi_l''' \;(4)$$

Durch Einsetzen und ~~Betrachtu~~ Benutzung von $(1)'$ zeigt sich, dass die DGl. durch den Ansatz erfüllt wird

Mit $l+1 \rightarrow l$ wird die Beh. zu

$$\chi_l = \left(\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\chi_{l-1} = \left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)^l \chi_0 \quad \text{mit } \chi_0 = \frac{u_0}{\rho} \propto \frac{\sin\rho}{\rho}$$

$R_l = \frac{u_l}{\rho} = \rho^l \chi_l \propto j_l(\rho)$: $\boxed{\text{sphärische Besselfunktionen}}$

Wie aus der Mathematik bekannt ist, lautet die allg. Def. der sph. Bf.:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)^l \frac{\sin\rho}{\rho}$$

rein mathematisch sind auch die sphärischen Neumann-Funktionen als irreguläre Lsg (sin ρ durch cos ρ ersetzen)

Ebenso die Kombination beider Lsg: "sphärische Hankel-Funktionen": $h_l(\rho) = j_l(\rho) \pm i n_l(\rho)$

weitere Eigenschaften:

$$\rho \to 0: \quad j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} + \dots \quad , (2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)\dots 5 \cdot 3 \cdot 1$$

$$n_l = \frac{-(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} + \dots$$

$$\rho \to \infty: \quad j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \qquad n_l(\rho) = -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

Eigenwerte über die RB:

$u_l(qa) \stackrel{!}{=} 0 \quad \rightarrow \quad j_l(\rho_{N,l}) \stackrel{!}{=} 0$ Nullstellen der Besselfunktionen:

$\rho_{N,l}$: Nullstellen von $j_l(\rho)$ mit N numeriert die Folge der Nullstellen

N: "radiale Quantenzahlen"

Das l bezeichnet die Orbitale!

N \ l	S 0	P 1	D 2	F-orbital 3
1	3,14	4,49	...	...
2	6,28	...		
3	...	...	--	

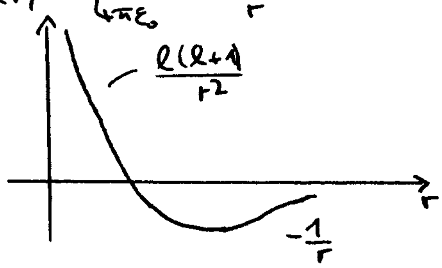
Die Elektronen lassen sich entsprechend durchnummerieren und mit Energieniveaus versehen: Nl:

1S, 1P, 1D, 2S, ... (dies fasst mehrere $\bar{e}$ zusammen: Es gibt noch die Entartung m)

Wasserstoffatom

Proton wird fest in die Mitte gesetzt, Potential ist das Coulombpot. einer Punktladung

$$U(r) = \frac{-1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{(Z e_0)\cdot e_0}{r}$$



$$\rho = \varkappa r \quad , \varkappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \quad , E < 0$$

$$\rho_0 = \frac{e_0^2 Z \varkappa}{4\pi\varepsilon_0 |E|}$$

SG: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r)\right] u(r) = E\, u(r)$

$$\rightarrow \left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right] u(\rho) = 0$$

... analoges Vorgehen wie beim rad. Potentialtopf

RB: $\rho \to 0$: $u \sim \rho^{\ell+1}$

$\rho \to \infty$: $\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}u - u = 0 \rightarrow u \sim e^{-\rho}$

Ansatz: $u(\rho) = \rho^{\ell+1} \cdot e^{-\rho}\, w(\rho)$ (Prinzip: bekannte Anteile voraussetzen, s.o.)

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial^2 w}{\partial\rho^2} + 2(\ell+1-\rho)\frac{\partial w}{\partial\rho} + (\rho_0 - 2(\ell+1))\,w = 0}$$

Diese DGL. ist zu lösen, um das H-Atom zu beschreiben

Lsg. mit Potenzreihenansatz $w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$

$$\rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left\{k(k-1)\rho^{k-1} + 2(\ell+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + [\rho_0 - 2(\ell+1)]\rho^k\right\} = 0$$

$\rightarrow$ Koeff. für ρ^k: $a_{k+1}[(k+1)k + 2(\ell+1)(k+1)] + a_k\{-2k + [\rho_0 - 2(\ell+1)]\} = 0$

dies ist eine Rekursionsformel a_{k+1} von a_k

Löst den Radialanteil der Wellenfunktion

Aber: Problem mit dem asymptotischen Verhalten: $\frac{a_{k+1}}{a_k} \xrightarrow{k\to\infty} \frac{2}{k}$

das ist dasselbe Verhalten wie für ein $e^{2\rho} \rightarrow$ Divergenz, keine Normierbarkeit

Einzige Lösung: Rekursionsformel muss abbrechen: $\sum_{k=0}^{\infty} \rightarrow \sum_{k=0}^{k_{max}=N}$

N ist dabei die radiale Quantenzahl

Berechnung der Abbruchbedingung:

für $k = N$: $2(N+\ell+1) - \rho_0 \overset{!}{=} 0 \rightarrow \rho_0 = 2\underbrace{(N+\ell+1)}_{n:\ \text{Hauptquantenzahl}}$ [1]

$\rightarrow w(\rho) = \sum_{k=0}^{n-\ell-1} a_k \rho^k$: Polynom vom Grad N ($\rightarrow$ N Nullstellen)

$$\rho_0 = \frac{e^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 |E|}\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \rightarrow \boxed{E_n = -\frac{m e^4 Z^2}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}}$$

kurz mit einer Rydbergkonstanten $R_H^* = \frac{m e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} = 13{,}6\ \text{eV}$

$$\rightarrow E_n = R_H^* \cdot \frac{1}{n^2}$$

---

[1] Daraus folgt $\ell \le n-1$; magnet. Quantenzahl $|m| \le \ell$; ℓ heißt auch Nebenquantenzahl

Die Wellenfunktion hat alle diese drei Quantenzahlen als Index: $\psi = \psi_{n\ell m}$

Hinweis zu den Entartungen: ergibt sich aus den drei Quantenzahlen

$E_1: \psi_{100}$; $E_2: \psi_{2,00}$; $\psi_{2,1,-1}$; $\psi_{2,1,0}$, $\psi_{2,1,1}$; E_3 : ...

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

Wenn man die versch. Polynome für $w(\rho)$ aufschreibt, stellt man fest, dass es sich um die zugeordneten Laguerre-Polynome handelt

$$w(\rho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$ [1]

allg. aus der Mathematik: $L_p^q(x) = \sum_{m=0}^{p} (-1)^m \frac{(p+q)!\, x^m}{m!(p-m)!(q+m)!}$

Die Lösung lautet dann insgesamt für das Wasserstoffatom

$$\boxed{\psi_{nlm} \propto R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad ; \quad R_{nl}(r) = \frac{u(r)}{r} \overset{e^{-\varkappa r}}{\propto} (2\varkappa r)^l \cdot e^{-\varkappa r}\, L_{n-l-1}^{2l+1}(2\varkappa r)}$$

Vorfaktor $\cdot\, (2\varkappa)^{3/2}$ · Numerischer Faktor

Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

Potential analog zu einer Dimension mit $x \to \vec{x}$

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

Separationsansatz: $\psi(\vec{x}) = \psi_1(x_1)\, \psi_2(x_2)\, \psi_3(x_3)$

Der Hamilton-Operator zerfällt dann auch in 3 Komponenten

$$\hat{H} = \sum \hat{H}_i \qquad \text{mit } \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2$$

In jeder Dimension wird dann der eindim. Oszillator gelöst: $E_i = \hbar\omega(n_i + \frac{1}{2})$

$$\to E = \sum E_i = \hbar\omega\,(n_1+n_2+n_3+\tfrac{3}{2}) = \hbar\omega\,(N+\tfrac{3}{2})$$

Unterschied zu einer Dimension: Es gibt eine Entartung wg. $N = n_1+n_2+n_3$

Entartungsgrad: $\underbrace{n_1+n_2}_{:=n}+n_3 \overset{!}{=} N$: $\sum_{n=0}^{\infty}(n+1) = \frac{(N+1)(N+2)}{2} = d_n$

Das Problem kann aber auch als Beispiel für ein Zentralpotential angesehen werden

[1] Dies entspricht der amerikanischen Literatur. Die russische Tradition (auch Schwabl) definiert $L_p^q\big|_{\text{r}} = \frac{(-1)^q\, L_{p+q}^q\big|_{\text{am}}}{(p+q)!}$

$\rightarrow \psi(r,\varphi,\vartheta) = R_n(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad ; \quad R_n(r) = \frac{u_N(r)}{r}$

$$\rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{m\omega^2}{2}r^2\right]u_N(r) = E_n\, u_N(r)$$

$$(n_x, n_y, n_z) \longrightarrow (N, l, m)$$

Entartung: $d_N = (2N+1)\,d_{N-2}$ $\rightarrow$ N fest: $\begin{cases} l = 0,2,\dots,N-2,N, & N \text{ gerade} \\ l = 1,3,\dots,N-2,N, & N \text{ ungerade}\end{cases}$

$$d_n = \begin{cases} \sum\limits_{l=0,2,\dots}^{N}(2l+1) & N \text{ gerade} \\ \sum\limits_{l=1,3,\dots}^{N}(2l+1) & N \text{ ungerade}\end{cases}$$

Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

klassisch: $\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} - \vec{\nabla}\phi \qquad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$

Aus der Lorentzkraft erhält man $m\ddot{\vec{x}} = \vec{F}_L = -e\vec{\nabla}\phi - e\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} + e\dot{\vec{x}}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A})$

in Komponenten: $m\ddot{x}_i = -e\frac{\partial\phi}{\partial x_i} - e\frac{\partial A_i}{\partial t} + e\dot{x}_j\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)$ klassische Bewegungsgleichung

kann aus Lagrange hergeleitet werden:

$L(\vec{x},\dot{\vec{x}}) = T - V = \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 + e(\dot{\vec{x}}\cdot\vec{A} - \phi)$ über Euler-Lagrange-Gl.:

$$\frac{d}{dt}\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}}_{\equiv p_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0$$

Hamilton-Funktion: $H(\vec{x},\vec{p}) = \vec{p}\cdot\dot{\vec{x}} - L = \frac{1}{m}\vec{p}\cdot(\vec{p}-e\vec{A}) + \frac{1}{2}m\,\frac{1}{m^2}(\vec{p}-e\vec{A})^2 - \frac{e}{m}(\vec{p}-e\vec{A})\cdot\vec{A} + e\phi$

$$\boxed{H = \frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2 + e\phi}$$ Quantisieren!

quantenm.: $\hat{H}\,\psi(\vec{x},t) = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})^2 + e\phi\right]\psi(\vec{x},t)$

mit der Coulombeichung $\nabla\cdot\vec{A} = 0$ gilt durch Ausschreiben

$$\boxed{\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + e\phi + i\frac{\hbar e}{m}\vec{A}\cdot\nabla + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\right]\psi}$$

$H_{paramagn.}$ $\quad$ $H_{diamag.}$

Paramagnetischer / Diamagnetischer Effekt, z.B. konst. Magnetfeld (in $\vec{e}_z$)

$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x}\times\vec{B}$

$\hat{H}_p = \ldots = -\frac{e}{2m}\,(\vec{x}\times\vec{\partial})\cdot\vec{B} = -\frac{e}{2m}\,\hat{L}\,\vec{B} = -\vec{m}\,\vec{B}$

$\hat{m}_z = -\frac{|e|}{2m}\hat{L}_z \quad ; \quad \hat{L}_z \psi_{em} = \hbar m\, \psi_{em}$

Energie wird minimal, wenn $m_z = \langle \psi_{em} | \hat{m}_z | \psi_{em} \rangle$ maximal

$\rightarrow m_z = \frac{|e|\hbar}{2m} l$, d.h. in $+\vec{e}_z$-Richtung, also in Richtung von $\vec{B}$

magnetisches Moment richtet sich in $\vec{B}$-Richtung aus und verstärkt das äußere Feld $\Rightarrow$ paramagnetischer Term

$\hat{H}_d = \ldots = \frac{e^2 B_0^2}{8m}(x^2+y^2)$, " $m_z \propto -B_0$ "

$\Rightarrow$ diamagnetischer Term

Explizit: diamagnetischer Term für ein gel. Teilchen im konstanten B-Feld

Lorentz-Kraft: $\vec{F}_L = e\,\dot{\vec{x}} \times B$, <u>klassisch</u>:

Bewegungsgleichung $m\ddot{\vec{x}} = F_L$ wird gelöst durch

$$x(t) = x_0 + \varrho_0 \cos(\omega_c t - \varphi_0) \qquad \omega_c = \frac{|e|B_0}{m}$$
$$y(t) = y_0 + \varrho_0 \sin(\omega_c t - \varphi_0) \qquad \text{Kreisfrequenz}$$
$$z(t) = v_{0,z}\cdot t + z_0$$

$x_0, y_0, z_0, \varrho_0, \varphi_0, v_{0,z}$ wird durch Anfangsbed. beschrieben

$\rightarrow$ spiralförmige Bewegung

Diese Problem ist quantenmechanisch als das <u>Landau-Problem</u> bekannt

<u>Landau-Problem</u>

$\vec{B} = B_0 \cdot \vec{e}_z$, $\vec{A}(\vec{x}) = -\frac{1}{2}\vec{x}\times\vec{B} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}B_0 y \\ -\frac{1}{2}B_0 x \\ 0 \end{pmatrix}$ über geeignete Eichung!

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - e\vec{A}\right)^2 = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left[(\hat{p}_x + \frac{e}{2}B_0 y)^2 + (\hat{p}_y - \frac{e}{2}B_0 x)^2\right]$$
$$= \hat{H}_\parallel + \hat{H}_\perp$$

---

definiere: $z = x + iy \rightarrow \frac{\partial}{\partial z} f(x,y) = \frac{\partial}{\partial x} f \frac{\partial x}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y} f \frac{\partial y}{\partial z}$

$\rightarrow x = \frac{1}{2}(z + z^*) \rightarrow \frac{\partial x}{\partial z} = \frac{1}{2}$

$\rightarrow y = \frac{1}{2i}(z - z^*) \rightarrow \frac{\partial y}{\partial z} = \frac{1}{2i}$

Damit wird $\hat{H}_\perp = -\frac{2\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial z^*}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{m\omega_c^2}{8} z^* z + \frac{\omega_c}{2}\hat{L}_z$

$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hbar\left(z\frac{\partial}{\partial z} - z^*\frac{\partial}{\partial z^*}\right)$; $\omega_c = \frac{-eB_0}{m}$

$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\ell_B^2}}\left(2\ell_B^2\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{1}{2}z\right)$ $\qquad$ $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\ell_B^2}}\left(-2\ell_B^2\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2}z^*\right)$

$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\ell_B^2}}\left(2\ell_B^2\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2}z^*\right)$ $\qquad$ $\hat{b}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\ell_B^2}}\left(-2\ell_B^2\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{1}{2}z\right)$

Vorfaktoren sind so gewählt, dass $[\hat{a},\hat{a}^+] = 1$, $[\hat{b},\hat{b}^+] = 1$

$\ell_B^2 \equiv \frac{\hbar}{|e|B_0}$: magnetische Länge

$\rightarrow \dots$ $\hat{H}_\perp = \hbar\omega_c\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ $\rightsquigarrow$ harmonischer Oszillator

$\hat{L}_z = \hbar\left(\hat{b}^+\hat{b} - \hat{a}^+\hat{a}\right)$ $\qquad$ d.h. $\hat{H}_\perp \psi_{n,k} = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)\psi_{n,k}$

n gibt die Landau-Niveaus an

$\hat{L}_z \psi_{n,k} = \hbar(k-n)\psi_{n,k}$, $k = 0, 1, \dots$ *

$E = E_\parallel + E_\perp = \frac{p_3^2}{2m} + \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$E_\perp \stackrel{!}{=} -m_z B_0 \rightarrow m_z = -\frac{|e|\hbar}{m}\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$\hookrightarrow$ induziertes magnetisches Moment in $\vec{e}_z$-Richtung, d.h. Diamagnetismus

Aus den Energieniveaus wird nun die Wellenfunktion bestimmt.

Grundzustand: $\hat{a}\psi_{00} = 0$; $\hat{b}\psi_{00} = 0$

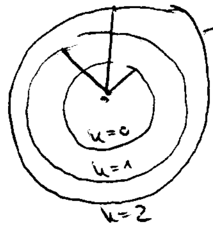
$\rightarrow \dots$ $\psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell_B^2}} e^{-z^* z/4\ell_B^2}$

angeregte Zustände: $\psi_{n,k} = \frac{(\hat{a}^+)^n (\hat{b}^+)^k}{\sqrt{n!}\sqrt{k!}}\psi_{00} = \underbrace{N_k}_{\text{Normierung}} z^k e^{-z^* z/4\ell_B^2}$

Ergebnis: Wie bewegt sich das Teilchen tatsächlich?

Betrachte Erwartungswert von $z^* z = x^2 + y^2$: Radius

$\langle \psi_{0,k} | z z^* | \psi_{0,k} \rangle = 2(k+1)\,\ell_B^2$



Radius: $r_k = \sqrt{2(k+1)}\; l_B$

Betrachte mag. Fluss

$$\phi_{\circledcirc} = B_0(\pi r_{k+1}^2 - \pi r_k^2)$$

$$= B_0 \pi (2(k+2) - 2(k+1))\, l_B^2$$

mit $l_B^2 = \frac{\hbar}{|e| B_0}$: $\boxed{\phi_{\circledcirc} = \frac{2\pi\hbar}{|e|} = \phi_0 \quad \text{elementares Flussquant}}$

Auch wenn das Teilchen "ruhig" im Magnetfeld liegt, rotiert es um einen Kreis: der kleinste Zustand ist $\neq$ Null!

Allgemein ist der Fluss ein Vielfaches eines Flussquants $\phi = N\phi_0$
$k = 0, 1, \dots N-1$ jeder Zustand ist N-fach entartet

Unschärferelationen

Die allgemeine Unschärfe entspricht im Prinzip der Schwarzschen Ungleichung

definiere: $\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$, $\delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$; $\hat{A}, \hat{B}$ hermitesch

Schwarzsche Ungleichung: $\langle(\delta\hat{A})^2\rangle \langle(\delta\hat{B})^2\rangle \geq |\langle\delta\hat{A}\,\delta\hat{B}\rangle|^2$

Beweis: $\langle(\delta\hat{A})^2\rangle = \langle\psi|(\delta\hat{A})^2|\psi\rangle = \langle\underbrace{\delta\hat{A}\psi}_{:=\psi_1}|\delta\hat{A}\psi\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle$

$\delta\hat{A}|\psi\rangle = |\delta\hat{A}\psi\rangle$

$\langle(\delta\hat{B})^2\rangle = \quad \dots \quad = \langle\psi_2|\psi_2\rangle$

$\langle\delta\hat{A}\,\delta\hat{B}\rangle = \langle\psi|\delta\hat{A}\,\delta\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$

damit wird die obige Gleichung zu $\|\psi_1\|^2 \|\psi_2\|^2 \geq |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2$

$$\delta\hat{A}\,\delta\hat{B} = \frac{1}{2}\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\} + \frac{1}{2}[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] \qquad \text{(mit Antikommutator)}$$

$[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]^\dagger = -[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]$ antihermitesch

$\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}^\dagger = +\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}$ hermitesch

$$|\langle\delta\hat{A}\,\delta\hat{B}\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]\rangle|^2$$

$$\geq \frac{1}{4}|\langle[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]\rangle|^2$$

$$\langle (\delta\hat{A})^2 (\delta\hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] \rangle \right|^2$$

$$\Delta A \equiv \sqrt{\langle (\delta\hat{A})^2 \rangle} \quad , \quad \Delta B \equiv \sqrt{\langle (\delta\hat{B})^2 \rangle}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|}$$

<u>Wahrscheinlichkeitsdeutung der Entwicklungskoeffizienten</u>

- Observable $\hat{=}$ selbstadjungierter Operator $\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{= c_n} = \sum_n c_n |n\rangle$$

Erwartungswert:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{m,n} \langle \psi | m \rangle \underbrace{\langle m | \hat{A} | n \rangle}_{\substack{= a_n \langle m|n\rangle \\ = a_n \delta_{mn}}} \langle n | \psi \rangle$$

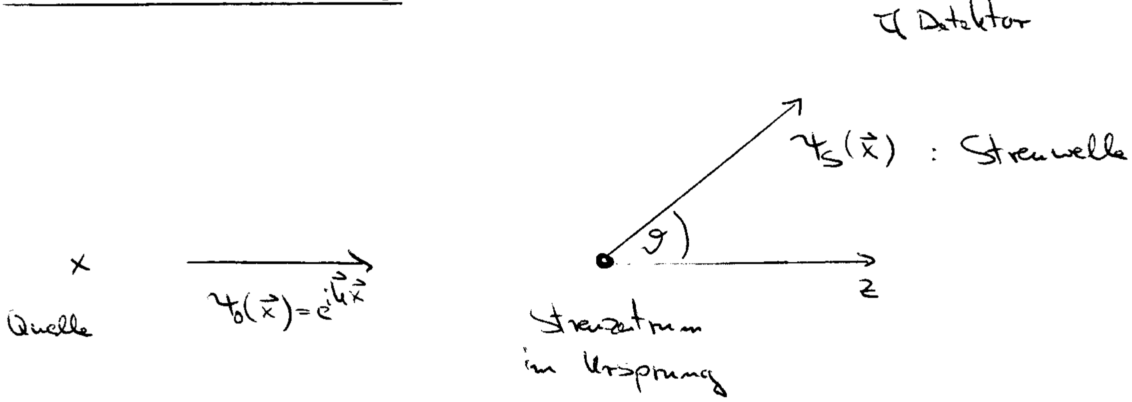
$$= \sum_n \langle \psi | n \rangle a_n \langle n | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle a \langle \psi$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

$|c_n|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass bei der Messung der Observable $\hat{A}$ den Eigenwert a_n zu finden

Die Wahrscheinlichkeiten addieren sich zu 1

Stationäre Streutheorie



Beschreibung durch Schrödingergleichung

Einfallende Welle : $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi_0 = E\psi_0$; $E = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} > 0$ kein Potential

Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_0 = |\psi_0|^2 = 1$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}_0 = \frac{1}{2m}\left[\psi_0^*(-i\hbar\nabla)\psi_0 - \psi_0(-i\hbar\nabla)\psi_0^*\right] = \frac{\hbar\vec{k}}{2m}$

Gesamtwelle des Systems: $\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \psi_S(\vec{x})$

Potential muss hinzugenommen werden : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$

Die Lösung wird ermittelt mit Hilfe der Greenschen Funktion

$$(\nabla^2 + \vec{k}^2)\, G^{(+)}(\vec{x}) = \delta(\vec{x})$$

Die Differentialgleichung wird damit in integraler Form schreibbar:

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, G^+(\vec{x}-\vec{x}')\, V(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}') \qquad (1)$$

Diese Gleichung kann iterativ angegangen werden

Beweis für (1):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E\right)\psi(\vec{x}) = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E\right)\psi_0(\vec{x})}_{=0} - \int d^3x' \underbrace{(\nabla^2 + \vec{k}^2)\, G^+(x-x')}_{=\delta(x-x')} V(x')\psi(x')$$

$$= 0 - V(\vec{x})\psi(\vec{x}) \Rightarrow \hat{H}\psi = E\psi \quad \checkmark$$

Die Gleichung für die Greensche Funktion lässt sich lösen (→ Edynamik)

$$G^+(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}$$ (vom Ursprung auslaufende Kugelwelle)

In die Wahrscheinlichkeitsstromdichte eingesetzt (als ψ), erhält man

$\vec{j}_S = j_S \vec{e}_r$, $j_{S,r} = \frac{\hbar k}{m r^2}$

$$k|\vec{x}-\vec{x}'| = k\sqrt{\vec{x}^2 - 2\vec{x}\vec{x}' + \vec{x}'^2}$$

Detektor weit weg vom Streuer $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'| \Rightarrow \ldots = kr - k\frac{\vec{x}\vec{x}'}{r} + \ldots = kr - \vec{k}'\cdot\vec{x}'$

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x})\psi(\vec{x}')$$

$$\overset{(\text{Näherung})}{=} e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' \, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}')\psi(\vec{x}') = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta,\varphi)$$

$f(\vartheta)$ ist die Streuamplitude

$$f(\vartheta) := -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(x)\,\psi(\vec{x}')$$

$\rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsstromdichte der auslaufenden Kugelwelle:

$$j_{s,r} = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi_s^* \frac{\partial}{\partial r}\psi_s\right) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r}\right)|f(\vartheta)|^2$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\hbar k}{m}|f(\vartheta)|^2$$

$dN = \vec{j}\,d\vec{S}\,dt$: Anzahl der Teilchen, die pro Zeitintervall dt durch das Flächenelement $d\vec{S}$ hindurchströmt

Gezielte Streutheorie in Dirac-Schreibweise

Bornsche Näherung $\qquad$ komplizierten Potential

Dirac-Notation: $\langle\vec{x}|\psi\rangle = \langle\vec{x}|\psi_0\rangle + \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \int d^3x''$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{2m}{\hbar^2} G\,\hat{V}|\psi\rangle$$

kann aufgelöst werden zu

$$|\psi\rangle = \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2}G\hat{V}\right)^{-1}|\psi_0\rangle \quad \Big| \text{ geometrische Reihe}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{2m}{\hbar^2}G\hat{V}\right)^n|\psi_0\rangle$$

Die Bornsche Näherung besteht darin, die Reihe nach dem zweiten Glied abzubrechen

Explizit: $\psi(\vec{x}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \, \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|x-x'|} V(\vec{x})\cdot e^{ikz'}$

asymptotisch: $|\vec{x}-\vec{x}'| = \sqrt{r^2 - 2\vec{x}\vec{x}' + \vec{x}'^2} \xrightarrow{r\to\infty} r - \vec{x}'\cdot\vec{e}_r$