12.04.05

## Mechanik ⇔ Quantenmechanik

Massenpunkt: Ort, Zeit ("Materie")

Licht (Welle): Frequenz, Wellenlänge
unendliche Ausdehnung

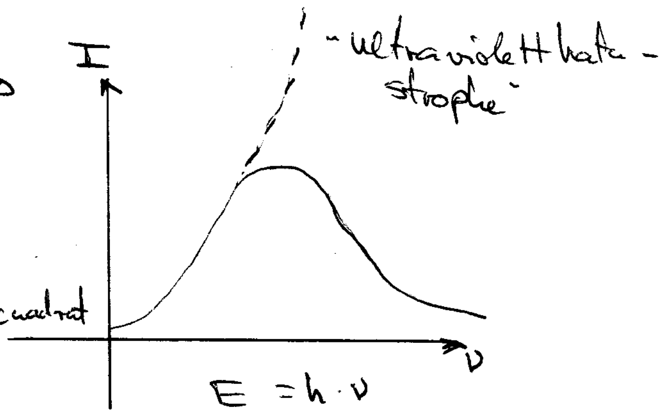
Paradoxien: Spektrallinien ? (Balmer)

Planck: Wärmestrahlung

klassische E-Dyn:

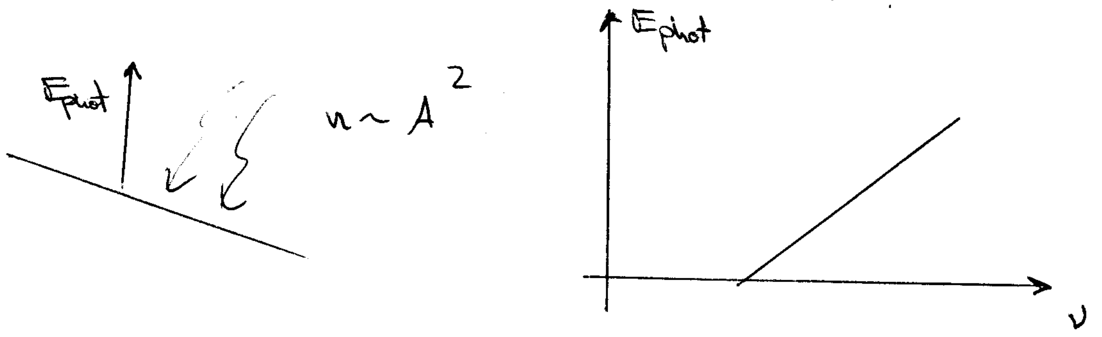
$E \sim A^2$

Energie wie Amplitudenquadrat

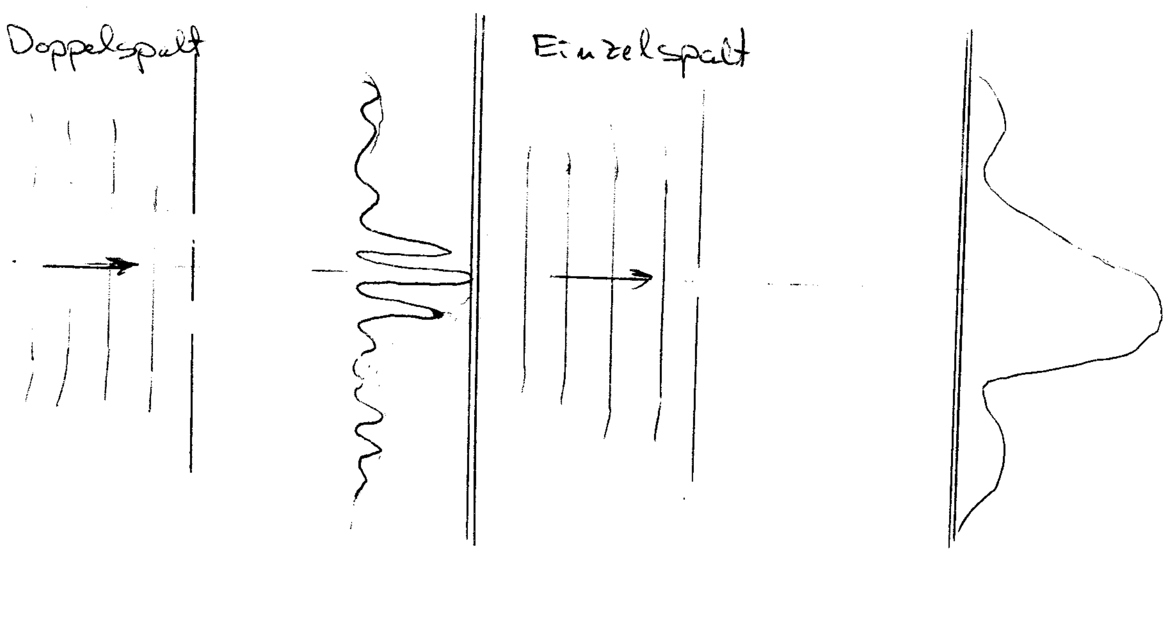



$\underline{E = h \cdot \nu}$

## Photoeffekt

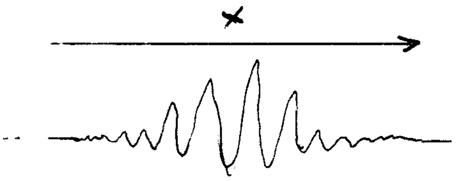



## Doppelspaltexperiment



# Wellenpakete

unendlicher Wellenzug




← $\Psi(x,t)$ begrenztes Wellenpaket

mögliche Theorie als Zwischending von Welle und Teilchen

$E = h\nu \qquad E = \frac{p^2}{2m} \qquad n \sim A^2 \sim |\Psi|^2$

Ort des Wellenpakets?

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\Psi(x,t)|^2\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx}$$

mittlerer Ort ist die x-Koordinate gewichtet über die Amplitude

$n=1$: $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2\,dx = 1 \qquad \rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ Dichte

Welchen Wert hat $f(x,t)$ für das Wellenpaket

$$\langle f(x,t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\, f(x,t)\, \Psi(x,t)\,dx$$

Streuung um den Mittelwert x:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle$$

$\Rightarrow$ Ortsunschärfe $\Delta x := \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

Geschwindigkeit des Wellenpakets:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx}\,dk$$

mit $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dx$

für Materie ist die Ausbreitung abhängig von der Wellenzahl

Elementarwelle $e^{ikx - i\omega t}$ hat die Phasengeschwindigkeit

$c_{ph} = \frac{\omega}{k}$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) \cdot e^{ikx - i\omega(k)t}\, dk$$

Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets

$\left.\frac{d\omega(k)}{dk}\right|_{k=\langle k\rangle}$ mittlere Wellenzahl $\langle k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 k\, dk$

Gauss:

$\phi(x) = e^{-Ax^2 - px + c}$ $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$

$\rightarrow$ quadr. Ergänzung

Gruppengeschwindigkeit im Wellenpaket 14.04.05

Bewegungsgleichung soll im Grenzfall Teilchen auch für Wellenpakete gelten

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx - i\omega(k)t}\, dk$$

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

Phasengeschwindigkeit: $c_{ph} = \frac{\omega}{k} = \nu \cdot \lambda$

$\omega = 2\pi\nu$

chirp: Veränderung der Form des Wellepakets beim Laser

$$c_{gr} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=\langle k\rangle}$$

Herleitung:

$$\omega(k) = \omega(\langle k\rangle) + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{\langle k\rangle} (k - \langle k\rangle) + \dots$$

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx - i\omega t - i\omega'(k - \langle k\rangle)t}\, dk$$

$$\Psi(x,t) = \frac{e^{i\omega t + i\omega' t\langle k\rangle}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ik(x-\omega' t)}\, dk$$

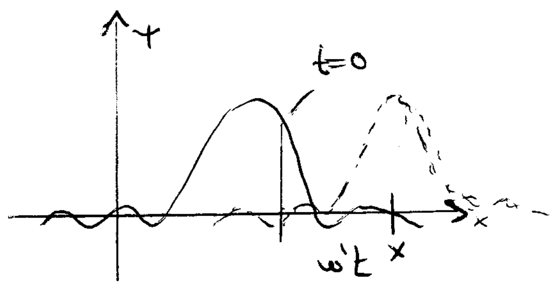
$$\Psi(x,t) = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ik(x-\omega' t)}\, dk$$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx}\, dk$$

$$\Psi(x,t) = e^{i\alpha}\, \Psi(x - \omega' t, 0)$$

---

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\Psi(x - \omega' t, 0)|^2$$




$\omega'$ = Gruppengeschwindigkeit

Zusammenfassung:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$\langle k \rangle = \int \phi^*(k)\, k\, \phi(k)\, dk$$

$$\langle v \rangle = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{\langle k \rangle}$$

nicht mehr durch $\int |\Psi|^2 dx$ teilen wegen Normierung auf 1

## Wellenpaket für ein freies Teilchen

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 \qquad \text{(mechanisch)}$$

$\rightarrow$ Welle ?

Für Welle wird angenommen

$$\boxed{E = \hbar \omega} \qquad ; \ \hbar := \frac{h}{2\pi} \qquad \hbar\omega = h \cdot \nu$$

$$\hbar \omega = \frac{1}{2} \cdot m \left( \frac{d\omega}{dk} \right)^2 \quad \ldots$$

---

$$\frac{d\omega}{dk} = v$$

$$\frac{d}{dk}\left( \frac{p^2}{2m\hbar} \right) = v = \frac{p}{m} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{1}{2\hbar} \frac{d}{dk} p^2 = p$$

Bedeutung von $k$ aus der mechanischen Perspektive?

$\rightsquigarrow k = \frac{p}{\hbar}$ bzw

$$\boxed{p = \hbar k}$$

Freies Teilchen (d.h. Teilchen bewegt sich nicht im Potential)

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \rightsquigarrow \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Leftrightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\, dk$$

$\phi(k)$ muss gegeben sein: $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dx$

Frequenz des Wellenpakets ?

$$\langle\omega\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \underbrace{\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(x,t)\, dx}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \int_{-\infty}^{+\infty} i\frac{\partial}{\partial t}\phi(k)\, e^{ikx-i\omega t}\, dk\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(q)\, e^{-iqx+i\omega(q)t}\, dq \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(k)\,\phi(k)\, e^{ikx}\, dk\, dx$$

durch Einsetzen v. $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)\, e^{ikx-i\omega t}\, dk$

für $\psi^*$ wird $dq$ als Differential verwendet werden 1)

---

Einschub Fourier-Transformation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)}\, dk = 2\pi\,\delta(x-x_0)$$

---

$$\langle\omega\rangle = \int \psi^* \left(i\frac{\partial}{\partial t}\right) \psi\, dx$$

$$\langle f(x)\rangle = \int \psi^*\, f(x)\, \psi\, dx$$

$$\langle E\rangle = \langle\hbar\omega\rangle = \int \psi^* \underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}\, \psi\, dx$$

$$\langle x\rangle = \int \psi^* \underbrace{x}_{\text{Operatoren}}\, \psi\, dx$$

$$2\pi\,\delta(q-k)$$

$$\langle\omega\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \phi^*(k)\,\omega(k)\,\phi(k)\, \cancel{e^{i\omega(k)t - i\omega(k)t}}$$

---

1)
$$\int \psi^* \left(i\frac{\partial}{\partial t}\right) \psi\, dx$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, dq\, dk\, \phi^*(q)\, e^{-iqx+i\omega(q)t} \overset{\omega(k)}{\cancel{\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)}}\, \phi(k)\, e^{ikx-i\omega(k)t}$$

$$= \int \phi^*(k)\,\omega(k)\,\phi(k)\, dk \quad \text{- -}$$

## Impulsoperator

$$p = \hbar k$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(k)\, \hbar k\, \phi(k)\, dk$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\ [?]\ \psi(x,t)\, dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, dx\, dy\, \psi^*(y,0)\, e^{iky}\, \hbar k\, \psi(x,0)\, e^{-ikx}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, dx\, dy\, \psi^*(y,0)\, e^{iky}\, \psi(x,0) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{-ikx} \right)$$

bez. x part. integrieren (ausintegrierter Anteil verschw.)

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, dx\, dy\, \psi^*(y,0)\, e^{iky} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,0) \right) \underline{e^{ik(y-x)}}$$

$\hookrightarrow 2\pi\,\delta(x-y)$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x,0) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x,0)$$

Impulsoperator:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Energieoperator: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Ortsoperator: $x$

Allgemein:

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\, O\, \psi(x,t)\, dx$$

$\Rightarrow$ Schrödinger-Gleichung

# Schrödinger-Gleichung

Teilchen im Potential $V(x)$

gesucht: Wellenpaket

Teilchen: $\frac{p^2}{2m} + V(x) = E$ Hamilton

Forderung: $\left\langle \frac{p^2_{\text{Operator}}}{2m} + V(x)_{op} - E_{op} \right\rangle = 0$

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \left\{ \frac{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2}{2m} + V(x) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi(x,t)\, dx}_{} = 0$$

$$= 0$$

Schrödinger Gleichung:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\, \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t)}$$

Normierung: $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$

Aussicht: Potentialtopf $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{, wenn } |x| < \frac{a}{2} \\ \infty & \text{, sonst} \end{cases}$

Gibt es Lösungen mit $\psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$ ?

$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = \hbar\omega\psi(x)$

(zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung)

## Teilchen der Masse m im Potential V(x)

Wellenpaket : $\psi(x,t)$

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = \hbar\omega\psi = E\psi$$

mit $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\underbrace{\left(\frac{p^2}{2m} + V\right)}_{\text{Hamilton-Operator}}\psi = E\psi$$

$$H\psi = E\psi$$

„Quantisierung":

Hamilton-funktion aufschreiben und p ersetzen durch $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

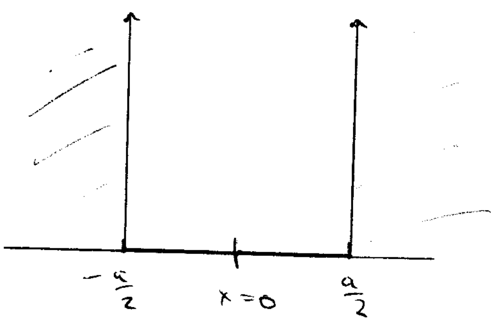
$\Rightarrow$ Ersetzung von Zahl durch Operator

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x \psi\, dx = \int \phi^* \underbrace{x_{op}}_{\hookrightarrow i\frac{\partial}{\partial k}} \phi\, dk$$

$$\langle O\rangle = \int \psi^* O \psi\, dx = \int \phi^* \tilde{O} \phi\, dk$$

Beispiel : Potentialtopf

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < \frac{a}{2} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$



für $|x| < \frac{a}{2}$ : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' = E\Psi$

für $|x| > \frac{a}{2}$ $\infty \Psi =$ endl. $\leadsto \Psi \equiv 0$

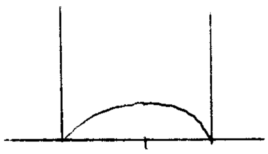
Ableitung einer Unstetigkeit ist die $\delta$-Funktion

$$\int_{-\infty}^{x} \delta(x')\,dx' = \Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x<0 \\ 1 & \text{für } x>0 \end{cases}$$

Anschluss and die Potentialwände?

Ableitung muss stetig anschließen, zweite Ableitung hat $\delta$-Funktion an der betroffenen Stelle

Grundzustand (kleinste Energie E)



$$\Psi_0 = A \cos\frac{\pi x}{a}$$

Normierung: $\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} |\Psi_0|^2\,dx \overset{!}{=} 1 = |A|^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \cos^2\frac{\pi x}{a}\,dx$

$$= \frac{|A|^2}{2} \leadsto A = \sqrt{2}$$

Interpretation?

experimenteller Befund. Teilchen können mit sich selbst interferieren

Problem der Teilbarkeit? Welle müsste teilbar sein, Elektronen sind es nicht. Experimentell ist das Elektron punktförmig

Interpretation: $\rho(x) = 2\cos^2\frac{\pi x}{a}$ ist Wahrscheinlichkeitsamplitude

„Teilchen sind Interpretation" ?

~~#~~ Analog Frequenz $\rightarrow$ Tonempfindung

$\langle O \rangle$ heißt daher der Erwartungswert des Operators $O$

## Hilbertraum

Zustände: z.B. Wellenfunktion $\psi(x)$

Operatoren: z.B. $x$, $p = -i\frac{\partial}{\partial x}$, $H, \dots$, allgemein $A$

$$\langle O \rangle = \int \psi^* O \psi \, dx$$ = Erwartungswert des Operators im Zustand $\psi$

$$\langle O \rangle \overset{!!}{=} \text{reell}$$

## Dirac-Notation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) A \, \psi(x) \, dx = \underset{\text{bra - ket}}{\langle \phi | A | \psi \rangle}$$

$$\langle \phi | A | \psi \rangle^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi A^* \psi^* dx = \int (A^* \psi^*) \phi \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A^{*T} \phi \, dx$$

$$= \langle \psi | A^{*T} | \phi \rangle$$

$A^{*T} =: A^\dagger$ hermitisch adjungierte Operator

$$\langle \psi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle \overset{!}{=} \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$\Rightarrow A^\dagger = A$ hermitisch

Messwerte sollen reell sein, daher muss der entsprechende Operator hermitisch sein

$$\langle\phi|p|\psi\rangle = \int \phi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dx$$

$$\langle\phi|p|\psi\rangle^* = \int \phi \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi^* \, dx$$

$$= \int \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi^*\right) \phi \, dx$$

| part. Int.; kein aus-integrierter Anteil, da unendliches Integral

$$= \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \phi \, dx$$

$$\rightsquigarrow p^+ = p$$

$\langle\phi|x|\psi\rangle$ ist trivial

Hamiltonoperator ist ebf. hermitisch, sein Erwartungswert ist die Energie

$$\langle\phi|A|\psi\rangle \xrightarrow{A \to I} \langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^* \psi \, dx$$

Normierung: $\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int \psi^* \psi \, dx$

$$p|\psi\rangle = |-i\hbar \tfrac{\partial}{\partial x} \psi\rangle$$

Bra alleine drückt nur das komplex konjugierte aus

Schrödinger Gleichung: $H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$

$$\langle\psi|H = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|$$

Zustände seien Vektoren in einem (i. A. $\infty$-dim.) Funktionenraum. Er wird zum Hilbertraum, in dem das folgende Skalarprodukt definiert wird:

Skalarprodukt $\phi$ und $\psi$ $:= \langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^* \psi \, dx$

Bsp.: $f(x) = \sum a_n x^n$ Taylorentwicklung

$f(x)$ ist eine Linearkombination der Basisfunktionen $x^n, x \in (-\infty, \infty)$

Nachteile:

i) die Funktionen $x^n$ sind auf $(-\infty, +\infty)$ nicht normierbar

ii) " " $x^n$ sind nicht orthogonal

$\int x^n x^m dx \neq 0$ wenn $n \neq m$

---

$x \in [0,1]$ $f(x) = \sum_k (a_k \sin 2\pi kx + b_k \cos 2\pi kx)$

Fourierreihe

Die Basisfunktionen sind normierbar und orthogonal

Operatoren vertauschen i. A. nicht!

$x p f(x) \neq p x f(x)$

$-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} f(x) \neq -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x f(x)) = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} f - i\hbar f$

$(xp - px) f(x) := xp - px = i\hbar$

$\underbrace{[x,p]}_{\text{Kommutator}} := xp - px = i\hbar$

$[x,p] = i\hbar$ ist der "kanonische" Kommutator von Ort u. Impuls

$H = H(p,x)$; $[x,p] = i\hbar$

$\rho(x) = \psi^* \psi$ Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Erhaltungssätze müssen weiterhin gelten, da

$$\int \rho(x)\, dx = 1$$

Es ex. eine Kontinuitätsgleichung

$j(x)$ sei die Dichte des Wahrscheinlichkeitsstromes:

$$\dot\rho + \operatorname{div} j(x) = 0 \leadsto \dot\rho + j'(x) = 0 \leadsto j(x) = \int^x \dot\rho\, dx'$$

$$= \int^x \frac{d}{dt}(\psi^* \psi)\, dx - \int^x (\dot\psi^* \psi + \psi^* \dot\psi)\, dx$$

Vorzeichen!

$$\dot\psi = \frac{1}{i\hbar} H \psi \qquad \dot\psi^* = -\frac{1}{i\hbar} H \psi^*$$

$$j = \frac{i}{\hbar} \int^x [(H\psi^*)\psi - \psi^*(H\psi)]\, dx$$

$$j = \frac{i}{\hbar} \int [(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{*''} + V\psi^*)\psi - \psi^*(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi)]\, dx$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^x (\overset{\text{part. Int.}}{\psi^{*''}\psi} - \overset{\text{part. Int.}}{\psi^*\psi''})\, dx$$

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^{*'}\psi - \psi^*\psi') = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\psi' - \psi^{*'}\psi)$$

---

Anwendung: Stromdichte der ebenen Welle

$$\psi = e^{ikx} \qquad \psi^* = e^{-ikx}$$

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(ik + ik) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

Vorzeichen korrigiert

## Einführung (Kleinert)

$$\frac{d^3E}{d^3k} \sim \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1}$$

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

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

(natürliche Einheiten $\hbar = 1$)

$$\psi(x) = e^{ipx/\hbar}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \hbar^2\frac{k^2}{2m} \propto \hbar^2 \frac{-\nabla^2}{2m}$$

k ist durch den Gradienten auf der Welle gegeben

$$\Rightarrow -\hbar^2\frac{\nabla^2}{m}\psi = E\psi$$

Schrödinger-Gleichung für freies Teilchen

Im Potentialtopf sind die Energien durch diese Formel quantisiert

1926 Schrödinger: Schrödingergleichung im Potential

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

1925 Heisenberg: Matrizenmechanik

$$[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar$$

Funktionalmatrizen $M_{xx'}$

kontinuierliche Indizes

1927 Dirac: relativistische Formel

hat negative Energien als Lösung,

sagt Antiteilchen voraus

nichtrel. Energie: $= \frac{p^2}{2m}$

relat. Energie: $= \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \overset{\text{Taylor}}{=} mc^2 + \frac{p^2}{2m} + O(p^4)$

$$\sqrt{m^2c^4 - \hbar^2 \nabla^2 c^2}\, \psi(x) = E(x)$$

Wurzel aus Operator? ...

"Matrizenwurzel" ???

Dirac'sche Notation

$$\psi_k(x) = e^{ikx}$$

$$\int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} = \delta(x) \quad \text{— Distribution o. verallg. Funktion}$$

Def.: $\int dx\, \delta(x) f(x) = f(0)$

$$\int dx' \underbrace{\delta(x-x')}_{1_{x,x'} \text{ Funktionalmatrix}} f(x') = f(x)$$

$$\boxed{1_{x,x'}\, f_{x'} = f_x}$$

$$1_{xx'} = \langle x | \hat{1} | x' \rangle$$

lokale Zustände

$$\langle x | k \rangle := e^{ikx}$$

$$1_{xx'} = \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-x')} = \int \frac{dp}{2\pi}$$

$$= \int \frac{dp}{2\pi} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle$$

$$\langle x | x' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle$$

28.04.05

# Der eindimensionale harmonische Oszillator

- rücktreibende Kraft : $F = -kx$ , $V(x) = \frac{k}{2}x^2$
$$= \frac{m\omega^2}{2}x^2$$
$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ Schwingungsfrequenz

Hamilton-Funktion : $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$

Quantisierung : $H \rightarrow \hat{H}$ Übergang zum Operator

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$ Hamilton-Operator

- algebraische Lösung

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,x + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)$$ Vernichtungsoperator

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,x - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)$$ Erzeugungsoperator

Auflösen nach $x$ $\Rightarrow$ $x(\hat{a}, \hat{a}^+)$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^+\right)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^+\right)$$

• commutator (Vertauschungsrelation):

$$[x, \hat{p}]\, f(x) = (x\hat{p} - \hat{p}x)\, f(x)$$

$$= x\left(-i\hbar\right)\frac{\partial}{\partial x} f(x) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x \cdot f(x)\right)$$

$$= \cancel{x\left(-i\hbar\right)\frac{\partial}{\partial x} f(x)} + i\hbar f(x) + i\hbar\, x \frac{\partial}{\partial x} f(x)$$

$$= i\hbar\, f(x)$$

$$\boxed{[x, \hat{p}] := i\hbar}$$

Vertauschungsrelation von $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ ?

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(-i)\sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}}\left[(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)(\hat{a}-\hat{a}^\dagger) - (\hat{a}-\hat{a}^\dagger)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\right]$$

$$= -i\frac{\hbar}{2}\left(-\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)$$

$$= -i\frac{\hbar}{1}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)$$

$$= i\hbar\,[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \overset{!}{=} i\hbar$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1}$$

Normierung erklärt die Koeffizienten

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{4}\left[-(\hat{a}-\hat{a}^{+})^{2} + (\hat{a}+\hat{a}^{+})^{2}\right]$$

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

$$= \hbar\omega\left(\underbrace{\hat{a}^{+}\hat{a}}_{\hat{n}} + \frac{1}{2}\right)$$

$\hat{n} := \hat{a}^{+}\hat{a}$ Besetzungszahloperator

$$\hat{a}\hat{n} = \hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a} = (\hat{a}^{+}\hat{a}+1)\hat{a} = \hat{n}\hat{a} + \hat{a} \longrightarrow [\hat{a},\hat{n}] = \hat{a}$$

$$\hat{a}^{+}\hat{n} = \hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a} = \hat{a}^{+}(\hat{a}\hat{a}^{+}-1) = \hat{n}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+} \longrightarrow [\hat{a}^{+},\hat{n}] = -\hat{a}^{+}$$

$$[\hat{a}^{q},\hat{n}] = q\,\hat{a}^{q} \quad , \quad [\hat{a}^{+q},\hat{n}] = -q\,\hat{a}^{+q}$$

---

Es sei $\Psi_n$ Eigenfunktion zum Eigenwert $n$

$$\hat{n}\Psi_n(x) = n\Psi_n(x) \qquad n = 0,1,2,3\ldots$$

$$\hat{H}\Psi_n(x) = \underbrace{\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)}_{\text{Energieeigenwerte des Hamiltonop.}:\ E_n}\Psi_n(x)$$

Wellenfunktion $|\Psi_n(x)|^2 dx$ : Wahrsch., dass Teilchen im Volumenelement $dx$ um $x$ ist.

$n$ positiv ganzzahlig $\rightarrow$ Beweis?

Skalarprodukt

$$\langle \varphi, \psi \rangle := \int dx\, \varphi^*(x)\, \psi(x)$$

$$\langle \varphi, \psi \rangle^* = \langle \psi, \varphi \rangle$$

$$\langle \varphi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \rangle = c_1 \langle \varphi, \psi_1 \rangle + c_2 \langle \varphi, \psi_2 \rangle$$

$$\langle \varphi, \varphi \rangle \geq 0 \qquad ; \ \langle \varphi, \varphi \rangle = 0 \rightsquigarrow \varphi \equiv 0$$

$$\langle \varphi, \hat{A}\psi \rangle = \int dx\, \varphi^*(x)\, \hat{A}\, \psi(x)$$

$$\langle \hat{A}^+\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \hat{A}\psi \rangle \quad (\text{Def. von } \hat{A}^+)$$

$\hat{A}^+$ = adjungierter Operator | selbstadjungiert (hermitisch) $\hat{A}^+ = A$

$$\int dx\, (\hat{A}^+\varphi)^* \psi = \int dx\, \varphi^* \hat{A} \psi$$

Weiterführung harmonischer Oszillator 3.5.05

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad , \ \omega = \sqrt{k/m} \ \text{Schwingungsfreq.}$$

$$= T + V$$

$$H \to \hat{H} \quad (p \to \hat{p}) \qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{H}\psi_n(x) = \underbrace{\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)}_{\text{Eigenwert } E_n} \psi_n$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung des ~~B~~ Problems

Bew., dass die Gleichung die Schrödingergleichung des Problems ist:

Allg. SG: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(x) \Psi$

Zerlegung: $\boxed{\Psi(x,t) = u(x) \cdot f(t)}$ (Ansatz)

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt}}_{\text{nur zeitabh.}} = \underbrace{\frac{1}{u}\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u + V(x)\, u\right]}_{\text{nur ortsabh.}}$$

$:= E$ $\leadsto$ beide Seiten müssen konst. sein

$$\Rightarrow i\hbar \frac{1}{f} \frac{d}{dt} f = E \rightarrow f(t) = c \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (1)$$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)\right] u(x) = E\, u(x)} \quad (2)$$

---

$n \in \mathbb{N}$?

- $n \langle \Psi_n, \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, \hat{n} \Psi_n \rangle \overset{\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}}{=} \langle \hat{a} \Psi_n, \hat{a} \Psi_n \rangle \geq 0$

  $\leadsto n \geq 0$

  niedrigstmögliche Energie für $n = 0$

- Eigenfunktion des Grundzustands ($n = 0$)

  $\hat{a} \Psi_0 = 0$, $\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) = 0$

  dimensionslose Größe $\xi = \cancel{\sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}}}\, x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$ (?)

$$\Rightarrow \quad \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\xi\, d\xi \quad \rightsquigarrow \psi_0 = c_0 e^{-\xi^2/2}$$

Normierung! (Wahrscheinlichkeiten in der QM müssen sich auf 1 addieren)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi_0(x)|^2 \overset{!}{=} 1$$

$$= |c_0|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\xi^2}$$

$$= |c_0|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

$$\rightsquigarrow c_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

$$\Rightarrow \psi_0(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} \qquad \text{SG des Grundzustands}$$

<u>angeregte Energiezustände</u>:

$$\hat{n}\, \underbrace{\hat{a}^+ \psi_n}_{} \underset{\uparrow}{=} (\hat{a}^+ \hat{n} + \hat{a}^+)\psi_n = (\hat{a}^+ n + \hat{a}^+)\psi_n = (n+1)\underbrace{\hat{a}^+\psi_n}_{}$$

$[\hat{a}^+, \hat{n}] = -\hat{a}^+$, Kommutator

$\Rightarrow \hat{n}$ liefert Eigenwert $(n+1)$

$n$ = Anzahl der Schwingungsquanten

$$\langle \hat{a}^+\psi_n, \hat{a}^+\psi_n \rangle = \langle \psi_n, \hat{a}\hat{a}^+\psi_n \rangle = \langle \psi_n, (\hat{a}^+\hat{a} + 1)\psi_n \rangle$$

$$= (n+1) \underbrace{\langle \psi_n, \psi_n \rangle}_{=1} \qquad [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

$$\Rightarrow \hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1} \cdot \psi_{n+1}$$

Erzeugungsop. erzeugt ein Schwingungsquant

$$\hat{n}(\hat{a}\psi_n) = (n-1)(\hat{a}\psi_n)$$

Vernichtungsoperator

$$\Rightarrow \hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

Zusammenfassung

- Grundzustand : $n=0$ , $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ , $\psi_0$
- 1. ang. Zustand : $n=1$ , $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$ , $\psi_1$

  $\vdots$
- n. ang. Zustand : $n$ , $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ , $\psi_n$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n\psi_0$$

$$= \frac{c_0}{\sqrt{2^n n!}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} \qquad c_0 = \text{Normierungskonst.}$$

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\varphi(\xi) = -e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2}\varphi(\xi)\right)$$

$$(\ldots)^2\varphi(\xi) = +e^{\xi^2/2}\frac{d^2}{d\xi^2}\left(e^{-\xi^2/2}\varphi(\xi)\right)$$

$$(\ldots)^n\varphi(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2/2}\varphi(\xi)\right)$$

$\varphi(\xi)$ beliebig , z.B.

$$\varphi(\xi) = e^{-\xi^2/2}$$

$$\psi_n(\xi) = \frac{c_0}{\sqrt{2^n n!}}(-1)^n e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)\,e^{-\xi^2/2}$$

Hermitesche Polynome

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

$H_0 = 1$ $\quad H_1 = 2\xi$ $\quad H_2 = (2\xi)^2 - 2$ $\quad H_3 = \dots$

$H_n$ hat $n$ Knoten (reelle Nullstellen)

$$\sqrt{n}\, \psi_{n-1} = \hat{a} \psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n$$

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

$$\searrow\ 2\xi H_n = 2n H_{n-1} + H_{n+1}$$

$$H_n' = 2n H_{n-1}$$

$$\Rightarrow\ H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0$$

10.5.05

Def. Herm. Polynome (Korrekturen)

$$\psi_n(\xi) = \frac{c_0}{2^n\, n!} (-1)^n e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad , \; c_0 = \left(\frac{m\omega}{4\pi}\right)^{1/4}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{4\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}} H_n(\xi) \cdot e^{-\xi^2/2}$$

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

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

$$\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \stackrel{!}{=} e^{-\xi^2/2} \cdot e^{\xi^2} \left[\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}\right] e^{-\xi^2/2}$$

---

Interpretation der Wellenfunktion als Aufenthaltswahrscheinlichkeit

klassisch: $w_{klass}(x)\, dx = 2 \frac{dt}{T}$ ; $T = \frac{2\pi}{\omega}$

$dt$: Aufenthaltsdauer in $dx$

$$w_{klass}(x) = \frac{\omega}{\pi} \frac{1}{\dot{x}} = \frac{\omega}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\dot{x}^2}}$$

$$\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 = E \rightsquigarrow \dot{x}^2 = \frac{2E}{m} - \omega^2 x^2$$

$$= \omega^2 (x_0^2 - x^2)$$

Wendepunkt

$$\Rightarrow w_{klass}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

Normierung: $\int_{-x_0}^{x_0} dx\, w_{klass}(x) \stackrel{!}{=} 1$ ✓

quantenmechanisch: $|\psi_n(x)|^2\,dx$ : Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumenelement um $x$ zu finden

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \overset{!}{=} E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\rightarrow x_0^2 = 2 \underbrace{\frac{\hbar \cancel{\omega}}{m\omega^{\cancel{2}}}}_{=1 \text{ für Untersuchung}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad \Big|\ \xi = \underbrace{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}_{=1 \text{ für Untersuchung}}\, x$$

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\hbar \pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{-\xi/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

## quantenmechanische Unschärfe

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

$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_n (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^{+2}) \psi_n \rangle$$
$$= \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = 0$$

$$\Delta \hat{p}^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle = \hbar^2 \frac{m\omega}{\hbar}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \Delta x\, \Delta\hat{p} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

## Dirac-Schreibweise

$$\langle n, xn \rangle = \langle \psi_n, x\psi_n \rangle$$
$$\langle \psi_n \hat{A} \psi_m \rangle = \langle n, \hat{A} m \rangle = \langle n | \hat{A} m \rangle = \langle n | \hat{A} | m \rangle$$

# Kohärente Zustände

$$\hat{a}(\alpha) := e^{-\alpha\hat{a}^+}\,\hat{a}\,e^{\alpha\hat{a}^+} \quad , \alpha \in \mathbb{C}$$

neuer Vernichtungsoperator

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

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

$$= \hat{a} + \alpha$$

neue Wellenfunktion

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

$\Rightarrow$ Linearkombination aller möglichen Anregungzustände

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha\hat{a}^+}\,|0\rangle \qquad \text{Schreibweise}$$

$$\langle\psi_\alpha, \psi_\alpha\rangle = 1 \qquad (\ \langle\alpha|\alpha\rangle = 1\ )$$

Beh.: $\psi_\alpha$ ist Eigenfunktion von $\hat{a}$ (des Vernichtungsoperator)

Bew.: $$\hat{a}\,\psi_\alpha = \underbrace{e^{\alpha\hat{a}^+}\cdot e^{-\alpha\hat{a}^+}}_{=1}\,\underbrace{\hat{a}\;e^{-|\alpha|^2/2}\cdot e^{\alpha\hat{a}^+}\psi_0}_{\hat{a}+\alpha}$$

$\alpha$ ist Eigenwert des Vernichtungsoperators

$$\cancel{= e^{-|\alpha|^2/2}(\hat{a}+\alpha)\psi_0}$$

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

$$= \alpha\,\psi_\alpha \qquad\qquad \hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

▫

12.05.05

$\therefore \Psi_\alpha = \frac{\partial}{\partial\alpha} \Psi_\alpha \; ...$

$\therefore e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = \frac{\partial}{\partial\alpha} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} |0\rangle$

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

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_\alpha , (\hat{a}\hat{a} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger}_{=\hat{a}^\dagger\hat{a}+1} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) \Psi_\alpha \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1 + \alpha^{*2}\right)$$

Varianz

$$\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle^2 + \langle x\rangle^2$$

$$= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(\alpha+\alpha^*)^2 + 1 - (\alpha+\alpha^*)^2\right] = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle p\rangle = -i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2} \langle \Psi_\alpha , (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \Psi_\alpha \rangle$$

$$= -i \left(\;\right)^{1/2} (\alpha - \alpha^*)$$

$$\langle p^2\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2}\left[(\alpha-\alpha^*)^2 - 1\right]$$

$$\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2}\cdot(-1) = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

Unschärfe $\Delta x \Delta p = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2} = \frac{\hbar}{2}$

Bei kohärenten Zuständen ist die Unschärfe minimal!

Zeitentwicklung:

$$\Psi_\alpha = e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha \hat{a}^+}\, \Psi_0$$

$$= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\, \hat{a}^+)^n}{n!} \Psi_0 = \dots$$

$\hat{a}^+$ n-mal auf $\Psi_0$ angewandt, liefert $\Psi_n$

allgemein:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

$$\Psi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}\, \Psi_n$$ zeitabhängige SG aus zeitunabh. SG

$$\dots \Rightarrow e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\big(\overbrace{\alpha e^{-i\omega t}}^{:=\alpha(t)}\big)^n}{n!} \sqrt{n!}\, \Psi_n \cdot e^{-i\omega t/2}$$

$$= e^{-|\alpha|^2/2}\, e^{\alpha(t)\, \hat{a}^+}\, \Psi_0\, e^{-i\omega t/2}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\Psi_\alpha(t) = e^{\alpha(t)\, \hat{a}^+ - \alpha^*(t)\, \hat{a}}\, \Psi_0 \cdot e^{-i\omega t/2}}$$

Zur Herleitung Baker-Campell-Hausdorff benutzen

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}}\, e^{\hat{B}}\, e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2}$$

# Mathematische Eigenschaften

- Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind reell

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

$$<\psi, \hat{A}\psi> = a <\psi, \psi> = a \qquad (1)$$

$$<\hat{A}\psi, \psi> = <a\psi, \psi> = a^* <\psi, \psi> = a^* \qquad (2)$$

$\hat{A}$ hermitesch : $<\hat{A}\psi, \psi> = <\psi, \hat{A}^+\psi> = <\psi, \hat{A}\psi>$ (3)

(1) − (2) :

$$<\psi, \hat{A}, \psi> - <\hat{A}\psi, \psi> = a - a^*$$

mit (3) :

$$a - a^* = 0$$

- Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m \quad , \quad \hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

$$a_n <\psi_m, \psi_n> = <\psi_m, \hat{A}\psi_n> = <\hat{A}\psi_m, \psi_n> = a_m <\psi_m, \psi_n>$$

$$\Rightarrow (a_n - a_m) <\psi_m, \psi_n> = 0 \quad , \quad a_n \neq a_m$$

$$\rightsquigarrow <\psi_m, \psi_n> = 0$$

Entartung: $a_n = a_m$ ?

$$<\psi_m, \psi_n> = c_{mn} \quad \text{(Matrix)}$$

$$c^*_{mn} = c_{mn} \quad \text{d.h.} \quad c^+ = c$$

lin. Alg. : $c^{diag} = U^+ c\, U$ C ist durch unitären op. diagonalisierbar

$$\sum_{m,n} \langle u_{mp} \psi_m , \psi_n u_{nq} \rangle = \sum_{m,n} u^*_{mp} c_{mn} u_{nq} = \left(u^+ c\, u\right)_{pq}$$
$$= \left(c^{diag}\right)_{pq}$$

- die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators bilden ein vollständiges Orthonormalsystem

$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x-x')$$

$$\psi(x) = \int dx' \delta(x-x') \psi(x')$$
$$= \sum_n \int dx' \psi_n(x) \psi_n^*(x') \psi(x')$$
$$= \sum_n \psi_n(x) \underbrace{\langle \psi_n , \psi \rangle}_{c_n} = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

$$\boxed{\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)}$$

Darstellung einer Funktion als Linearkombination der Eigenfunktionen

Bsp.: $\delta(x-x') = \sum_n c_n \psi_n(x)$

$$\int dx\, \psi_m^*(x)\, \delta(x-x') = \int dx\, \psi_m^*(x) \sum_n c_n \psi_n(x)$$
$$\psi_m^*(x') = \sum_n c_n \underbrace{\langle \psi_m , \psi_n \rangle}_{\delta_{m,n}} = c_m$$

$$\delta(x-x') = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x)$$

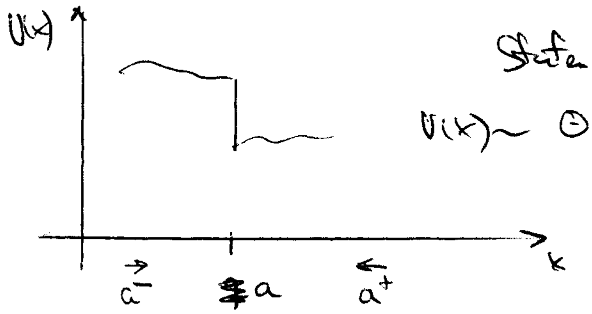
# Stetigkeit von $\psi(x)$ und $\psi'(x)$

17.05.05

Zeitunabh. SG:

$$(T + V(x))\,\psi(x) = E\,\psi(x) \quad ; \quad T = \frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

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




Stufenpotential

$V(x) \sim \Theta(x-a)$

angen. $\psi(x) \sim \Theta(x-a)$ : $\psi'' \sim \delta'(x-a)$ ↯

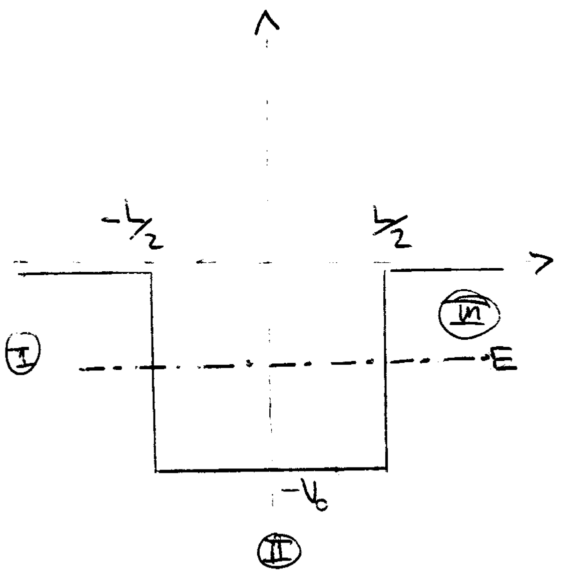
angen. $\psi'(x) \sim \Theta(x-a)$ : $\psi'' \sim \delta(x-a)$ ↯

$\psi(x)$ und $\psi'(x)$ müssen stetig sein

## Anschlussbedingungen

$$\left.\begin{aligned} \psi(a^-) &= \psi(a^+) \\ \psi'(a^-) &= \psi'(a^+) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{\psi'(a^-)}{\psi(a^-)} = \frac{\psi'(a^+)}{\psi(a^+)}$$

# Potentialtopf




$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & , -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

$-V_0 < E < 0$ gebundener Zustand

Information: 1) SG

2) $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |\psi(x)|^2 = 1$

3) $\psi(x), \psi'(x)$ stetig

I $\quad \psi'' = \varkappa^2 \psi \quad , \varkappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E > 0 \quad , \varkappa > 0$

$$\left.\begin{array}{l} \psi(x) \propto e^{\pm \varkappa x} \\ \psi(x) \xrightarrow[x \to -\infty]{} 0 \end{array}\right\} \psi_I(x) = A \cdot e^{\varkappa x}$$

III $\quad$ analog $\qquad \psi_{III}(x) = C \cdot e^{-\varkappa x}$

II $\quad \psi'' = -k^2 \psi \quad , k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) > 0 \quad k > 0$

$\psi_{II}(x) = B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \qquad |$ komplex i wg. $\psi'' < 0$

wegen Spiegelsymmetrie:

- gerade Lsg: $\psi_{II}(x) = B_g \cos(kx)$ (g)

- ungerade Lsg: $\psi_{II}(x) = B_u \sin(kx)$ (u)

Nutzung der Stetigkeitsbedingungen

für (g)

$$\left.\begin{aligned} B_g \cos k\tfrac{L}{2} &= e^{-\varkappa L/2} \\ B_g\, k \sin k\tfrac{L}{2} &= \varkappa e^{-\varkappa \frac{L}{2}} \end{aligned}\right\} \tan\left(k\frac{L}{2}\right) = \frac{\varkappa}{k}$$

für (u)

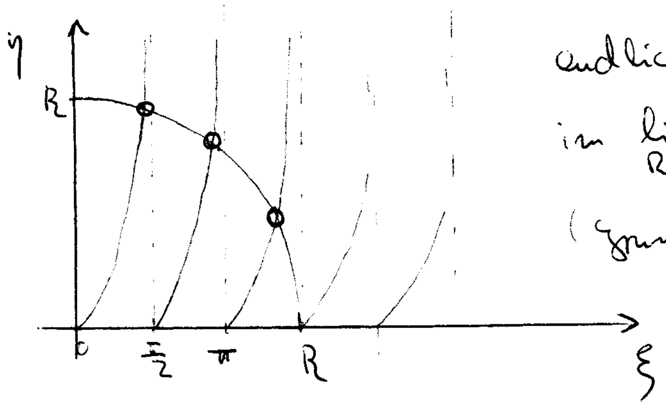
$$\left.\begin{aligned} B_u \sin k\tfrac{L}{2} &= e^{-\varkappa L/2} \\ B_u\, k \cos k\tfrac{L}{2} &= -\varkappa e^{-\varkappa L/2} \end{aligned}\right\} -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\varkappa}{k}$$

$$\xi := \frac{kL}{2} \qquad \eta := \varkappa \frac{L}{2}$$

$$\eta = \xi \tan \xi^{\,(g)} = -\xi \cot \xi^{\,(u)}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = (k^2 + \varkappa^2)\left(\frac{L}{2}\right)^2$$

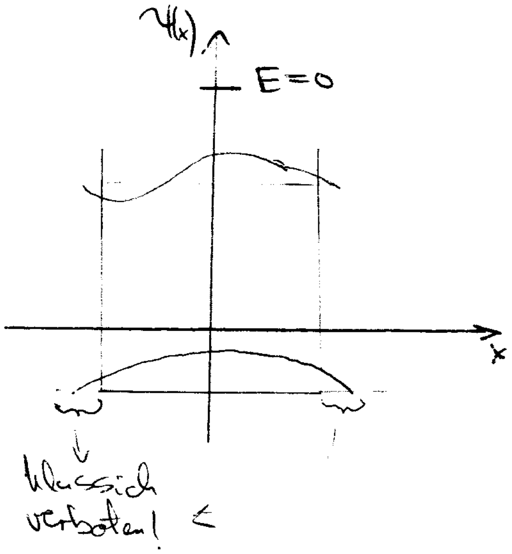
$$= \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0 - E)\left(\frac{L}{2}\right)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\left(\frac{L}{2}\right)^2 =: R^2$$




endliche Anzahl diskreter Lösungen

im $\lim_{R\to 0}$ bleibt immer noch eine Lsg.

(Grundzustand) übrig




Eindringtiefe $d = \frac{1}{\varkappa} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}$

Exponentieller Abfall der Wellenfunktion im "verbotenen" Bereich

Unendlich tiefer Potentialtopf

$V_0 \to \infty \quad , |E| \to \infty \quad , d \to 0$

$(g): \quad \psi(x) = \Theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right) \cos(kx) \quad , \frac{kL}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$

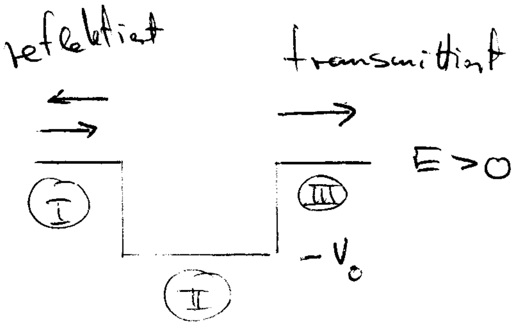
$(u): \quad \psi(x) = \Theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right) \sin(kx) \quad , \frac{kL}{2} = n\pi$

$$E = -V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \cdot \begin{cases} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 & (g) \\ n^2 & (u) \end{cases}$$

$$= -V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \begin{cases} (2n+1)^2 \\ (2n)^2 \end{cases}$$

# Streuzustände

$E > 0$




II $\quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$

I III $\quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0 \quad , q > 0$

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{iqx} + B e^{-iqx}$$

$$\psi_{II}(x) = C \cdot e^{ikx} + D \cdot e^{-ikx}$$

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

Anschlussbed.: $\quad (x = -\frac{L}{2})$ $\quad$ linker Rand

$$A \cdot e^{-iq\frac{L}{2}} + B e^{iq\frac{L}{2}} = C \cdot e^{-ik\frac{L}{2}} + D e^{ik\frac{L}{2}}$$

$$iq\left(A \cdot e^{-iq\frac{L}{2}} - B \cdot e^{iq\frac{L}{2}}\right) = ik\left(C \cdot e^{-ik\frac{L}{2}} - D e^{ik\frac{L}{2}}\right)$$

Matrix-Notation

$$\begin{pmatrix} e^{-iq\frac{L}{2}} & e^{iqL/2} \\ e^{-iqL/2} & -e^{iqL/2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ikL/2} & e^{ik\frac{L}{2}} \\ \frac{k}{q} e^{-ik\frac{L}{2}} & -\frac{k}{q} e^{ik\frac{L}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m\left(-\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$ $\quad$ ; $m\left(-\frac{L}{2}\right)$ ist Matrix für die Stelle $\frac{L}{2}$

rechter Rand $\left(x = +\frac{L}{2}\right)$: $\quad \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = m\left(\frac{L}{2}\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$

linker und rechter Rand:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = m\left(-\frac{L}{2}\right) \, m^{-1}\left(\frac{L}{2}\right)$$

$$G=0 \overset{(1)}{\leadsto} A = e^{iqL}\left[\cos kL - \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k}+\frac{k}{q}\right)\sin kL\right] F$$

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

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

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

mit $\left(\frac{q}{k}-\frac{k}{q}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{E+V_0}} - \frac{\sqrt{E+V_0}}{\sqrt{E}}\right)^2 = \frac{V_0^2}{E(E+V_0)}$

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

; $kL = n\pi \leadsto |S|^2 = 1$

volle Transmission

"Resonanz"

Bei Resonanz: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0 = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} - V_0 > 0$

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

# Resonanz

$$kL = n\pi \quad \rightsquigarrow \quad |S|^2 = 1$$

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

$$\left( S e^{iqL} \right)^{-1} = \cos kL - \frac{i}{2} \left( \frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \sin kL \qquad \Big|\, \text{Taylor}$$

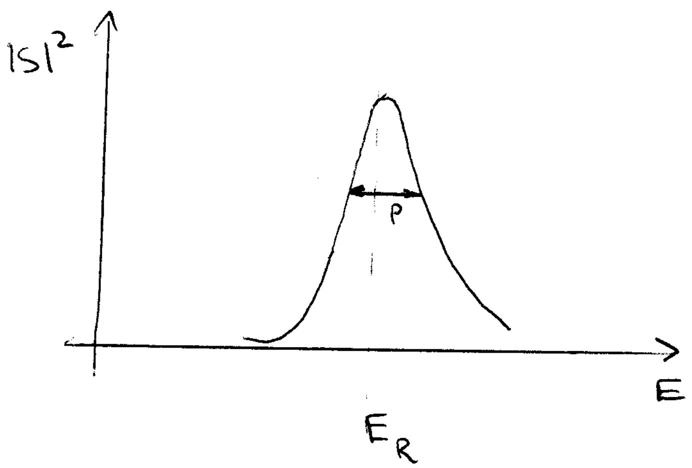
$$= (-1)^n \left[ 1 - i \frac{2}{\Gamma} (E - E_R) + \ldots \right]$$

$$\frac{d}{dt} \left( \cos kL - \frac{i}{2} \left( \frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \sin kL \right) \Big|_{E = E_R}$$

$$= - \frac{i}{2} \left( \frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \cos(kL) \cdot L \cdot \frac{dk}{dE} \Big|_{E = E_R}$$

$$= - i \cdot \frac{2}{\Gamma}$$

$$S e^{iqL} = (-1)^n \frac{i\, \Gamma/2}{E - E_R + i\, \Gamma/2} \quad , \quad |S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$




Lorentz

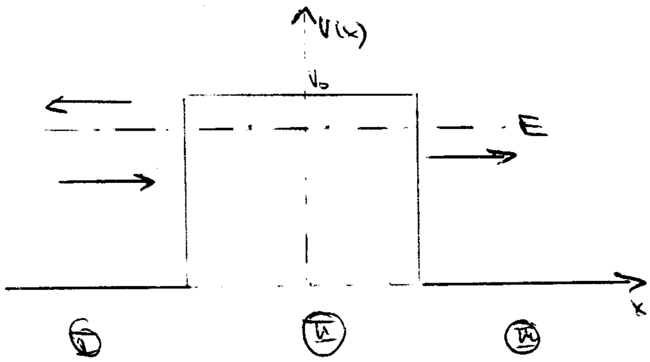
Breit-Wigner-Funktion

$$S(E) = |S(E)| \cdot e^{i(\delta(E) - qL)}$$

$$\tan \delta(E) = \frac{\mathrm{Im}\left[S(E)\, e^{iqL}\right]}{\mathrm{Re}\left[\,..\,\right]} = \frac{1}{2}\left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q}\right)\tan(kL)$$

$$\tan \delta(E) = \frac{E - E_R}{\Gamma/2}$$

## Potentialbarriere




$$\mathrm{I}, \mathrm{III} : q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0$$

$$\mathrm{II} : \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \quad , \kappa > 0$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A \cdot e^{iqx} + B e^{-iqx}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = C \cdot e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}$$

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

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

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

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

$$|S(E)|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\,\frac{\sinh^2 \kappa L}{E/V_0\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \neq 0 \quad (!)$$

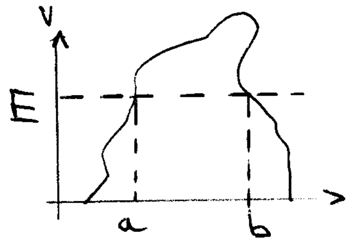
"Tunneleffekt"

$|S|^2$ = Tunnelwahrscheinlichkeit

Barriere groß : $\kappa L \gg 1 \rightarrow \sinh \kappa L \simeq \frac{1}{2} e^{\kappa L}$

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

Kompliziertes Potential




$$\rightarrow |S(E)|^2 \propto e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{a(E)}^{b(E)} dx \sqrt{2m(V(x) - E)}} \quad \text{Gamow-Faktor}$$

# Drehimpuls

bisher : Translation $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{a}\hat{\vec{p}}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\vec{a}\cdot\nabla)^n\psi(x)$ $= \psi(\vec{x}+\vec{a})$

Drehimpuls klassisch : $\vec{L} = \vec{x}\times\vec{p}$

$\longrightarrow \hat{\vec{L}} = \vec{x}\times\hat{\vec{p}}$ ; $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$

Dimension einer Wirkung

$$\boxed{\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\, x_j\, \hat{P}_k} \quad ; \quad \varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{gerade Perm. von } 1,2,3 \\ -1, & \text{ungerade} \;\; \text{"} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Drehimpuls quantenmechanisch

Vertauschungsrelation

$[x_i, \hat{P}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$

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

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

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

Betrachte: $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\hat{\vec{L}}}\psi(\vec{x})$ ... schwierig

wir nehmen an $\vec{\phi} = \phi\,\vec{e}_z$

$\vec{\phi}\hat{\vec{L}} = \phi\,\hat{L}_z$

Kugelkoordinaten:

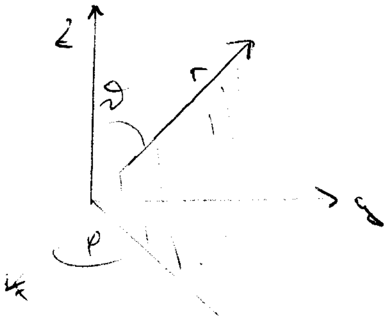
$$\nabla \psi = \frac{\partial \psi}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial \vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial \psi}{\partial \varphi}\vec{e}_\varphi$$

$$\vec{x} = r\cdot\vec{e}_r$$

$$\hat{\vec{L}} = \vec{x}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\,\vec{x}\times\nabla = -i\hbar\Big(0 + \underbrace{e_r\times e_\vartheta}_{\vec{e}_\varphi}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \underbrace{\vec{e}_r\times\vec{e}_\varphi}_{-\vec{e}_\vartheta}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big)$$

$$= \cancel{-i\hbar\Big(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\varphi - \frac{1}{\sin\vartheta}}$$

$$\boxed{\hat{\vec{L}} = -i\hbar\Big(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big)}$$




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

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

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

$$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar\Big(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\Big) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

$e^{\frac{i}{\hbar}\phi\hat{L}_z}\psi(r,\vartheta,\varphi) = \psi(r,\vartheta,\varphi+\phi)$ Rotation um z-Achse

allgemein:

$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\vec{L}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}+\vec{\phi}\times\vec{x})$, Rotation des Vektors $\vec{x}$ um die Drehachse $\vec{e}_\phi$ über Winkel $\phi = |\vec{\phi}|$, $\vec{\phi} = \phi\cdot\vec{e}_\phi$

Eigenwerte sind gequantelt

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad , \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = i\hbar \hat{L}_y \pm \hbar \hat{L}_x$$
$$= \pm\hbar \hat{L}_\pm$$

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

Eigenfunktion des $\hat{L}_z$ - Operators:

$$\hat{L}_z \Psi_m = \hbar m \, \Psi_m$$

| hinzufügen von $\hbar$ aus Dimensions-gründen

$m$ wird sich herausstellen als Anzahl der Drehimpulsquanten

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm \Psi_m = (\hat{L}_\pm \hat{L}_z \pm \hbar \hat{L}_\pm)\Psi_m = (\hat{L}_\pm \hbar m \pm \hbar \hat{L}_\pm)\Psi_m$$

$$\boxed{L_z \underbrace{\hat{L}_\pm \Psi_m}_{\propto \Psi_{m\pm1}} = \hbar(m \pm 1)\hat{L}_\pm \Psi_m}$$

Vernichtungs- / Erzeugungsoperator

$\hat{L}_+$ : Erzeugungsoperator
$\hat{L}_-$ : Vernichtungsoperator

„Leiteroperatoren"

Schreibweise:

$$\hat{L}_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$$

$$|m\rangle \rightarrow |\lambda, m\rangle$$

$$\hat{L}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda, m\rangle$$

$$\hat{L}_z |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle$$

Eigenfunktionen sind orthonormal:

$$\langle \lambda, m | \lambda', m' \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{mm'}$$

$$\langle \hat{L}_i \lambda, m | \hat{L}_i \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | \hat{\vec{L}}^2 \lambda m \rangle \geq 0 \rightsquigarrow \boxed{\lambda \geq 0}$$

$$\langle \psi | \hat{\vec{L}}^\dagger \varphi \rangle = \langle \hat{\vec{L}} \psi | \varphi \rangle$$

$$= \int d^3x \left[ -i\hbar \left( \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(\vec{x}) \right]^* \varphi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x \left[ +i\hbar \left( \text{———} - \text{———} \right) \psi^*(\vec{x})\, \varphi(\vec{x}) \right]$$

$$\overset{\text{part. Int.}}{=} \int d^3x\, \psi^*(\vec{x}) (-i\hbar) \left( \text{———} - \text{———} \right) \varphi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x\, \psi^*(x)\, \hat{\vec{L}}\, \varphi(x) = \langle \psi | \hat{\vec{L}} \varphi \rangle$$

$$\rightsquigarrow \hat{\vec{L}}^\dagger = \hat{\vec{L}} \qquad \text{Hermitischer Operator}$$

$$\rightsquigarrow \hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp$$

$$\langle \hat{L}_\pm \lambda, m | \hat{L}_\pm \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | (\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm) \lambda, m \rangle$$

$$= \langle \lambda, m | (\hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z) \lambda, m \rangle$$

| Eigenwerte sind bekannt

$$= (\lambda - m^2 \mp m) \hbar^2 \cdot 1 \geq 0$$

1 Fall: $m > 0$

$$\lambda \geq m^2 + m$$

$$m_{max} =: l$$

$$\hat{L}_+ |\lambda, l\rangle = 0$$

$$\langle \lambda l | \hat{L}_- \hat{L}_+ \lambda l \rangle$$

$$= (\lambda - l^2 - l)\hbar^2 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow \lambda = l(l+1)$$

2. Fall: $m < 0$

$$\lambda \geq m^2 - m$$

$$m_{min} =: -l$$

$$\rightsquigarrow \lambda - m_{min}^2 + m_{min} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow l(l+1) = m_{min}(m_{min} - 1)$$

$m: -l, -l+1, \ldots, l-1, l$, $\quad l - k = -l \rightsquigarrow 2l = k$

$2l$: ganzzahlig

$$\boxed{l = 0, 1, 2, 3, \ldots}$$ oder $l = \cancel{0}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$

---

## $\hat{L}^2$ ausgeschrieben in Polarkoordinaten

$$\hat{\vec{L}}^2 = (-i\hbar)^2 \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - e_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \cdot \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

beachte $\frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\varphi = 0$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \overbrace{e_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \vec{e}_\varphi}^{=-\cos\vartheta}\right)\frac{\partial}{\partial\vartheta}$$

$$- \underbrace{\vec{e}_\varphi \left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta\right)}_{=0} \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

26.05.05

# Kugelflächenfunktionen

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

$\rightarrow$ Kugelflächenfunktionen

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}=im\,Y_{lm}$$

Ansatz: $Y_{lm}(\ ,\varphi)=\Theta_{lm}(\vartheta)\,\Phi_m(\varphi)$

$$\phi_m(\varphi)=e^{im\varphi}$$

Forderung: Eindeutig $\Phi_m(\varphi)\overset{!}{=}\Phi_m(\varphi+2\pi)$

$\rightsquigarrow$ m ganzzahlig $\rightsquigarrow$ l ganzzahlig
(in diesem Fall nicht $l=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\dots$)

$$\Rightarrow\underbrace{\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\vartheta}+l(l+1)\right]}_{\text{Differenzialgl. der Kugelflächenfunktionen}}\Theta_{lm}(\vartheta)=0$$

$$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y=\hbar\,e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta}+i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

anfangen mit dem höchsten Zustand $Y_{ll}$, d.h. $m=l$

$$\hat{L}_+Y_{ll}=0\quad\rightsquigarrow\quad e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}+i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\Theta_{ll}(\vartheta)\,e^{il\varphi}\overset{!}{=}0$$

$$\rightsquigarrow\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}-l\cot\vartheta\right)\Theta_{ll}(\vartheta)=0\rightsquigarrow\boxed{\Theta_{ll}=c_l\cdot\sin^l(\vartheta)}\ ^{1)}$$

1) $c_l$, die Normierungskonstante sei vernachlässigt, kann bestimmt werden als $\int_0^\pi d\vartheta\,\sin\vartheta\int_0^{2\pi}d\varphi\,|Y_{lm}(\vartheta)|^2=1$

$\hat{L}_- \psi_{\ell\ell} \propto \psi_{\ell,\ell-1}$ , $\hat{L}_- \psi_{\ell,\ell-1} \propto \psi_{\ell,\ell-2}$ bzw $\hat{L}_-^2 \psi_{\ell\ell} \propto \psi_{\ell,\ell-2}$

$\ldots \hat{L}_-^n \psi_{\ell,\ell} \propto \psi_{\ell,\ell-n}$

$\rightarrow \psi_{\ell,m} \propto \hat{L}_-^{\ell-m} \psi_{\ell\ell}$

$$\hat{L}_-\left[f(\vartheta)\, e^{i\ell\varphi}\right] = \hbar\, e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,(i\ell)\right) f(\vartheta) e^{i\ell\varphi}$$

$$= -\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \ell\cot\vartheta\right) f(\vartheta)\, e^{i(\ell-1)\varphi}$$

$$= -\hbar\,\frac{1}{\sin^\ell(\vartheta)}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left[\sin^\ell\vartheta\, f(\vartheta)\right] e^{i(\ell-1)\varphi}$$

$$= \hbar\,\frac{1}{\sin^{\ell-1}\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\left[\sin^\ell\vartheta\, f(\vartheta)\right]$$

$f(\vartheta)$ sei nun $G_{\ell\ell} = c_\ell \sin^\ell(\vartheta)$

$$\underbrace{\boxed{\psi_{\ell,m} \propto \frac{1}{\sin^m(\vartheta)}\left(\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\right)^{\ell-m} \sin^{2\ell}(\vartheta)\cdot \underbrace{e^{im\varphi}}_{\Phi(\varphi)}}}_{\substack{\text{Kugelflächenfunktionen} \\ Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)}}$$

Beispiele

$Y_{00} \propto 1$ $\qquad Y_{11} \propto \sin\vartheta\, e^{i\varphi}$ $\qquad Y_{10} \propto \frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\sin^2\vartheta \propto \cos\vartheta$

$Y_{22} \propto \sin^2\vartheta\, e^{2i\varphi}$ $\qquad Y_{21} \propto \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\sin^4\vartheta\, e^{i\varphi} \propto \sin\vartheta\cos\vartheta e^{i\varphi}$

$Y_{20} \propto \left(\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\right)^2 \sin^4\vartheta \propto \frac{d^2}{dx^2}(1-x^2)^2 \propto 3\cos^2\vartheta - 1$

Zur Übersicht:

$$Y_{lm} \overset{x=\cos\vartheta}{\propto} \underbrace{\frac{1}{(1-x^2)^{m/2}} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} (1-x^2)^l}_{} e^{im\varphi}$$

$P_{lm}$: Zugeordnete Legendre - Polynome

$m=0 \leadsto P_{l0} = P_l(x) \propto \frac{d^l}{dx^l}(1-x^2)^l$ : Legendre - Polynome

Es gilt $Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m Y^*_{l,-m}(\vartheta,\varphi)$

Normierung: $\int d\Omega \, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) \, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{mm'}$

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta$$

Beh.: $f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} a_{lm} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ Entwicklung bel. Funktion in Kugelflächenfunktionen ist möglich

Vollständigkeit:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{\infty} Y_{lm}(\vartheta,\varphi) Y^*_{lm}(\vartheta',\varphi') = \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')$$

# Entwicklung der Deltafunktion

$$f(\vartheta,\varphi) = \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')$$

$$\stackrel{!}{=} \sum_{l,m} a_{lm}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$\rightsquigarrow \int d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\vartheta,\varphi)\,\delta(\cos\vartheta-\cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')$$

$$= \sum_{l,m} a_{lm} \underbrace{\int d\Omega\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y^*_{l'm'}(\vartheta,\varphi)}_{\delta_{l,l'}\,\delta_{mm'}}$$

$$\rightsquigarrow \quad Y^*_{l'm'}(\vartheta',\varphi') = \sum_{lm} \delta_{l,l'}\,\delta_{m,m'}\, a_{lm}$$

$$a_{l'm'} = Y^*_{l'm'}(\vartheta',\varphi')$$

$$\rightsquigarrow \quad \boxed{\delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi') = \sum_{lm} Y^*_{lm}(\vartheta',\varphi')\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}$$

Korrektur: Hermitizität von $\hat{L}$

$$\langle \psi | \hat{L}^\dagger | \phi \rangle = \langle \hat{L}\psi | \phi \rangle$$

$$= \int d^3x \left[ -i\hbar \left( \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi(x) \right]^* \phi(\vec{x})$$

$$= i\hbar \int_0^\infty dr\, r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta \left[ \left( \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \psi^*(x) \right] \phi$$

$$\overset{\text{p.Int.}}{=} -i\hbar \int_0^\infty dr\, r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \psi^*(x) \Big[ \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left( \sin\vartheta\, \vec{e}_\varphi\, \phi(\vec{x}) \right)$$

$$- \frac{\partial}{\partial\varphi} \left( \vec{e}_\vartheta\, \phi(\vec{x}) \right) \Big]$$

$$= \text{———} \quad " \quad \text{———} \Big[ \cos\vartheta\, \vec{e}_\varphi\, \phi(\vec{x}) + 0 + \sin\vartheta\, \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} \phi(\vec{x})$$

$$- \left( \frac{\partial}{\partial\varphi} \vec{e}_\vartheta \right) \phi(\vec{x}) - \vec{e}_\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi} \phi(\vec{x}) \Big]$$

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

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} \vec{e}_\vartheta = -\vec{e}_x \cos\vartheta \sin\varphi + \vec{e}_y \cos\vartheta \cos\varphi$$

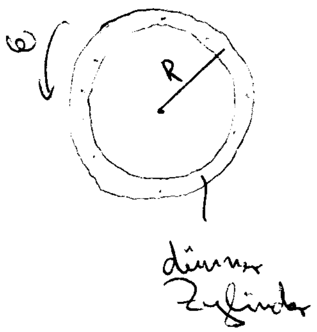
$$= \cos\vartheta\, e_\varphi$$

$$\langle \psi | \hat{L}^\dagger | \phi \rangle = \int dr\, r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta\, \psi^* \underbrace{\left[ -i\hbar \left( \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \right]}_{\hat{\vec{L}}} \phi(\vec{x})$$

$$= \int d^3x\, \psi^*(\vec{x})\, \hat{\vec{L}}\, \phi(\vec{x}) = \langle \psi | \hat{\vec{L}}\, \phi \rangle$$

$$\rightsquigarrow \boxed{\hat{\vec{L}}^\dagger = \hat{\vec{L}}}$$

Gedankenexperiment - BEK 31.05.05




Bose - Einstein - Kondensation

Energie: $N \frac{1}{2} m \omega_1^2 R^2 = \frac{L_z^2}{2NmR^2}$ ; $L_z = N \cdot R \cdot m v$

$\sim \frac{(N\hbar)^2}{2NmR^2} = \frac{N\hbar^2}{2mR^2}$

$\Rightarrow \omega_1 \sim \frac{\hbar}{mR^2}$

Quantenmechanik spielt eine Rolle bei tiefen Temperaturen

Es sei $\omega < \omega_1$ (weniger als 1 Schwingungsquant)

$\Rightarrow$ beim Kühlen stoppt die Rotation, da die Energie für ein Drehquant nicht ausreicht

experimentelle Durchführung: Hess - Fairbank - Experiment

## Zentralpotential

d.h. $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$ ; V nur von r abhängig

Anwendung von Kugelkoordinaten

$\hat{\vec{p}}^2 = (-i\hbar\nabla)^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{r^2}$ , $\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r$

$= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$

$[r, \hat{p}_r] = i\hbar$

$\hat{p}_r^2 = (-i\hbar)^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\right)$

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

Zeitunabhängige Schrödingergleichung für Zentralpotential

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\Psi(r,\vartheta,\varphi)=E\,\Psi(r,\vartheta,\varphi)$$

Rückschlüsse aus der SG:

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

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

$R(r) = \frac{u(r)}{r}$ für günstige Betrachtung

$$\hat{p}_r^2 R(r) = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)^2\frac{u(r)}{r} = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}u(r)$$

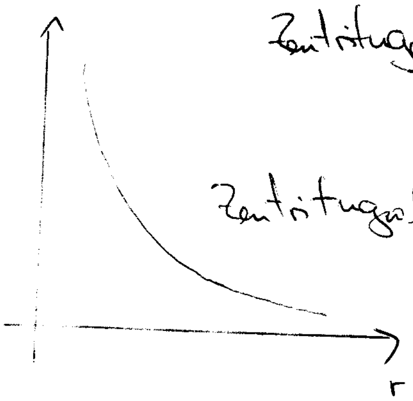
$\Rightarrow$

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

effektives Potential

für $l\neq 0$ zus. Term $\sim\frac{1}{r^2}$

Zentrifugalpotential




Zentrifugalpotential $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

Normierung

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, |R(r)|^2 = 1 \quad \rightsquigarrow \quad \int_0^\infty dr\, |u(r)|^2 = 1$$

Randbedingung $u(0) = 0$

$$\lim_{r\to 0} V(r) r^2 = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \lim_{r \to 0} \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u \approx 0$$

$$\rightsquigarrow \quad u \sim r^{\ell+1}$$

(denkbar wäre auch $\sim r^{-\ell}$, aber dann ist $u(0) = 0$ nicht erfüllt)

Kugelförmiger Kasten

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

Randbedingungen: $u(0) = 0$ , $u(a) = 0$

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

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

$\ell = 0$ : $\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + 1\right) u(\rho) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad u_0 \propto \sin\rho$ $\quad (\sim \rho \,:\, \rho \to 0)$ ✓

Ansatz: $u_\ell = \rho^{\ell+1} \chi_\ell(\rho)$

asymptotische Bedingung

$$\rightsquigarrow \quad \chi_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{\rho} \chi_\ell' + \chi_\ell = 0$$

Beh.: $\chi_{l+1} = \frac{1}{\rho} \chi_l'$ (1) vgl. Legendre / Hermite - Polynome

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

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

$$\chi_{l+1}'' + \frac{2(l+2)}{\rho} \chi_{l+1}' + \chi_{l+1} \overset{?}{=} 0$$

wird durch (1) + (2) + (3) erfüllt

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

$\rightsquigarrow$ Sphärische Bessel - Funktionen $j_l(\rho)$

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

sphärische Neumann - Funktionen

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}\right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}$$ physik. nicht relevant

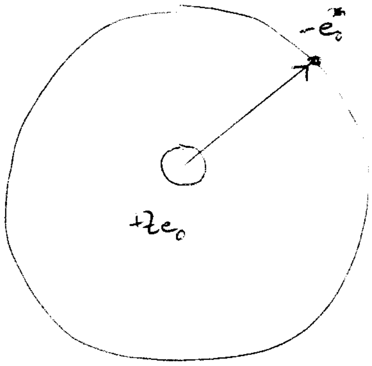
sphärische Hankel - Funktionen: Zusammenfassung beider Ausdrücke

$$h_l(\rho) = j_l(\rho) \pm i\, n_l(\rho)$$

$\rho \to 0$: $j_l(\rho) = \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$ ; $n_l(\rho) = -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$

noch zu erfüllen: $u(qa) \overset{!}{=} 0 \quad \rightsquigarrow \quad j_l(qa) = 0$

# Das Wasserstoffatom




$$U(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{r} \qquad \text{Coulomb-Potential}$$

$$\rho := \varkappa r \quad \text{mit } \varkappa := \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

$$\rho_0 := \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\varkappa}{|E|} \quad ; E<0$$

$\Rightarrow$

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

Asymptotisches Verhalten:

$\rho \to 0 \; ; \; u \sim \rho^{l+1}$

$\rho \to \infty : \frac{\partial^2 u}{\partial\rho^2} - u \simeq 0 \;\rightsquigarrow\; u \sim e^{-\rho}$

$\rightsquigarrow$ Ansatz: $\boxed{u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho}\, w(\rho)}$

Einsetzen in DGL

(1) $$\rightsquigarrow \rho\frac{\partial^2 w}{\partial\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{\partial w}{\partial\rho} + \left[\rho_0 - 2(l+1)\right] w = 0$$

Schreibweise von $w$ als Potenzreihe

(2) $$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$$

2.6.05

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

Koeffizienten für $\rho^k \overset{!}{=} 0$

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

$\Rightarrow$ Rekursionsformel $a_{k+1} = \dfrac{\cdot/\cdot}{\cdot/\cdot} a_k = \dfrac{2(k+l+1)-\rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \xrightarrow[k \text{ groß}]{} \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k}$$

Vergleich mit der asymptotischen Forderung

$$e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(2\rho)^k \Rightarrow \frac{2^{k+1}/(k+1)!}{2^k/k!} = \frac{2}{k+1} \to \frac{2}{k}$$

Reihe konvergiert nicht! $\to$ Problem der Normierbarkeit

$\Rightarrow$ Lsg.: Reihe muss abbrechen

d.h. $\exists\, k_{max} =: N$ sodass $2(N+l+1) - \rho_0 = 0$

$\nexists$ sodass ab $k = k_{max}$ die Reihe abbricht

$$\rho_0 = 2\underbrace{(N+l+1)}_{:= n} \quad , N = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

N nennt man die radiale Quantenzahl

n nennt man die Hauptquantenzahl

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

d.h. N Nullstellen

# Energiespektrum des H-Atoms

$$\rho_0 = \frac{e_0^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 |E|}\,\kappa = \frac{e_0^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 |E|}\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{e_0^2 Z}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}\sqrt{\frac{2m}{|E|}}$$

$$E = -\frac{2m e_0^4 Z^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2 \rho_0^2} = -\frac{m \cdot e_0^4 Z^2}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2}\,\frac{1}{n^2}$$

Rydberg-Konstante:

$$R_H = \frac{m e_0^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} = 13{,}6 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{R_H Z^2}{n^2} \qquad \text{für H ist } Z = 1$$

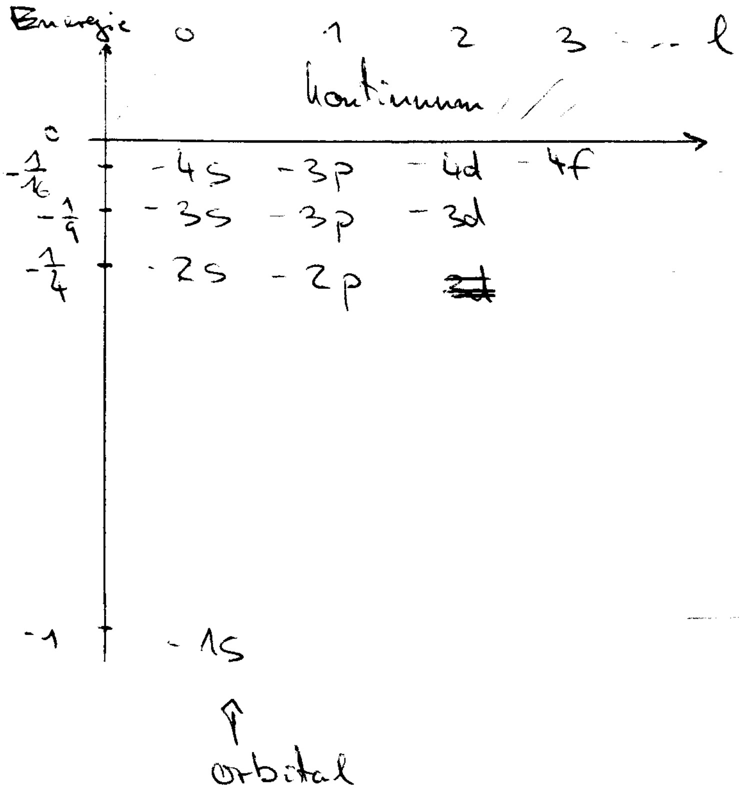
Zur Erinnerung:

$n = N + l + 1 \quad , \quad l \le n-1 \quad , \quad |m| \le l$

→ 3 Quantenzahlen

$|n, l, m\rangle$ als Kurzform für einen Zustand

| Energie-Eigenwerte | | | Entartung |
|---|---|---|---|
| $\|1\,0\,0\rangle$ | | | 1 |
| $\|2\,0\,0\rangle$ | $\|2\,1\,-1\rangle$ | | 4 |
| | $\|2\,1\,0\rangle$ | | |
| | $\|2\,1\,1\rangle$ | | |
| $\|3\,0\,0\rangle$ | $\|3\,2\,-2\rangle$ | $\|3\,1\,-1\rangle$ | 9 |
| | $\|3\,2\,-1\rangle$ | $\|3\,1\,0\rangle$ | allgemein: |
| | $\|3\,2\,0\rangle$ | $\|3\,1\,1\rangle$ | $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ |
| | $\|3\,2\,1\rangle$ | | |
| | $\|3\,2\,3\rangle$ | | |




$$\hbar \omega_{pq} = E_p - E_q$$
$$= Z^2 R_H \left(-\frac{1}{p^2} + \frac{1}{q^2}\right)$$

| Spektral-Serien | Endniveau |
|---|---|
| Lyman | $q = 1$ |
| Balmer | $q = 2$ |
| Paschen | $q = 3$ |

---

Mathematika:
rek[k, n, l)

$n=1$ $l=0$ : $w(\rho) = a_0$

$n=2$ $l=0$ : $w(\rho) = a_0 + a_1\rho$

$n=3$ $l=0$ $w(\rho) = a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2$ $\quad a_1 = \text{rek}[0,3,0]\, a_0 = -2a_0$

$= a_0\left(1 - 2\rho + \frac{2}{3}\rho^2\right)$ $\quad a_2 = \text{rek}[1,3,0]\, a_1 = \frac{2}{3} a_0$

$l=1$ . . .

. . . $\Rightarrow w(\rho) \propto L^{2l+1}_{n-l-1}(2\rho)$ $\boxed{\text{Laguerre}}$

## Wellenfunktion

$$\psi_{n\ell m}(\vec{x}) \propto R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$$

$$R_{n\ell}(r) = \frac{u(r)}{r} \underset{\uparrow}{\propto} (2\varkappa r)^{\ell} e^{-\varkappa r} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2\varkappa r)$$

$\rho = \varkappa r$

$(2\varkappa)^{3/2}$ zusätzlicher Faktor von $\varkappa$

## Betrachtung von $\varkappa$ – Bohrscher Radius

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \frac{Z}{n}\sqrt{\frac{2m\, m e_0^4}{2\hbar^4 (4\pi\varepsilon_0)^2}}$$

$$= \frac{Z}{n} \cdot \frac{1}{a}$$

$$a = \frac{\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)}{m e_0^2} \quad \text{Bohrscher Radius}$$

# Teilchen im elektromagnetischen Feld

Elektrodynamik: $\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} - \nabla\phi$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Lorentz-Gleichung:

$$\vec{F}_L = e\left(\vec{E} + \dot{\vec{x}} \times \vec{B}\right)$$

Bewegungsgleichung:

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

mit $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{a}\vec{c}\,\vec{b} - \vec{a}\vec{b}\,c$

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

Lagrange-Funktion:

$$L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = T - V$$

Euler-Lagrange-Gleichungen:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0}$$

liefert die Bewegungsgleichung

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

Kontrolle:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \; (= P_i) &= m\dot{x}_i + eA_i \\ \frac{\partial L}{\partial x_i} &= -e\frac{\partial\phi}{\partial x_i} + e\dot{x}_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i} \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt}P_i &= m\ddot{x}_i + e\frac{dA_i}{dt}, \quad \vec{A} = \vec{A}(\vec{x}, t) \\ &= m\ddot{x}_i + e\frac{\partial A_i}{\partial t} + e\underbrace{\frac{dx_j}{dt}}_{\dot{x}_j}\frac{\partial A_i}{\partial x_j} \end{aligned}$$

Hamilton-Funktion:

$$H(\vec{x},\vec{p}) := \vec{p}\dot{\vec{x}} - L$$

$$= \vec{p}\cdot\frac{1}{m}(\vec{p}-e\vec{A}) - \frac{1}{2}\frac{m}{m^2}(\vec{p}-e\vec{A})^2 - \frac{e}{m}(\vec{p}-e\vec{A})\vec{A} + e\phi$$

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

kann quantisiert werden

$$H(\vec{x},\vec{p}) \longrightarrow \hat{H}(\vec{x},\hat{\vec{p}})$$

$$\hat{H}\psi(\vec{x},t) \quad \text{bzw} \quad \hat{H}\psi(\vec{x}) = ?$$

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

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + e\phi\right]\psi + \frac{i\hbar e}{2m}\left[\nabla(\vec{A}\psi) + \vec{A}\nabla\psi\right] + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\psi$$

$$\text{mit } \nabla(\vec{A}\psi) = \underbrace{(\nabla\vec{A})}_{\text{0 mit Coulombeichung}}\psi + \vec{A}\nabla\psi$$

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

Beispiel: konstantes Magnetfeld

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x}\times\vec{B}, \quad \vec{B} = \text{const}$$

$$\frac{i\hbar e}{m}\vec{A}\cdot\nabla = -\frac{i\hbar e}{2m}(\vec{x}\times\vec{B})\cdot\nabla$$

$$= +\frac{i\hbar e}{2m}(\vec{x}\times\nabla)\vec{B}$$

$$= -\frac{e}{2m}\hat{\vec{L}}\cdot B \qquad \text{paramagnetischer Term}$$

klassisch: Energie eines magnetischen Dipols im äußeren Feld $\vec{B}$:

$$E = -\vec{m}\vec{B}$$

$$\rightsquigarrow \frac{e}{2m}\vec{L} \equiv \vec{m}$$

klassisch: $\vec{m} = \frac{1}{2}\int d^3x' \, \vec{x}' \times \vec{j}(\vec{x}')$ , $\vec{j}(\vec{x}') = e\vec{v}\,\delta(\vec{x}' - x(t))$

$p = m\vec{v}$

$$= \frac{e}{2m}\vec{x}\times\vec{p} = \frac{e}{2m}\vec{L}$$

$$\frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 \overset{\vec{B}=B\vec{e}_z}{=} \frac{e^2B^2}{8m}\left(x^2+y^2\right)$$ diamagnetischer Term

$$\rightsquigarrow \vec{m} \propto \vec{B}$$

Landau-Problem

geladenes Teilchen in einem konstanten $\vec{B}$

$\vec{B} = B\cdot\vec{e}_z \qquad \vec{A}(\vec{x}) = Bx\,\vec{e}_y \quad , \phi = 0 \qquad B = \nabla\times\vec{A}$

Landau-Eichung

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - e\vec{A}\right)^2 = \frac{\hat{p}_3^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_1^2 + \left(\hat{p}_2 - eBx\right)^2\right]$$

$$= \hat{H}_{\parallel} + \hat{H}_{\perp} \quad , \quad \left[\hat{H}_{\parallel}, \hat{H}_{\perp}\right] = 0$$

$\rightsquigarrow$ Separationsansatz I

$$\psi(\vec{x}) = \psi_{\parallel}(z)\cdot\psi_{\perp}(x,y)$$

$$\hat{H}_{\parallel} \psi_{\parallel}(z) = E_{\parallel} \psi_{\parallel}(z) \quad , \quad E_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \quad , \quad \psi_{\parallel} = e^{ik_3 z}$$

$$\hat{H}_{\perp} \psi_{\perp}(x,y) = E_{\perp} \psi_{\perp}(x,y)$$

Separationsansatz II : $\psi_{\perp}(x,y) = e^{ik_2 y} \varphi(x)$

$$\hat{H}_{\perp} \psi_{\perp} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_1^2 + e^2 B^2 \left( x - \frac{\hbar k_2}{eB} \right)^2 \right] \varphi(x) \cdot e^{ik_2 y}$$

$$\overset{!}{=} E_{\perp} \psi_{\perp}$$

$$\left[ \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_c^2 (x - x_0)^2 \right] \varphi(x) = E_{\perp} \varphi(x)$$

mit $\omega_c := \dfrac{|e| B}{m}$ : Kreisfrequenz

$x_0 := \dfrac{\hbar k_2}{eB}$ || Verknüpfung Orts $\leftrightarrow$ Impuls-raum

$\rightsquigarrow$ SG für den harmonischen Oszillator !
mit bekannten Lösungen:

$\rightsquigarrow$ $E_{\perp} = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$ , $n = 0, 1, 2, \ldots$ Landau-Niveaus

$\varphi(x) = \varphi_n(x - x_0)$

$$E = E_{\parallel} + E_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} + \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

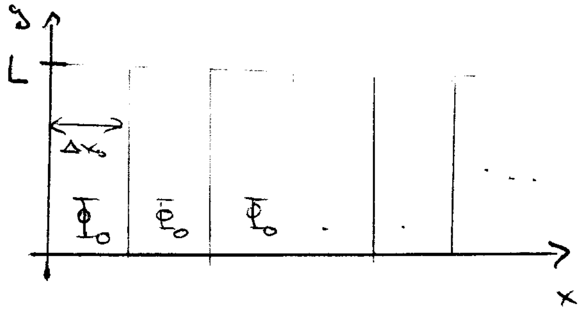
$$\psi(\vec{x}) = e^{ik_3 z} e^{ik_2 y} \varphi_n \left( x - \frac{\hbar k_2}{eB} \right)$$

Diamagnetismus:

$$E_\perp = -m_z B \quad \rightsquigarrow \quad m_z = -\frac{|e|\hbar}{2m}(2n+1)$$

induziertes magnetisches Moment in $(-\vec{e}_z)$ - Richtung

Entartung:




$$k_z = \frac{2\pi i}{L}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\Delta k_z \Big|_{min} = \frac{2\pi}{L}$$

$$\rightsquigarrow \Delta x_0 \Big|_{min} = \frac{\hbar}{eB} \frac{2\pi}{L}$$

$$\Phi_{min} = B \, \Delta x_0\big|_{min} L$$

$$= 2\pi \frac{\hbar}{e} = \Phi_0 \quad \text{elementares Flussquant}$$

$$\frac{\text{Entartung}}{\text{Flächeneinheit}} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

# Aharonow-Bohm-Effekt

9.6.05

Eichtransformation: $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, $\vec{A} \hat{=} \vec{A} + \nabla\Lambda(\vec{x},t)$

$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A} - \nabla\phi$, $\phi \to \phi' = \phi - \frac{\partial \Lambda(\vec{x},t)}{\partial t}$

Schrödinger-Gl.:

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

Teilchen der Ladung e in Feld beschrieben durch $\vec{A}$ und $\phi$

Beh.: $\psi \to \psi' = \psi e^{\frac{ie}{\hbar}\Lambda(\vec{x},t)}$

Bew.: durch ~~Einse~~ Auflösen und Einsetzen

$\leadsto$

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - e\vec{A} + e\nabla\Lambda\right)^2 + e\phi' + e\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right]\psi' e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi' e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda}\right)$$

mit $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi' e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda}\right) = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'\right)e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda} + i\hbar\psi' e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda}\left(-\frac{ie}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\Lambda\right)$

$$= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'\right)e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda} + \psi' e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda}\cdot e\frac{\partial}{\partial t}\Lambda$$

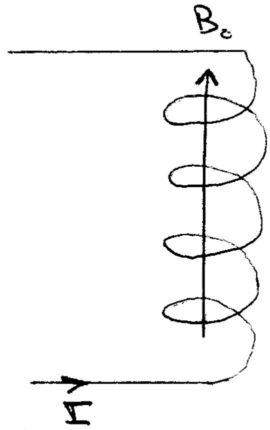
...

$$\leadsto \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - e\vec{A}\right)^2 + e\phi'\right]\psi' = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'.$$

SG ist invariant!

eigentlich sollte Phasenfaktor unwichtig sein ($e^{-\frac{ie}{\hbar}\Lambda}$ solle irrelevant sein)

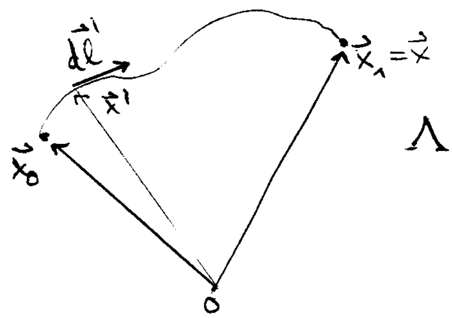
Dies ist beim ABE nicht der Fall




$\vec{B}=0$ , $\nabla\times\vec{A}=0$ , $\vec{A}=-\nabla\Lambda$

$$\boxed{\lambda(x)=\int_{x_0}^{x}dx'\,a(x') \qquad \frac{d\lambda(x)}{dx}=a(x)}$$

$$\boxed{\phi=0=\phi'}$$



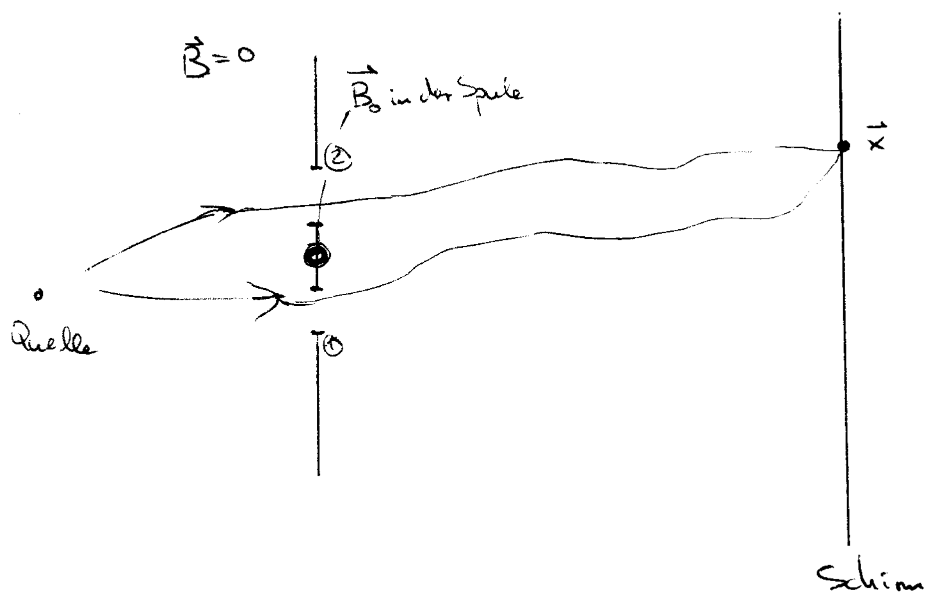

$$\Lambda(\vec{x})=-\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}}d\vec{l}'\cdot\vec{A}(\vec{x})$$

$$\vec{A}\rightarrow\boxed{\vec{A}'=\vec{A}+\nabla\Lambda=0}$$

$$\rightsquigarrow\ \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla\right)^2\psi'=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'$$

$$\psi=\psi' e^{\frac{-ie}{\hbar}\Lambda}=\psi'\exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_{x_0}^{x}d\vec{l}'\cdot A(\vec{x}')\right)$$

AB-Doppelspaltexperiment



• nur Spalt 1 offen:

$$\psi_{1,B} = \psi_{1,0} \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_1 d\vec{l}\cdot\vec{A}(\vec{x})\right)$$

• nur Spalt 2 offen

$$\psi_{2,B} = \psi_{2,0}\cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_2 d\vec{l}\cdot\vec{A}(\vec{x})\right)$$

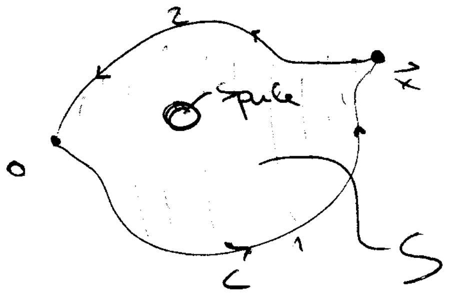
• Beide geöffnet:

$$\psi_B = \psi_{1,0}\exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_1 d\vec{l}\cdot\vec{A}(\vec{x})\right) + \psi_{2,0}\exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_2 d\vec{l}\cdot\vec{A}(\vec{x})\right)$$

relative Phase: $\int_1 d\vec{l}\,\vec{A}(\vec{x}') - \int_2 d\vec{l}'\cdot\vec{A}(\vec{x}') = \oint_C d\vec{l}'\cdot\vec{A}(\vec{x})$

$$\overset{\text{Stokes}}{=} \int_S d\vec{S}'\cdot\underbrace{\nabla\times\vec{A}(\vec{x})}_{\vec{B}}$$

$$= \Phi_B$$




$$\psi_B(\vec{x}) = \left[\psi_{1,0}(\vec{x})\exp\left(\tfrac{ie}{\hbar}\Phi_B\right) + \psi_{2,0}(\vec{x})\right]\exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_2 d\vec{l}'\, A(\vec{x}')\right)$$

# Zeeman - Effekt (normal)

ohne Spin

Wasserstoffatom im konstanten Magnetfeld

$$\Delta\hat{H} = -\frac{e}{2m_e} B \hat{L}_z \quad , \vec{B} = B \cdot \vec{e_z}$$

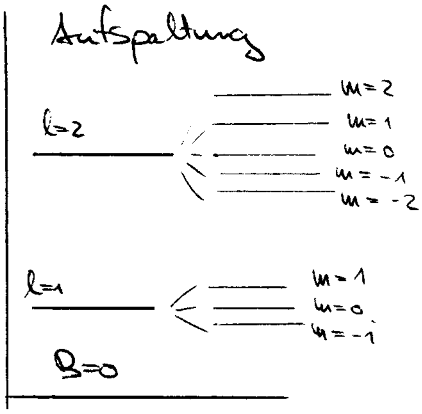
paramagnetischer Term

$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = \hbar m \psi_{nlm}$$

$$\hat{H}\psi_{nlm} = \left( -\frac{\tilde{R}_H}{n^2} - \frac{eB}{2m_e}\hbar m \right) \psi_{nlm}$$

$$\leadsto E_{nlm} = -\frac{\tilde{R}_H}{n^2} + \hbar \omega_L m \quad , \quad \omega_L = \frac{-eB}{2m_e} > 0$$

Lamor - Freq. $\left( \text{vgl. } \omega_c = \frac{|e| B}{m_e} \right)$



# Dirac - Notation

$$\langle \psi_1 , \psi_2 \rangle := \int dx\, \psi_1^*(x)\, \psi_2(x) \qquad \text{Skalarprodukt}$$

komplexer Vektorraum: $\mathcal{H} = \left\{ \underset{\uparrow \atop \text{Vektor}}{\psi} : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; \int dx\, |\psi(x)|^2 < \infty \right\}$

Es gilt die Schwarzsche Ungleichung

<u>Bew.:</u> $$\left\langle \psi_1 - \psi_2 \frac{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle}{\langle \psi_2, \psi_2 \rangle} ,\ \psi_1 - \psi_1 - \psi_2 \frac{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle}{\langle \psi_2, \psi_2 \rangle} \right\rangle \geq 0$$

$$\langle \psi_1, \psi_1 \rangle - 2 \frac{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle^2}{\langle \psi_2, \psi_2 \rangle} + \frac{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle^2}{\langle \psi_2, \psi_2 \rangle} \geq 0$$

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \geq \frac{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle^2}{\langle \psi_2, \psi_2 \rangle} \qquad \blacksquare$$

Dreiecksungleichung: $\| \psi_1 + \psi_2 \| \leq \| \psi_1 \| + \| \psi_2 \|$

$$\| \psi_1 + \psi_2 \|^2 = \langle \psi_1 + \psi_2 , \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_1 + \psi_2 \rangle + \langle \psi_2, \psi_1 + \psi_2 \rangle$$

$$= \|\psi_1\|^2 + 2 \langle \psi_1, \psi_2 \rangle + \|\psi_2\|^2$$

$$\leq \|\psi_1\|^2 + 2 |\langle \psi_1, \psi_2 \rangle| + \|\psi_2\|^2$$

$$\leq \|\psi_1\|^2 + 2 \|\psi_1\| \|\psi_2\| + \|\psi_2\|^2$$

$$= \left( \|\psi_1\| + \|\psi_2\| \right)^2 \qquad \blacksquare$$

$\{u_n \in H\}$ bilden eine Basis des Hilbert-Raums

$\forall \psi \in H$ gilt $\psi = \sum_n \underset{\substack{\uparrow \\ \langle u_n, \psi \rangle}}{c_n} u_n$ (Vollständigkeit)

Explizit: $\psi(x) = \sum_n u_n(x) \int dx' \, u_n^*(x') \psi(x')$

$$\Rightarrow \sum_n u_n(x) \, u_n^*(x') = \delta(x - x')$$

Orthonormalsystem:

$$\langle u_m, u_n \rangle = \delta_{mn}$$

Lineare Operatoren:

$\hat{A}: \psi \rightarrow (\hat{A}\psi)$

$\hat{A}(\alpha \psi_1 + \beta \psi_2) = \alpha \hat{A}\psi_1 + \beta \hat{A}\psi_2$

zu $\hat{A}$ adjungierter Operator

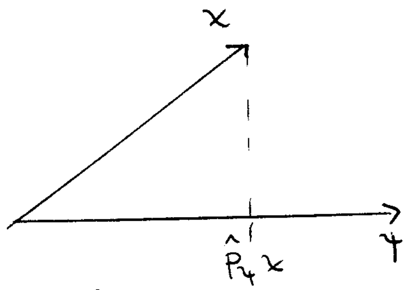
$\langle \psi_1, \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi_1, \psi_2 \rangle$

$\hat{A}$ heißt hermitisch, wenn $\langle \psi_1, \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \hat{A}\psi_1, \psi_2 \rangle$

$\approx$ selbstadjungiert (Unterschied in Bezug auf den Def.-Bereich)

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

Sei $\psi \in H$ , $\|\psi\| = 1$




Projektionsoperator

$$\hat{P}_\psi x = \langle \psi, x \rangle \psi$$

$\hat{P}_\psi$ linear, selbstadjungiert und $\hat{P}_\psi^2 = \hat{P}_\psi$

<u>Bew.:</u> $\hat{P}_\psi^2 x = \hat{P}_\psi (\hat{P}_\psi x) = \hat{P}_\psi \left( \langle \psi, x \rangle \psi \right) = \langle \psi, x \rangle \hat{P}_\psi \psi$

$$= \langle \psi, x \rangle \langle \psi, \psi \rangle \psi = \hat{P}_\psi x \quad \blacksquare$$

<u>Dirac - Notation:</u>

$\psi$: Vektor $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \to |\psi\rangle$ Ket - Vektor

$\begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \\ \vdots \\ c_n^* \end{pmatrix}$ [1] $\to \langle \psi |$ Bra - Vektor

Skalarprodukt zweier Vektoren

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle$$

Matrixelemente : $\langle x | \hat{A} | \psi \rangle := \langle x, \hat{A} \psi \rangle$

In dieser Notation:

$$\hat{P}_\psi |x\rangle = \langle \psi | x \rangle |\psi\rangle$$
$$= |\psi\rangle \langle \psi | x \rangle$$

orthonormal:

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$$

vollständig

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle$$
$$= \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle$$
$$\sum |n\rangle\langle n| = 1$$

---

1) eigtl. Zeilenvektor
$(c_1^*, c_2^*, \ldots c_n^*$

Fourier-Transformation

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \psi(k)\, e^{ikx} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \psi(k)\, u_k(x) \;, \quad u_k \notin H$$

$u_k \to$ uneigentliche Basis

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \langle k|\psi\rangle\, |k\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\, |k\rangle\langle k|\psi\rangle \;, \quad \boxed{\langle k|\psi\rangle = \psi(k)}^{*} \quad \text{Impulsdarstellung}$$

Orthonormal: $\langle k|k'\rangle = 2\pi\,\delta(k-k')$

Vollständigkeit: $\int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle\langle k| = 1$

Inverse Fourier-Transformation

$$\psi(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi(x)\, e^{-ikx}$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |x\rangle\langle x|\psi\rangle \;, \quad \boxed{\langle x|\psi\rangle = \psi(x)}^{**}$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \;, \quad \int dx\, |x\rangle\langle x| = 1$$

$(*) + (**)$:

$$\rightarrow \langle x|k\rangle = e^{ikx} \;, \quad \langle k|x\rangle = \langle x|k\rangle^* = e^{-ikx}$$

$$\int \frac{dk}{2\pi} \langle x|k\rangle\langle k|x'\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} e^{-ikx'} = \delta(x-x') = \langle x|1|x'\rangle$$

$$\sum_n \langle x|n\rangle\langle n|x'\rangle = \langle x|1|x'\rangle$$

$$\sum_n u_n(x)\, u_n^*(x') = \delta(x-x')$$

Beliebiger Operator

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|$$

$$= \sum_{n,m} \langle n|\hat{A}|m\rangle \; |n\rangle\langle m|$$

$$= \sum_{n,m} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Matrix}}}{A_{nm}} \; |n\rangle\langle m|$$

$$\langle x'|\hat{x}\;|x\rangle = x\,\langle x'|x\rangle = x\;\delta(x-x')$$

$$\langle k'|\hat{p}|k\rangle = \hbar k\,\langle k'|k\rangle = \hbar k\;2\pi\delta(k-k')$$

$$\langle x'\;|\hat{p}|x\rangle = \int \frac{dk}{2\pi}\langle x'|\hat{p}\;|k\rangle\langle k\;|x\rangle$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi}\hbar k\;\langle x'|k\rangle\langle k\;|x\rangle$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi}\hbar k\; e^{ikx'}\;e^{-ikx}$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\int\frac{dk}{2\pi}\langle x'|k\rangle\langle k|x\rangle$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|x\rangle$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x')$$

---

$$\langle n|\,\hat{a} \overset{?}{=} \ldots$$

$$= \sum_m \langle n|\hat{a}|m\rangle\langle m| \quad = \quad \hat{a}\,|m\rangle \quad = \sum_m \sqrt{m}\,\underbrace{\langle n|m-1\rangle}_{\delta_{n,m-1}}\langle m|$$

$$= \sqrt{n+1}\;\langle n+1|$$

16.06.05

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} \psi(k) \, e^{ikx}$$ Fouriertransformierte

$$\langle x | \psi \rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \langle k | \psi \rangle \langle x | k \rangle$$ Dirac-Schreibweise

$|\psi_2\rangle = \hat{B} |\psi_1\rangle$ , was ist $\langle \psi_2 |$ ?

$$\langle \psi_2 | = \langle \hat{B} \psi_1 | = \sum_n \langle \hat{B} \psi_1 | n \rangle \langle n |$$

$$\langle \psi_1 | \hat{B}^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \hat{B} \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{B} | \psi_1 \rangle^*$$

$$\rightsquigarrow \langle \psi_2 | = \sum_n \langle \psi_1 | \hat{B}^\dagger | n \rangle \langle n | = \langle \psi_1 | \hat{B}^\dagger$$

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

<u>Basiswechsel</u>

1. Basis : $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$

2. Basis : $A'_{m'n'} = \langle m' | \hat{A} | n' \rangle$

$$= \sum_{m,n} \langle m' \underbrace{| m \rangle \langle m |}_{1} \overbrace{\hat{A}}^{A_{mn}} \underbrace{| n \rangle \langle n |}_{1} n' \rangle$$

mit $\langle n | n' \rangle =: S_{nn'}$ , $\langle m' | m \rangle =: S^*_{mm'}$

$$= \sum_{m,n} S^*_{mm'} A_{mn} S_{nn'}$$

$$\boxed{A' = S^\dagger A S}$$

$S$ ist unitär : $S^+ S = 1$

Bew.: $(S^+S)_{m'n'} = \sum_{m,n} S^*_{mm'} \delta_{mn} S_{nn'} = \sum_n S^*_{nm'} S_{nn'}$

$$= \sum_n \langle m'|n\rangle \langle n|n'\rangle = \langle m'|n'\rangle = \delta_{m'n'}$$

## Unschärferelation

Es gibt eine Unschärferelation zwischen zwei Operatoren, wenn sie nicht vertauschbar sind

$$\delta\hat{A} := \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$$

$$\delta\hat{B} := \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$$

; $\hat{A}, \hat{B}$ hermitische Operatoren

$$\langle (\delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\delta\hat{B})^2 \rangle \underset{\text{Schwarz}}{\geq} |\langle \delta\hat{A}\, \delta\hat{B} \rangle|^2$$

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

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

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

$$= \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$\delta\hat{A}\,\delta\hat{B} = \frac{1}{2} \underbrace{\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}}_{\substack{\text{Antikommutator} \\ \delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A}}} + \frac{1}{2} [\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]$$

$$[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]^+ = -[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] \quad \text{, wegen } \left( (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ \right)$$

→ antihermitisch, imag. Eigenw.!

$$\{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}^+ = \{\delta\hat{A}, \delta\hat{B}\}$$ → hermitisch, reelle Eigenwerte!

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

(Betrag einer komplexen Zahl $[\,]+\{\,\}$)

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

$$\langle(\delta\hat{A})^2\rangle\langle(\delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|^2 \quad ; \Delta A := \sqrt{\langle(\delta A)\rangle}$$

$$\rightarrow \boxed{\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|}$$

Wahrscheinlichkeitsdeutung der Entwicklungskoeffizienten

Observable $\hat{=}$ selbstadjungierter Operator

$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ die Messung ist der Eigenwert des Operators, wen $|n\rangle$ ein Eigenvektor ist

→ Beliebiger Zustand muss in Eigenfunktionen entwickelt werden

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

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

$$= \sum_{m,n}\langle\psi|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$= \sum_{m,n}\langle\psi|m\rangle a_n \overbrace{\langle m|n\rangle}^{\delta_{nm}}\langle n|\psi\rangle$$

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

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

$P_n$, der Koeffizient des Eigenwerts $a_n$, gibt die Wahrscheinlichkeit an, bei der Messung den Eigenwert $a_n$ zu messen.

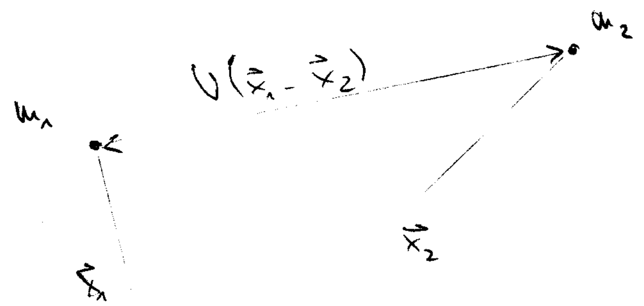
Überprüfung der Sinnhaftigkeit:

$$\sum_n P_n \stackrel{?}{=} 1$$

Beweis:

$$\langle 1 \rangle = 1 = \sum_n |c_n|^2 = \sum_n P_n$$

<u>Zweikörperprobleme</u>




$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \qquad \text{klassisch}$$

Relativ- und Schwerpunktskoordinaten

$$\vec{x}_r = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad , \quad \vec{x}_S = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1 + m_2} \quad , \quad \vec{p}_r = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1 + m_2}$$

$$= \mu (v_1 - v_2)$$

$$\vec{p}_1 = m_1 \vec{v}_1 \quad , \quad \vec{p}_2 = m_2 \vec{v}_2$$

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

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{\vec{p}_r^{\,2}}{2\mu} + \frac{\vec{p}_s^{\,2}}{2M}$$

quantenmechanisch:

$\vec{p}_{1,2} \longrightarrow \hat{\vec{p}}_{1,2} = -i\hbar \nabla_{1,2}$ , $[x_i^\alpha, p_j^\beta] = i\hbar \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$ ; $\alpha, \beta = 1,2$ gibt das Teilchen an

$$[x_{r,i}, \hat{p}_{r,j}] = i\hbar \delta_{ij}$$ Beweis mühselig

$$[x_{s,i}, \hat{p}_{s,j}] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$\rightarrow \boxed{\hat{\vec{p}}_r = -i\hbar \nabla_r \qquad \hat{\vec{p}}_s = -i\hbar \nabla_s}$$

Schrödinger-Gleichung

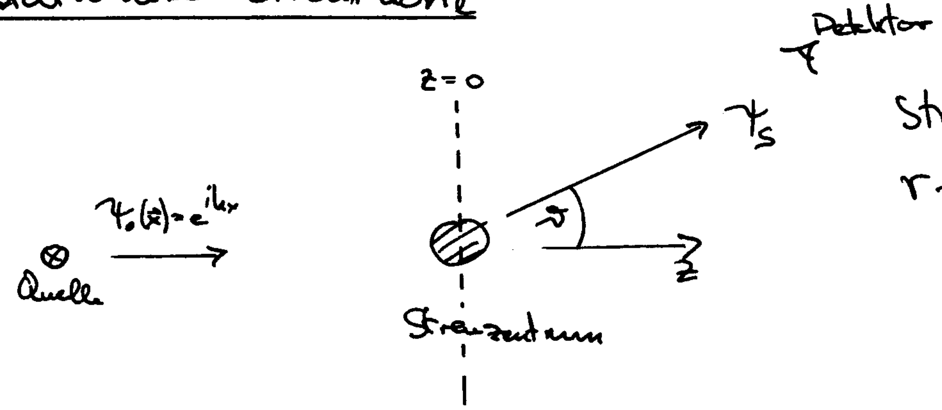
$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}_r^{\,2}}{2\mu} + \frac{\hat{\vec{p}}_s^{\,2}}{2M} + V(x)\right] \Psi(\vec{x}_r, \vec{x}_s) = E_{tot} \Psi(\vec{x}_r, \vec{x}_s)$$

Separationsansatz: $\Psi(\vec{x}_r, \vec{x}_s) = \underbrace{e^{i\vec{k}_s \vec{x}_s}}_{\text{kein Potential für den Schwerpunkt} \rightsquigarrow \text{freies Teilchen}} \Psi(\vec{x}_r)$

$$\rightsquigarrow -\left[\frac{\hat{\vec{p}}_r^{\,2}}{2\mu} + V(\vec{x}_r)\right] \Psi(\vec{x}_r) \stackrel{!}{=} E \Psi(\vec{x}_r)$$

$$\text{mit } E = E_{tot} - \frac{\hbar^2 \vec{k}_s^{\,2}}{2M}$$

# Stationäre Streutheorie




Streuwelle $\Psi_S$
r – Abstand Detektor zu Streuzentrum

einfallende Welle: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi_0(\vec{x}) = E\,\Psi_0(\vec{x})$

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} > 0$$

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\varrho_0 = |\Psi_0|^2 = 1$ (normiert)

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $\vec{j}_0 = \hbar\,\vec{k}/m$

Zustand des Systems: $\Psi(\vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}) + \Psi_S(\vec{x})$

$\hat{H}\Psi = E\Psi$, $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})$ $\qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$

(Energieerhaltung: Hamilton auf Gesamtwelle ergibt das gleiche)

Lösung der SG mit Hilfe der Greenschen Funktion:

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

Lsg. der DGL kann dann geschrieben werden als

$$\Psi(\vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}) + \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, G^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}')\, V(\vec{x}')\, \Psi(\vec{x}')$$

(Integralgleichung)

$\Psi_0(\vec{x})$ ist die Lsg. der homogenen DGL.

Beweis: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E\right)\psi(\vec{x}) \qquad | \ \psi(\vec{x})$ einsetzen

$$= \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)}_{=0}\psi_0(\vec{x})$$

$$- \int d^3x' \underbrace{(\nabla_x^2 + k^2)\, G^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}')}_{=\delta(\vec{x}-\vec{x}')} V(\vec{x})\,\psi(\vec{x})$$

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

Aus der Edynamik:

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

$G^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}')$ ist eine von $\vec{x}$ ausgehende Kugelwelle

$$\vec{j} = j_r\,\vec{e}_r \ , \quad j_r = \frac{\hbar k}{m r^2}$$

andere mögliche Lsg.: $G^{(-)}(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ikr}}{r}$

nach $\vec{x}$ einlaufende Kugelwelle

Detektor sei weit entfernt vom Streuzentrum: $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$

Taylorentwicklung $\quad k|\vec{x}-\vec{x}'| = k\sqrt{r^2 - 2\vec{x}\vec{x}' + x'^2} \qquad ; r = |\vec{x}|$

$$= kr - k\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r}$$

$$= kr - \vec{k}'\vec{x}' + \ldots \quad ; \quad \vec{k}' = k\frac{\vec{x}}{r} = k\,\vec{e}_r$$

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

$$= e^{i\vec{k}\vec{x}} + \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' \, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}')\,\psi(\vec{x}')$$

$$= e^{i\vec{k}\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \cancel{\varphi}) \qquad (r \to \infty)$$

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

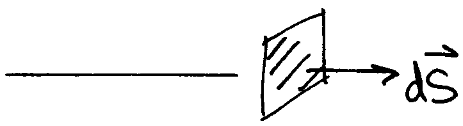
Streuamplitude ist für eine bestimmte $V(x)$ zu bestimmen

Stromdichte der auslaufenden Kugelwelle

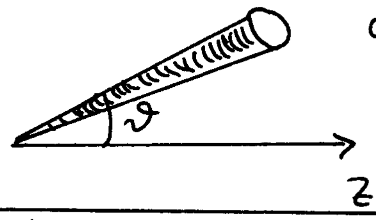
$$j_{s,r} = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left( \psi_s^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_s \right)$$

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

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




$dN = j \cdot d\vec{S} \, dt$




$d\vec{S} = r^2 d\Omega \, \vec{e}_r$

$d\Omega = d\varphi \, d\cos\vartheta$

$$\boxed{\frac{1}{j_{ein}} \frac{dN}{d\Omega \, dt} = \frac{d\sigma}{d\Omega}}$$

differenzieller Wirkungsquerschnitt (Streuquerschnitt)

$$dN = \vec{j}_s \vec{e}_r \, r^2 \, d\Omega \, dt$$

$$\rightsquigarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{s,r}}{j_{ein}} = |f(\vartheta)|^2$$

---

$$\vec{j} = \frac{-\hbar}{2m} i \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right)$$

$$z \quad - \quad z^* \quad \to \mathrm{Im}(..)$$

Totaler Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \, |f(\vartheta)|^2$$

Zerlegung in Teilwellen:

<u>Partialwellen - Entwicklung</u>

Generell: $\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$\uparrow$ Separationsansatz

$\hookrightarrow e^{im\varphi}$

keine $\varphi$ - Winkelabhängigkeit: $\hat{L}_z \psi(r, \vartheta) = 0$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

In diesen Fall daher nicht entwicklung in Kugelflächenfunktionen, sondern in Legendrepolynome

$$Y(\vartheta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\vartheta)$$

$$\rightsquigarrow \psi(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\vartheta)$$

a) Zerlegung der einlaufenden Welle

$$\psi_0(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} = e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\hat{u}_l(r)}{r} P_l(\cos\vartheta)$$

Koeffizienten bestimmen

$x := \cos\vartheta$

$$\int_{-1}^{1} dx\, e^{ikrx} P_{l'}(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l^0(r)}{r} \underbrace{\int_{-1}^{1} dx\, P_{l'}(x)\, P_l(x)}_{= \frac{2}{2l+1}\delta_{l'l}}$$

$$= \frac{2}{2l'+1} \frac{u_{l'}^0(r)}{r}$$

Detektor weit weg vom Streuzentrum!

$$\int_{-1}^{1} dx\, e^{ikrx} P_l(x) \overset{\text{p.I.}}{=} \left[\frac{1}{ikr} e^{ikrx} P_l(x)\right]_{-1}^{1} - \frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1} dx\, e^{ikrx} P_l'(x)$$

$$= \frac{1}{ikr}\left(e^{ikr}\cdot 1 - e^{-ikr} P_l(-1)\right) + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

$$P_l(1) = 1$$

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x)$$

$$= \frac{1}{ikr}\left(e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right) + \ldots$$

$$= \frac{1}{ikr} i^l \left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}\right] + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

$$\frac{2}{2l+1} \frac{u_l^0(r)}{r} \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{ikr} i^l \left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}\right]$$

$$\boxed{e^{ikz} \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{2ikr}\left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}\right] P_l(\cos\vartheta)}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{kr} \sin(kr - l\pi/2)\, P_l(\cos\vartheta)$$

b) Zerlegung der Gesamtwelle

$$\psi(\vec{x}) = e^{ikz} + \psi_s(\vec{x}) \xrightarrow{r\to\infty} \propto \frac{1}{r} e^{ikr} \text{ (auslaufend)}$$

$$\longrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{2ikr} \left[ S_l * e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right]$$

$S_l = 1 +$ Beitrag Streuwelle

$$|S_l| = 1$$

$$j_r = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow \mathrm{Im}\left(S_l^* e^{-ikr} \frac{\partial}{\partial r} S_l e^{ikr}\right) + \mathrm{Im}\left(e^{ikr} \frac{\partial}{\partial r} e^{-ikr}\right) \stackrel{!}{=} 0$$

(Was rausfließt muss auch reingeflossen sein)

$$\psi(x) \longrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{kr} e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)\, P_l(\cos\vartheta)$$

Phase $e^{i\delta_l}$ ist zu bestimmen

23.06.05

$$S_l^* S_l = 1 \quad , \quad S_l = e^{2i\delta_l} = 1 + 2i\delta_l + \dots$$

$$\psi(\vec{x}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{kr} e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)\, P_l(\cos\vartheta)$$

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

explizite Form von $f(\vartheta)$ in der Zerlegung?

$$e^{i\delta_\ell}\sin\left(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell\right) - \sin\left(kr - \ell\pi/2\right)$$

$$= \frac{1}{2i}\left[e^{i(kr-\ell\pi/2)}\, e^{2i\delta_\ell} - \cancel{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}} - e^{i(\ldots)} + \cancel{e^{-i(\ldots)}}\right]$$

$$= e^{i\delta_\ell}\, e^{i(kr-\ell\pi/2)}\, \frac{1}{2i}\left(e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}\right)$$

$$= e^{i\delta_\ell}\, e^{i(kr-\ell\pi/2)} \sin\delta_\ell \quad , \quad e^{-i\ell\pi/2} = (-i)^\ell$$

$$\Psi(x) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\frac{1}{kr}e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\, e^{ikr}\, P_\ell(\cos\vartheta)$$

$$\overset{!}{=} \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta)$$

$$\rightsquigarrow f(\vartheta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\, e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\, P_\ell(\cos\vartheta)$$

$$\sigma \underset{x := \cos\vartheta}{=} \int_{-1}^{+1} dx\, |f(x)|^2 = \boxed{\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell}$$

mit $\displaystyle\int_{-1}^{+1} dx\; P_{\ell'}(x)\, P_\ell(x) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,\ell'}$

optisches Theorem : $\displaystyle \sigma = \frac{4\pi}{k}\, \mathrm{Im}\, f(\vartheta)$

## Beispiel: Kugel als Streuzentrum


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

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r)\, P_l(\cos\vartheta)$$

vgl. Potentialtopf

$$R_l(r) = a_l\, j_l(kr) + b_l\, n_l(kr)$$

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin\rho}{\rho} \quad , \text{ sphärische Bessel-Funktionen}$$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos\rho}{\rho} \quad , \quad \text{" Neumann- "}$$

$$\left.\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho\to\infty} \frac{1}{\rho}\sin(\rho - l\pi/2) \\ n_l(\rho) &\longrightarrow -\frac{1}{\rho}\cos(\rho - l\pi/2) \end{aligned}\right\} \rightsquigarrow \text{sphärische Hankelfunktionen}$$

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i\, n_l(\rho) \longrightarrow \frac{1}{i\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)}$$

entspricht asymptotischem Verhalt. einer auslaufenden Kugelwelle

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l \left[\underset{\uparrow \atop \frac{1}{kr}\sin(kr - l\pi/2)}{j_l(kr)} + c_l \underset{\uparrow \atop \text{auslaufende Kugelwelle}}{h_l(kr)}\right] P_l(\cos\vartheta)$$

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

Randbedingung: $\psi(\vec{x}) = 0$ für $r = a$

$$\rightarrow c_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{h_\ell(ka)}$$

$$f(\vartheta) = \frac{1}{ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \cancel{i^\ell} c_\ell \cancel{e^{-i\ell\pi/2}} P_\ell(\cos\vartheta)$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{1}{k} \sum_\ell (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell P_\ell(\cos\vartheta)$$

$$c_\ell = \frac{1}{2}\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right)$$

$$\boxed{\tan\delta_\ell = \frac{1}{i} \frac{e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}}{e^{i\delta_\ell} + e^{-i\delta_\ell}}} = -i \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{e^{2i\delta_\ell} + 1} = -i \frac{2c_\ell}{2c_\ell + 2}$$

$$= \frac{-i}{1 + 1/c_\ell}$$

$$= \frac{-i}{1 - \frac{j_\ell + i h_\ell}{j_\ell}} = \boxed{\frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}}$$

$$\rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\sin^2\delta_\ell}{\sin^2\delta_\ell + \cos^2\delta_\ell}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{j_\ell^2(ka)}{j_\ell^2(ka) + n_\ell^2(ka)}$$

$$\xrightarrow[\ell=0]{ka \ll 1} \frac{4\pi}{k^2} \cdot 1 \cdot \frac{1}{1/(k^2a^2)} = 4\pi a^2$$ für niedrige Energie

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \longrightarrow 1$$

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho} \longrightarrow -\frac{1}{\rho}$$

$\ell = 0$: $\delta_0 = -ka < 0$ (abstoßendes Potential)

$$\delta_\ell \sim k^{2\ell+1}$$

$\sin^2 \delta_\ell$ maximal: $\delta_\ell = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad , \quad n \in \mathbb{Z}$

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_\ell (2\ell+1) \frac{1}{\cot \delta_\ell - i} P_\ell(\cos \vartheta)$$

$$\hookrightarrow \frac{1}{-i}, \quad \delta_\ell = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

$$\cot \delta_\ell(E) \simeq -\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)$$

$$e^{i\delta_\ell(E)} \sin \delta_\ell(E) \simeq \frac{-\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2}$$

Beitrag zu $\sigma$:

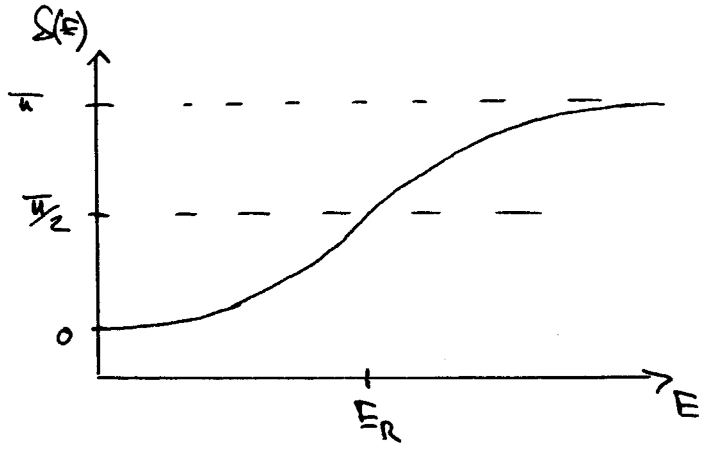
$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E-E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

– Breit-Wigner-Funktion

---

$$\tan \delta_\ell(E) \simeq \frac{-\Gamma/2}{E - E_R} \quad , \quad \delta_\ell(E) = \arctan\left(\frac{-\Gamma/2}{E - E_R}\right)$$




$$\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$$

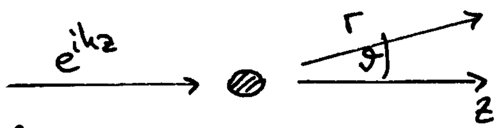
$$\xrightarrow{ka \gg 1} -\frac{\sin(ka - \ell\pi/2)}{\cos(ka - \ell\pi/2)}$$

$$\delta_\ell = -ka + \ell\pi/2$$

28.06.05

## Zeitunabhängige Störungstheorie

Streutheorie:




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

$\hookrightarrow G_k(\vec x) = \dfrac{-e^{ikr}}{4\pi r}\ ;\ E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\psi(\vec x)$ kann im allgemeinen nicht genau berechnet werden

$$\boxed{|\psi\rangle \equiv |\psi_0\rangle + \frac{2m}{\hbar} G_k V |\psi\rangle}$$

$$\underbrace{\langle \vec x|\psi\rangle}_{\psi(\vec x)} = \underbrace{\langle \vec x|\psi_0\rangle}_{\psi_0(\vec x)} + \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, d^3x''\, \underbrace{\langle \vec x|G|\vec x'\rangle}_{G(\vec x,\vec x') = G(\vec x - \vec x')} \underbrace{\langle \vec x'|V|\vec x''\rangle}_{V(\vec x'')\,\delta(\vec x' - \vec x'')} \langle \vec x''|\psi\rangle$$

$$\left(+1 - \frac{2m}{\hbar^2} G V\right)|\psi\rangle \quad \rightsquigarrow \quad |\psi\rangle = \left(1 - \frac{2m}{\hbar^2} G V\right)^{-1} |\psi_0\rangle$$

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

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

$$+ \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 G V G V |\psi_0\rangle + \ldots$$

$\longmapsto 0$

Bornsche Näherung

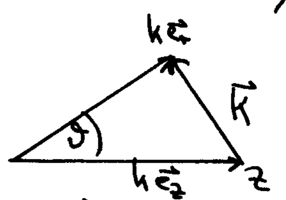
**Explizit:** $\psi_0(\vec x) - \dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\displaystyle\int d^3x'\, V(\vec x)\, \frac{e^{ik|\vec x - \vec x'|}}{|\vec x - \vec x'|}\, e^{ikz'} = \psi(\vec x)$

$$|\vec x - \vec x'| = \sqrt{r^2 - 2\vec x\cdot\vec x' + r'^2} = r - \frac{\vec x\cdot\vec x'}{r} = r - \vec x'\cdot\vec e_r$$

$$\psi(\vec x) \xrightarrow{r\to\infty} e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{r}\,\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, V(\vec x')\, e^{ik(\vec e_z - \vec e_r)\cdot\vec x'}$$

$$\overset{!}{=} e^{ikz} + f(\vartheta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \qquad\qquad z' = \vec x'\cdot\vec e_z$$

$$\rightsquigarrow f(\vartheta,\varphi) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, V(\vec x')\, e^{-i\vec K\cdot\vec x'} \quad , \quad \vec K = k(\vec e_r - \vec e_z)$$




$$K = |\vec K| = k\sqrt{1+1-2\cos\vartheta} = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}$$

$$V(\vec x) = V(r)$$

$$\rightsquigarrow f_B(\vartheta) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\cdot 2\pi \underbrace{\int_{-1}^{1} dt \int_0^\infty dr'\, r'^2\, V(r')\, e^{-iKr't}}_{\frac{2}{Kr'}\sin(Kr')}$$

$t = \cos\vartheta'$

$$\boxed{f_B(\vartheta) = \frac{-2m}{\hbar^2}\,\frac{1}{K}\int_0^\infty dr'\, r'\, V(r')\sin(Kr')}$$

$\in \mathbb{R}$ verletzt also das optische Theorem

## Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

$\hat H = \hat H_0 + \lambda \hat H \quad , \lambda\in\mathbb{R}$

Störung

Spektrum bekannt: $\hat H_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$

Gesucht: Eigenwerte und -Zustände $\hat H|n\rangle = E_n|n\rangle$

Annahme: $E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$(\hat H_0 + \lambda \hat H_1)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots)$$

$$= (E_n^0 + \lambda E_n + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots)$$

Koeffizientenvergleich für $\lambda^0, \lambda^1, \lambda^2, \ldots$

$\lambda^0$: $\hat{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$

$\lambda^1$: $\hat{H}_0 |n^1\rangle + \hat{H}_1 |n^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 |n^0\rangle$

$\lambda^2$: $\hat{H}_0 |n^2\rangle + \hat{H}_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle$

wählen: $\langle n^0 | n\rangle = 1$

$\rightsquigarrow \langle n^0|n^0\rangle + \lambda \langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2 \langle n^0|n^2\rangle + \ldots = 1$

$\rightsquigarrow \boxed{\langle n^0|n^k\rangle = 0}$ für $k \geq 1$

$$\underbrace{\langle n_0|\hat{H}_0|n^1\rangle}_{0} + \langle n_0|\hat{H}_1|n_0\rangle = E_n^0 \underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{0} + E_n^1 \underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{1}$$

$\rightsquigarrow \boxed{E_n^1 = \langle n^0|\hat{H}_1|n^0\rangle}$

$|n^0\rangle$ : vollständiges Orthonormalsystem

$|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m |m^0\rangle$ , $c_m = \langle m^0|n^1\rangle$

$$\langle m^0|\hat{H}_0|n^1\rangle + \langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle = E_n^0 \langle m^0|n^1\rangle + E_n^1 \underbrace{\langle m^0|n^0\rangle}_{=0}$$

$$E_m^0 c_m + \langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle = E_n^0 c_m$$

$\rightsquigarrow \boxed{c_m = \frac{\langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}}$ $\qquad |n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle$

$$\underbrace{\langle n^0|\hat{H}_0|n^2\rangle}_{0} + \langle n^0|\hat{H}_1|n^1\rangle = E_n^0 \underbrace{\langle n^0|n^2\rangle}_{0} + E_n^1 \underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{0} + E_n^2 \underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{1}$$

$\rightsquigarrow$ Energien in 2. Ordnung

$$E_n^2 = \langle n^0|\hat{H}_1|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \langle n^0|\hat{H}_1|m^0\rangle \frac{\langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m^0|\hat{H}_1|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}}$$

## Entartungen

$E_n^0$ ist entartet

$$\hat{H}_0 \, |n_\alpha^0\rangle \doteq E_n^0 \, |n_\alpha^0\rangle \quad , \quad \alpha = 1, 2, \dots k$$

(mehrere Eigenvektoren zu einem Eigenwert)

$$\langle n_\alpha^0 | n_\beta^0 \rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

$n_\alpha^0$ bilden eine Orthonormalbasis im k-dimensionalen Eigenraum

$$\lambda^0 : \hat{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 \, |n^0\rangle \quad , \quad |n^0\rangle = \sum_\alpha c_\alpha \, |n_\alpha^0\rangle$$

$$\lambda^1 : \langle n_\beta^0 | \hat{H}_0 | n^1\rangle + \langle n_\beta^0 | \hat{H}_1 | n^0\rangle = E_n^0 \underbrace{\langle n_\beta^0 | n^1 \rangle}_{0} + E_n^1 \underbrace{\langle n_\beta^0 | n^0\rangle}_{c_\beta}$$

$$\sum_\alpha c_\alpha \underbrace{\langle n_\beta^0 | \hat{H}_1 | n_\alpha^0 \rangle}_{H_{1,\beta\alpha}} = E_n^1 \, c_\beta$$

$$\rightsquigarrow \sum_\alpha H_{1,\beta\alpha} \, c_\alpha = E_n^1 \, c_\beta$$

$$\det(H_1 - E_n^1) \overset{!}{=} 0 \qquad \Big| \text{ lin. Alg.}$$

$$\hookrightarrow E_{n,\gamma}^1 \quad ; \gamma = 1, 2, \dots k$$

30.6.05

# WKB – Methode

WKB: Wentzel – Kramers – Brillouin

zeitunabhängige SG:

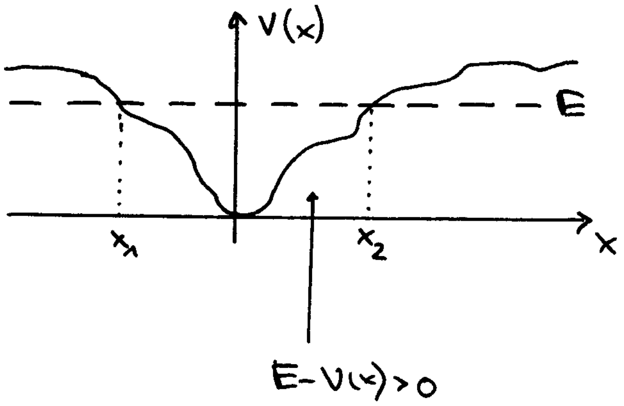
$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) = E\,\psi(\vec{x})$$

Das Potential sei konstant. $V(\vec{x}) = \text{const.}$

$\to$ Lsg.: $\psi(x) = Ae^{\pm ikx}$ (ebene Welle)

Impuls, $p = \hbar k = \sqrt{2m\,(E-V)}$

Nun sei Potential von x abhängig




$x_1, x_2$: Umkehrpunkte $E = V(x)$

zwischen $x_1$ und $x_2$ ist die Lsg. eine harmonische Schw., außerhalb exp. Abfall

definiere $p(x) := \sqrt{2m\,(E-V(x))} = \hbar k(x)$

$k \to i\varkappa$ für Außenbereich $E - V(x) < 0$

$$\to \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\,\psi(x) = 0}$$

Ansatz: $\psi(x) = A(x)\,e^{iS(x)/\hbar}$

Real- und Imaginär-Teil:

$$\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 = p^2 + \cancel{\hbar^2 \frac{1}{A}\frac{d^2A}{dx^2}}^{\,0} \quad (1)$$

$\lim_{\hbar \to 0}$ : quasiklassische Näherung

kann benutzt werden, wenn

$$\hbar^2 \gg \frac{1}{A}\frac{d^2A}{dx^2}$$

$$\frac{d^2S}{dx^2} A + 2\frac{dS}{dx}\frac{dA}{dx} = 0 \quad (2)$$

(1) : $S(x) = \pm \int^x dx'\, p(x')$ vgl. klassisch Wirkung

(2) : $\frac{1}{A}\frac{d}{dx}\left(\frac{dS}{dx} A^2\right) = 0 \rightsquigarrow p(x) A^2(x) = c^2$

$\rightsquigarrow A(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}}$

$$\boxed{\psi_{qk}(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}}\, e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int^x dx' p(x')}}$$

$|\psi(x)|^2 dx$ : Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Volumenelement $dx$ um $x$ zu finden

Bereiche unmittelbar links und rechts der Wendepunkte können durch die WKB-Methode nicht beschrieben werden, da dort $p(x) = 0 \rightsquigarrow \psi_{qk}$ divergiert.

in diesem Bereich: (z.B. an der Stelle $x_2$)

$$V(x) = \underset{E}{V(x_2)} + V'(x_2)(x - x_2) + O((x-x_2)^2)$$

kann getrennt gelößt werden.

$$\rightsquigarrow V(x) - E \simeq V'(x_2)\, x - x_2$$

$\rightsquigarrow$ Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V'(x)(x - x_2)\right]\psi(x) = 0 \quad \text{für Bereich um } x_2$$

$$u := \left[\frac{2m}{\hbar^2} V'(x)\right]^{1/3}(x - x_2)$$

$\rightsquigarrow \left(\frac{d^2}{du^2} - u\right) \Psi = 0$ , Airysche Differentialgleichung

Lösung: Airysche Funktion $Ai(u) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i(ut + \frac{1}{3}t^3)}$

Verträglichkeit der Lösung in den Randbereichen mit der WKB-Lösung im inneren?

$$\left(\frac{d^2}{du^2} - u\right) Ai(u) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt \left(-t^2 - u\right) e^{i(ut + \frac{1}{3}t^3)}$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt \, \frac{d}{dt} e^{i(ut + \frac{1}{3}t^3)} \longrightarrow 0$$

$\rightarrow$ Airische Funktion ist also in der Tat eine Lösung

<u>Sattelpunkt-Näherung</u>

$$I = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \, f(x) \, e^{ig(x)}$$

angen. $g'(x)$ hat ~~1~~ Nullstelle und $f(x)$ variiert schwach

$$g(x) = g(x_0) + \underbrace{\left.\frac{dg}{dx}\right|_{x_0}}_{= 0} (x - x_0) + \frac{1}{2} g''(x_0)(x - x_0)^2 + \ldots$$

$$I \simeq f(x_0) \, e^{ig(x_0)} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{\frac{i}{2} g''(x_0)(x - x_0)^2}$$

Fresnel-Integral:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{i\frac{x^2}{2a}} = \sqrt{|a|} \, \underline{\underline{e^{i\frac{\pi}{4}\,\mathrm{sgn}(a)}}}$$ extra Phase

$$I = \sum_{x_0} f(x_0) \sqrt{\frac{2\pi}{|g''(x_0)|}} \, e^{ig(x_0) \pm i\pi/4}$$ ; + für $g''(x_0) > 0$ , − für $g''(x_0) < 0$

└ für mehrere Nullstellen

extra Phase wird auch in der WKB auftauchen

Für die Airy-Funktion:

$$Ai(u) \sim \begin{cases} \dfrac{1}{2\sqrt{\pi}} \dfrac{1}{(u)^{1/4}}\, e^{-\frac{2}{3} u^{3/2}} & u \gg 0 \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \dfrac{1}{(-u)^{1/4}} \cos\left(-\frac{2}{3}(-u)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & u \ll 0 \quad (x - x_2 < 0) \end{cases}$$

$$-\frac{2}{3}(-u)^{3/2} = -\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V'(x_2)}\,(x_2 - x)^{3/2} \quad , \; x_2 - x > 0$$

$$= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV'(x_2)} \int_{x_2}^{x} dx' \,(x_2 - x)^{1/2}$$

$$= \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} dx' \sqrt{2m\,(E - V(x'))}$$

$V(x) \simeq V(x_2) + V'(x_2)(x - x_2)$

$\rightsquigarrow E - V(x) \simeq V'(x_2)(x - x_2)$

~~$Ai(u) \sim$~~

$$= \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} dx'\, p(x') \quad , \; x_2 > x$$

$$= -\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} dx'\, p(x')$$

$$(-u)^{1/4} \sim (x_2 - x)^{1/4} \sim p(x)^{1/2}$$

$$Ai(u) \simeq \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} dx'\, p(x') - \frac{\pi}{4}\right] \qquad u < 0$$

$\cos(-z) = \cos(+z)$

$$A_i(u) \simeq \frac{c'}{\sqrt{\hbar\varkappa(x)}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} dx'\,\hbar\varkappa(x')}$$

$k \to i\varkappa \;, \; p = \hbar k \to i\hbar\varkappa$

$\Rightarrow$ beide Lösungen ergänzen sich

$$x \le x_2 : \quad \psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} dx'\, p(x') - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$= \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} dx'\, p(x') - \frac{\pi}{4} - \underbrace{\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx'\, p(x') - \frac{\pi}{2}\right)}_{\substack{\gamma = 0 \bmod \pi \\ \text{für Konsistenz}}}\right]$$

$x \geq x_1 : \psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} dx'\, p(x') - \frac{\pi}{4}\right]$

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx'\, p(x') = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \qquad ; n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung für die Energieeigenwerte

5.7.05

$\gamma = 0 \mod \pi \quad \rightsquigarrow \quad \cancel{\frac{1}{2\pi}\frac{1}{\hbar}\oint dx'\, p(x') = n + \frac{1}{2}}$ } ?

$n$ in der Quantisierungsbedingung : Zahl der Knoten

im $\lim_{n\to\infty}$ : klassischer Fall

## Zeitabhängige Phänomene

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \hat{H}\psi(\vec{x},t)$$

Dirac-Notation:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle = \hat{H}\,|\psi,t\rangle$$

(Ortswellenfunktion $\psi(\vec{x},t) = \langle\vec{x}\,|\,\psi,t\rangle = \psi(\vec{x},t)$)

$\hat{H}$ sei zeitunabhängig

$$|\psi,t\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|\psi,0\rangle = \hat{u}(t)\,|\psi,0\rangle$$

$\hat{u}(t)$ : Zeitentwicklungsoperator

Schrödinger-Bild:

- Zustände hängen von der Zeit ab
- Operatoren (abgesehen von expliziter Zeitabhängigkeit) sind zeitunabhängig

$$\hat{u}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = 1 - \frac{i}{\hbar} t \hat{H} - \frac{1}{2}\frac{t^2}{\hbar^2}\hat{H}^2 + \ldots$$

$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ ; $|n\rangle$ ist vollständiges Orthonormalsystem

Vollständigkeitsrelation $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$

$$\hat{H} = \hat{H}\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_n E_n |n\rangle\langle n|$$

$$f(\hat{H}) = \sum_n f(E_n)\,|n\rangle\langle n|$$

$$\rightsquigarrow \hat{u}(t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|n\rangle\langle n| \qquad (*)$$

$$|\psi, 0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$|\psi, t\rangle = \hat{u}(t)\,|\psi, 0\rangle = \sum_n c_n \hat{u}(t)\,|n\rangle \qquad | \leftarrow (*)$$

$$= \hat{u}(t)\,|\psi, 0\rangle$$

$$= \sum_n c_n \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}\,|m\rangle \underbrace{\langle m|n\rangle}_{=\delta_{mn}}$$

$$= \sum_n \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,c_n}_{:= c_n(t)}\,|n\rangle$$

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle$$

Bemerkung:

$\hat{u}(t)$ ist unitär: $\hat{u}^{+}(t)\,\hat{u}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = 1$

$\hat{u}^{+}(t) = \hat{u}(-t)$

Heisenberg-Bild:

Zustände ändern sich nicht, nur Operator

## Heisenberg-Bild

Ausgehend von zeitunabhängigen Operatoren

$$\hat{A}(t) := e^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{A}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
$$= \hat{u}^{+}(t)\,\hat{A}\,\hat{u}(t)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{A} + \hat{A}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\hat{H}\right)e^{-i\hat{H}t/\hbar} + e^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
$$= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}(t) - \hat{A}(t)\hat{H}\right) + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}(t)] + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}}$$ Heisenberg-Gleichung

"explizite Zeitabhängigkeit" : $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(t)$
begründet $\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}$

Betrachtung der Zustände:
Zustandsvektor im Heisenberg-Bild

$$|\psi\rangle_H := \hat{u}^{+}(t)\,|\psi,t\rangle_S = \hat{u}^{+}(t)\,\hat{u}(t)\,|\psi,0\rangle = |\psi,0\rangle$$

$|\psi\rangle_H$ ist also zeitunabhängig

"Erwartungswert" eines Operators $\hat{O}$ (d.h. Skalarprodukt)

$$\langle\psi,t|\hat{O}|\psi',t\rangle = {}_H\langle\psi|\hat{u}^{+}(t)\,\hat{O}\,\hat{u}(t)|\psi'\rangle_H = {}_H\langle\psi|\hat{O}(t)|\psi'\rangle_H$$

## Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$
$\hat{H}_0$: zeitunabhängig

$$|\psi,t\rangle_I = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\,|\psi,t\rangle_S = \hat{u}_0^{+}\,|\psi,t\rangle_S$$

$$\hat{A}_I(t) = \hat{u}_0(t)\,\hat{A}(t)\,\hat{u}_0^{+}(t)$$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_I = \hat{V}_I(t)\, |\psi, t\rangle$ ; $\frac{d}{dt}\hat{A}_I(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_I(t)$

Beispiel: Schrödinger-Bild $\hat{H} = \hat{H}(t)$ .

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

$$|\psi, t\rangle = \hat{u}(t)\, |\psi, 0\rangle \qquad \text{bzw} \quad = \hat{u}(t, t_0)\, |\psi, t_0\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}(t, t_0) = \hat{H}(t)\, \hat{u}(t, t_0) \qquad ; \quad u(t_0, t_0) = 1$$

ist äquivalent zu folgender Integralgleichung

$$\hat{u}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{H}(t')\, \hat{u}(t', t_0)$$

Lösen durch Iteration:

$$\hat{u}_0(t, t_0) = 1$$

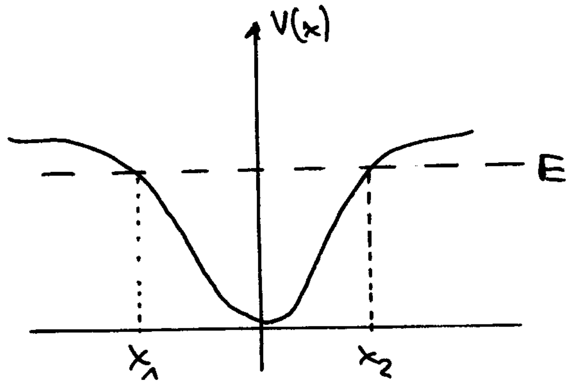
$$\hat{u}_1(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{H}(t')\, 1$$

$$\vdots$$

$$\hat{u}_n(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \left(\hat{H}(t') \cdot u_{n-1}(t', t_0)\right)$$

# Korrektur WKB-Methode

7.2.05




$$x > x_1: \ \psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$x < x_2: \ \psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} dx' p(x') - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$= \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \cos\Big[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} dx' p(x') - \frac{\pi}{4} \underbrace{-\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') - \frac{\pi}{2}\right)}_{:= \gamma = n\pi \ ; n = 0,1,2,\dots}\Big]$$

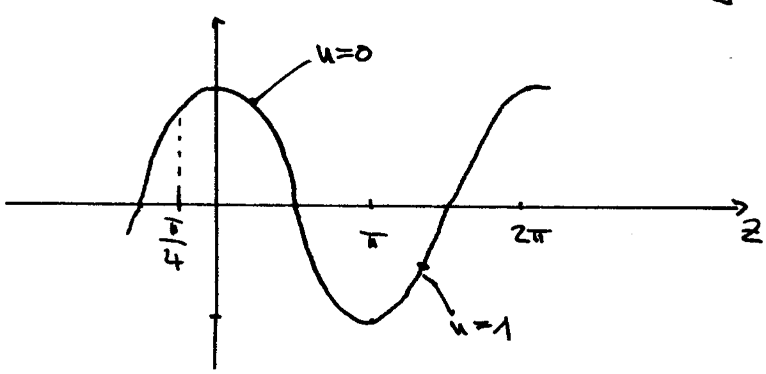
$\rightsquigarrow$ $c' = c(-1)^n$ max. Variation des Koeffizienten

Behauptung: $n$ ist die Anzahl der Knoten der Wellenfunktion

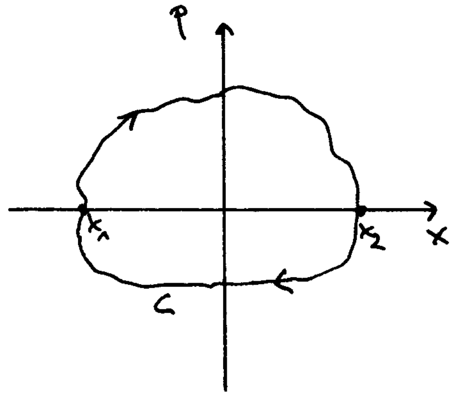
Beweis:
$$\psi(x_1) = \frac{c'}{\sqrt{p(x_1)}} \cos\left[-\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\psi(x_2) = \frac{c'}{\sqrt{p(x_2)}} \cos\left[\gamma + \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$= \frac{c'}{\sqrt{p(x_2)}} \cos\left[n\pi + \frac{\pi}{4}\right]$$




$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) \rightarrow \frac{1}{\pi\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = n + \frac{1}{2}$$




Phasenraum
– geschlossene Kurve

## Weiterführung zeitabhängige Phänomene

Schrödinger-Bild : $\hat{H} = \hat{H}(t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = \hat{H}(t) \, |\psi, t\rangle \quad , \quad |\psi, t\rangle = \hat{u}(t, t_0) \, |\psi, t_0\rangle$$

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}(t, t_0) \right] |\psi, t_0\rangle = \left[ \hat{H}(t) \, \hat{u}(t, t_0) \right] |\psi, t_0\rangle$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{u}(t, t_0) = \hat{H}(t) \, \hat{u}(t, t_0)}$$ Operatorgleichung

$$\hat{u}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}(t') \, \hat{u}(t', t_0)$$ mit Randbedingung $\hat{u}(t_0, t_0) = 1$

Iteration :

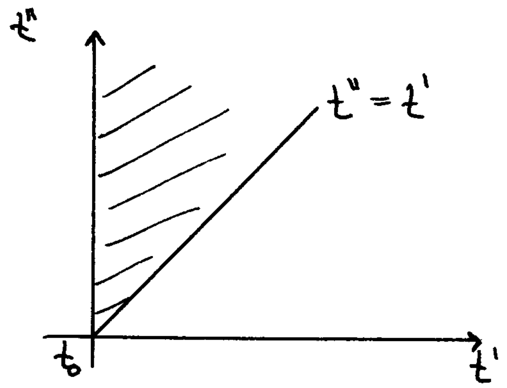
$$\hat{u}_0(t, t_0) = 1$$

$$\hat{u}_1(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}(t') \cdot 1$$

$$\hat{u}_2(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'' \, \hat{H}(t'') \, \hat{u}_1(t'', t_0)$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'' \, \hat{H}(t'') + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^{t} dt'' \, \hat{H}(t'') \int_{t_0}^{t''} dt' \, \hat{H}(t')$$

mit Schreibweise $I := \int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' \, \hat{H}(t'') \, \hat{H}(t')$



Integrationsbereich $t'' \geq t'$

$$I = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t_0}^{t} dt' \; \hat{T}\left[\hat{H}(t'')\,\hat{H}(t')\right]$$

Integration soll über das ganze Gebiet ausgeführt werden

mit $\hat{T}$ : Zeitordnungsoperator

$$\hat{T}\left[\hat{H}(t'')\,\hat{H}(t')\right] = \begin{cases} \hat{H}(t'')\; H(t') \\ \hat{H}(t')\; H(t'') \end{cases}$$

bzw. $\hat{T}[\ldots] = \hat{H}(t'')\; H(t')\; \Theta(t''-t') + \hat{H}(t')\; \hat{H}(t'')\; \Theta(t'-t'')$

$$I = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t_0}^{\cancel{t}\, t''} dt' \; \hat{H}(t'')\, \hat{H}(t')\; \cancel{\Theta(t''-t')} + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{\cancel{t}\, t'} dt'' \; \hat{H}(t')\, \hat{H}(t'')\; \cancel{\Theta(t'-t'')}$$

mit $t' \leftrightarrow t''$

$$= \int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' \; \hat{H}(t'')\, \hat{H}(t')$$

allgemein für den Zeitordnungsoperator

$$\hat{T}\left[\hat{O}_n(t_n)\, \hat{O}_{n-1}(t_{n-1}) \ldots \hat{O}_1(t_1)\right] = \hat{O}_{i_n}(t_{i_n}) \ldots \hat{O}_{i_1}(t_{i_1})$$

$$t_{i_n} > t_{i_{n-1}} > \ldots > t_{i_1}$$

ordnet ein Produkt von Operatoren chronologisch.

Mit dieser Umschreibung kann die Iteration für $\hat{u}$ geschlossen geschrieben werden

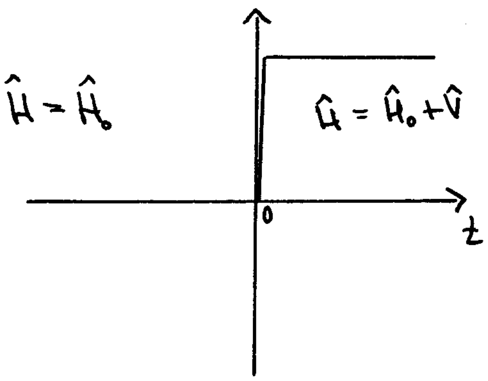
$$\hat{u}(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, \hat{H}(t_n)\, \hat{H}(t_{n-1}) \cdots \hat{H}(t_1)$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t} dt_n \int_{t_0}^{t} dt_{n-1} \cdots \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{T} \left[\hat{H}(t_n)\, \hat{H}(t_{n-1}) \cdots \hat{H}(t_1)\right]$$

$$\boxed{\hat{u}(t,t_0) = \hat{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{H}(t')\right]}$$ Dyson-Reihe

$$\xrightarrow{\hat{H}(*)} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right]$$

## Plötzliche Parameteränderung (Pauli)




$t < 0 \quad : \quad |n_0, t\rangle = e^{-iE_n^0} |n_0\rangle$

$t > 0 \quad : \quad |n, t\rangle = e^{-iE_n} |n\rangle$

Zeitintervall $\Delta t$ der Änderung ist sehr klein

nach der Änderung

$$|\psi, t\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle\langle n | n_0, 0\rangle$$

Wahrscheinlichkeit für den Übergang in irgendeinen neuen Zustand $|m\rangle$

$$P_{n_0 \to m} = |\langle m | n_0, 0\rangle|^2$$

mit zeitabhängiger Störungstheorie

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{bekannt}} + \underbrace{\hat{V}(t)}_{\text{Störung}} \qquad \hat{V}(t) \neq 0 \text{ für } t > t_0$$

$t < t_0: i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^0, t\rangle = \hat{H}_0 |\psi^0, t\rangle$

$t > t_0: i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi, t\rangle$

$|\psi, t\rangle = |\psi_0, t\rangle$ für $t < t_0$

Wechselwirkungs-Darstellung

$|\psi, t\rangle_I := e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_I = -\hat{H}_0 |\psi, t\rangle_I + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi, t\rangle$$

$$= \cancel{-\hat{H}_0 |\psi, t\rangle_I} + \underbrace{e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\cancel{\hat{H}_0} + \hat{V}(t)) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}}_{\hat{V}_I(t)} \underbrace{e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle}_{|\psi, t\rangle_I}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi, t\rangle_I$$

$$|\psi, t\rangle_I = \hat{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t')\right] |\psi, t_0\rangle_I$$

$$\overset{1.\text{Ordnung}}{=} |\psi, t_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t') |\psi, t_0\rangle_I + \dots$$

$t < t_0: |n\rangle \to |\psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_n^0, 0\rangle$

$$= e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

$\to |\psi, t\rangle_I = e^{+i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle$

$$= |n\rangle \quad (t < t_0)$$

$$\to |\psi, t\rangle_I = |n\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t') |n\rangle$$

## Zeitabhängige Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad , \quad V(t) \neq 0 \text{ für } t > t_0$$

Störung (klein ggü. $\hat{H}_0$)

$$|\psi, t\rangle_I := e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle$$

$$|\psi, t\rangle_I = \hat{T} \exp\left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t')\right] |\psi, t_0\rangle$$

$$\hookrightarrow V_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

Störungstheorie:

$$|\psi, t\rangle_I = |\psi, t_0\rangle_I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t') |\psi, t_0\rangle_I + \dots \qquad (*)$$

Nehmen an $t < t_0$: $|\psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |m, 0\rangle$

$$= e^{-iE_m t/\hbar} |m\rangle$$

$$|\psi, t\rangle_I = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle = |m\rangle \qquad (t \leq t_0)$$

$$|\psi, t\rangle_I = |m\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{V}_I(t') |m\rangle \qquad (**)$$

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n(t) |n, t\rangle \quad , \quad c_n(t) = \langle n, t | \psi, t\rangle$$

$$= \sum_n c_n(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |n, 0\rangle$$

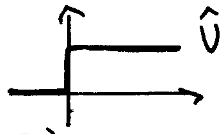
$$c_n(t) = \langle n, t | \psi, t\rangle = \langle n | \underbrace{e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi, t\rangle}_{= |\psi, t\rangle_I} = \langle n | \psi, t$$

$$\overset{(**)}{=} \delta_{n,m} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \langle n | V_I(t') | m\rangle$$

$$= \delta_{n,m} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{i(E_n - E_m) t'/\hbar} \langle n | \hat{V}(t') | m\rangle$$

$|c_n(t)|^2$, $n \neq m$ : Übergangswahrscheinlichkeit $P_{m \to n}$

$$P_{m\to n} = \frac{1}{\hbar^2}\left| \int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|\hat{V}(t')|m\rangle \right|^2 \quad , t_0 = 0$$



$\hat{V}(t) = \hat{V}$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left| \langle n|\hat{V}|m\rangle \int_0^t dt'\, e^{i\omega_{nm}t'} \right|^2 \quad ; \omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_{nm}t/2)}{(\omega_{nm}/2)^2} |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2 \quad ; \lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2 \alpha t}{\pi\alpha^2 t} = \delta(\alpha)$$

$$\xrightarrow{t\to\infty} \pi t \cdot \frac{1}{\hbar^2}\,\delta(\omega_{nm}/2)\, |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2$$

---

$$\delta(f(x)) = \sum_{x_0} \frac{1}{|f'(x_0)|}\delta(x - x_0)$$

$$\to P_{m\to n} \overset{t\to\infty}{=} \frac{2\pi}{\hbar} t\, \delta(E_n - E_m)\, |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2$$

Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit

$$\boxed{\Gamma_{m\to n} := \frac{P_{m\to n}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_n - E_m)\, |\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2}$$

Fermische goldene Regel

# Berry- / magnetische Phase

$\hat{H} = \hat{H}(t) = \hat{H}(\vec{R}(t))$ ← ändert sich nur sehr langsam

z.B.: langsames Einschalten eines Magnetfelds

$\hat{H}(t)\,|n,t\rangle = E_n(t)\,|n,t\rangle$

Adiabatische Änderung: System bleibt im momentanen Zustand $|n,t\rangle$

Ansatz: $|\psi,t\rangle = c(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,E_n(t')\right)|n,t\rangle$

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

$$\dot{c}(t) = -c(t)\,\langle n,t|\frac{d}{dt}|n,t\rangle$$

$$\rightarrow c(t) = c(0)\exp\left[-\int_0^t dt'\,\langle n,t'|\frac{d}{dt}|n,t'\rangle\right]$$

$$= c(0)\,e^{i\gamma}$$

$$\boxed{\gamma = i\int_0^t dt'\,\langle n,t'|\frac{d}{dt}|n,t'\rangle}$$ Berry-Phase $\gamma \in \mathbb{R}$

definiere: $|n',t\rangle = e^{i\chi(t)}\,|n,t\rangle$

sollte sich eigtl. nicht unterscheiden

$$i\langle n',t|\frac{d}{dt}|n',t\rangle = i\,\langle n,t|\frac{d}{dt}|n,t\rangle - \frac{d\chi(t)}{dt}$$

$\rightarrow$ $\chi(t)$ geeignet wählen und die extra Phase ist weg

Änderung von $\hat{H}$ soll nach einer gewissen Zeit wieder in den ursprünglichen Zustand kommen

$$\hat{H}(T) = \hat{H}(0)$$

$$i\oint dt\,\langle n',t|\frac{d}{dt}|n',t\rangle = i\oint dt\,\langle n,t|\frac{d}{dt}|n,t\rangle - \underbrace{[\chi(T)-\chi(0)]}_{=2\pi m,\ m\in\mathbb{Z}}$$

$e^{i\gamma}$ : ändert sich nicht durch einen Basiswechsel

Musterbeispiel:

$$\hat{H}(t) = -\vec{\sigma}\cdot\vec{R}(t) \quad , \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{R}(t) = \begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2 \\ R_1 + iR_2 & -R_3 \end{pmatrix}$$

$\rightarrow E_\pm = \pm R \quad , R = |\vec{R}|$ aus der Bestimmung der Eigenwerte $\det(\hat{H} - E) \overset{!}{=} 0$

Einsetzen in Berry-Phase:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{(i\hbar) \langle n(\vec{R}(t')) | \frac{d}{dR_i} | n(\vec{R}(t)) \rangle}_{= A_i^{(n)}} \frac{dR_i(t')}{dt'}$$

$$\vec{A}^{(n)} = i\hbar \langle n(\vec{R}) | \nabla | n(\vec{R}) \rangle \quad , \quad \nabla = \left( \frac{\partial}{\partial R_1}, \frac{\partial}{\partial R_2}, \frac{\partial}{\partial R_3} \right)$$

$\vec{A}$ transformiert wie Vektorpotential

$\rightarrow$ es gibt auch ein EM-Feld

$$\langle n | \hat{H} | m \rangle = E_m \langle n | m \rangle = E_m \delta_{nm}$$

$$\langle n | \hat{H} | m \rangle = 0 \quad \text{für} \quad n \neq m$$

$$\rightarrow \langle \nabla n | \underbrace{\hat{H} | m \rangle}_{E_m | m \rangle} + \langle n | \nabla \hat{H} | m \rangle + \underbrace{\langle n | \hat{H}}_{E_n \langle n |} | \nabla m \rangle = 0$$

$$\rightarrow -\langle n | \nabla | m \rangle + \langle n | \nabla \hat{H} | m \rangle + \langle n | \nabla | m \rangle E_n = 0$$

$$\langle n|\nabla|m\rangle = \frac{\langle n|\nabla \hat{H}|m\rangle}{E_m - E_n}$$

$$F^n_{ij} = \partial_i A^n_j - \partial_j A^n_i$$

$$= i\hbar \left[ \partial_i \langle n|\partial_j n\rangle - \partial_j \langle n|\partial_i n\rangle \right]$$

$$= i\hbar \sum_{m\neq n} \frac{\langle n|(\partial_i \hat{H})|m\rangle \langle m|(\partial_j \hat{H})|n\rangle - \langle n|(\partial_j \hat{H})|m\rangle \langle m|(\partial_i \hat{H})|n\rangle}{(E_m - E_n)^2}$$

$$\partial_j = \frac{\partial}{\partial R_j} \qquad (2R)^2 \qquad \frac{\partial}{\partial R_i}\hat{H} = -\sigma_i$$

⋮

$$\vec{B}^{(n)} = \mp \frac{\hbar}{2} \frac{\hat{R}}{R^2}$$

, magnetischer Monopol an der Stelle $\vec{R} = 0$