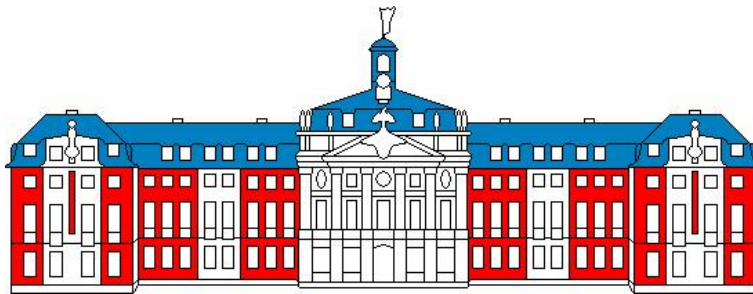


QUANTENTHEORIE

P. Eckelt

Vorlesung

SS 2000, WS 2000/01, WS 2001/02



Westfälische Wilhelms-Universität

Institut für Theoretische Physik

*Es gibt nichts Neues unter der Sonne.
(Kohélet 1,9)*

Inhaltsverzeichnis

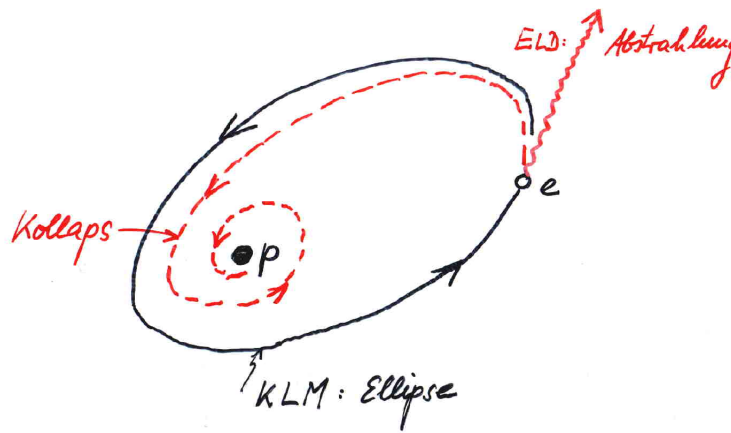
1	Vorbemerkungen, Literatur	1
2	Die Schrödinger-Gleichung	5
3	Freies Teilchen	19
4	Erwartungswerte und Operatoren	30
5	Eindimensionale Bewegung	39
6	Messwerte und Messwahrscheinlichkeiten	63
7	Harmonischer Oszillator	76
8	Quantenmechanik des Drehimpulses	86
9	Teilchen im Zentralpotential	107
10	Mathematischer Formalismus und allgemeine Grundlagen	155
11	Der Teilchenspin	200
12	Das quantenmechanische Mehrkörperproblem	227
13	Störungsrechnung	248
14	Feldquantisierung	269
15	Symmetrien und Invarianzen	289

16 Formale Streutheorie	312
16.1 Møller-Operatoren und Lippmann-Schwinger-Gleichungen	317
16.2 S-Matrix, T-Matrix und Wirkungsquerschnitte	327
16.3 Invarianzen (Symmetrien) und Erhaltungssätze	337
17 Dirac-Theorie: Relativistisches Elektron	353
Danksagung	384

1 Vorbemerkungen, Literatur

Die Entwicklung der Quantenmechanik (QUM) ist motiviert durch experimentelle Erfahrungen, die mit klassischer Mechanik (KLM) und Elektrodynamik (ELD) nicht zutreffend beschreibbar sind.

Struktur und Spektren der Atome, Moleküle, ... (auch: Kerne, Festkörper, ...); z.B. *H-Atom* aus Proton p und Elektron e :



• Abbildung 1.1 •

Klassisch-mechanisch handelt es sich um das Coulomb-Kepler-Problem: Orbit = Ellipse, in deren einem Brennpunkt sich der Kern befindet, Flächensatz usw. Nach der ELD emittiert das beschleunigte (!) Elektron elektromagnetische Strahlung. Es verliert entsprechend Energie und stürzt in den Kern. Dieser Kollaps wird aber nicht beobachtet. Zwar emittiert das *angeregte* H-Atom elektromagnetische Strahlung, aber nur bis zu einem *stabilen Grundzustand*. Erklärung? Das vom angeregten H-Atom emittierte *Strahlungsspektrum* ist im übrigen *diskret*: Lyman-Serie, Balmer-Serie, Paschen-Serie, ... und steht in keinem erkennbaren Zusammenhang mit dem nach KLM und ELD erwarteten Frequenz-Kontinuum. Erklärung?

Bohr-Sommerfeld: Auszeichnung gewisser „erlaubter“ Orbits durch zusätzliche „Quantenbedingungen“, hier betreffend den Bahndrehimpuls (im Allgemeinen betreffend die Wirkungsvariablen des zu Grunde liegenden Hamilton-Systems):

$$L_n = n \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.1)$$

mit der Planckschen Konstanten

$$\hbar = 1.05 \dots \times 10^{-34} \text{ J s} . \quad (1.2)$$

Daraus ergeben sich (für Kreisbahnen) die *diskreten Energieniveaus*

$$E_n = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2} . \quad (1.3)$$

Das *Ritzsche Kombinationsprinzip* liefert die Frequenzen

$$\omega_{nn'} = \frac{|E_n - E_{n'}|}{\hbar} \quad (1.4)$$

in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment. Dieses beim H-Atom erfolgreiche Verfahren versagt bereits beim He-Atom und kann erst recht nicht Struktur und Spektren komplizierterer Systeme erklären; auch nicht die chemische Bindung des H₂-Moleküls; nicht die auf dem Spin beruhenden Effekte, ...

Die *Quantisierung der Energie* der Atome wird nicht nur bei der quantenhaften Emission und Absorption von elektromagnetischer Strahlung beobachtet, sondern z. B. auch bei Stoßexperimenten, wie dem *Franck-Hertz-Experiment*, ...

Die *Quantisierung des Drehimpulses* nach Betrag und Richtung dominiert die gesamte Atom- und Molekülphysik; siehe z. B. das *Stern-Gerlach-Experiment*, ...

Welle-Teilchen-Dualismus des Lichtes. Gewisse Phänomene sind sowohl im Wellen- als auch im Teilchenbild erklärbar: geradlinige Ausbreitung, Reflexion und Brechung, ... Dagegen sind Beugung und Interferenz nur im Rahmen der Wellenoptik beschreibbar. Andererseits gibt es Experimente, die nur auf der Grundlage einer Teilchentheorie deutbar sind: *Schwarzer Strahler*, *Photoeffekt*, *Compton-Streuung*, ... Die Analyse dieser Experimente suggeriert (Planck, Einstein, ...) , dass Licht der Frequenz ω und vom Wellenvektor \vec{k} ein System von Teilchen, sog. *Photonen*, mit der Energie E und dem Impuls \vec{p} ist:

$$E = \hbar \omega \quad (1.5 \text{ a})$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} . \quad (1.5 \text{ b})$$

Die Dispersionsbeziehung

$$\omega = c |\vec{k}| \quad (1.6)$$

liefert den ultrarelativistischen Zusammenhang

$$E = c |\vec{p}| \quad (1.7)$$

– gültig für Teilchen, die sich mit der Geschwindigkeit c bewegen oder (äquivalent hierzu) die Ruhmasse 0 besitzen.

Umgekehrt beobachtet man den *Welle-Teilchen-Dualismus* der *Materie*. Die korpuskulare Struktur von atomaren Teilchen und ihre Ablenkung – sofern geladen (Elektronen, Protonen, Ionen, ...) – in elektromagnetischen Feldern sind im (klassischen) Teilchenbild beschreibbar, auch z. B. die Rutherford-Streuung (α -Teilchen + Kern), jedoch nicht die meisten anderen Stoßprozesse, nicht die Struktur der Atome, ... (s. o.). Gar nicht erklärbar im Teilchenbild ist die *Beugung von „Teilchenstrahlen“* an Spalten, ... Kristallen, ... und die dabei beobachteten Interferenzen. Dazu bedarf es einer Wellentheorie. Welcher? Die Analyse der Experimente zeigt: „Teilchen“ mit E , \vec{p} ist eine „Welle“ mit ω , \vec{k} zugeordnet, wobei der Zusammenhang auch hier durch (1.5) gegeben ist: *de-Broglie-Beziehungen*. Ausgehend von der (nichtrelativistischen) Newtonschen Verknüpfung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.8)$$

erhält man hier jedoch die Dispersionsbeziehung

$$\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} . \quad (1.9)$$

Im Unterschied zu den dispersionsfreien Lichtwellen (Wellenpakete bewahren ihre Gestalt) zeigen *Materiewellen* Dispersion (Wellenpakete fließen auseinander).

Anmerkung: Ausführliche Darstellungen der in dieser Einleitung erwähnten grundlegenden Experimente in der parallelen Vorlesung: Einführung in die Atom-, Kern-, Festkörperphysik.

Literatur:

G. Grawert, Quantenmechanik, Akad. Verlagsgesellschaft, Wiesbaden (1978)

R.J. Jelitto, Theoretische Physik 4, 5, Quantenmechanik I, II, Aula-Verlag, Wiesbaden (1984)

W. Nolting, Grundkurs: Theoretische Physik 5: Quantenmechanik 1, 2, Zimmermann-Neufang, Ulmen (1992, 93)

ferner:

E. Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, Akad. Verlagsgesellschaft, Wiesbaden (1979)

W. Franz, Quantentheorie, Heidelberger Taschenbücher No. 102,
Springer-Verlag, Berlin (1971)

E. Merzbacher, Quantum Mechanics, J. Wiley & Sons, New York (1970)

A. Messiah, Quantum Mechanics I, II, North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1965)

W.R. Theis, Grundzüge der Quantentheorie, Teubner-Studienbücher
Physik, Stuttgart (1985)

F. Schwabl, Quantenmechanik, Springer-Lehrbuch, Berlin (1988)

2 Die Schrödinger-Gleichung

Betrachte ein Teilchen der Masse m , das sich in einem Kraftfeld mit dem Potential $V(\vec{x}, t)$ bewegt.

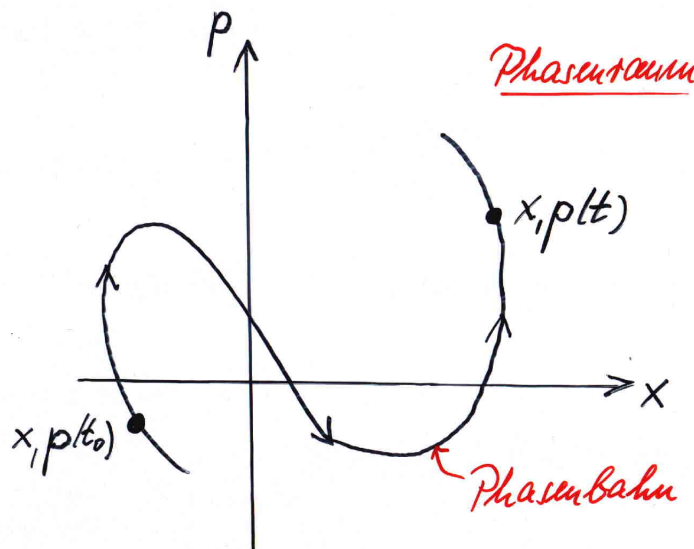
Klassische Mechanik. *Hamilton-Funktion:*

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}, t), \quad (2.1)$$

kanonische Gleichungen:

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \quad (2.2)$$

\Rightarrow allgemeine Lösung $\vec{x}(t, \vec{a}, \vec{b})$, $\vec{p}(t, \vec{a}, \vec{b})$. Nach Vorgabe von Anfangsbedingungen folgt die spezielle Lösung $\vec{x}(t, \vec{x}_0, \vec{p}_0)$, $\vec{p}(t, \vec{x}_0, \vec{p}_0)$. Zustand zur Zeit t : Punkt $\vec{x}(t)$, $\vec{p}(t)$ im Phasenraum. Zeitliche Entwicklung: *Phasenbahn*.



• Abbildung 2.1 •

Dynamische Variablen:

$$A = A(\vec{x}, \vec{p}, t), \quad (2.3)$$

z. B. die Hamilton-Funktion selbst, mit der zeitlichen Entwicklung

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}; \quad (2.4)$$

Poisson-Klammer (PK):

$$\{A, H\} = \frac{\partial A}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} . \quad (2.5)$$

A Konstante der Bewegung, falls nicht explizit t -abhängig *und* falls die PK mit H verschwindet; z. B. $H = \text{konstant}$, falls nicht explizit t -abhängig (Energiesatz).

Alternativ kann man den klassisch-mechanischen Zustand (inkl. seiner zeitlichen Entwicklung) durch eine *Wirkungsfunktion* beschreiben:

$$S = S(\vec{x}, \vec{b}, t) , \quad (2.6)$$

die man als vollständiges Integral der *Hamilton-Jacobi-Gleichung* berechnet:

$$H\left(\vec{x}, \frac{\partial S}{\partial \vec{x}}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 . \quad (2.7)$$

Die Trajektorie berechnet man aus S wie folgt:

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{x}} = \vec{p} , \quad \frac{\partial S}{\partial \vec{b}} = \vec{a} \quad (2.8)$$

$\Rightarrow \vec{x}, \vec{p}(t, \vec{a}, \vec{b})$. S ist Erzeugende vom F_2 -Typ (siehe z. B. Goldstein, Klassische Mechanik) für eine kanonische Transformation $\vec{x}, \vec{p} \rightarrow \vec{a}, \vec{b}$ mit der neuen trivialen Hamilton-Funktion $K = 0$. Durch Anfangsbedingungen kann man die Integrationskonstanten \vec{a}, \vec{b} zugunsten der Anfangswerte \vec{x}_0, \vec{p}_0 eliminieren.

Lösbare (integrable) *Beispiele*: freies Teilchen, harmonischer Oszillator, Kepler-Problem.

Das **klassische Teilchenbild** beschreibt erfolgreich die Ablenkung von geladenen Teilchen (Ladung q) in schwach veränderlichen elektromagnetischen Feldern:

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q \vec{A}(\vec{x}, t))^2 + q \phi(\vec{x}, t) , \quad (2.9)$$

z. B. Elektronen, Protonen, Ionen, ... in Massenspektrometern, Beschleunigern, ... Gl. (2.1) ist ein Spezialfall der allgemeineren Gl. (2.9): $\vec{A} = \vec{0}$. (2.9) beschreibt den nichtrelativistischen Grenzfall.

In den stark veränderlichen Feldern an Kanten, Ecken, Spitzen, ... Oberflächen von Kristallgittern, ... tritt *Beugung* auf; dort versagt das klassische Teilchenbild. Außerdem kann dieses Modell nicht die Struktur der Atome und deren Spektren erklären; auch nicht die Streuung atomarer Teilchen aneinander. Daher der Versuch eines **klassischen**

Wellenfeldbildes; siehe Grawert, Kap. 2. Dieses ist nicht ganz erfolglos: Teilchenbeugung, diskrete Energieniveaus, Tunneleffekt, ... , ist aber letztlich zu verwerfen, da die Teilchen scharf lokalisiert registriert werden. (Das Beugungsbild stammt nicht vom einzelnen Teilchen, sondern wird durch eine „Gesamtheit“ solcher Teilchen verursacht.) Lokalisierung ist zwar auch im klassischen Wellenfeldbildern beschreibbar (Superposition ebener Wellen \Rightarrow Wellenpaket) – aber nur für begrenzte zeitliche Dauer: Die Dispersion der Materiewellen lässt alle Wellenpakete unbeschränkt auseinanderfließen.

In der **Quantenmechanik** wird der Zustand des Teilchens durch eine komplexwertige *Wellenfunktion* $\psi(\vec{x}, t)$ beschrieben; Bedeutung siehe unten. $\psi(\vec{x}, t)$ befriedigt die **Schrödinger-Gleichung**; diese ist für das System (2.1) von der Gestalt

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(\vec{x}, t) = 0; \quad (2.10)$$

mit Hilfe des *Hamilton-Operators*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}\right)^2 + V(\vec{x}, t) \quad (2.11)$$

schreibt man abgekürzt

$$\left(H + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(\vec{x}, t) = 0. \quad (2.12)$$

Der Hamilton-Operator geht aus der Hamilton-Funktion dadurch hervor, dass man

$$\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (2.13)$$

ersetzt. Das gilt auch für das System (2.9):

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} - q \vec{A}(\vec{x}, t)\right)^2 + q \phi(\vec{x}, t); \quad (2.14)$$

(2.14) zusammen mit (2.12) ergibt die Schrödinger-Gleichung für das geladene Teilchen im \vec{A} , ϕ -Feld. Wir beschränken uns (in diesem Semester) auf das Teilchen im Potential V , d. h. auf den Hamilton-Operator (2.11).

Die Schrödinger-Gleichung (2.12) ist eine *lineare, homogene partielle Differentialgleichung 2. Ordnung* für $\psi(\vec{x}, t)$. Vgl. homogene Wellengleichung der Vakuumelektrodynamik: dort konstante Koeffizienten, hier nicht ($V(\vec{x}, t)$) \Rightarrow keine allgemeine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung – bis auf spezielle Systeme.

Aus Linearität + Homogenität folgt das **Superpositionsprinzip**: $\psi_1(\vec{x}, t)$, $\psi_2(\vec{x}, t)$ Lösungen von (2.12) $\Rightarrow \alpha \psi_1(\vec{x}, t) + \beta \psi_2(\vec{x}, t)$ Lösung von (2.12), d. h. Prinzip der

Superponierbarkeit von Zuständen \Rightarrow Möglichkeit zur Beschreibung von Interferenzen und Beugungsphänomenen.

Die Schrödinger-Gleichung ist von 1. Ordnung in der Zeit. Daraus folgt: Durch den Anfangszustand $\psi(\vec{x}, 0)$ ist der Zustand $\psi(\vec{x}, t)$ zur Zeit t eindeutig festgelegt. \Rightarrow **Determiniertheit** der zeitlichen Entwicklung der Wellenfunktion.

Die Schrödinger-Gleichung steht in enger formaler Beziehung zur Hamilton-Jacobi-Gleichung. Mit

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{S}(\vec{x}, t)} \quad (2.15)$$

folgt aus (2.11, 12):

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \vec{x}} \right)^2 + V(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2im} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial \tilde{S}}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} = 0. \quad (2.16)$$

Im **klassischen Grenzfall** schwach veränderlicher quantenmechanischer Phasenfunktionen wird das „Quantenpotential“ $\frac{\hbar}{2im} \Delta \tilde{S}$ vernachlässigt (Limes $\hbar \rightarrow 0$):

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \vec{x}} \right)^2 + V(\vec{x}, t) + \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} = 0. \quad (2.17)$$

Das ist die Hamilton-Jacobi-Gleichung (2.7); \tilde{S} hat in diesem Limes die Bedeutung der klassisch-mechanischen Wirkungsfunktion S . Trajektorien der KLM orthogonal zu den Wellenfronten der QUM; KLM als „geometrisch-optischer Grenzfall“ der QUM.

Welche **physikalische Bedeutung** hat $\psi(\vec{x}, t)$? Multipliziere Gl. (2.10) mit $\psi^*(\vec{x}, t)$, und subtrahiere davon die mit $\psi(\vec{x}, t)$ multiplizierte Gl. (2.10)*:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) - \frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2im} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi^* \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Mit

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (2.19)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2im} \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) + \text{konj. kompl.} \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (2.20)$$

folgt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 . \quad (2.21)$$

Das ist die *Kontinuitätsgleichung* mit ρ als Dichte und \vec{j} als Stromdichte; beide Größen reell. Für welche Erhaltungsgröße? Für die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** des Teilchens!

Anmerkung: (2.19) impliziert für die Wellenfunktion die Darstellung

$$\psi(\vec{x}, t) = \sqrt{\rho(\vec{x}, t)} e^{i\chi(\vec{x}, t)} ; \quad (2.22)$$

damit folgt aus (2.20) für die Stromdichte:

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \rho(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \chi(\vec{x}, t) \quad (2.23)$$

und wegen $\vec{j} = \rho \vec{v}$ für die lokale Geschwindigkeit:

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \chi(\vec{x}, t) . \quad (2.24)$$

Der Betrag von ψ bestimmt also die Dichte, die Phase von ψ die Transportgeschwindigkeit. Wovon? Welcher Substanz?

Statistische Interpretation der Wellenfunktion. Das Teilchen befinde sich im Zustand $\psi(\vec{x}, t)$, dann ist

$$\rho(\vec{x}, t) = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte} , \quad (2.25)$$

bei Ortsmessung zur Zeit t das Teilchen am Ort \vec{x} zu finden;

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte} , \quad (2.26)$$

das Teilchen zur Zeit t beim Durchtritt durch eine Fläche an der Stelle \vec{x} zu registrieren. Das sind *lokale* Aussagen!

Global interpretiert man – nach Vorgabe eines Volumens V bzw. einer Fläche S – wie folgt:

$$Q_V = \int_V \rho(\vec{x}, t) dV = \int_V |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV \quad (2.27)$$

= Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen zur Zeit t im Volumen V anzutreffen;

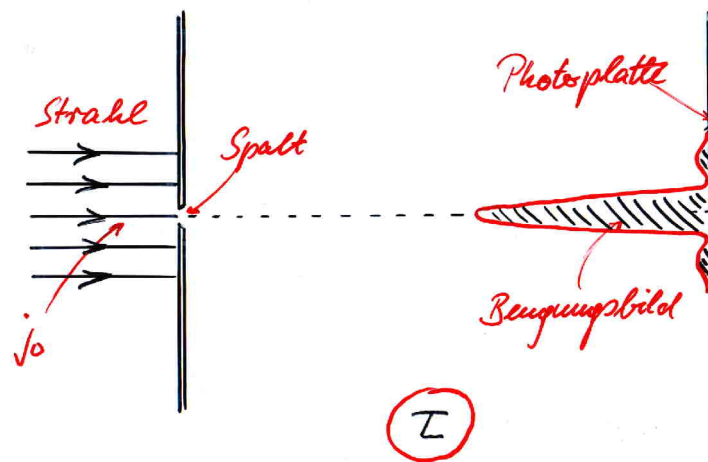
$$I_S = \int_S \vec{j}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} = \frac{\hbar}{m} \int_S \text{Im} \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} \quad (2.28)$$

= Wahrscheinlichkeitsstrom (Wahrscheinlichkeit / Zeit) dafür, dass das Teilchen zur Zeit t durch die Fläche S hindurchtritt. Handelt es sich bei S um die (geschlossene) Oberfläche von V , so folgt mit dem Gaußschen Integralsatz aus (2.21):

$$\dot{Q}_V + I_S = 0 . \quad (2.29)$$

Die Wahrscheinlichkeit für den Aufenthalt des Teilchens in V ändert sich zeitlich nach Maßgabe des Wahrscheinlichkeitsstromes durch S – Ausdruck der Teilchenerhaltung.

Zur *Erläuterung* der statistischen Interpretation: Beugung eines Teilchenstrahls am Spalt.



• Abbildung 2.2 •

Stromdichte j_0 , Beobachtungszeit τ : Beugung am Spalt \Rightarrow Schwärzung der Photoplatte \Rightarrow Beugungsbild. j_0 kleiner, τ gleich: Beugungsbild blasser, gleiche Gestalt. j_0 so klein, dass nur *ein* Teilchen in τ passiert: kein Beugungsbild, sondern punktförmige Schwärzung! Oftmalige Wiederholung \Rightarrow Beugungsbild.

Dieser experimentelle Befund wird mit Hilfe der Wellenfunktion wie folgt beschrieben: Die Registrierung eines einzelnen Teilchens auf der Photoplatte entspricht einer Ortsmessung. Keine sichere Vorhersage über den Ausgang der \vec{x} -Messung möglich, sondern nur *Wahrscheinlichkeitsaussage*: N Experimente mit je einzelnen Teilchen unter gleichen Bedingungen, $N \rightarrow \infty$. Realisierung durch Strahl \Rightarrow reproduzierbare Verteilung der \vec{x} -Messwerte (Beugungsbild). ΔN Registrierungen im \vec{x} -Bereich V :

$$N \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Delta N}{N} = \int_V |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV . \quad (2.30)$$

\vec{x} -Messung für einzelnes Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit Q_V .

Statistische Gesamtheit: Große Anzahl identisch präparierter Systeme derselben Sorte. Hier: Einteilchensysteme. Später: Erweiterung auf Mehrteilchensysteme. Messung einer Observablen liefert Häufigkeitsverteilung der Messwerte: Hier: Observable \vec{x} . Später: beliebige Observablen, z. B. \vec{p} . $|\psi(\vec{x}, t)|^2 =$ Verteilung der \vec{x} -Werte bei Ortsmessung zur Zeit t an dem Teilchen der durch ψ beschriebenen Gesamtheit. Parameter t bezieht sich auf Einzelmessung, nimmt bei jeder Einzelpräparation Nullwert an. Einzelexperimente zeitlich parallel zu denken.

Interferenz von Wahrscheinlichkeiten. Der Zustand ψ sei eine Überlagerung zweier Zustände ψ_1 und ψ_2 :

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \rho &= \psi^* \psi \\ &= (\psi_1^* + \psi_2^*)(\psi_1 + \psi_2) \\ &= \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 \\ &= \rho_1 + \rho_2 + 2 \operatorname{Re}(\psi_1^* \psi_2) \geq 0, \end{aligned} \quad (2.32)$$

d. h. die zu ψ gehörige Wahrscheinlichkeitsdichte ρ setzt sich nicht einfach additiv aus den zu ψ_1 und ψ_2 gehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten ρ_1 und ρ_2 zusammen; vielmehr tritt zusätzlich ein „Interferenzterm“ auf. Dieser kann positiv \Rightarrow konstruktive Interferenz oder negativ \Rightarrow destruktive Interferenz sein. *Beispiel* für Realisierung: Beugung eines Teilchenstrahls am Doppelspalt.

Normierung der Wellenfunktion. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen überhaupt irgendwo anzutreffen, ist nach (2.27):

$$Q = \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV, \quad (2.33)$$

wobei über den ganzen Raum zu integrieren ist. *Falls* dieses Integral existiert (ψ quadratintegrabel), kann man $\psi(\vec{x}, t)$ auf 1 normieren (durch Multiplikation mit einem passenden Faktor):

$$\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV = 1, \quad (2.34)$$

d. h. der Gesamtwahrscheinlichkeit Q wird der Wert 1 zugeordnet. Quadratintegrable Wellenfunktionen seien im folgenden stets gemäß (2.34) normiert. – Notwendig für Normierbarkeit (Quadratintegrabilität) ist, dass ψ im Unendlichen hinreichend stark verschwindet und somit einen „lokalisierten Zustand“ beschreibt, z. B. einen „gebundenen Zustand“. Bezeichnung: *eigentlicher Zustand*.

Daneben gibt es ψ -Funktionen, die zwar nicht normierbar (nicht quadratintegrabel) sind:

$$\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV = \infty, \quad (2.35)$$

dafür aber wenigstens asymptotisch beschränkt (für alle t):

$$\exists a > 0, b > 0 : |\psi(\vec{x}, t)| < a \quad \forall \vec{x} : |\vec{x}| > b. \quad (2.36)$$

Sie beschreiben „nichtlokalisierte Zustände“, z. B. „Streuzustände“. Bezeichnung: *uneigentliche Zustände*. Für derartige Wellenfunktionen kann man relative Wahrscheinlichkeiten definieren:

$$\frac{Q_{V_1}}{Q_{V_2}} = \frac{v_1 \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV}{v_2 \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV}. \quad (2.37)$$

Lösungen der Schrödinger-Gleichung; die nicht wenigstens asymptotisch beschränkt sind, haben keine physikalische Bedeutung. Sie werden für die Zustandsbeschreibung nicht zugelassen.

Die Normierung (2.34) bleibt im Laufe der Zeit, d. h. bei der dynamischen Zustandsentwicklung gemäß Schrödinger-Gleichung, erhalten:

$$\dot{Q} = \frac{d}{dt} \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV = 0. \quad (2.38)$$

Das folgt aus (2.29) im Limes $V \rightarrow \infty, S(V) \rightarrow \infty$: Normierbare ψ -Funktionen fallen asymptotisch so stark ab, dass der Wahrscheinlichkeitsstrom durch die „unendlich ferne Oberfläche“ verschwindet: $I = 0$, folglich $\dot{Q} = 0$. Erhaltung der Norm als *Teilchenenerhaltung* zu interpretieren.

Folgerung: Mit (2.12) folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dV \\ &= \frac{i}{\hbar} \int ((H\psi)^* \psi - \psi^* (H\psi)) dV \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.39)$$

woraus sich

$$\int (H\psi)^* \psi dV = \int \psi^* (H\psi) dV \quad (2.40)$$

ergibt, d. h. der Hamilton-Operator H ist notwendig ein „Hermitescher Operator“. Haben die H -Operatoren (2.11, 14) diese Eigenschaft? Ja! Beweis? Die „Hermitizität“ von H

– wie auch anderer Operatoren – ist von zentraler Bedeutung für die Quantentheorie (siehe unten).

Die Zustandsfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ liefert die Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ des *Teilchenortes* \vec{x} zur Zeit t . Welche Information über den *Teilchenimpuls* \vec{p} zur Zeit t ist in der ψ -Funktion enthalten? Es zeigt sich, dass nicht nur über den Ort, sondern auch über den Impuls nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind.

Fourier-Transformation:

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3x \quad (2.41 \text{ a})$$

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \varphi(\vec{p}, t) d^3p. \quad (2.41 \text{ b})$$

Interpretation:

$$|\varphi(\vec{p}, t)|^2 = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}, \quad (2.42)$$

bei Impulsmessung zur Zeit t den Impuls \vec{p} zu messen. Die Begründung für diese Interpretation ergibt sich aus den nachfolgenden Betrachtungen.

Nach (2.41) folgt $\varphi(\vec{p}, t)$ eindeutig aus $\psi(\vec{x}, t)$, und umgekehrt ergibt sich $\psi(\vec{x}, t)$ eindeutig aus $\varphi(\vec{p}, t)$. Die Zustandsbeschreibung durch $\psi(\vec{x}, t)$ ist äquivalent zur Zustandsbeschreibung durch $\varphi(\vec{p}, t)$. Man spricht von der **Ortsdarstellung** bzw. von der **Impulsdarstellung** des Teilchenzustandes. Impulsdarstellung der Schrödinger-Gleichung (2.10)?

Eine erste vernünftige Konsequenz der vorstehenden Interpretation liegt in der *Erhaltung der Norm* bei Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned} \int |\varphi(\vec{p}, t)|^2 d^3p &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi^*(\vec{x}, t) d^3x \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}'} \psi(\vec{x}', t) d^3x' d^3p \\ &= \int \int \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}', t) \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} d^3p}_{=\delta(\vec{x}-\vec{x}')} d^3x d^3x' \\ &= \int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Teilchen irgendeinen Impuls hat, ist gleich der Wahrscheinlichkeit dafür, dass es sich an irgendeinem Ort aufhält – nämlich gleich 1 für eigentliche und gleich ∞ für uneigentliche Zustände.

Eine weitere vernünftige Konsequenz der Interpretation (2.42) ist das **Theorem von Ehrenfest**. Dieses macht Aussagen über die Dynamik der *Mittelwerte*, auch *Erwartungswerte*:

$$\langle \vec{x} \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \vec{x} \psi(\vec{x}, t) d^3 x \quad (2.44)$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \varphi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \varphi(\vec{p}, t) d^3 p, \quad (2.45)$$

nämlich:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle \quad (2.46)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V \rangle, \quad (2.47)$$

wobei

$$\langle \vec{\nabla} V \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) (\vec{\nabla} V(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t) d^3 x. \quad (2.48)$$

Da über \vec{x} und \vec{p} in der QUM grundsätzlich nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind, verliert der Trajektorienbegriff der KLM in der QUM für den Einzelprozess seine Bedeutung. Gln. (2.46, 47) zeigen aber: Im Mittel über eine statistische Gesamtheit verhalten sich \vec{x} und \vec{p} nach den Gesetzen der KLM – wenigstens näherungsweise, sofern

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \vec{x}} V(\vec{x}, t) \right\rangle \simeq \frac{\partial}{\partial \langle \vec{x} \rangle} V(\langle \vec{x} \rangle, t) \quad (2.49)$$

gilt, was bei (räumlich) schwach veränderlichen Potentialen der Fall ist.

Zur Vorbereitung auf den Beweis der Gln. (2.46, 47) wird $\langle \vec{p} \rangle$ in der Ortsdarstellung ausgedrückt, und zwar hat man wegen (2.45, 41 a):

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int \varphi^*(\vec{p}, t) \vec{p} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3 x d^3 p \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int \varphi^*(\vec{p}, t) \frac{\hbar}{i} \int \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \right) \psi(\vec{x}, t) d^3 x d^3 p \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int \varphi^*(\vec{p}, t) \frac{\hbar}{i} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3 x d^3 p \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int \int \varphi^*(\vec{p}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} d^3 p \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3 x \\ &= \int \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3 x. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Im dritten Schritt wurde partiell integriert; zuletzt wurde von (2.41 b) Gebrauch gemacht.

Umgekehrt kann man auch $\langle \vec{x} \rangle$ in der Impulsdarstellung ausdrücken:

$$\langle \vec{x} \rangle = - \int \varphi^* (\vec{p}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \varphi (\vec{p}, t) d^3 p . \quad (2.51)$$

Verifiziere das! \vec{p} nimmt also in der Ortsdarstellung die Gestalt $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$ an (siehe (2.13)), während \vec{x} in der Impulsdarstellung wie $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$ wirkt. Die typische Gestalt der Erwartungswerte (2.44, 45, 50, 51) wird später auf beliebige Observablen verallgemeinert.

Beweis von (2.46). Aus (2.44) folgt mit (2.12, 11, 50):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \vec{x} \psi + \psi^* \vec{x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d^3 x \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \left((H \psi)^* \vec{x} \psi - \psi^* \vec{x} (H \psi) \right) d^3 x \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H \vec{x} - \vec{x} H) \psi d^3 x \\ &= \frac{\hbar}{2 i m} \int \psi^* \underbrace{(\Delta \vec{x} - \vec{x} \Delta)}_{= 2 \vec{\nabla}} \psi d^3 x \\ &= \frac{\hbar}{i m} \int \psi^* \vec{\nabla} \psi d^3 x \\ &= \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle , \end{aligned} \quad (2.52)$$

wobei im dritten Schritt die Hermitizität von H benutzt wurde.

Man kann zeigen: H ist hermitesch im Sinne von (2.40) genau dann, wenn gilt:

$$\int (H \chi)^* \psi dV = \int \chi^* (H \psi) dV \quad (2.53)$$

als allgemeinere Definition der Hermitizität von H .

Beweis von (2.47). Aus (2.50) folgt mit (2.12, 11, 48):

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \vec{\nabla} \psi + \psi^* \vec{\nabla} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d^3 x \\
&= \int \left((H \psi)^* \vec{\nabla} \psi - \psi^* \vec{\nabla} (H \psi) \right) d^3 x \\
&= \int \psi^* (H \vec{\nabla} - \vec{\nabla} H) \psi d^3 x \\
&= \int \psi^* \underbrace{(V \vec{\nabla} - \vec{\nabla} V)}_{= -(\vec{\nabla} V) \psi} \psi d^3 x \\
&= - \int \psi^* (\vec{\nabla} V) \psi d^3 x \\
&= -\langle \vec{\nabla} V \rangle, \tag{2.54}
\end{aligned}$$

wobei wiederum im dritten Schritt davon Gebrauch gemacht wurde, dass H ein hermitescher Operator ist.

In dem wichtigen **Spezialfall** $V = V(\vec{x})$, d. h. im Falle zeitunabhängigen Potentials, somit zeitunabhängigen Hamilton-Operators (autonomes System), ist die Schrödinger-Gleichung durch den *Separationsansatz*

$$\psi(\vec{x}, t) = \chi(\vec{x}) e^{-i\omega t} \tag{2.55}$$

lösbar; das ist eine harmonische Oszillation der Frequenz ω . Einsetzen von (2.55) in die Schrödinger-Gleichung (2.12) führt für den „Ortsanteil“ der Wellenfunktion auf die **stationäre Schrödinger-Gleichung**:

$$(H - \hbar\omega) \chi(\vec{x}) = 0. \tag{2.56}$$

Die Normierungsbedingung (2.34) für ψ überträgt sich wie folgt auf χ :

$$\int |\chi(\vec{x})|^2 dV = 1 \tag{2.57}$$

im Falle eigentlicher Zustände (gebundener Zustände). Bei uneigentlichen Zuständen (Streuzuständen) ist zwar

$$\int |\chi(\vec{x})|^2 dV = \infty \tag{2.58}$$

entsprechend (2.35), es ist aber wenigstens asymptotische Beschränktheit im Sinne von (2.36) zu fordern.

Bezeichnung von Zuständen der Gestalt (2.55) als **stationäre Zustände**, da zeitunabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(\vec{x}) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = |\chi(\vec{x})|^2 . \quad (2.59)$$

Auch die Erwartungswerte $\langle \vec{x} \rangle$ und $\langle \vec{p} \rangle$ hängen gemäß (2.44) bzw. (2.50) nicht von der Zeit ab. Das gleiche gilt für die Impulsverteilung.

Gl. (2.56) besitzt im allgemeinen mehrere, sogar unendlich viele, linear unabhängige Lösungen $\chi_\alpha(\vec{x})$:

$$(H - \hbar \omega_\alpha) \chi_\alpha(\vec{x}) = 0 \quad (2.60)$$

zu (verschiedenen) Frequenzen ω_α . Dabei kann die Indexmenge $\{\alpha\}$ diskret und/oder kontinuierlich sein. Mathematisch gesehen handelt es sich bei (2.60) – zusammen mit der Normierungs- bzw. Randbedingung – um die *Eigenwertgleichung* des Hamilton-Operators; mit der Abkürzung

$$E_\alpha = \hbar \omega_\alpha \quad (2.61)$$

schreibt man üblicherweise

$$(H - E_\alpha) \chi_\alpha(\vec{x}) = 0 . \quad (2.62)$$

Die mathematischen und physikalischen Aspekte dieser Gleichung werden noch ausführlich zu erörtern sein. Ein Resultat sei vorweggenommen: Im Zustand χ_α hat das System die *Energie* E_α .

Zu jedem Paar $\omega_\alpha, \chi_\alpha(\vec{x})$ gibt es einen stationären Zustand

$$\psi_\alpha(\vec{x}, t) = \chi_\alpha(\vec{x}) e^{-i\omega_\alpha t} \quad (2.63)$$

als Lösung von (2.12). Allgemeinere Lösungen von (2.12) liefert die Superposition

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \chi_{\alpha}(\vec{x}) e^{-i\omega_{\alpha} t} . \quad (2.64)$$

Wenn das Funktionensystem der $\chi_\alpha(\vec{x})$ „vollständig“ ist, erhält man auf diese Weise die *allgemeine Lösung* der Schrödinger-Gleichung; wenn das Funktionensystem der $\chi_\alpha(\vec{x})$ „orthogonal“ ist, kann man die Koeffizienten a_α durch den Anfangszustand $\psi(\vec{x}, 0)$ ausdrücken (als „inneres Produkt“ von $\chi_\alpha(\vec{x}, 0)$ und $\psi(\vec{x}, 0)$), und (2.64) liefert dann die zeitliche Entwicklung von $\psi(\vec{x}, t)$ aus $\psi(\vec{x}, 0)$. Siehe unten!

Das Symbol \sum_{α} in (2.64) bedeutet Summation im Falle diskreter und Integration im Falle kontinuierlicher Indexmenge $\{\alpha\}$.

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte folgt aus (2.64):

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha}^* a_{\beta} \chi_{\alpha}^*(\vec{x}) \chi_{\beta}(\vec{x}) e^{i(\omega_{\alpha} - \omega_{\beta})t}. \quad (2.65)$$

Diese Formel suggeriert die Möglichkeit der Emission und Absorption von elektromagnetischer Strahlung der Frequenzen

$$\omega_{\alpha\beta} = |\omega_{\alpha} - \omega_{\beta}| = \frac{|E_{\alpha} - E_{\beta}|}{\hbar}, \quad (2.66)$$

was an das Ritzsche Kombinationsprinzip (1.4) erinnert.

3 Freies Teilchen

Dieses System ist durch

$$V(\vec{x}, t) \equiv 0 \quad (3.1)$$

gekennzeichnet. Damit reduziert sich die Schrödinger-Gleichung (2.12) auf

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\vec{x}, t) = 0. \quad (3.2)$$

Mit dem Separationsansatz (2.55) geht man zur stationären Schrödinger-Gleichung (2.56) über:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \hbar \omega \right) \chi(\vec{x}) = 0; \quad (3.3)$$

die Lösung ist

$$\chi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (3.4)$$

mit

$$\omega_{\vec{k}} = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} \quad (3.5)$$

zur kontinuierlichen Indexmenge $\{\vec{k}\}$. \vec{k} reell, da $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ asymptotisch beschränkt $\Rightarrow \omega$ reell, was auch aus Δ hermitesch folgt.

Das Funktionensystem der $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ ist *vollständig*:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \int a(\vec{k}) \chi_{\vec{k}}(\vec{x}) d^3 k \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3 k, \end{aligned} \quad (3.6)$$

d. h. man kann beliebige $\psi(\vec{x})$ danach entwickeln.

Das Funktionensystem der $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ ist *orthonormiert*:

$$\begin{aligned} \int \chi_{\vec{k}'}^*(\vec{x}) \chi_{\vec{k}}(\vec{x}) d^3 x &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} d^3 x \\ &= \delta(\vec{k}' - \vec{k}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ sind uneigentliche Zustände: nicht quadratintegrabel, folglich nicht normierbar, jedoch asymptotisch beschränkt.

Mit (3.7) kann man aus (3.6) die zur Darstellung von $\psi(\vec{x})$ erforderliche Amplitude $a(\vec{k})$ berechnen:

$$\begin{aligned} a(\vec{k}) &= \int \chi_{\vec{k}}^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) d^3 x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) d^3 x . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Wie macht man das? Nach (3.6, 8) sind $\psi(\vec{x})$ und $a(\vec{k})$ zueinander Fourier-Transformierte. Zusammenhang mit Impulsdarstellung siehe unten.

Die stationären Zustände des freien Teilchens sind nach (2.63) die **ebenen Wellen**

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega_{\vec{k}} t)} \quad (3.9)$$

mit der Dispersionsbeziehung (3.5). Diese stimmt nach (1.9) mit dem Experiment überein, was ein starkes Argument für die Gültigkeit der (freien) Schrödinger-Gleichung ist.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Zustand (3.9) hat den konstanten Wert $(2\pi)^{-3}$ – unabhängig von \vec{k} , \vec{x} und t . Das Teilchen hält sich – unabhängig von seiner Geschwindigkeit – überall und ständig mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf; der Ort ist völlig unbestimmt. Da $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t)$ nicht normierbar ist, kann man zwar die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in einem bestimmten Volumen nicht angeben; man kann aber relative Wahrscheinlichkeiten gemäß (2.37) berechnen: $Q_{V_1} / Q_{V_2} = V_1 / V_2$. Der Mittelwert $\langle \vec{x} \rangle$ des Ortes ist nicht definiert.

Impulsdarstellung der ebenen Welle gemäß (2.41 a):

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{k}}(\vec{p}, t) &= \frac{1}{(2\pi\sqrt{\hbar})^3} \int e^{-i(\frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k})\cdot\vec{x}} d^3 x e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \\ &= \hbar^{3/2} \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}) e^{-i\omega_{\vec{k}} t} ; \end{aligned} \quad (3.10)$$

das ist ein Zustand mit dem scharfen Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$; siehe (1.5 b). Der nach (2.50), (3.9) oder (2.45), (3.10) berechnete Erwartungswert $\langle \vec{p} \rangle$ hat diesen Wert. *Achtung:* Die Integrale (2.45, 50) divergieren für ebene Wellen (3.9, 10); man arbeite mit „fast“ ebenen Wellen!

In der ebenen Welle ist der Ort des Teilchens völlig unbestimmt, während der Impuls einen scharfen Wert besitzt. Durch Überlagerung ebener Wellen gelangt man zu

Zuständen mit weniger unbestimmtem Ort, dafür aber weniger scharfem Impuls. Siehe unten!

Allgemeine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung durch Superposition der Basiszustände (3.9):

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}, t) &= \int a(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{x}, t) d^3 k \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int a(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega_{\vec{k}}t)} d^3 k .\end{aligned}\quad (3.11)$$

Gestalt und Lage dieses **Wellenpaketes** hängen von der Amplitudenfunktion und von der Zeit ab.

Betrachte zunächst einen *festen Zeitpunkt*, einfachheitshalber $t = 0$:

$$\psi(\vec{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int a(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} d^3 k \quad (3.12 \text{ a})$$

$$a(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}, 0) d^3 x , \quad (3.12 \text{ b})$$

vgl. (3.6, 8). $\psi(\vec{x}, 0)$ und $a(\vec{k})$ sind durch Fourier-Transformation miteinander verknüpft. $\psi(\vec{x}, 0)$ ist genau dann quadratintegabel, wenn $a(\vec{k})$ quadratintegabel ist; denn:

$$\int |\psi(\vec{x}, 0)|^2 d^3 x = \int |a(\vec{k})|^2 d^3 k , \quad (3.13)$$

vgl. (2.43). Das Wellenpaket hat seinen „Mittelpunkt“ beim Erwartungswert

$$\langle x_j \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, 0) x_j \psi(\vec{x}, 0) d^3 x , \quad j = 1, 2, 3 ; \quad (3.14)$$

es hat in j -Richtung die „Ausdehnung“

$$\Delta x_j = \sqrt{\langle (x_j - \langle x_j \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x_j^2 \rangle - \langle x_j \rangle^2} \quad (3.15)$$

– auch als *Varianz*, *Unschärfe* oder *Streuung* bezeichnet. Entsprechend hat man im \vec{k} -Raum:

$$\langle k_i \rangle = \int a^*(\vec{k}) k_i a(\vec{k}) d^3 k \quad (3.16)$$

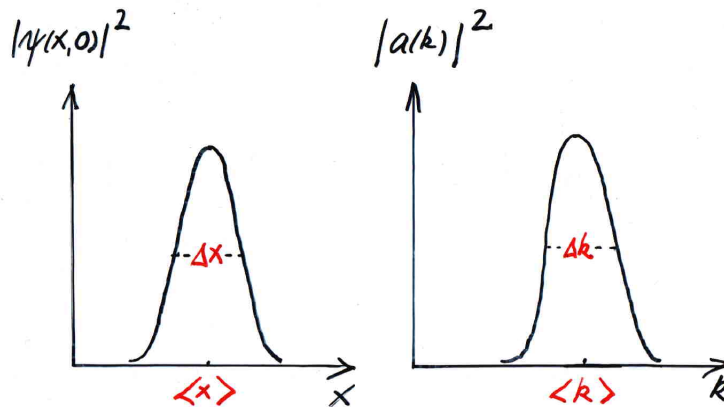
bzw.

$$\Delta k_j = \sqrt{\langle (k_j - \langle k_j \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle k_j^2 \rangle - \langle k_j \rangle^2} , \quad (3.17)$$

$i = 1, 2, 3$. Es gilt die **Unschärfebeziehung**

$$\Delta k_i \Delta x_j \geq \delta_{ij} / 2 . \quad (3.18)$$

Da es sich bei dieser Ungleichung um einen Spezialfall der später zu besprechenden und zu beweisenden „Heisenbergschen Unschärfebeziehung“ handelt, wird hier auf den Beweis verzichtet. Bedeutung von (3.18):



• Abbildung 3.1 •

Für jede beliebige feste Raumrichtung ($i = j$, Index weggelassen) gilt: Nach Vorgabe von Δk bezüglich dieser Richtung ist Δx bezüglich dieser Richtung nicht kleiner als $1/2 \Delta k$. Wenn man ein kleines Δx wünscht (Lokalisierung), hat man notwendig (i. a. nicht hinreichend) ein großes Δk vorzugeben, d. h. die ebenen Wellen aus einem großen Wellenzahlbereich zu überlagern. Wenn man ein kleines Δk vorgibt, erhält man ein großes Δx , d. h. ein räumlich ausgedehntes Wellenpaket. Im Grenzfall $a(k) = \delta(k - k_0)$ mit $\Delta k = 0$ resultiert $\psi(x, 0) \sim e^{ik_0 x}$ mit $\Delta x = \infty$ (eindimensional). Bezüglich verschiedener Raumrichtungen ($i \neq j$) gelten diese Einschränkungen nicht.

Zeitliche Entwicklung des Wellenpaketes. Einsetzen von (3.12 b) in (3.11) liefert den Zusammenhang zwischen $\psi(\vec{x}, t)$ und $\psi(\vec{x}, 0)$:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int G_0(\vec{x} - \vec{x}', t) \psi(\vec{x}', 0) d^3 x' \quad (3.19)$$

mit dem (freien, Index 0) **Propagator**

$$G_0(\vec{x} - \vec{x}', t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - \omega_{\vec{k}} t)} d^3 k ; \quad (3.20)$$

dieser hängt wesentlich von der Dispersionsbeziehung (3.5) ab.

Näherung: Die Amplitudenfunktion enthalte nur Beiträge aus der nahen Umgebung von $\vec{k} = \vec{k}_0$. Entwicklung von $\omega_{\vec{k}}$ um \vec{k}_0 :

$$\begin{aligned}\omega_{\vec{k}} &= \frac{\hbar}{2m} \vec{k}_0^2 + \frac{\hbar}{m} \vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + \frac{\hbar}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \\ &= \omega_0 + \vec{v}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + \frac{\hbar}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 ;\end{aligned}\quad (3.21)$$

dabei ist

$$\vec{v}_0 = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}}(\vec{k}_0) = \frac{\hbar}{m} \vec{k}_0 \quad (3.22)$$

die zu $\vec{k} = \vec{k}_0$ gehörige *Gruppengeschwindigkeit*. Linearisierung, d. h. Vernachlässigung des quadratischen Terms (was einer Vernachlässigung der Dispersion entspricht):

$$\omega_{\vec{k}} \simeq \omega_0 + \vec{v}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) . \quad (3.23)$$

Damit folgt aus (3.20) für G_0 die approximative Darstellung

$$\begin{aligned}G_0(\vec{x} - \vec{x}', t) &\simeq \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k}_0 \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - \omega_0 t)} \int e^{i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot (\vec{x} - \vec{x}' - \vec{v}_0 t)} d^3 k \\ &= e^{i(\vec{k}_0 \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - \omega_0 t)} \delta(\vec{x} - \vec{x}' - \vec{v}_0 t) ;\end{aligned}\quad (3.24)$$

diese führt in (3.19) auf die genäherte zeitliche Entwicklung

$$\psi(\vec{x}, t) \simeq e^{i\omega_0 t} \psi(\vec{x} - \vec{v}_0 t, 0) . \quad (3.25)$$

Das Wellenpaket bewegt sich unter Wahrung seiner Gestalt (ohne Dispersion) mit der Geschwindigkeit \vec{v}_0 geradlinig-gleichförmig durch den Raum (freies Teilchen!). Der Phasenfaktor ist ohne physikalische Bedeutung.

Im Laufe der Zeit tritt jedoch Dispersion auf. Will man auch diese erfassen, so hat man (3.20) *exakt* auszuwerten. Faktorisierung:

$$G_0(\vec{x} - \vec{x}', t) = \prod_{j=1}^3 g_0(x_j - x'_j, t) \quad (3.26)$$

mit

$$\begin{aligned}
g_0(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk \\
&= \frac{1}{2\pi} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\hbar t}{2m}(k - \frac{mx}{\hbar t})^2} dk \\
&\quad \text{Substitution: } \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}} \left(k - \frac{mx}{\hbar t}\right) = \kappa \\
&= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\kappa^2} d\kappa}_{= \sqrt{\pi} e^{-\frac{i\pi}{4}}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{i \frac{m x^2}{2 \hbar t}} . \tag{3.27}
\end{aligned}$$

Einsetzen von (3.27) in (3.26) liefert das Resultat

$$G_0(\vec{x} - \vec{x}', t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(i \frac{m(\vec{x} - \vec{x}')^2}{2\hbar t}\right) . \tag{3.28}$$

Mit diesem Propagator kann gemäß (3.19) die exakte zeitliche Entwicklung $\psi(\vec{x}, 0) \rightarrow \psi(\vec{x}, t)$ berechnet werden.

Beispiel: Gaußsches Wellenpaket, einfachheitshalber eindimensional:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} b}} e^{-\frac{x^2}{2b^2} + i k_0 x} ; \tag{3.29}$$

mit $v_0 = \hbar k_0 / m$ erhält man

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t \sqrt{\pi} b}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t} - \frac{x'^2}{2b^2} + i k_0 x'} dx' \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t \sqrt{\pi} b}} e^{\frac{im}{2\hbar t} \left(x^2 - \frac{(x-v_0 t)^2}{1 + i\hbar t / m b^2}\right)} I
\end{aligned}$$

mit

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{im}{2\hbar t} \left(1 + \frac{i\hbar t}{m b^2}\right) \left(x' - \frac{x - v_0 t}{1 + i\hbar t / m b^2}\right)^2} dx' = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar t}{m(1 + i\hbar t / m b^2)}} ,$$

folglich

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} b (1 + i \hbar t / m b^2)}} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar t} \left(x^2 - \frac{(x - v_0 t)^2}{1 + i \hbar t / m b^2}\right)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} b (1 + i \hbar t / m b^2)}} \exp\left(\frac{-x^2 / 2 b^2 + i (k_0 x - \omega_0 t)}{1 + i \hbar t / m b^2}\right)\end{aligned}\quad (3.30)$$

mit $\omega_0 = \hbar k_0^2 / 2m$; der Ausdruck (3.30) geht im Limes $t \rightarrow 0$ in (3.29) über.

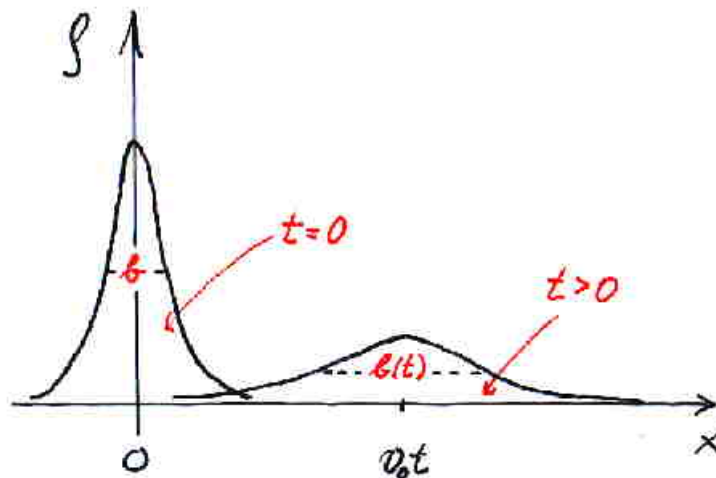
Von größerem Interesse als die Wellenfunktion ist die Dichte:

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \psi^*(x, t) \psi(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi} b(t)} e^{-\left(\frac{x - v_0 t}{b(t)}\right)^2}\end{aligned}\quad (3.31)$$

mit

$$b(t) = b \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m b^2}\right)^2}.\quad (3.32)$$

Das Wellenpaket bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit v_0 in x -Richtung:



• Abbildung 3.2 •

Es wird dabei zunehmend breiter und flacher: es „zerfließt“ infolge Dispersion. Dieser Effekt ist umso signifikanter, je kleiner die Masse m ist: im makroskopischen Bereich vernachlässigbar, im mikroskopischen Bereich im Allgemeinen nicht.

Beispiel: Elektron. $b = b(0) = 10^{-7} \text{ m} \Rightarrow b(1 \text{ s}) = 1 \text{ km}$. Ein Elektron der kinetischen Energie 100 eV durchläuft eine Apparatur von 5 m Länge in der Laufzeit $\tau = 10^{-6}$ s; für $b(0) = 10^{-4} \text{ m}$ folgt $b(\tau)/b(0) = 1.00005$; in diesem Fall ist die Dispersion zu vernachlässigen. Siehe auch Jelitto 4, S. 43/44 •

Die *Impulsdarstellung* des Wellenpaketes (3.11) ist nach (2.41 a)

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{p}, t) &= \frac{1}{\hbar^{3/2}} \int a(\vec{k}) \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k} - \vec{p}/\hbar) \cdot \vec{x}} d^3x e^{-i\omega_{\vec{k}} t} d^3k}_{= \delta(\vec{k} - \vec{p}/\hbar)} \\ &= \hbar^{-3/2} a(\vec{p}/\hbar) e^{-i\omega_{\vec{p}/\hbar} t}; \end{aligned} \quad (3.33)$$

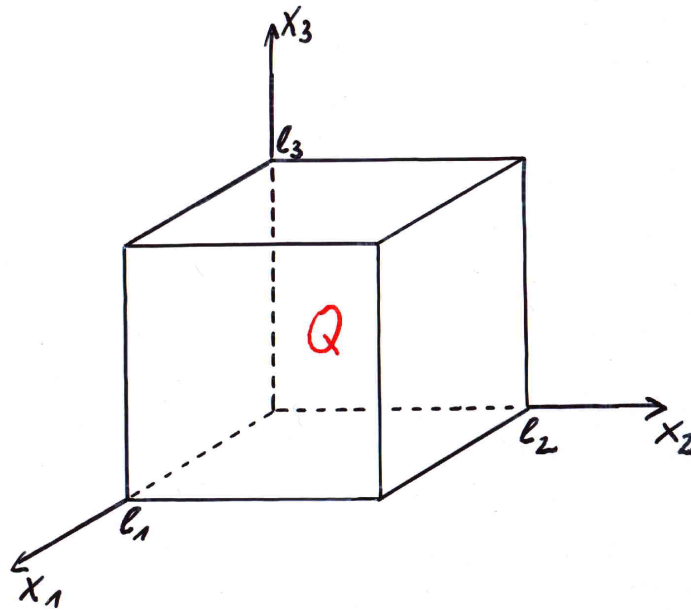
im Spezialfall der ebenen Welle ist $a(\vec{p}/\hbar) = \delta(\vec{p}/\hbar - \vec{k})$, und (3.33) geht in (3.10) über. Die \vec{p} -Verteilung (Wahrscheinlichkeitsdichte) des Wellenpaketes ergibt sich aus (3.33) zu

$$|\varphi(\vec{p}, t)|^2 = \frac{1}{\hbar^3} |a(\vec{p}/\hbar)|^2; \quad (3.34)$$

sie ist zeitlich konstant, wie es sich für ein freies Teilchen gehört.

Das Teilchen sei nun in einem **Kasten** Q eingesperrt:

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x_i < l_i, \quad i = 1, 2, 3 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3.35)$$



• Abbildung 3.3 •

d. h. auf Q eingeschränkte, daselbst aber freie Bewegung. Außerhalb von Q ist die Bewegung „verboten“: $\chi(\vec{x}) \equiv 0$. Innerhalb von Q hat man die freie stationäre Schrödinger-Gleichung

$$(\Delta + \vec{k}^2) \chi(\vec{x}) = 0 \quad (3.36)$$

mit der Normierungsbedingung

$$\int_Q |\chi(\vec{x})|^2 d^3 x = 1 \quad (3.37)$$

zu lösen; zusätzliche Randbedingung:

$$\chi(\vec{x}) = 0 \quad \text{für } \vec{x} \in S(Q) \quad (3.38)$$

wegen Stetigkeit der χ -Funktion auf dem Rand S von Q . Siehe Jelitto 4, Kap. 2.7.1.

Das vorstehende Problem ist – wie schon das Problem des uneingeschränkt freien Teilchens – *separabel* in x_1, x_2, x_3 :

$$\left(\frac{d^2}{dx_i^2} + k_i^2 \right) \chi^{(i)}(x_i) = 0 \quad (3.39)$$

mit

$$\int_0^{l_i} |\chi^{(i)}(x_i)|^2 dx_i = 1 \quad (3.40)$$

und

$$\chi^{(i)}(0) = \chi^{(i)}(l_i) = 0 \quad (3.41)$$

ist für $i = 1, 2, 3$ zu lösen; daraus resultiert

$$\chi(\vec{x}) = \chi^{(1)}(x_1) \chi^{(2)}(x_2) \chi^{(3)}(x_3) \quad (3.42)$$

mit

$$\vec{k}^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2. \quad (3.43)$$

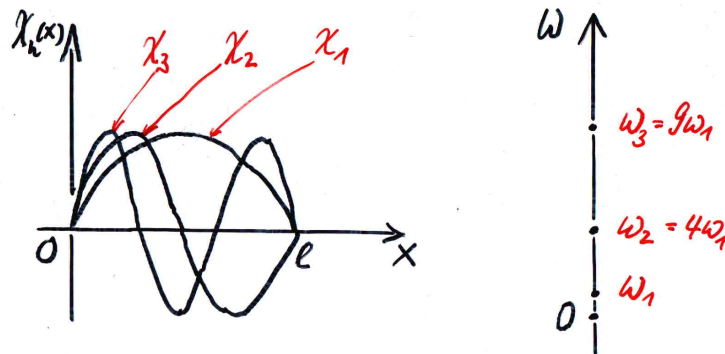
Einfachheitshalber betrachten wir nur das *eindimensionale Problem* (3.39, 40, 41), ohne Index i ; dessen Lösung ist

$$\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l} \quad (3.44)$$

mit

$$k_n^2 = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \Rightarrow \omega_n = \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \quad (3.45)$$

zur diskreten Indexmenge $\{n = 1, 2, 3, \dots\}$.



• Abbildung 3.4 •

Quantisierung als Konsequenz der Randbedingungen; diese sind eine Konsequenz der Gebundenheit an den Kasten (Verschwinden von χ außerhalb des Kastens und Stetigkeit von χ); die Lokalisierung der Bewegung ist aber äquivalent zur Normierbarkeit der

χ -Funktion. Also: Endliche χ -Norm impliziert Quantisierung! Dieser allgemeingültige Zusammenhang wird in späteren Beispielen noch deutlicher werden.

Das Funktionensystem der $\chi_n(x)$ ist *vollständig*:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{\pi n x}{l} \quad (3.46)$$

für alle $\psi(x)$ mit $\psi(0) = \psi(l) = 0$. Fourier-Reihe.

Das Funktionensystem der $\chi_n(x)$ ist *orthonormiert*:

$$\int_0^l \chi_m^*(x) \chi_n(x) dx = \frac{2}{l} \int_0^l \sin \frac{\pi m x}{l} \sin \frac{\pi n x}{l} dx = \delta_{mn} . \quad (3.47)$$

Damit berechnet man die Fourier-Koeffizienten in (3.46) zu

$$a_n = \int_0^l \chi_n^*(x) \psi(x) dx = \sqrt{\frac{2}{l}} \int_0^l \sin \frac{\pi n x}{l} \psi(x) dx . \quad (3.48)$$

Wie macht man das?

Die *stationären Zustände* des Teilchens im (eindimensionalen) Kasten sind

$$\psi_n(x, t) = \chi_n(x) e^{-i\omega_n t} ; \quad (3.49)$$

die *allgemeine Lösung* gewinnt man durch Superposition:

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x, t) = \sum_n a_n \chi_n(x) e^{-i\omega_n t} . \quad (3.50)$$

Für $\chi_n(x)$ und ω_n sind die Ausdrücke (3.44, 45) einzusetzen.

Setzt man die zu $\psi(x, 0)$ gehörigen Entwicklungskoeffizienten a_n gemäß (3.48) in (3.50) ein, so kann man die zeitliche Entwicklung von $\psi(x, t)$ aus $\psi(x, 0)$ wie folgt darstellen:

$$\psi(x, t) = \int_0^l g(x, x', t) \psi(x', 0) dx' \quad (3.51)$$

mit dem *Propagator*

$$\begin{aligned} g(x, x', t) &= \sum_n \chi_n(x) e^{-i\omega_n t} \chi_n^*(x') \\ &= \frac{2}{l} \sum_n \sin \frac{\pi n x}{l} e^{-\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} \sin \frac{\pi n x'}{l} . \end{aligned} \quad (3.52)$$

Diese Summe gestattet – im Unterschied zum Integral (3.27) – keine einfache Auswertung. Oder doch?

4 Erwartungswerte und Operatoren

Das betrachtete Teilchen befinde sich im Zustand $\psi(x, t)$. Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ort \vec{x} und den Impuls \vec{p} gemäß Kap. 2. Die *Erwartungswerte* der Größen \vec{x} und \vec{p} werden dort als Mittelwerte aus den Resultaten der \vec{x} -Messung bzw. der \vec{p} -Messung an den Teilchen der durch ψ beschriebenen Gesamtheit definiert:

$$\langle \vec{x} \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \vec{x} \psi(\vec{x}, t) d^3 x \quad (4.1)$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3 x \quad (4.2)$$

gemäß (2.44) bzw. (2.45, 50). *Beispiel:* Beim Gaußschen Wellenpaket (3.30) ist $\langle x \rangle = v_0 t$ und $\langle p \rangle = m v_0$. Verifiziere das!

Auch über beliebige andere *dynamische Variablen* $A = A(\vec{x}, \vec{p}, t)$ sind in der QUM im Allgemeinen nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich: Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen A -Werte, Erwartungswert $\langle A \rangle$ usw.

Welche Aussagen kann man im Zustand $\psi(\vec{x}, t)$ über die *Energie* des Teilchens machen? Erwartungswert der *potentiellen Energie*:

$$\langle V \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) V(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) d^3 x . \quad (4.3)$$

Zeitliche Änderung:

$$\frac{d}{dt} \langle V \rangle = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} V \psi d^3 x + \int \psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3 x + \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle \quad (4.4)$$

mit

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial V}{\partial t}(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) d^3 x . \quad (4.5)$$

Mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung und auf Grund der Hermitezität des Hamilton-Operators folgt aus (4.4):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle V \rangle &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H V - V H) \psi d^3 x + \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \psi^* \left(H \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) H \right) \psi d^3 x + \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Erneute Ausnutzung der Hermitezität von H und Anwendung von (2.12) führt auf

$$\frac{d}{dt} \langle V \rangle = -\frac{d}{dt} \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi d^3 x + \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle. \quad (4.7)$$

Mit der Abkürzung

$$\langle T \rangle = \int \psi^* (\vec{x}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi (\vec{x}, t) d^3 x \quad (4.8)$$

erhält man schließlich

$$\frac{d}{dt} (\langle T \rangle + \langle V \rangle) = \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle. \quad (4.9)$$

Es liegt nahe, $\langle T \rangle$ als Erwartungswert der *kinetischen Energie* zu interpretieren. (4.9) ist dann die *Energiebilanz* des Teilchens im Mittel über eine statistische Gesamtheit: Bei Systemen mit $\partial V / \partial t = 0$ (konservativen Systemen) ist die Summe der mittleren kinetischen und der mittleren potentiellen Energie zeitlich konstant; im Falle $\partial V / \partial t \neq 0$ ändert sich die mittlere Energie im Laufe der Zeit infolge t -Abhängigkeit der auf das Teilchen einwirkenden Kraft.

Schließlich führt man den Erwartungswert der *Energie* ein:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle T \rangle + \langle V \rangle \\ &= \int \psi^* (x, t) H \psi (\vec{x}, t) d^3 x. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Mit $\partial H / \partial t = \partial V / \partial t$ nimmt die Energiebilanz (4.9) die folgende Gestalt an:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle. \quad (4.11)$$

Vgl. mit der klassisch mechanischen Beziehung $dH / dt = \partial H / \partial t$, einem Spezialfall von (2.4). In *konservativen Systemen* ist der Erwartungswert der Energie eine Konstante der Bewegung:

$$\langle H \rangle = \text{konstant} . \quad (4.12)$$

In den *stationären Zuständen* (2.63) ist

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_\alpha &= \int \psi_\alpha^* (\vec{x}, t) H \psi_\alpha (x, t) d^3 x \\ &= \int \chi_\alpha^* (\vec{x}) H \chi_\alpha (\vec{x}) d^3 x ; \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit (2.56, 57) folgt daraus

$$\begin{aligned}\langle H \rangle_\alpha &= \hbar \omega_\alpha \int \chi_\alpha^*(\vec{x}) \chi_\alpha(\vec{x}) d^3 x \\ &= \hbar \omega_\alpha .\end{aligned}\tag{4.14}$$

Später wird gezeigt, dass dieser Erwartungswert „scharf“ ist: Das Teilchen hat im Zustand $\psi_\alpha(\vec{x}, t)$ mit Sicherheit die Energie $E_\alpha = \hbar \omega_\alpha$, d. h. alle Teilchen der Gesamtheit haben diesen E -Wert.

(4.1, 2, 3, 8, 10) suggerieren das folgende **allgemeine Schema**: Die klassischen **Observablen** A werden in der QUM durch **Operatoren** \hat{A} dargestellt; z. B.

- Ort: $A = \hat{A} = \vec{x}$ Multiplikation
- Impuls: $A = \vec{p}, \hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$ Gradient
- kinet. Energie: $A = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \hat{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2}$ Laplace
- potent. Energie: $A = \hat{A} = V(\vec{x}, t)$ Multiplikation
- Energie: $A = \text{Hamilton-Funktion} \quad \hat{A} = \text{Hamilton-Operator}$

Formel für den **Erwartungswert** von A :

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \psi(\vec{x}, t) d^3 x ;\tag{4.15}$$

dieser hängt im Allgemeinen von der Zeit ab.

Anmerkungen:

- Die Operatoren \hat{A} sind hier zunächst nur in der Ortsdarstellung aufgeführt; sie wirken auf Wellenfunktionen $\psi(\vec{x}, t)$. Man kann die \hat{A} auch in der Impulsdarstellung angeben, wo sie auf Wellenfunktionen $\varphi(\vec{p}, t)$ anzuwenden sind, z. B. $\vec{x} \rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \vec{p} \rightarrow \vec{p}, \dots$ siehe (2.51, 45). Später wird ein allgemeines Verfahren entwickelt, wie man Zustandsfunktionen und Operatoren in beliebige Darstellungen transformiert.
- Sei $\partial \hat{A} / \partial t = 0$. In den stationären Zuständen $\psi_\alpha(\vec{x}, t)$ ist der Erwartungswert $\langle A \rangle_\alpha$ zeitlich konstant.

Eigenschaften der Operatoren \hat{A} 1. *Linearität:*

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2, \quad (4.16)$$

$\alpha, \beta, \in \mathbf{C}$. Jelitto 4, S. 58. Im Falle $\hat{A} = H$ ist diese Eigenschaft (zusammen mit der Homogenität der Schrödinger-Gleichung) bedeutsam für die Begründung des Superpositionsprinzips der QUM; siehe Kap. 2.

2. *Hermitezität:*

$$\int (\hat{A}\psi)^* \psi d^3x = \int \psi^* (\hat{A}\psi) d^3x, \quad (4.17)$$

vgl. (2.40) für $\hat{A} = H$. Die bisher diskutierten Operatoren \vec{x} , $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$, $\dots - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta$, \dots besitzen sämtlich diese Eigenschaft. Zeige das! Aus (4.17) folgt mit (4.15):

$$\langle A \rangle^* = \langle A \rangle, \quad (4.18)$$

d. h. die Erwartungswerte sind *reell* – als unerlässliche Eigenschaft physikalischer Messgrößen.

Folgerung: Für beliebige ψ_1, ψ_2 gilt (siehe (2.53) für $\hat{A} = H$; siehe Jelitto 4, S. 71):

$$\int (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 d^3x = \int \psi_1^* (\hat{A}\psi_2) d^3x. \quad (4.19)$$

Beweis: Wegen (4.17) gilt für beliebiges $\beta \in \mathbf{C}$:

$$\begin{aligned} 0 &= \int (\hat{A}(\psi_1 + \beta\psi_2))^* (\psi_1 + \beta\psi_2) d^3x - \text{konj. kompl.} \\ &= \beta \left(\int (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 d^3x - \int \psi_1^* (\hat{A}\psi_2) d^3x \right) - \text{konj. kompl.}; \end{aligned} \quad (4.20)$$

folglich ist $\beta(\dots)$ reell; wegen der Beliebigkeit von β (z. B. $\beta = 1, i$) muss $(\dots) = 0$ gelten; das ist aber die *Behauptung*.

Wie konstruiert man den zur klassisch-mechanischen Variablen A gehörigen quantenmechanischen Operator \hat{A} ? *Vorschrift:*

$$A(\vec{x}, \vec{p}, t) \longrightarrow \hat{A} = A\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}, t\right). \quad (4.21)$$

Siehe z. B. die Konstruktion des Hamilton-Operators aus der Hamilton-Funktion in Kap. 2.

Beispiel: Bahndrehimpuls:

$$A = \vec{x}, \wedge \vec{p} \quad \longrightarrow \quad \hat{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (4.22)$$

linear und hermitesch. Beweise das!

Achtung! Das Verfahren ist nicht eindeutig und führt im Allgemeinen nicht auf hermitesche Operatoren; nur als grobe Faustregel zu verstehen; z. B.

$$A = \vec{x} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{x} \quad \longrightarrow \quad \hat{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \neq \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{x} \quad (4.23)$$

zweideutig, nicht hermitesch. Einen hermiteschen Operator erhält man wie folgt

$$A = \frac{1}{2} (\vec{x} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{x}) \quad \longrightarrow \quad \hat{A} = \frac{\hbar}{2i} \left(\vec{x} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{x} \right); \quad (4.24)$$

beweise die Hermitezität!

Zur *Vereinfachung* wird im folgenden \hat{A} mit A bezeichnet. Bezeichnung der Variablen und des Operators gleichermaßen als *Observable*.

Kommutator zweier Observablen. A, B im Allgemeinen nicht vertauschbar, d. h.

$$[A, B] = AB - BA \quad (4.25)$$

im Allgemeinen nicht gleich dem Nulloperator. *Beispiel: Heisenbergsche Vertauschungsrelationen* zwischen \vec{x}, \vec{p} -Komponenten:

$$[x_j, p_k] = i \hbar \delta_{jk} \quad (4.26 \text{ a})$$

$$[x_j, x_k] = 0 \quad (4.26 \text{ b})$$

$$[p_j, p_k] = 0 \quad (4.26 \text{ c})$$

$j, k = 1, 2, 3$. In der Ortsdarstellung leicht zu beweisen; gelten auch in jeder anderen Darstellung. Siehe unten!

Kommutator-Algebra – vgl. Poisson-Klammern der KLM:

1.

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$\Rightarrow [A, A] = 0 \quad (4.27)$$

2.

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$$

$$\Rightarrow [A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad (4.28)$$

3.

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

$$\Rightarrow [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (4.29)$$

4.

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0. \quad (4.30)$$

Die qum. Observablen bilden eine *Algebra*: additive ($A + B$) und multiplikative (AB) Verknüpfung; wegen der zusätzlichen antikommutativen (1.), bilinearen (2.) Verknüpfung $[A, B]$, die der Produktregel (3.) und der Jacobi-Identität (4.) genügt, handelt es sich um eine *Lie-Algebra*. Die klm. Observablen – auch addierbar und multiplizierbar – bilden bezüglich der Poisson Klammer $\{A, B\}$ ebenfalls eine Lie-Algebra.

Unschärfe des Erwartungswertes einer Observablen A , d. h. Streuung der Messwerte von A um ihren Mittelwert:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (4.31)$$

Beispiel: Beim Gaußschen Wellenpaket (3.30) ist $\Delta x = b(t) / \sqrt{2}$, $\Delta p = \hbar / \sqrt{2} b$, d. h. Δx nimmt im Laufe der Zeit gemäß (3.32) zu, während Δp zeitlich konstant ist. Verifiziere dieses Resultat!

In den *stationären Zuständen* (2.63) ist

$$(\Delta H)_\alpha = 0; \quad (4.32)$$

folgt mit $H \chi_\alpha = E_\alpha \chi_\alpha \Rightarrow H^2 \chi_\alpha = E_\alpha^2 \chi_\alpha$. Die stationären Zustände $\psi_\alpha(\vec{x}, t)$ sind also Zustände scharfer Energie E_α – wie im Anschluss an (4.14) behauptet wurde. – Sei A beliebig mit $\partial A / \partial t = 0$. In den stationären Zuständen $\psi_\alpha(\vec{x}, t)$ ist die Unschärfe $(\Delta A)_\alpha$ zeitlich konstant.

Die Nichtvertauschbarkeit zweier Observablen A, B impliziert eine **Unschärfebeziehung**:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (4.33)$$

in beliebigen Zuständen ψ .

Beweis: Zunächst macht man sich klar, dass gilt:

$$[A, B] = iC \quad (4.34)$$

mit A, B hermitesch $\Rightarrow C$ hermitesch, siehe Jelitto 4, Kap. 2.8.1. Mit

$$\tilde{A} = A - \langle A \rangle, \quad \tilde{B} = B - \langle B \rangle \quad (4.35)$$

gilt für beliebiges reelles β und wegen \tilde{A}, \tilde{B} hermitesch:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int ((\tilde{A} + i\beta\tilde{B})\psi)^* (\tilde{A} + i\beta\tilde{B})\psi d^3x \\ &= \int \psi^* \tilde{A}^2 \psi d^3x + \beta^2 \int \psi^* \tilde{B}^2 \psi d^3x + i\beta \int \psi^* (\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}) \psi d^3x \\ &= \langle \tilde{A}^2 \rangle + \beta^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle + i\beta \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle \\ &= (\Delta A)^2 + \beta^2 (\Delta B)^2 + i\beta \langle [A, B] \rangle; \end{aligned} \quad (4.36)$$

mit (4.34) erhält man schließlich die Ungleichung:

$$(\Delta B)^2 \beta^2 - \langle C \rangle \beta + (\Delta A)^2 \geq 0. \quad (4.37)$$

Diese ist dann identisch in β erfüllt, wenn die Diskriminante des β -Polynoms vom Grade 2 auf der linken Seite nicht positiv ist (keine zwei reellen Nullstellen):

$$\langle C \rangle^2 - 4(\Delta B)^2 (\Delta A)^2 \leq 0, \quad (4.38)$$

woraus mit (4.34) die *Behauptung* (4.33) folgt.

In dem Spezialfall $A = x_j, B = p_j$ folgt mit (4.26 a) aus (4.33) die **Heisenbergsche Unschärfebeziehung**:

$$\Delta x_j \Delta p_j \geq \hbar/2, \quad j \geq 1, 2, 3. \quad (4.39)$$

Es gibt keinen Zustand ψ , in dem das Unschärfeprodukt von Orts- und Impulskomponente – beide bezogen auf dieselbe Richtung – kleiner als $\hbar/2$ ist; es ist nicht möglich,

eine derartige Gesamtheit von Teilchen zu präparieren. *Beispiel:* Beim Gaußschen Wellenpaket (3.30) hat man mit den Resultaten im Anschluss an (4.31) und mit (3.32):

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p &= \frac{\hbar}{2} \frac{b(t)}{b} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 b^4}} \\ &\geq \frac{\hbar}{2} .\end{aligned}\tag{4.40}$$

Für $t = 0$ steht das Gleichheitszeichen: *minimales Wellenpaket*. – Diskutiere die Heisenbergsche Unschärfebeziehung auch am Beispiel der „Beugung am Spalt“; siehe Abbildung 2.2!

Unter den Observablen des betrachteten Systems spielt der Hamilton-Operator eine besondere Rolle. Er repräsentiert nicht nur die wichtige Größe Energie, sondern er steuert auch die zeitliche Entwicklung, d. i. die *Dynamik des Systems*: siehe Schrödinger-Gleichung. Über die t -Abhängigkeit der Wellenfunktion bestimmt er auch die t -Abhängigkeit der Erwartungswerte; mit (2.12, 40) und (4.15) erhält man nämlich:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d^3 x \\ &= \frac{i}{\hbar} \int ((H \psi)^* A \psi - \psi^* A (H \psi)) d^3 x + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi d^3 x \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H A - A H) \psi d^3 x + \int \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi d^3 x \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle .\end{aligned}\tag{4.41}$$

Zur zeitlichen Veränderung von A im Mittel tragen der Kommutator $\frac{1}{i\hbar} [A, H]$ und die t -Abhängigkeit $\partial A / \partial t$ im Mittel bei. Vgl. die KLM-Formel (2.4). Für $A = \vec{x}$ und $A = \vec{p}$ erhält man (mit $\partial \vec{x} / \partial t = \vec{0}$, $\partial \vec{p} / \partial t = \vec{0}$) das Theorem von Ehrenfest; Übung! Zur Definition von $\partial A / \partial t$ siehe Jelitto 4, S. 175/76.

Sei A nicht explizit zeitabhängig: $\partial A / \partial t = 0$. Man bezeichnet in der QUM (wie in der KLM) die mit H kommutierenden Observablen als *Erhaltungsgrößen*:

$$\begin{aligned}[H, A] = 0 &\quad \Rightarrow \quad \langle A \rangle = \text{konstant} \\ \Rightarrow [H, A^2] = 0 &\quad \Rightarrow \quad \Delta A = \text{konstant} .\end{aligned}\tag{4.42}$$

Erwartungswert und Unschärfe von Erhaltungsgrößen sind in jedem Zustand $\psi(\vec{x}, t)$, welcher der Schrödinger-Gleichung genügt, zeitlich konstant. *Beispiele:* H selbst, d. i. Energieerhaltung; Impuls des freien Teilchens.

Energie-Zeit-Unschärfebeziehung. Für $B = H$ folgt aus (4.33) mit (4.41):

$$\begin{aligned} \Delta A \Delta E &\geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle| \\ &= \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|, \end{aligned} \quad (4.43)$$

sofern A nicht explizit zeitabhängig ist. *Definition:*

$$\begin{aligned} \tau_A &= \frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \\ \tau &= \min_A \tau_A, \end{aligned} \quad (4.44)$$

wobei die für eine bestimmte Fragestellung charakteristischen Observablen des Systems zu berücksichtigen sind. Innerhalb des Zeitintervalls τ gehen dynamische Änderungen des Systems in den Unschärfen der betrachteten Observablen unter; daher wird τ als *Lebensdauer* des zu Grunde liegenden Zustandes $\psi(\vec{x}, t)$ bezeichnet. Aus (4.33, 44) folgt die Ungleichung

$$\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (4.45)$$

Diskussion der Energie-Zeit-Unschärferelation in Nolting 5.1, Kap. 3.4.6. Bedeutung von (4.45) für die zeitabhängige Prozesse: Stoßprozesse, Zerfallsprozesse, ... Für stationäre Zustände ist zwar $\Delta E = 0$, aber $\tau = \infty$ (wegen $d\langle A \rangle / dt = 0$).

5 Eindimensionale Bewegung

Das Teilchen bewege sich in einer Dimension (x -Richtung) im Potential $V(x)$. Hamilton-Operator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) . \quad (5.1)$$

Stationäre Schrödinger-Gleichung (2.62) = Eigenwertgleichung von H :

$$(H - E) \chi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \chi''(x) + k^2(x) \chi(x) = 0 \quad (5.2)$$

mit

$$k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) . \quad (5.3)$$

Gesucht sind die Energieeigenwerte E_α und die Energieeigenfunktionen $\chi_\alpha(x)$. Diese hängen wesentlich davon ab, welche Gestalt $V(x)$ hat. Es gibt jedoch davon (weitgehend) unabhängige **allgemeine Eigenschaften**:

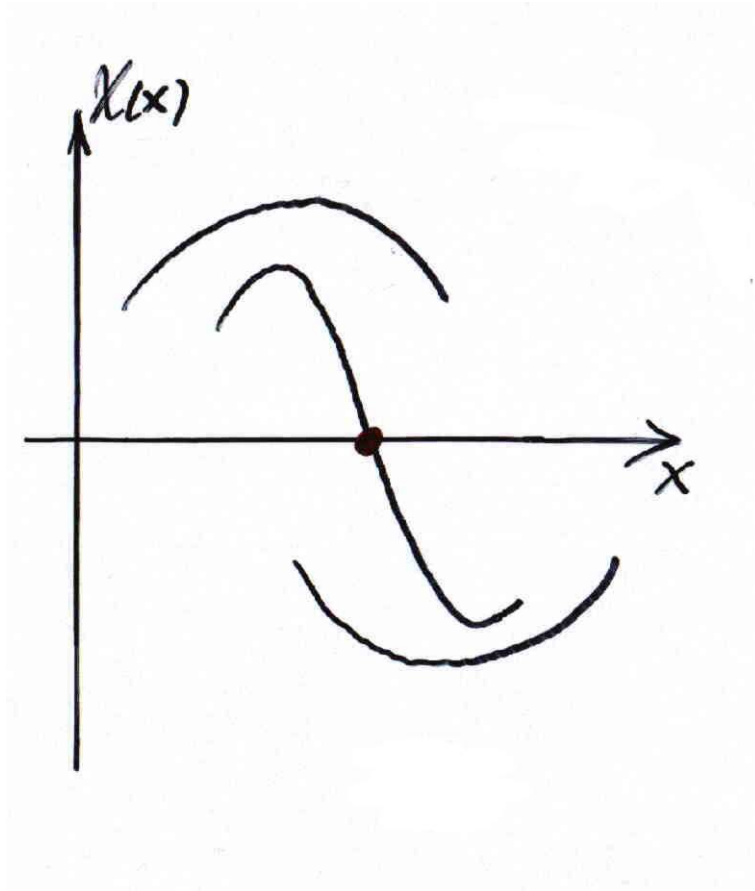
- Beschränkung auf $\chi(x)$ **reell** möglich; denn mit $\chi(x)$ ist auch $\chi^*(x)$ Lösung; falls χ, χ^* linear unabhängig, konstruiert man daraus die reelle Basis $\chi(x) + \chi^*(x)$ und $-i(\chi(x) - \chi^*(x))$. $\chi(x)$ und $\chi'(x)$ überall **stetig** (sofern $V(x)$ höchstens endliche Diskontinuitäten aufweist). Begründung?

- Typisches Verhalten von $\chi(x)$ in **klassisch erlaubten** und **klassisch verbotenen Bereichen** der x -Achse:

a) *klassisch erlaubtes Gebiet*:

$$V(x) < E \quad \Leftrightarrow \quad k^2(x) > 0 ; \quad (5.4)$$

dort haben $\chi''(x)$ und $\chi(x)$ stets entgegengesetztes Vorzeichen $\Rightarrow \chi(x)$ zur x -Achse *hingekrümmt*:



• Abbildung 5.1 a •

$\Rightarrow \chi(x)$ oszillierend; z. B. $V(x) = \text{konstant}$:

$$\chi(x) = a e^{i k x} + b e^{-i k x} \quad (5.5)$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)} .$$

Nulldurchgänge sind Wendepunkte: $\chi(x_0) = 0 \Rightarrow \chi''(x_0) = 0$. Bezeichnung als *Knoten*.

b) *klassische Umkehrpunkte*:

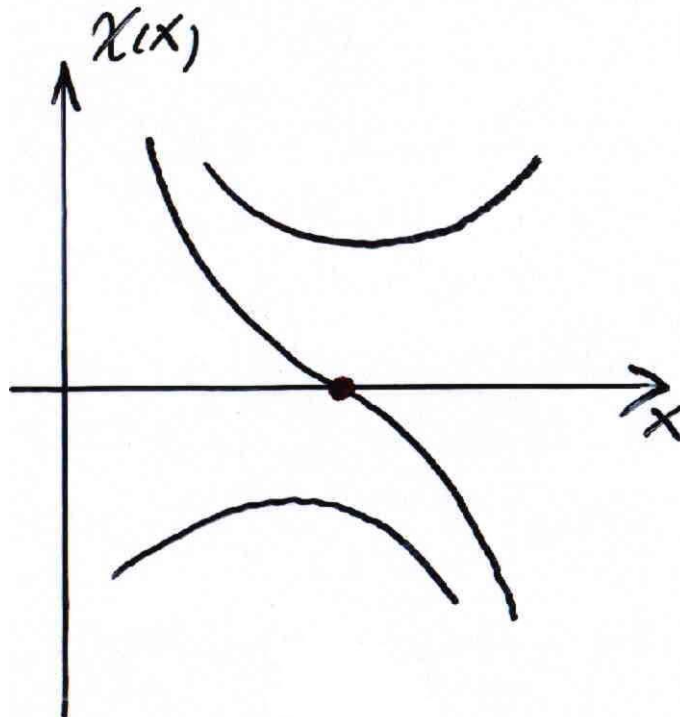
$$V(x) = E \Rightarrow k^2(x) = 0 ; \quad (5.6)$$

dort hat wegen $\chi''(x) = 0$ die Wellenfunktion $\chi(x)$ einen Wendepunkt, nicht notwendig auf der x -Achse.

c) *klassisch verbotenes Gebiet* (quantenmechanisch i. a. nicht verboten):

$$V(x) > E \Leftrightarrow k^2(x) < 0; \quad (5.7)$$

dort haben $\chi''(x)$ und $\chi(x)$ überall gleiches Vorzeichen $\Rightarrow \chi(x)$ von der x -Achse *weggekrümmt*:



• Abbildung 5.1 b •

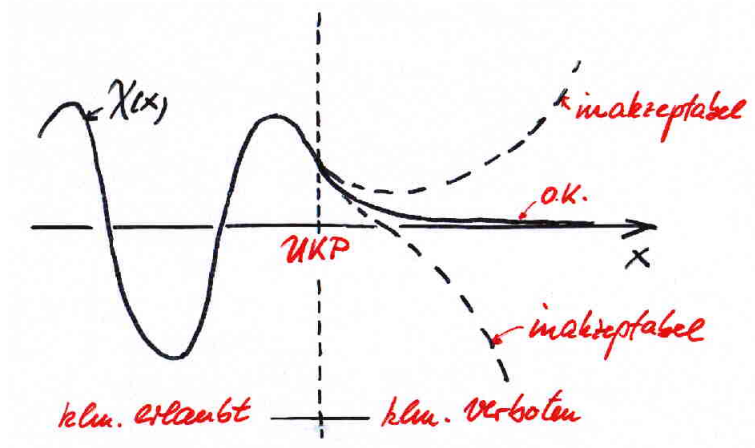
$\Rightarrow \chi(x)$ *exponentiell abfallend* oder *anwachsend* (letzteres nur möglich, falls sich ein erlaubter Bereich anschließt); z. B. $V(x) = \text{konstant}$:

$$\chi(x) = ce^{\kappa x} + de^{-\kappa x} \quad (5.8)$$

mit

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V - E)}.$$

Übergang vom klm. erlaubten zum klm. verbotenen Bereich (ohne Anschluss eines weiteren klm. erlaubten Bereiches):



• Abbildung 5.2 •

• **Wronski-Determinante.** Betrachte zwei Lösungen $\chi_1(x)$ und $\chi_2(x)$ zu den Energien E_1 bzw. E_2 :

$$\chi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V(x)) \chi_1(x) = 0 \quad (5.9)$$

$$\chi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - V(x)) \chi_2(x) = 0 .$$

Multiplikation der ersten Gleichung mit $\chi_2(x)$, der zweiten Gleichung mit $\chi_1(x)$ sowie Subtraktion:

$$\chi_1''(x) \chi_2(x) - \chi_2''(x) \chi_1(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \chi_1(x) \chi_2(x) ; \quad (5.10)$$

Integration von $x = a$ bis $x = b$, partielle Integration. Mit

$$W_{12}(x) = \left(\chi_1(x) \chi_2'(x) - \chi_2(x) \chi_1'(x) \right) \quad (5.11)$$

erhält man

$$W_{12}(x) \Big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2) \int_a^b \chi_1(x) \chi_2(x) dx . \quad (5.12)$$

Seien $\chi_1(x)$, $\chi_2(x)$ *normierte Zustände* (gebundene Zustände), d. h. E_1, E_2 aus dem diskreten Spektrum von H (siehe unten).

a) Für $E_1 = E_2$ ergibt sich aus (5.12) – mit $W_{12}(\pm\infty) = 0$:

$$W_{12}(x) \equiv 0 ; \quad (5.13)$$

folglich sind $\chi_1(x), \chi_2(x)$ linear abhängig; zeige das! Wegen Gleichheit der Norm (= 1) erhält man

$$\chi_1(x) = e^{i\beta} \chi_2(x) , \quad (5.14)$$

$\beta \in \mathbb{R}$, d. i. „physikalische Gleichheit“: keine Entartung. Gilt nur in einer Dimension.

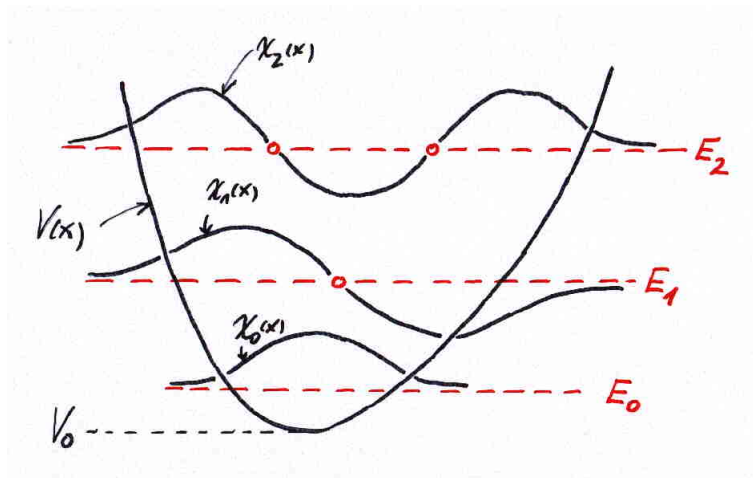
b) Für $E_1 \neq E_2$ erhält man aus (5.12) – mit $W_{12}(\pm\infty) = 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi_1(x) \chi_2(x) dx = 0 , \quad (5.15)$$

d. h. $\chi_1(x), \chi_2(x)$ sind *orthogonal* zueinander. Gilt auch in höheren Dimensionen.

• **Eigenwertproblem.** Erläuterung an Hand von Beispielen; zur näheren Begründung siehe Jelitto 4, Abschnitt 2.6.2.2.; Nolting 5, Abschnitt 4.1; Messiah 1, Abschnitt 3.2; Schwabl, Abschnitt 3.6.

a) $V(x) \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow \pm\infty$. Rein diskretes Spektrum, keine Entartung:



• Abbildung 5.3 •

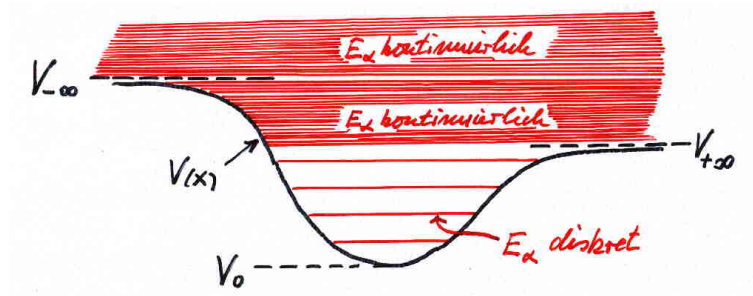
Divergenz von $\chi(x)$ für $x \rightarrow \pm\infty$ wird nur für gewisse (unendlich viele) diskrete E -Werte vermieden (siehe oben: passende Krümmung hin zur x -Achse):

$$V_0 < E_0 < E_1 < \dots < E_n < \dots ; \quad (5.16)$$

die E_n sind nach unten durch V_0 beschränkt, nach oben unbeschränkt. Die entsprechenden Eigenfunktionen $\chi_0(x), \chi_1(x), \dots, \chi_n(x), \dots$, sind durch wachsende Knotenzahl gekennzeichnet, und zwar ist die Knotenzahl gleich dem Index: kein Knoten, ein Knoten, ..., n Knoten, ... : *Knotensatz*. Für $n > m$ liegt zwischen je zwei Knoten von $\chi_m(x)$ mindestens ein Knoten von $\chi_n(x)$. Beweis mit (5.12).

b) $V(x) \rightarrow V_{\pm\infty}$ für $x \rightarrow \pm\infty$. Spektrum teils diskret, teils kontinuierlich; teils keine Entartung, teils zweifache Entartung. Sei $V_{+\infty} < V_{-\infty}$.

$V_0 < E < V_{+\infty}$: Rein diskretes Spektrum, keine Entartung. Ob es überhaupt ein E_0 gibt, hängt von $V(x)$ ab; darüber hinaus kann es – wiederum abhängig von $V(x)$ – endlich oder unendlich viele E_n geben. Eigenfunktionen wie unter a): oszillierend im klassisch erlaubten Bereich, exponentiell abfallend jenseits der UKP im klassisch verbotenen Bereich. Knotenregeln.



• Abbildung 5.4 •

$V_{+\infty} < E < V_{-\infty}$. Kontinuierliches Spektrum, keine Entartung. Eigenfunktionen links vom UKP exponentiell abfallend, rechts oszillierend; zwar nicht quadratintegabel, aber asymptotisch beschränkt.

$V_{-\infty} < E$. Kontinuierliches Spektrum, jeder E -Wert zweifach entartet: zwei linear unabhängige Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung zu jedem E . $\chi(x)$ durchweg oszillierend; zwar nicht quadratintegabel, aber asymptotisch beschränkt.

c) Sei

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) \sim -\frac{1}{|x|^r} . \quad (5.17)$$

Im Falle $r < 2$ (z.B. $r = 1$, Coulomb-Potential) hat man E_n -Häufung gegen $E = 0$; im Falle $r > 2$ gibt es einen endlichen Abstand des höchsten E_n -Wertes zu $E = 0$. Für $r = 2$ gibt es keine allgemeingültige Aussage.

Sei

$$\lim_{x \rightarrow 0} V(x) \sim -\frac{1}{|x|^s}. \quad (5.18)$$

Im Falle $s < 2$ (z. B. $s = 1$, Coulomb-Potential) ist das E_n -Spektrum nach unten beschränkt; im Falle $s > 2$ nicht. Und im Falle $s = 2$?

• Sei $V(x)$ **symmetrisch**:

$$V(x) = V(-x); \quad (5.19)$$

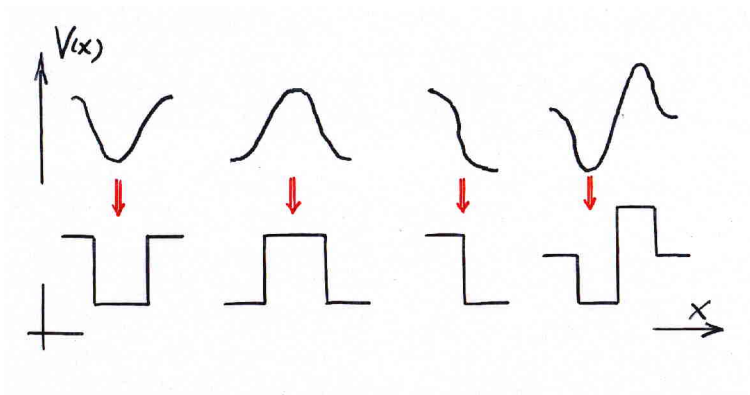
dann sind die Eigenfunktion $\chi_n(x)$ zu den diskreten Eigenwerten E_n entweder gerade oder ungerade. Es gilt:

$$\chi_n(x) = (-1)^n \chi_n(-x), \quad (5.20)$$

$n = 0, 1, 2, \dots, n, \dots$; d. h. der Grundzustand ist gerade, der erste angeregte Zustand ist ungerade, der zweite angeregte Zustand wieder gerade, usw. Beweis in den Übungen; siehe auch Nolting 5, Abschnitt 4.1.4 und Aufgabe 4.1.3 zum Begriff der *Parität*.

Im folgenden wird – in diesem Kapitel – nur noch der Spezialfall eines **stückweise konstanten Potentials** diskutiert.

Oft ist es möglich, $V(x)$ in guter Näherung durch ein stückweise konstantes Potential zu approximieren, z. B.



• Abbildung 5.5 •

Allgemein:

$$V(x) = V_j, \quad x_j < x < x_{j+1}, \quad j = 0, 1, \dots, n-1, n \quad (5.21)$$

mit $x_0 = -\infty, x_{n+1} = +\infty$. $V(x)$ unstetig in $x = x_1, \dots, x_n$; insgesamt $n + 1$ Intervalle konstanten V -Wertes.

Stationäre Schrödinger-Gleichung (5.2):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right) \chi(x) = 0. \quad (5.22)$$

Im j . Intervall hat man:

$$\chi''(x) + k_j^2 \chi(x) = 0 \quad (5.23)$$

mit

$$k_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_j)}; \quad (5.24)$$

allgemeine Lösung:

$$\chi(x) = a_j e^{i k_j x} + b_j e^{-i k_j x}, \quad x_j < x < x_{j+1}, \quad j = 0, \dots, n. \quad (5.25)$$

Wodurch legt man die $2n + 2$ Konstanten $a_0, b_0, \dots, a_n, b_n$ fest?

Anschlussbedingungen. $\chi(x)$ soll nicht nur jeweils im j . Intervall, sondern auf der ganzen x -Achse die stationäre Schrödinger-Gleichung befriedigen. Deshalb ist *Stetigkeit von $\chi(x)$ und $\chi'(x)$* bei x_1, \dots, x_n zu fordern:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\chi(x_j - \varepsilon) - \chi(x_j + \varepsilon)) = 0 \quad (5.26)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\chi'(x_j - \varepsilon) - \chi'(x_j + \varepsilon)) = 0;$$

das ergibt mit (5.25):

$$a_{j-1} e^{i k_{j-1} x_j} + b_{j-1} e^{-i k_{j-1} x_j} - a_j e^{i k_j x_j} - b_j e^{-i k_j x_j} = 0 \quad (5.27)$$

$$k_{j-1} (a_{j-1} e^{i k_{j-1} x_j} - b_{j-1} e^{-i k_{j-1} x_j}) - k_j (a_j e^{i k_j x_j} - b_j e^{-i k_j x_j}) = 0,$$

$j = 1, \dots, n$. Zu diesen $2n$ Bestimmungsgleichungen kommen gewisse Randbedingungen zur endgültigen Festlegung von $\chi(x)$.

1. Fall: finite Bewegung. Sei

$$V_{min} < E < V_0, V_n, \quad (5.28)$$

wobei $V_{min} = \text{Min}(V_1, \dots, V_{n-1})$ ist. Dann sind k_0 bzw. k_n nach (5.24) imaginär:

$$k_0 = i \kappa_0 = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (5.29)$$

$$k_n = i \kappa_n = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_n - E)}.$$

Für die Asymptotik von $\chi(x)$ bedeutet das:

$$\chi(x) = \begin{cases} a_0 e^{-\kappa_0 x} + b_0 e^{\kappa_0 x}, & -\infty < x < x_1 \\ a_n e^{-\kappa_n x} + b_n e^{\kappa_n x}, & x_n < x < +\infty \end{cases} \quad (5.30)$$

Die *Normierungsbedingung*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(x)|^2 dx = 1 \quad (5.31)$$

erfordert die *Randbedingungen*

$$a_0 = b_n = 0. \quad (5.32)$$

Damit sind nur noch $2n$ Integrationskonstanten, nämlich $b_0, a_1, b_1, \dots, a_{n-1}, b_{n-1}, a_n$, zu bestimmen. Hierzu dient das Gleichungssystem (5.27).

Die Gln. (5.27) sind $2n$ *homogene* lineare Gleichungen zur Bestimmung der Unbekannten b_0, \dots, a_n . *Lösbarkeitsbedingung*:

$$\det \begin{pmatrix} e^{\kappa_0 x_1} & -e^{i k_1 x_1} & -e^{-i k_1 x_1} & 0 \dots \\ -i \kappa_0 e^{\kappa_0 x_1} & -k_1 e^{i k_1 x_1} & k_1 e^{-i k_1 x_1} & 0 \dots \\ & & \ddots & \\ \dots 0 & e^{i k_{n-1} x_n} & e^{-i k_{n-1} x_n} & -e^{-\kappa_n x_n} \\ \dots 0 & k_{n-1} e^{i k_{n-1} x_n} & -k_{n-1} e^{-i k_{n-1} x_n} & -i \kappa_n e^{-\kappa_n x_n} \end{pmatrix} = 0. \quad (5.33)$$

Diese ist nur für bestimmte *diskrete* Energiewerte $E = E_0, E_1, E_2, \dots$ erfüllt. (Die k_j hängen gemäß (5.24) von E ab.) Es gibt nur endlich viele E -Werte; jedoch mindestens einen (siehe unten).

Zu jedem E_k , $k = 0, 1, \dots, m$, gibt es eine Lösung $b_0^{(k)}, a_1^{(k)}, \dots, b_{n-1}^{(k)}, a_n^{(k)}$ von (5.27); folglich eine Lösung $\chi_k(x)$ von (5.22), die im j . Intervall von der Gestalt (5.25) ist:

$$\chi_k(x) = a_j^{(k)} e^{i k_j x} + b_j^{(k)} e^{-i k_j x}; \quad (5.34)$$

beachte dabei (5.32) für alle k . Diese Lösung ist durch die homogenen Gln. (5.22, 27) nur bis auf einen Faktor gegeben; diesen legt man durch die Normierungsbedingung (5.31)

fest:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi_k(x)|^2 dx = 1 . \quad (5.35)$$

Damit ist das Problem (5.22, 31) im Falle (5.28) vollständig gelöst.

2. Fall: infinite Bewegung. Das Teilchen sei asymptotisch ($x \rightarrow \pm\infty$) frei:

$$V_0, V_n < E . \quad (5.36)$$

Dann sind k_0 bzw. k_n nach (5.24) reell. Für $\chi(x)$ bedeutet das asymptotisch:

$$\chi(x) = \begin{cases} a_0 e^{i k_0 x} + b_0 e^{-i k_0 x} , & -\infty < x < x_1 \\ a_n e^{i k_n x} + b_n e^{-i k_n x} , & x_n < x < +\infty . \end{cases} \quad (5.37)$$

Betrachte eine Situation, in der das Teilchen, von $x = -\infty$ kommend, an $V(x)$ gestreut wird. Der Term $a_0 e^{i k_0 x}$ beschreibt den Einlauf. Das Teilchen wird nun entweder reflektiert: es kehrt nach $x = -\infty$ zurück – oder transmittiert: es gelangt nach $x = +\infty$. Zu diesen beiden Prozessen gehören die Terme $b_0 e^{-i k_0 x}$ bzw. $a_n e^{i k_n x}$. Der Term $b_n e^{-i k_n x}$ beschreibt eine Bewegung von $x = +\infty$ zum Potential hin. Dieser Vorgang sei situationgemäß ausgeschlossen; daher die *Randbedingung*:

$$b_n = 0 . \quad (5.38)$$

Betrachtet man a_0 als vorgegeben (z. B. $a_0 = (2\pi)^{-1/2}$), so stellt (5.27) $2n$ *inhomogene* lineare Gleichungen zur eindeutigen Bestimmung der $2n$ unbekanntenen Konstanten b_0, \dots, a_n dar, und zwar *kontinuierlich* zu jeder Energie E aus (5.36).

Zur einlaufenden Welle $a_0 e^{i k_0 x}$ gehört nach (2.20) die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j_0 = \frac{\hbar k_0}{m} |a_0|^2 , \quad (5.39)$$

zur reflektierten Welle $b_0 e^{-i k_0 x}$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j_r = -\frac{\hbar k_0}{m} |b_0|^2 , \quad (5.40)$$

und zur transmittierten Welle $a_n e^{i k_n x}$ gehört die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j_t = \frac{\hbar k_n}{m} |a_n|^2 . \quad (5.41)$$

Die drei Stromdichten sind wegen der Kontinuitätsgleichung (2.21) für den stationären Fall: $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ durch die folgende Bilanzgleichung miteinander verknüpft:

$$j_0 + j_r = j_t . \quad (5.42)$$

Reflexionswahrscheinlichkeit:

$$R = -\frac{j_r}{j_0} = \left| \frac{b_0}{a_0} \right|^2 . \quad (5.43)$$

Transmissionswahrscheinlichkeit:

$$T = \frac{j_t}{j_0} = \frac{k_n}{k_0} \left| \frac{a_n}{a_0} \right|^2 . \quad (5.44)$$

Aus (5.42) folgt Teilchenerhaltung:

$$R + T = \left| \frac{b_0}{a_0} \right|^2 + \frac{k_n}{k_0} \left| \frac{a_n}{a_0} \right|^2 = 1 . \quad (5.45)$$

Die einseitig infinite Bewegung mit $V_0 < E$, aber $E < V_n$ (oder umgekehrt) wird hier nicht eigens behandelt. Evtl. in den Übungen.

Beispiel:

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & -l/2 < x < l/2 \\ 0 & \text{sonst} . \end{cases} \quad (5.46)$$

Allgemeine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung:

$$\chi(x) = \begin{cases} a_0 e^{ik(x+l/2)} + b_0 e^{-ik(x+l/2)} & , \quad -\infty < x < -l/2 \\ a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} & , \quad -l/2 < x < +l/2 \\ a_2 e^{ik(x-l/2)} + b_2 e^{-ik(x-l/2)} & , \quad +l/2 < x < +\infty \end{cases} \quad (5.47)$$

mit

$$k = k_0 = k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (5.48)$$

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_1)} .$$

Translation um $\mp l/2$ in den Intervallen 0 bzw. 2 zur bequemeren Formulierung der Anschlussbedingungen:

$$\begin{aligned} a_0 + b_0 - \Gamma^{-1} a_1 - \Gamma b_1 &= 0 \\ k(a_0 - b_0) - k_1(\Gamma^{-1} a_1 - \Gamma b_1) &= 0 \\ \Gamma a_1 + \Gamma^{-1} b_1 - a_2 - b_2 &= 0 \\ k_1(\Gamma a_1 - \Gamma^{-1} b_1) - k(a_2 - b_2) &= 0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

mit

$$\Gamma = e^{i k_1 l/2} . \quad (5.50)$$

Im folgenden sollen nicht alle Varianten, sondern nur zwei wichtige Spezialfälle erörtert werden.

a) Gebundene Zustände im Potentialtopf: $V_1 < E < 0$. Die Normierungsbedingung macht

$$a_0 = b_2 = 0 \quad (5.51)$$

erforderlich. Es empfiehlt sich, das resultierende Gleichungssystem (5.49) durch Addition / Subtraktion der 1. und 3. bzw. 2. und 4. Gleichung zu entkoppeln:

$$\begin{pmatrix} \Gamma - \Gamma^{-1} & 1 & 0 & 0 \\ -k_1(\Gamma + \Gamma^{-1}) & -k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(\Gamma + \Gamma^{-1}) & 1 \\ 0 & 0 & k_1(\Gamma - \Gamma^{-1}) & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 - b_1 \\ b_0 - a_2 \\ a_1 + b_1 \\ b_0 + a_2 \end{pmatrix} = 0 . \quad (5.52)$$

Bedingung für die Existenz nichttrivialer Lösungen ist das Verschwinden der Determinante der 4×4 -Koeffizientenmatrix. Das geschieht entweder, wenn die Determinante der linken oberen 2×2 -Matrix (A) verschwindet oder wenn die Determinante der rechten unteren 2×2 -Matrix (B) verschwindet (beides zugleich ist unmöglich):

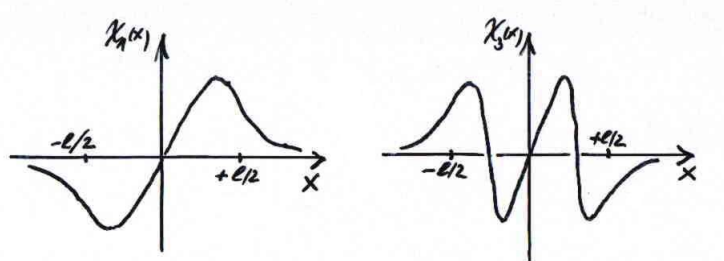
• *ungerade Zustände:*

$$\begin{aligned} \det A &= k_1(\Gamma + \Gamma^{-1}) - k(\Gamma - \Gamma^{-1}) = 0 \\ &\Rightarrow \det B \neq 0 \\ &\Rightarrow a_1 + b_1 = b_0 + a_2 = 0 ; \end{aligned} \quad (5.53)$$

mit (5.47, 51) folgt

$$\chi(x) = \begin{cases} b_0 e^{\kappa(x+l/2)} & , -\infty < x < -l/2 \\ 2i a_1 \sin k_1 x & , -l/2 < x < l/2 \\ -b_0 e^{-\kappa(x-l/2)} & , +l/2 < x < +\infty . \end{cases} \quad (5.54)$$

Die verbleibenden Konstanten b_0 , a_1 berechnet man aus dem A -System und aus der Normierungsbedingung; z. B.



• Abbildung 5.6 a •

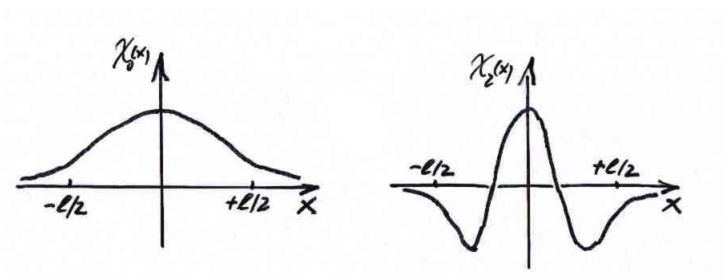
• gerade Zustände:

$$\begin{aligned} \det B &= k(\Gamma + \Gamma^{-1}) - k_1(\Gamma - \Gamma^{-1}) = 0 \\ &\Rightarrow \det A \neq 0 \\ &\Rightarrow a_1 - b_1 = b_0 - a_2 = 0; \end{aligned} \quad (5.55)$$

mit (5.47, 51) erhält man

$$\chi(x) = \begin{cases} b_0 e^{\kappa(x+l/2)} & , -\infty < x < -l/2 \\ 2a_1 \cos k_1 x & , -l/2 < x < +l/2 \\ b_0 e^{-\kappa(x-l/2)} & , l/2 < x < +\infty . \end{cases} \quad (5.56)$$

Die verbleibenden Konstanten b_0 , a_1 berechnet man hier aus dem B -System und aus der Normierung, z. B.



• Abbildung 5.6 b •

In (5.54) und (5.56) ist $k = i \kappa$, somit

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} . \quad (5.57)$$

Die Bedingungen (5.53, 55) lassen sich mit (5.50) wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} k_1 \tan(k_1 l / 2) - \kappa &= 0 & (\chi \text{ gerade}) \\ k_1 \cot(k_1 l / 2) + \kappa &= 0 & (\chi \text{ ungerade}) . \end{aligned} \quad (5.58)$$

Mit Hilfe der Variablen

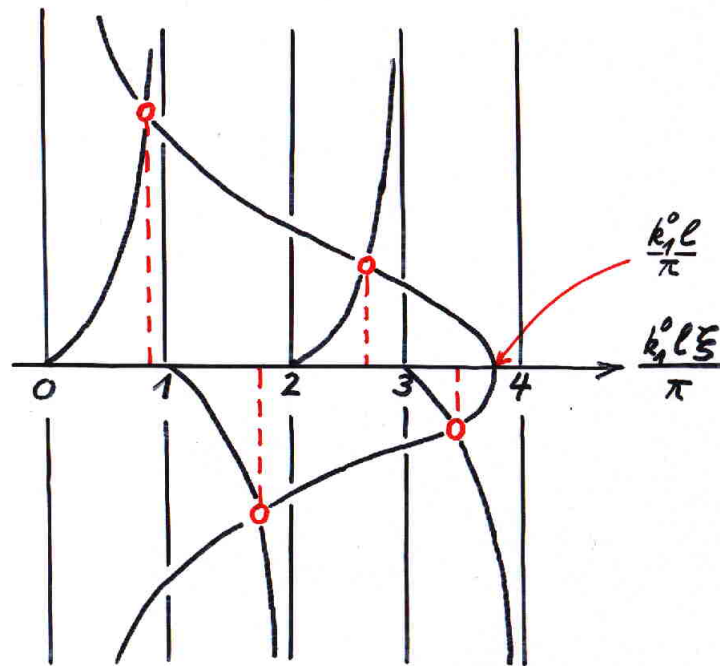
$$\xi = \sqrt{\frac{E - V_1}{-V_1}} \quad (5.59)$$

($V_1 < E < 0 \Leftrightarrow 0 < \xi < 1$) sowie des Parameters

$$k_1^0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mV_1} \quad (5.60)$$

stellt man (5.58) folgendermaßen dar:

$$\begin{aligned} \tan \frac{k_1^0 l \xi}{2} &= \frac{\sqrt{1 - \xi^2}}{\xi} & (\chi \text{ gerade}) \\ \cot \frac{k_1^0 l \xi}{2} &= -\frac{\sqrt{1 - \xi^2}}{\xi} & (\chi \text{ ungerade}) . \end{aligned} \quad (5.61)$$



• Abbildung 5.7 •

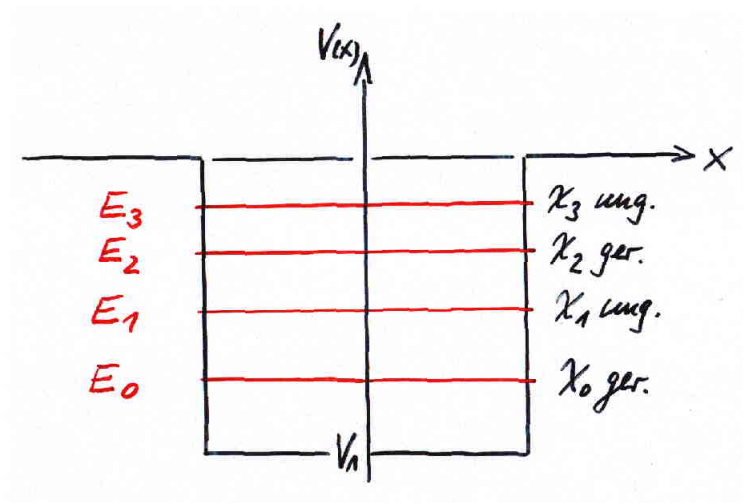
Zu jeder Lösung ξ_n gibt es ein *Energieniveau*

$$E_n = V_1 (1 - \xi_n^2) ; \quad (5.62)$$

deren Anzahl beträgt

$$z = 1 + \left[\frac{k_1^0 l}{\pi} \right] . \quad (5.63)$$

Es gibt also immer mindestens einen gebundenen Zustand (in diesem $V(x)$!), den *Grundzustand*; ob überhaupt, und wenn ja, wieviele *angeregte Zustände* es darüber hinaus gibt, hängt davon ab, wie groß $k_1^0 l / \pi$ ist. Demnach ist z umso größer, je größer m , l und $-V_1$ sind. Der Grundzustand $\chi_0(x)$ ist gerade, dann folgt der ungerade Zustand $\chi_1(x)$,



• Abbildung 5.8 •

dann der gerade Zustand $\chi_2(x)$, der ungerade Zustand $\chi_3(x)$, ... immer abwechselnd. Das ist nach (5.19, 20) ein allgemein gültiges Charakteristikum symmetrischer Potentiale. Im Grenzfall $V_1 \rightarrow -\infty \Rightarrow k_1^0 \rightarrow \infty$ hat man

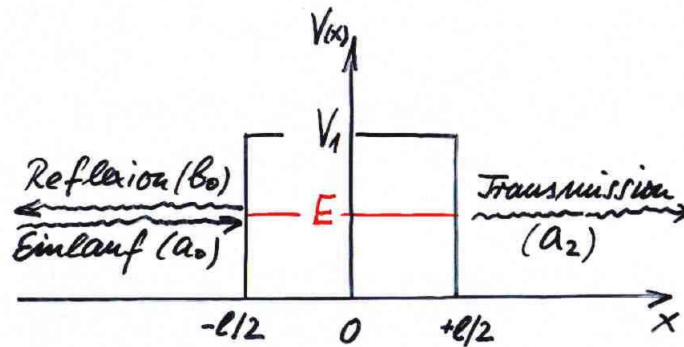
$$\xi_n = \frac{n\pi}{k_1^0 l} \Rightarrow E_n = V_1 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{l} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.64)$$

was dem Resultat (3.45) entspricht: Unendlich tiefer Topf = Kasten mit unendlich hohen Wänden.

b) Durchtunnelung eines Potentialwalles: $0 < E < V_1$. Das Teilchen komme von links, was die Randbedingung

$$b_2 = 0 \quad (5.65)$$

erforderlich macht; a_0 beliebig vorgegeben. Das resultierende



• Abbildung 5.9 •

Gleichungssystem (5.49) legt die Verhältnisse b_0/a_0 , a_1/a_0 , b_1/a_0 , a_2/a_0 eindeutig fest. Es ist jedoch formal einfacher, (5.49) nach a_0/a_2 , b_0/a_2 , a_1/a_2 , b_1/a_2 aufzulösen:

$$\frac{a_0}{a_2} + \frac{b_0}{a_2} - \Gamma^{-1} \frac{a_1}{a_2} - \Gamma \frac{b_1}{a_2} = 0 \quad (5.66 \text{ a})$$

$$\frac{a_0}{a_2} - \frac{b_0}{a_2} - \frac{k_1}{k} \left(\Gamma^{-1} \frac{a_1}{a_2} - \Gamma \frac{b_1}{a_2} \right) = 0 \quad (5.66 \text{ b})$$

$$\Gamma \frac{a_1}{a_2} + \Gamma^{-1} \frac{b_1}{a_2} = 1 \quad (5.66 \text{ c})$$

$$\Gamma \frac{a_1}{a_2} - \Gamma^{-1} \frac{b_1}{a_2} = \frac{k}{k_1}. \quad (5.66 \text{ d})$$

Aus (5.66 c, d) folgt:

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{1}{2} \Gamma^{-1} \left(1 + \frac{k}{k_1} \right) \quad (5.67)$$

$$\frac{b_1}{a_2} = \frac{1}{2} \Gamma \left(1 - \frac{k}{k_1} \right).$$

Einsetzen von (5.67) in (5.66 a, b) und Auflösen ergibt:

$$\frac{a_0}{a_2} + \frac{b_0}{a_2} = \frac{1}{2} \left(\Gamma^{-2} \left(1 + \frac{k}{k_1} \right) + \Gamma^2 \left(1 - \frac{k}{k_1} \right) \right)$$

$$\frac{a_0}{a_2} - \frac{b_0}{a_2} = \frac{k_1}{2k} \left(\Gamma^{-2} \left(1 + \frac{k}{k_1} \right) - \Gamma^2 \left(1 - \frac{k}{k_1} \right) \right),$$

folglich

$$\begin{aligned}\frac{a_0}{a_2} &= \frac{1}{2} \left(\Gamma^2 + \Gamma^{-2} - \frac{1}{2} \left(\frac{k}{k_1} + \frac{k_1}{k} \right) (\Gamma^2 - \Gamma^{-2}) \right) \\ \frac{b_0}{a_2} &= -\frac{1}{4} \left(\frac{k}{k_1} - \frac{k_1}{k} \right) (\Gamma^2 - \Gamma^{-2}) .\end{aligned}\tag{5.68}$$

Mit

$$k_1 = i \kappa_1 , \quad \kappa_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_1 - E)}\tag{5.69}$$

und

$$\Gamma = e^{-\kappa_1 l / 2}\tag{5.70}$$

folgt:

$$\begin{aligned}\frac{a_0}{a_2} &= \cosh(\kappa_1 l) - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{\kappa_1} - \frac{\kappa_1}{k} \right) \sinh(\kappa_1 l) \\ \frac{b_0}{a_2} &= -\frac{i}{2} \left(\frac{k}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{k} \right) \sinh(\kappa_1 l) .\end{aligned}\tag{5.71}$$

Hieraus erhält man für die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned}R &= \left| \frac{b_0}{a_0} \right|^2 = \left| \frac{b_0}{a_2} \right|^2 / \left| \frac{a_0}{a_2} \right|^2 \\ &= \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{k} \right)^2 \sinh^2(\kappa_1 l)}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{k} \right)^2 \sinh^2(\kappa_1 l)}\end{aligned}\tag{5.72}$$

bzw.

$$\begin{aligned}T &= \left| \frac{a_2}{a_0} \right|^2 = 1 / \left| \frac{a_0}{a_2} \right|^2 \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{k} \right)^2 \sinh^2(\kappa_1 l)} .\end{aligned}\tag{5.73}$$

Man erkennt, dass die Teilchenerhaltung $R + T = 1$ erfüllt ist. – Ferner sieht man, dass ein völlig anderes Verhalten vorliegt als in der KLM. Während dort für $E < V_1$ immer Reflexion eintritt, also $R = 1, T = 0$ ist, besteht in der QUM eine endliche Wahrscheinlichkeit für Durchquerung des Walles: **Tunneleffekt**. Diese sinkt mit wachsendem $\kappa_1 l$,

d. h. wird immer geringer, je höher sich der Potentialwall über dem Energieniveau des Teilchens erhebt und je breiter der Wall ist. Wird $\kappa_1 l \gg 1$, so geht (5.73) über in

$$T = \left(\frac{4k\kappa_1}{k^2 + \kappa_1^2} \right)^2 e^{-2\kappa_1 l}. \quad (5.74)$$

Erst am unendlich breiten Wall (Stufe, $l \rightarrow \infty$) tritt Totalreflexion ein. – Diskutiere den Fall $E > V_1$. Die KLM ergibt hier umgekehrt $R = 0$, $T = 1$. Welches Resultat liefert die QUM?

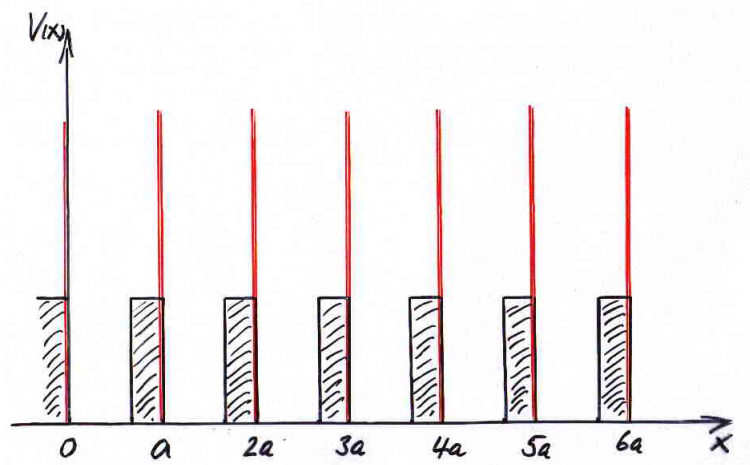
Kronig-Penney-Modell. Modellierung der Elektronenbewegung (im Rahmen einer Ein-Teilchen-Näherung) im gitterperiodischen Potential eines Festkörpers (in einer räumlichen Dimension) durch

$$V(x) = D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na), \quad (5.75)$$

$D > 0$, $a > 0$ Konstanten. Dieses Potential kann man sich entstanden denken aus dem stückweise konstanten Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & na < x < (n+1)a - b \\ V_0, & (n+1)a - b < x < (n+1)a \end{cases} \quad (5.76)$$

im Limes $b \rightarrow 0$ mit $D = bV_0 = \text{konstant}$; $0 < b < a$, $V_0 > 0$.



• Abbildung 5.10 •

Die Bereiche mit $V(x) = 0$ entsprechen den Gitteratomen; die dazwischen liegenden Bereiche mit $V(x) > 0$ bilden Barrieren, die vom Elektron beim Wechsel des „Gitterplatzes“ zu durchtunneln sind. Das Modell (5.75, 76) führt auf eine für Festkörper typische *Bandstruktur*: das abwechselnde Auftreten von *Energiebändern* und *Energielücken* unterschiedlicher Breiten. Die Bandstruktur bildet die Grundlage für das Verständnis der höchst verschiedenen Leitfähigkeit (und anderer physikalischer Eigenschaften) in Isolatoren, Halbleitern und Metallen; siehe Festkörperphysik. – Nachfolgend wird das System (5.75) behandelt, was formal etwas einfacher ist als das System (5.76), jedoch dasselbe leistet.

Die Intervalle $na < x < (n+1)a$, $n \in \mathbf{Z}$, in denen nach (5.75) $V(x) = 0$ ist, sind für $E > 0$ klassisch erlaubte Gebiete. Die stationäre Schrödinger-Gleichung hat dort die allgemeine Lösung

$$\chi(x) = a_n e^{ik(x-na)} + b_n e^{-ik(x-na)} \quad (5.77)$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}; \quad (5.78)$$

vgl. (5.25, 24). Die Abspaltung der Faktoren $e^{\pm ikna}$ von den Koeffizienten a_n, b_n vereinfacht die spätere Formulierung; vgl. (5.47).

Anschlussbedingungen bei $x = na$:

- Stetigkeit von $\chi(x)$, impliziert im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\chi(na + \varepsilon) - \chi(na - \varepsilon) = 0; \quad (5.79)$$

- Integration der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\chi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - D \sum_n \delta(x - na)) \chi(x) = 0 \quad (5.80)$$

über das Intervall $[na - \varepsilon, na + \varepsilon]$ ergibt im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\chi'(na + \varepsilon) - \chi'(na - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} D \chi(na); \quad (5.81)$$

d. h. $\chi'(x)$ ist an den Stellen $x = na$ unstetig.

Das Potential (5.75) ist periodisch mit der Periode a :

$$V(x + a) = V(x); \quad (5.82)$$

Bezeichnung von a als „Gitterkonstante“. Wegen (5.82) ist der Hamilton-Operator a -periodisch. Konsequenz für die Eigenfunktionen:

$$|\chi(x+a)|^2 = |\chi(x)|^2 ,$$

folglich

$$\chi(x+a) = e^{iKa} \chi(x) , \quad -\pi < Ka \leq +\pi ; \quad (5.83)$$

d. h. Kennzeichnung der Eigenfunktionen durch die Wellenzahl K :

$$\chi(x) = \chi_K(x)$$

mit

$$\chi_K(x+na) = e^{iKna} \chi_K(x) . \quad (5.84)$$

Aus (5.83, 84) ergibt sich das *Bloch-Theorem*:

$$\chi_K(x) = u_K(x) e^{iKx}$$

mit

$$u_K(x+a) = u_K(x) ; \quad (5.85)$$

d. h. $u_K(x)$ ist – anders als $\chi_K(x)$ – streng gitterperiodisch.

Periodische Randbedingungen – wegen endlicher Ausdehnung des Festkörpers –

$$\chi_K(x+Na) \stackrel{!}{=} \chi_K(x) \quad (5.86)$$

bewirken Diskretisierung von K ; wegen (5.83, 84) folgt nämlich aus (5.86):

$$e^{iKNa} = 1 ,$$

somit

$$K = \frac{2\pi}{Na} m , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - 1 \right) , + \frac{N}{2} ; \quad (5.87)$$

d. h. N verschiedene K -Werte; N große, gerade, natürliche Zahl.

Aus (5.84) folgt für den Lösungsansatz (5.77):

$$\begin{aligned} a_n e^{ikx} + b_n e^{-ikx} &= e^{iKna} (a_0 e^{ikx} + b_0 e^{-ikx}) \\ \Rightarrow \quad a_n &= a_0 e^{iKna} , \quad b_n = b_0 e^{iKna} ; \end{aligned} \quad (5.88)$$

d. h. alle Koeffizienten a_n, b_n ergeben sich aus a_0, b_0 . Bestimmung von a_0, b_0 aus den Anschlussbedingungen für die Stelle $x = a$: Aus (5.79) folgt

$$a_1 + b_1 - (a_0 e^{i k a} + b_0 e^{-i k a}) = 0, \quad (5.89)$$

und aus (5.81) folgt

$$i k (a_1 - b_1) - i k (a_0 e^{i k a} - b_0 e^{-i k a}) = \frac{2m}{\hbar^2} D (a_1 + b_1); \quad (5.90)$$

mit (5.88) erhält man aus (5.89, 90) das *homogene Gleichungssystem*:

$$A \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = 0 \quad (5.91)$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} e^{i K a} - e^{i k a} & e^{i K a} - e^{-i k a} \\ i k (e^{i K a} - e^{i k a}) - \frac{2m}{\hbar^2} D e^{i K a} & i k (-e^{i K a} + e^{-i k a}) - \frac{2m}{\hbar^2} D e^{i K a} \end{pmatrix} \quad (5.92)$$

Die *Lösbarkeitsbedingung*

$$\det(A) = 0 \quad (5.93)$$

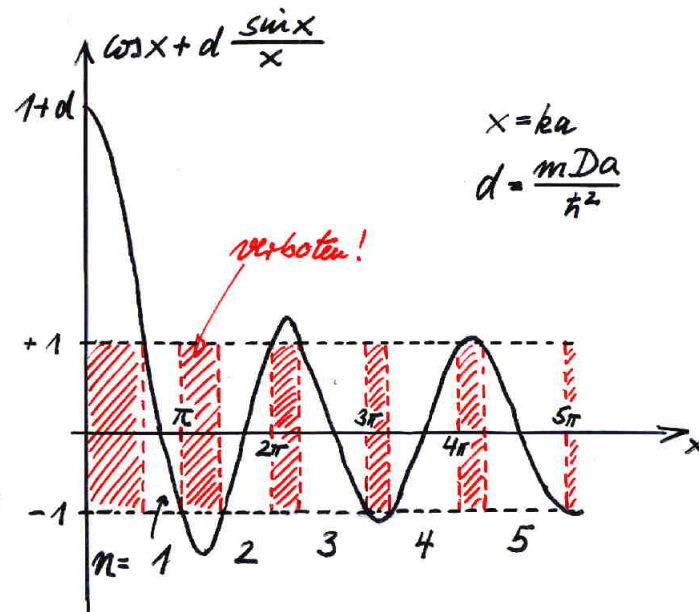
führt auf die folgende Bedingung für die möglichen Energieeigenwerte:

$$\cos(k(E)a) + \frac{mD}{\hbar^2 k(E)} \sin(k(E)a) = \cos K a, \quad (5.94)$$

wobei mit $k(E)$ die Beziehung (5.78) gemeint ist.

Folgerungen aus (5.94):

- Nur solche Energien E sind erlaubt, für die der Betrag der linken Seite nicht größer als 1 ist. \Rightarrow Einteilung der Energieachse in *erlaubte* und *verbotene* Intervalle, d. h. in *Energiebänder* und in *Energielücken*:



• Abbildung 5.11 •

- Beginn der „verbotenen Zone“ jeweils durch

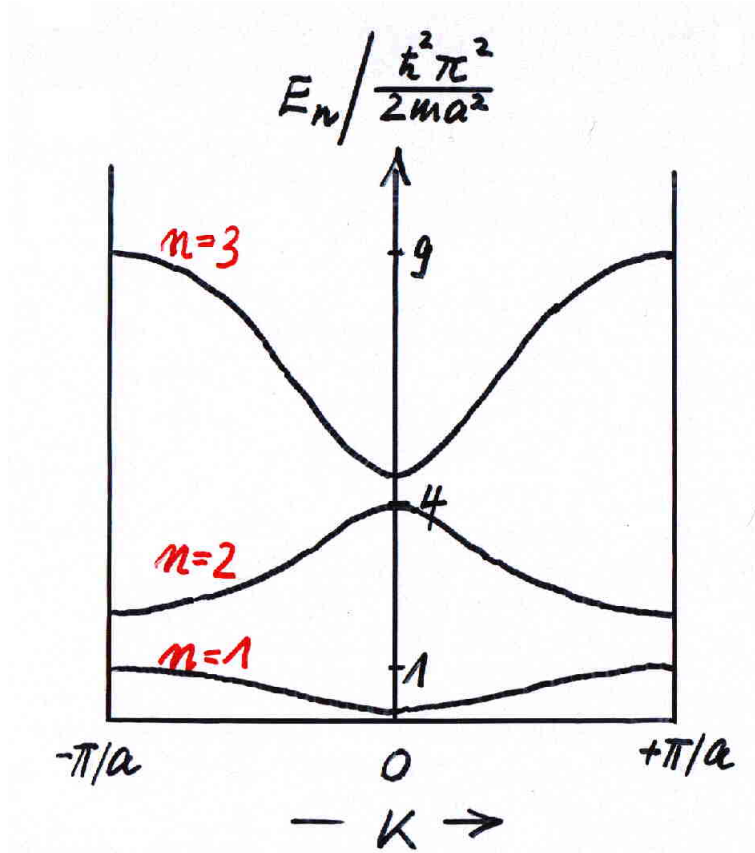
$$k(E)a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.95)$$

gegeben; d. h. obere Bandkante jeweils bei

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.96)$$

– unabhängig von der „Potentialstärke“ D . Nummerierung der Energiebänder durch den Bandindex n .

- Die zu den durch (5.87) gegebenen K -Werten ($-\pi/a < K \leq +\pi/a$) gehörigen Energieeigenwerte $E_n(K)$ sind für die verschiedenen Bänder n aus (5.94) zu berechnen. Die Gesamtheit der $E_n(K)$ -Kurven bilden die *Bandstruktur* des Systems:



• Abbildung 5.12 •

Jedes Energieband enthält $N/2 + 1$ diskrete, dicht liegende Energieniveaus; beachte die Entartung $E_n(K) = E_n(-K)$ für $K \neq 0$.

- Die Bandstruktur hängt von den Parametern a und D ab. Wie?

Auf eine genauere Berechnung und Diskussion der zu den „Quantenzahlen“ K und n gehörigen Energieeigenfunktionen $\chi_{K,n}(x)$ wird hier verzichtet.

6 Messwerte und Messwahrscheinlichkeiten

Die *quadratintegriblen (komplexwertigen) Funktionen* $\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x}), \psi(\vec{x}), \dots$:

$$\int |\varphi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty, \quad \int |\chi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty, \dots \quad (6.1)$$

bilden einen **linearen Raum**: Mit $\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x})$ quadratintegribel und $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$ ist auch die Linearkombination $\alpha\varphi(\vec{x}) + \beta\chi(\vec{x})$ quadratintegribel. Zum Beweis siehe Jelitto 4, S. 65, 66. Ferner gibt es den Nullvektor: $\psi(\vec{x}) = 0$ (fast überall) und zu jedem $\psi(\vec{x})$ das inverse Element $-\psi(\vec{x})$. Bezeichnung dieses Vektorraumes als L_2 .

In L_2 lässt sich ein *inneres Produkt* wie folgt einführen: Zu beliebigem $\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x}) \in L_2$ gibt es

$$(\varphi, \chi) = \int \varphi^*(\vec{x}) \chi(\vec{x}) d^3x \in \mathbf{C} \quad (6.2)$$

mit den Eigenschaften:

$$(\chi, \varphi) = (\varphi, \chi)^* \quad (6.3)$$

und

$$(\psi, \alpha\varphi + \beta\chi) = \alpha(\psi, \varphi) + \beta(\psi, \chi), \quad (6.4 \text{ a})$$

woraus

$$(\alpha\varphi + \beta\chi, \psi) = \alpha^*(\varphi, \psi) + \beta^*(\chi, \psi) \quad (6.4 \text{ b})$$

folgt, d. h. Linearität „hinten“, Antilinearität „vorn“; ferner

$$(\psi, \psi) \geq 0 \quad \forall \psi \in L_2, \quad (6.5)$$

wobei das Gleichheitszeichen genau dann steht, wenn ψ der Nullvektor ist.

Durch die Einführung des (komplexen) inneren Produktes wird der Vektorraum zum **unitären Raum**. Durch weitere Strukturierungen gelangt man zum **Hilbert-Raum** L_2 ; das ist ein spezieller unitärer Raum L_2 . Die abstrakte Definition des Hilbert-Raumes erfolgt später.

Unter der *Norm* eines Vektors $\psi(\vec{x}) \in L_2$ versteht man

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)} \geq 0. \quad (6.6)$$

Im L_2 gelten die *Schwarzsche Ungleichung*

$$|(\varphi, \chi)| \leq \|\varphi\| \|\chi\| \quad (6.7)$$

und die *Dreiecksungleichung*

$$\left| \|\varphi\| - \|\chi\| \right| \leq \|\varphi + \chi\| \leq \|\varphi\| + \|\chi\| \quad (6.8)$$

für beliebige Paare $\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x})$. Wenn das innere Produkt zweier quadratintegrabler Funktionen verschwindet: $(\varphi, \chi) = 0$, bezeichnet man diese als *orthogonal* zueinander.

Die *eigentlichen*, d. h. normierbaren quantenmechanischen Zustandsfunktionen $\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x}), \psi(\vec{x}), \dots$ sind nach dem Vorhergehenden Elemente des Hilbert-Raumes L_2 ; die *uneigentlichen*, d. h. nicht normierbaren Zustandsfunktionen der QUM liegen nicht im L_2 . Gleichwohl kann man die uneigentlichen ψ -Funktionen untereinander und mit den eigentlichen ψ -Funktionen linearkombinieren – und erhält dabei neue eigentliche oder uneigentliche ψ -Funktionen. Ferner kann man *formal* ein inneres Produkt gemäß (6.2) einführen: sowohl zwischen uneigentlichen, als auch zwischen eigentlichen und uneigentlichen Zustandsfunktionen. Dabei hat man mit Divergenzen zu rechnen. Siehe Funktionalanalysis, Distributionentheorie, ...

Betrachte eine beliebige **Observable** A . Welche Messwerte a sind möglich? Die experimentelle Erfahrung zeigt: Es gibt Observablen, die nur bestimmte *diskrete Messwerte* besitzen, z. B.

- die Energie eines gebundenen Teilchens
- die Spinkomponente eines Elektrons
- den Drehimpuls eines Moleküls;

nicht alle A -Werte der KLM sind also möglich. Wie ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der erlaubten Messwerte im Zustand ψ ? Die experimentelle Erfahrung zeigt: Über den Ausgang einer Messung sind im Allgemeinen *nur Wahrscheinlichkeitsaussagen* möglich, z. B.

- bei Streuung eines Teilchens an einem Kraftzentrum
- bei Emission eines α -Teilchens aus einem Atomkern.

Die hier angesprochenen Wahrscheinlichkeiten sind als *relative Häufigkeiten* bei Messungen an den Systemen (hier: Teilchen) der durch ψ beschriebenen statistischen Gesamtheiten zu verstehen.

Beispiele (bisher betrachtete Observablen):

- Ort: $A = \vec{x}$. Erlaubt, d. h. als Messwerte möglich, sind kontinuierlich alle $x_j \in (-\infty, +\infty)$, $j = 1, 2, 3$ – wie in der KLM. \vec{x} -Verteilung im Zustand $\psi(\vec{x})$ ist $|\psi(\vec{x})|^2$.

• Impuls: $A = \vec{p}$. Erlaubt, d. h. als Messwerte möglich, sind kontinuierlich alle $p_k \in (-\infty, +\infty)$, $k = 1, 2, 3$ – wie in der KLM. \vec{p} -Verteilung im Zustand $\psi(\vec{x})$ ist $|\varphi(\vec{p})|^2$, wobei $\varphi(\vec{p})$ durch die Fourier-Transformation (2.41 a) aus $\psi(\vec{x})$ hervorgeht. Fester Zeitpunkt, Argument t weggelassen.

• Energie H für Teilchen im Kasten. Erlaubt, d. h. bei Messung möglich, sind nicht – wie in der KLM – alle $E \geq 0$, sondern nach (3.43, 45) nur die diskreten Werte

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right), \quad (6.9)$$

n_1, n_2, n_3 positiv ganz. Wie ist die E -Verteilung im Zustand $\psi(\vec{x})$?

Die Observable A ist durch einen *hermiteschen Operator* zu beschreiben. Für die nachfolgenden Resultate ist sogar zu fordern, dass der Operator A *selbstadjungiert* ist. Selbstadjungiertheit ist insofern spezieller als Hermitezität, als zusätzlich zu (4.17) noch gewisse Einschränkungen betreffend die Definitionsbereiche von A und A^+ (der adjungierte Operator) gefordert werden. Genaueres dazu später.

Einfachheitshalber hänge der (wesentlich) selbstadjungierte Operator

$$A = A(\vec{x}, \vec{p}) = A \left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \quad (6.10)$$

nicht von t ab. Betrachte dessen **Eigenwertproblem**:

$$A \chi(\vec{x}) = a \chi(\vec{x}). \quad (6.11)$$

Zu bestimmen sind die Eigenfunktionen $\chi(\vec{x})$ und die Eigenwerte a . Zwei Möglichkeiten:

- $\chi(\vec{x})$ quadratintegabel, somit normierbar: eigentlicher Zustand (I);
- $\chi(\vec{x})$ zwar nicht quadratintegabel, somit nicht normierbar, aber wenigstens asymptotisch beschränkt: uneigentlicher Zustand (II).

Ferner besitzt (6.11) Lösungen $\chi(\vec{x})$, die „nach außen“ divergieren; das sind keine akzeptablen Zustände, sie sind als Eigenfunktionen nicht zugelassen. Siehe Kap. 2 und Abbildung 5.2; ferner Jelitto 4, Kap. 2.6.2.2 betreffend das Beispiel $H \chi(x) = E \chi(x)$ für ein stetiges Topfpotential.

In der *Spektraltheorie* selbstadjungierter Operatoren im Rahmen der Funktionalanalysis zeigt man

-
- Die Eigenwerte a zu den $\chi(\vec{x})$ -Funktionen vom Typ I bilden eine *diskrete Folge* a_n : abzählbar endlich oder unendlich viele diskrete Eigenwerte. *Punktspektrum* des Operators A . Bezeichnung der entsprechenden Eigenfunktionen mit $\chi_n(\vec{x})$:

$$A \chi_n(\vec{x}) = a_n \chi_n(\vec{x}) . \quad (6.12)$$

- Die Eigenwerte a zu den $\chi(\vec{x})$ -Funktionen vom Typ II bilden eine *kontinuierliche Funktion* $a(k)$: überabzählbares Eigenwertkontinuum. *Streckenspektrum* des Operators A . Bezeichnung der entsprechenden Eigenfunktionen mit $\chi(k, \vec{x})$:

$$A \chi(k, \vec{x}) = a(k) \chi(k, \vec{x}) . \quad (6.13)$$

Die Menge aller Eigenwerte bildet das *Spektrum* des Operators (der Observablen) A . Dieses ist *rein diskret*, z. B. Energie des Teilchens im Kasten, oder *rein kontinuierlich*, z. B. Energie des freien Teilchens, oder *teils diskret, teils kontinuierlich*, z. B. Energie des Teilchens im Topf. Die stationäre Schrödinger-Gleichung ist die Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators $A = H$.

Sowohl die diskreten, als auch die kontinuierlichen *Eigenwerte* sind *reell*. Bilde z. B. den Erwartungswert von A im Zustand $\chi_n(\vec{x})$; mit (6.12, 4 a) erhält man

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_n &= (\chi_n, A \chi_n) \\ &= (\chi_n, a_n \chi_n) \\ &= a_n (\chi_n, \chi_n) \\ &= a_n , \end{aligned} \quad (6.14)$$

wobei zuletzt von der Normierung $\|\chi_n\|^2 = 1$ Gebrauch gemacht wurde. Der Erwartungswert $\langle A \rangle_n$ ist also gleich dem Eigenwert a_n . Da $\langle A \rangle_n$ gemäß (4.18) reell ist, ist folglich auch a_n reell:

$$a_n^* = a_n . \quad (6.15 \text{ a})$$

Gleiches lässt sich für die kontinuierlichen Eigenwerte beweisen:

$$a^*(k) = a(k) . \quad (6.15 \text{ b})$$

Die zu verschiedenen Eigenwerten gehörigen *Eigenfunktionen* sind *orthogonal* zueinander. Beweis für den diskreten Fall mit (4.17) und (6.15 a):

$$\begin{aligned} a_n (\chi_m, \chi_n) &= (\chi_m, A \chi_n) \\ &= (A \chi_m, \chi_n) \\ &= a_m^* (\chi_m, \chi_n) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (a_m - a_n)(\chi_m, \chi_n) = 0. \quad (6.16)$$

Da nach Voraussetzung $a_m \neq a_n$ ist, folgt die Behauptung:

$$(\chi_m, \chi_n) = 0. \quad (6.17 \text{ a})$$

Im kontinuierlichen Fall gilt für $a(k') \neq a(k)$ entsprechend

$$(\chi(k'), \chi(k)) = 0. \quad (6.17 \text{ b})$$

Ferner zeigt man, dass die Eigenfunktionen des Punkt- und des Streckenspektrums orthogonal zueinander sind:

$$(\chi(k), \chi_n) = 0. \quad (6.18)$$

Zusammen mit der *Normierung*

$$(\chi_n, \chi_n) = 1 \quad (6.19)$$

folgt aus (6.17 a)

$$(\chi_m, \chi_n) = \delta_{mn}; \quad (6.20 \text{ a})$$

man bezeichnet dieses Verhalten der $\chi_n(\vec{x})$ als *orthonormiert*. Siehe Teilchen im Kasten, Gl. (3.47).

Anmerkung: Die Orthogonalität der $\chi_n(\vec{x})$ erstreckt sich auch auf den Fall der *Entartung*: $a_m = a_n$ für $m \neq n$. Siehe unten.

Für das kontinuierliche Spektrum gilt analog

$$(\chi(k'), \chi(k)) = \delta(k' - k); \quad (6.20 \text{ b})$$

man bezeichnet dieses Verhalten der $\chi(k, \vec{x})$ ebenfalls als *orthonormiert*, genauer als *δ -orthonormiert*. Siehe freies Teilchen, Gl. (3.7).

Entartung. Man nennt den Eigenwert a_n *entartet*, wenn dazu mehrere (p) linear unabhängige Eigenfunktionen $\chi_{n,\nu}(\vec{x})$, $\nu = 1, 2, \dots, p$ gehören:

$$A\chi_{n,\nu}(\vec{x}) = a_n \chi_{n,\nu}(\vec{x}). \quad (6.21)$$

Durch Bildung geeigneter Linearkombinationen (Verfahren von Schmidt, siehe Jelitto 4, S. 92) kann man die $\chi_{n,\nu}(\vec{x})$ in dem zu a_n gehörigen p -dimensionalen Eigenraum orthogonalisieren, ferner normieren, also *orthonormieren*:

$$(\chi_{n,\mu}, \chi_{n,\nu}) = \delta_{\mu\nu}; \quad (6.22)$$

zusammen mit (6.20 a) ergibt das:

$$(\chi_{m,\mu}, \chi_{n,\nu}) = \delta_{mn} \delta_{\mu\nu} . \quad (6.23)$$

Auch die $a(k)$ können entartet sein; keine Formeln.

Beispiele:

- Teilchen im würfelförmigen Kasten der Kantenlänge l ; nach (6.9) gilt:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m l^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) . \quad (6.24)$$

Der Grundzustand ist nicht entartet (einfach); der erste, der zweite und der dritte angeregte Zustand ist jeweils dreifach entartet; der vierte angeregte Zustand ist wiederum einfach, ...

- Freies Teilchen:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (6.25)$$

Jedes $E(\vec{k}) > 0$ ist ∞ -fach (überabzählbar) entartet. Wieso?

In den folgenden allgemeinen Überlegungen wird zur Vereinfachung der Formeln immer angenommen, dass alle Eigenwerte einfach, d. h. nicht entartet sind.

Schließlich wird in der Spektraltheorie gezeigt, dass das System der Eigenfunktionen von A *vollständig* ist; d. h. man kann jedes $\psi(\vec{x}) \in L_2$ danach entwickeln:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n \alpha_n \chi_n(\vec{x}) + \int dk \alpha(k) \chi(k, \vec{x}) . \quad (6.26)$$

Die Orthonormierung (6.20) der Basisfunktionen $\chi_n(\vec{x})$, $\chi(k, \vec{x})$ liefert für die Entwicklungskoeffizienten α_n , $\alpha(k)$ die Ausdrücke:

$$\alpha_n = (\chi_n, \psi) = \int d^3x \chi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \quad (6.27 \text{ a})$$

$$\alpha(k) = (\chi(k), \psi) = \int d^3x \chi^*(k, \vec{x}) \psi(\vec{x}) . \quad (6.27 \text{ b})$$

Die Eigenfunktionen der Observablen (des selbstadjungierten Operators) A bilden demnach ein vollständiges, orthonormiertes Funktionensystem – ein VONS.

Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_n \chi_n(\vec{x}) \chi_n^*(\vec{x}') + \int dk \chi(k, \vec{x}) \chi^*(k, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') . \quad (6.28)$$

Zu dieser Beziehung gelangt man sofort, wenn man (6.27) in (6.26) einsetzt.

Die Vollständigkeit des Systems der Eigenfunktionen von $A = H$ stellt sicher, dass man die Schrödinger-Gleichungen mit beliebiger Anfangsbedingung durch Entwicklung nach stationären Zuständen lösen kann:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n \alpha_n \chi_n(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \int dk \alpha(k) \chi(k, \vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E(k) t} \quad (6.29)$$

mit

$$\alpha_n = \int d^3 x \chi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, 0) \quad (6.30)$$

$$\alpha(k) = \int d^3 x \chi^*(k, \vec{x}) \psi(\vec{x}, 0)$$

für beliebiges $\psi(\vec{x}, 0) \in L_2$. Es folgt

$$\psi(\vec{x}, t) = \int G(\vec{x}, \vec{x}', t) \psi(\vec{x}', 0) d^3 x', \quad (6.31)$$

mit dem *Propagator*

$$G(\vec{x}, \vec{x}', t) = \sum_n \chi_n(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \chi_n^*(\vec{x}') + \int dk \chi(k, \vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E(k) t} \chi^*(k, \vec{x}'); \quad (6.32)$$

siehe (3.20) und (3.52) für das freie Teilchen bzw. für das Teilchen im (eindimensionalen) Kasten.

Wir kehren zu den eingangs gestellten Fragen betreffend **die möglichen A-Werte und ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung** zurück. Dazu betrachten wir den Erwartungswert von A im Zustand $\psi(\vec{x})$. Mit (6.26) und (6.18, 20) erhält man:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= (\psi, A \psi) \\ &= \sum_{m,n} \alpha_m^* \alpha_n \underbrace{(\chi_m, A \chi_n)}_{= a_n \delta_{mn}} + \int dk' \int dk \alpha^*(k') \alpha(k) \underbrace{(\chi(k'), A \chi(k))}_{= \alpha(k) \delta(k' - k)} \\ &= \sum_n |\alpha_n|^2 a_n + \int dk |\alpha(k)|^2 a(k). \end{aligned} \quad (6.33)$$

Ferner:

$$\begin{aligned} 1 &= (\psi, \psi) \\ &= \sum_n |\alpha_n|^2 + \int dk |\alpha(k)|^2. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Beweise diese Gleichung! Ein Spezialfall ist (2.43) zusammen mit (2.34). Inwiefern?

Die Gln. (6.33, 34) legen das folgende **zentrale Postulat** der QUM nahe:

- Die bei einer A -Messung möglichen Messwerte sind die Eigenwerte a_n , $a(k)$ – und nur diese.
- Der Messwert a_n , $a(k)$ tritt im Zustand $\psi(\vec{x})$ mit der Wahrscheinlichkeit $|\alpha_n|^2$ bzw. mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\alpha(k)|^2$ auf:

$$\int_{\Delta k} dk |\alpha(k)|^2$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer A -Messung im Zustand $\psi(\vec{x})$ einen Wert $a(k)$ mit k aus dem Intervall Δk zu erhalten. Bezeichnung der α_n , $\alpha(k)$ als *Wahrscheinlichkeitsamplituden*.

Beispiele:

- $A = H$:

$$H \chi(\vec{x}) = E \chi(\vec{x}) . \quad (6.35)$$

Die Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators ist identisch mit der stationären Schrödinger-Gleichung. Das diskrete/kontinuierliche Eigenwertspektrum $E_n / E(k)$ liefert die erlaubten (die möglichen) Energiewerte des Systems. Die eigentlichen/uneigentlichen Eigenfunktionen $\chi_n(\vec{x}) / \chi(k, \vec{x})$ sind der räumliche Anteil der stationären Zustände des Systems. (χ_n, ψ) ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, im Zustand ψ die Energie E_n zu messen; entsprechend $(\chi(k), \psi)$ für $E(k)$.

- $A = \vec{p}$:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \chi(\vec{p}, \vec{x}) = \vec{p} \chi(\vec{p}, \vec{x}) . \quad (6.36)$$

Zu den rein kontinuierlichen Eigenwerten \vec{p} gehören die uneigentlichen Eigenfunktionen

$$\chi(\vec{p}, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} . \quad (6.37)$$

Diese sind δ -orthonormiert – vgl. (3.7) –

$$\begin{aligned} (\chi(\vec{p}'), \chi(\vec{p})) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} (\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{x}} \\ &= \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \end{aligned} \quad (6.38)$$

und *vollständig*, d. h. für $\psi(\vec{x}) \in L_2$ gilt die Entwicklung

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3 p \alpha(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (6.39)$$

mit der Amplitudenfunktion

$$\begin{aligned} \alpha(\vec{p}) &= (\chi(\vec{p}), \psi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) ; \end{aligned} \quad (6.40)$$

diese ist gemäß (2.41 a) gleich der Impulsdarstellung $\varphi(\vec{p})$ des Zustandes $\psi(\vec{x})$. Die Eigenfunktionen des Impulsoperators sind – zusammen mit dem Zeitfaktor $e^{-i\omega(\vec{p})t}$ – die *ebenen Wellen*. Die zentralen Beziehungen (6.33, 34) sind von der Gestalt

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 p \vec{p} |\alpha(\vec{p})|^2 = \int d^3 p \vec{p} |\varphi(\vec{p})|^2 \quad (6.41)$$

$$1 = \int d^3 p |\alpha(\vec{p})|^2 = \int d^3 p |\varphi(\vec{p})|^2 . \quad (6.42)$$

Interpretation: Der Impuls \vec{p} wird im Zustand $\psi(\vec{x})$ mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\alpha(\vec{p})|^2 = |\varphi(\vec{p})|^2$ gemessen; siehe (2.42).

• $A = \vec{x}$:

$$\vec{x} \chi(\vec{x}', \vec{x}) = \vec{x}' \chi(\vec{x}', \vec{x}) . \quad (6.43)$$

Der Faktor \vec{x} auf der linken Seite ist der Ortsoperator, der Faktor \vec{x}' auf der rechten Seite ist der kontinuierliche Eigenwert; dazu die uneigentlichen Eigenfunktionen

$$\chi(\vec{x}', \vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') , \quad (6.44)$$

d. h. Teilchen sicher am Ort $\vec{x} = \vec{x}'$. Diese sind δ -*orthonormiert*:

$$\begin{aligned} (\chi(\vec{x}'), \chi(\vec{x}'')) &= \int d^3 x \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}'') \\ &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}'') \end{aligned} \quad (6.45)$$

und *vollständig*:

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3 x' \alpha(\vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') = \alpha(\vec{x}) \quad (6.46)$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha(\vec{x}') &= (\chi(\vec{x}'), \psi) \\ &= \int d^3 x \delta(\vec{x} - \vec{x}') \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}') . \end{aligned} \quad (6.47)$$

Die Amplitudenfunktion $\alpha(\vec{x}')$ ist einfach die Ortsdarstellung $\psi(\vec{x}')$. Die zentralen Gleichungen (6.33, 34) sind

$$\langle \vec{x} \rangle = \int d^3 x' \vec{x}' |\alpha(\vec{x}')|^2 = \int d^3 x' \vec{x}' |\psi(\vec{x}')|^2 \quad (6.48)$$

$$1 = \int d^3 x' |\alpha(\vec{x}')|^2 = \int d^3 x' |\psi(\vec{x}')|^2. \quad (6.49)$$

Interpretation: Der Ort \vec{x}' wird im Zustand $\psi(\vec{x})$ mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\alpha(\vec{x}')|^2 = |\psi(\vec{x}')|^2$ gemessen; siehe (2.25).

Die *Impulsdarstellung* der *Impulseigenfunktionen* $\chi(\vec{p}', \vec{x})$ ist nach (2.41 a) und (6.37, 38)

$$\tilde{\chi}(\vec{p}', \vec{p}) = (\chi(\vec{p}), \chi(\vec{p}')) = \delta(\vec{p} - \vec{p}'); \quad (6.50)$$

vgl. (3.10). Das Teilchen hat mit Sicherheit den Impuls $\vec{p} = \vec{p}'$, wohingegen der Ort völlig unbestimmt ist (ebene Welle im Ortsraum).

Die *Impulsdarstellung* der *Ortseigenfunktionen* $\chi(\vec{x}', \vec{x})$ ist demgegenüber

$$\tilde{\chi}(\vec{x}', \vec{p}) = (\chi(\vec{p}), \chi(\vec{x}')) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}'}; \quad (6.51)$$

benutze hierfür (2.41 a) und (6.44). Der Impuls ist völlig unbestimmt (ebene Welle im Impulsraum), wohingegen das Teilchen den scharfen Ort $\vec{x} = \vec{x}'$ hat. Siehe Heisenbergsche Unschärfebeziehung.

A-Darstellung. Betrachte eine Observable A , dazu das VONS der Eigenfunktionen $\chi_n, \chi(k)$. Zu jedem Zustand ψ gibt es eindeutig die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_n, \alpha(k)$; umgekehrt legen die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_n, \alpha(k)$ den Zustand ψ eindeutig fest. Die Kenntnis der Amplituden $\alpha_n, \alpha(k)$ ist also äquivalent der Kenntnis des Zustandes ψ ; man bezeichnet daher die Amplituden $\alpha_n, \alpha(k)$ als die „ A -Darstellung des Zustandes ψ “. Die \vec{x} - und die \vec{p} -Darstellung von ψ passen nach dem Vorhergehenden in dieses Schema.

In (6.33) ist der Erwartungswert der Observablen A durch die möglichen Messwerte und die entsprechenden Messwahrscheinlichkeiten im Zustand ψ ausgedrückt. Dieser ist mit

der folgenden *Unschärfe* behaftet:

$$\begin{aligned} \Delta A &= \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \\ &= \left\{ \sum_n |\alpha_n|^2 a_n^2 + \int dk |\alpha(k)|^2 a^2(k) \right. \\ &\quad \left. - \left(\sum_n |\alpha_n|^2 a_n + \int dk |\alpha(k)|^2 a(k) \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Von besonderem Interesse ist eine Situation, in der sich das System in einem Eigenzustand von A befindet, z. B. $\psi = \chi_m$; dann ist

$$\alpha_n = \delta_{nm}, \quad \alpha(k) = 0, \quad (6.53)$$

folglich

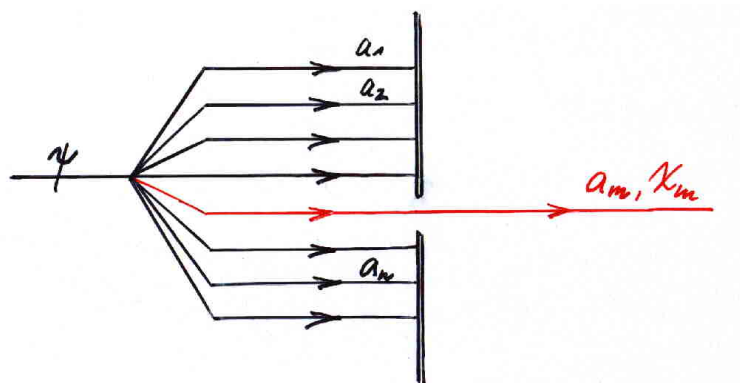
$$\langle A \rangle = a_m, \quad \Delta A = 0, \quad (6.54)$$

d. h. mit Sicherheit wird der zugehörige Eigenwert a_m gemessen. Der Eigenzustand χ_m besitzt den scharfen A -(Eigen-)Wert a_m .

Beispiel: $A = H$. Der stationäre Zustand $\chi_\alpha(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_\alpha t}$ ist ein Zustand der scharfen Energie E_α ; siehe (4.14, 32).

Präparation. Einfachheitshalber unterstellen wir für das Folgende ein rein diskretes System ohne Entartung. Herstellung einer Gesamtheit mit definiertem ψ durch *selektiven Messprozess*: Bei A -Messung an beliebiger statistischer Gesamtheit Aussonderung derjenigen Teilchen, die zur Zeit t_0 den Messwert a_m zeigen. Die ausgesonderte Teilgesamtheit befindet sich dann im Zustand

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \chi_m(\vec{x}); \quad (6.55)$$



• Abbildung 6.1 •

denn erneute A -Messung an der Teilgesamtheit unmittelbar nach der Präparation liefert – als Bestätigung der Selektion – das Resultat

$$\langle A \rangle_{t_0} = a_m, \quad (\Delta A)_{t_0} = 0; \quad (6.56)$$

daraus folgt zwingend (6.55); siehe Jelitto 4, S. 96. Was wird für $t > t_0$ aus der Präparation? Bleibt das System im Eigenzustand $\chi_m(\vec{x})$? Oder misst man im Laufe der Zeit auch andere A -Werte als a_m ?

Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsamplituden durch Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$\alpha_n(t) = (\chi_n, \psi(t)) \quad (6.57)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \dot{\alpha}_n(t) &= (\chi_n, \dot{\psi}(t)) \\ &= -\frac{i}{\hbar} (\chi_n, H \psi(t)), \end{aligned} \quad (6.58)$$

wobei zuletzt (2.12) benutzt wurde. Mit

$$\psi(t) = \sum_{n'} \alpha_{n'}(t) \chi_{n'} \quad (6.59)$$

folgt aus (6.58):

$$\dot{\alpha}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n'} H_{nn'} \alpha_{n'}(t) \quad (6.60)$$

mit

$$H_{nn'} = (\chi_n, H \chi_{n'}). \quad (6.61)$$

(6.60) ist ein lineares gekoppeltes Differentialgleichungssystem 1. Ordnung zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsamplituden $\alpha_n(t)$, d. h. zur Bestimmung des „Zustandes in der A -Darstellung“. Es handelt sich um die „Schrödinger-Gleichung in der A -Darstellung“. Die Matrix mit den Elementen (6.61) ist der „Hamilton-Operator in der A -Darstellung“.

Die *Anfangsverteilung* $\alpha_n(t_0)$ legt die Verteilung $\alpha_n(t)$ für alle Zeiten fest. Sei

$$\alpha_n(t_0) = \delta_{nm}, \quad (6.62)$$

was (6.55) entspricht; das hat im Allgemeinen *nicht* $\alpha_n(t) = \delta_{nm}$ zur Folge! Unter welchen Umständen bleibt die Präparation des Eigenzustandes evtl. doch erhalten?

Sei A eine *Erhaltungsgröße* – siehe (4.42):

$$[H, A] = 0 ; \quad (6.63)$$

sei ferner χ_n Eigenfunktion von A zum Eigenwert a_n :

$$A \chi_n = a_n \chi_n . \quad (6.64)$$

Aus (6.63, 64) folgt

$$A(H \chi_n) = a_n (H \chi_n) , \quad (6.65)$$

d. h. $H \chi_n$ ist ebenfalls Eigenfunktion von A zum Eigenwert a_n . Da a_n voraussetzungsgemäß nicht entartet ist, sind $H \chi_n$ und χ_n zueinander proportional:

$$H \chi_n = E_n \chi_n ; \quad (6.66)$$

wegen H hermitesch ist der Faktor E_n reell. Gl. (6.66) zeigt: χ_n ist *simultan* Eigenfunktion von H zum Eigenwert E_n (und von A zu a_n). Die vorstehende Überlegung gilt für alle n .

Wegen (6.66) ist die Hamilton-Matrix (6.61) *diagonal*:

$$H_{nn'} = E_n \delta_{nn'} . \quad (6.67)$$

(Jede Observable ist in ihrer Eigenbasis diagonal. Siehe unten.) Dadurch ist das Gleichungssystem (6.60) entkoppelt:

$$\dot{\alpha}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} E_n \alpha_n(t) \quad (6.68)$$

mit der Lösung (für alle n):

$$\alpha_n(t) = \alpha_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} . \quad (6.69)$$

Daraus folgt:

$$|\alpha_n(t)|^2 = |\alpha_n(t_0)|^2 = \text{konstant} . \quad (6.70)$$

Also: Nur bei Erhaltungsgrößen bleibt die Präparation eines Eigenzustandes erhalten, sonst im Allgemeinen nicht!

Beispiel: Impuls des freien Teilchens. Für $H = \vec{p}^2 / 2m$ gilt $[H, \vec{p}] = \vec{0}$. Folglich ist die Impulsverteilung $|\varphi(\vec{p}, t)|^2$ zeitlich konstant, siehe (3.34). Dagegen ist die Ortsverteilung $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ zeitlich nicht konstant; der Ort ist ja auch keine Erhaltungsgröße: $[H, \vec{x}] \neq \vec{0}$.

7 Harmonischer Oszillator

Ein Teilchen der Masse m bewege sich in dem Potential

$$V(\vec{x}) = \frac{k}{2} r^2, \quad r = |\vec{x}|, \quad (7.1)$$

$k > 0$ konstant. ($\vec{F} = -\vec{\nabla} V = -k\vec{x}$.) Modell für die Bewegung des Teilchens in der Umgebung eines isotropen Potentialminimums; siehe „harmonische Näherung“ der KLM. *Hamilton-Operator*:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{k}{2} r^2 \\ &= H_1 + H_2 + H_3 \end{aligned} \quad (7.2)$$

mit

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{k}{2} x_i^2, \quad (7.3)$$

$i = 1, 2, 3$, d. h. *Separabilität* des Eigenwertproblems von H in den kartesischen Koordinaten x_1, x_2, x_3 . Wir befassen uns daher im folgenden nur mit dem eindimensionalen Problem. Die dreidimensionalen Eigenfunktionen setzen sich *multiplikativ* aus den eindimensionalen Eigenfunktionen, und die dreidimensionalen Eigenwerte setzen sich *additiv* aus den eindimensionalen Eigenwerten zusammen. Vgl. Teilchen im Kasten.

Analytische Lösung

Stationäre Schrödinger-Gleichung des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\chi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \chi(x) = 0, \quad (7.4)$$

wo zur Abkürzung – wie in der KLM – gesetzt wurde:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (7.5)$$

Mit den *Skalierungen*

$$\begin{aligned} x &= \xi x_0, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ E &= \varepsilon E_0, \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned} \quad (7.6)$$

vereinfacht sich (7.4) zu („dimensionslose“ Schreibweise):

$$\chi''(\xi) + (\varepsilon - \xi^2)\chi(\xi) = 0; \quad (7.7)$$

hierbei wurde für $\chi(x) = \chi(\xi x_0) = \tilde{\chi}(\xi)$ zur Vereinfachung der Notation $\chi(\xi)$ gesetzt. Bezeichnung von x_0 als *Oszillatorlänge*.

Die Lösungen von (7.7) verhalten sich asymptotisch wie

$$\chi(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} \dots e^{\pm \xi^2/2}. \quad (7.8)$$

Das Pluszeichen ist aus physikalischen Gründen (welchen?) auszuschließen. *Lösungsansatz*:

$$\chi(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (7.9)$$

Einsetzen in (7.7) führt auf

$$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0. \quad (7.10)$$

Eine Lösung erkennt man unmittelbar: $H(\xi) = \text{konstant}$ zu $\varepsilon = 1$. Hierbei handelt es sich um den *Grundzustand* des Systems:

$$\chi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (7.11)$$

zur Energie E_0 ; siehe unten. Der Vorfaktor dient der Normierung. Weitere Lösungen von (7.10) kann man nicht so einfach ablesen.

Potenzreihenansatz:

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n. \quad (7.12)$$

Einsetzen in (7.10) liefert

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(n+1)(n+2)a_{n+2} + (\varepsilon - 1 - 2n)a_n\} \xi^n = 0. \quad (7.13)$$

Diese Beziehung ist genau dann identisch in ξ erfüllt, wenn alle $\{\dots\}$ verschwinden. Das ergibt die *Rekursionsformel*:

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} a_n, \quad (7.14)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ Berechnung der Koeffizienten a_n mit Hilfe von (7.14) und der *Randbedingungen*:

$$H(0) = a_0, \quad H'(0) = a_1, \quad (7.15)$$

d. h. Vorgabe der Koeffizienten a_0 und a_1 .

Wir betrachten die beiden *Spezialfälle*

- $a_0 \neq 0, a_1 = 0$:

$$H(\xi) = a_0 \left(1 - \frac{\varepsilon - 1}{2!} \xi^2 + \frac{(\varepsilon - 1)(\varepsilon - 5)}{4!} \xi^4 - \frac{(\varepsilon - 1)(\varepsilon - 5)(\varepsilon - 9)}{6!} \xi^6 + \dots \right), \quad (7.16)$$

d. h. $H(\xi) = H(-\xi)$ ist *gerade*;

- $a_0 = 0, a_1 \neq 0$:

$$H(\xi) = a_1 \left(\xi - \frac{\varepsilon - 3}{3!} \xi^3 + \frac{(\varepsilon - 3)(\varepsilon - 7)}{5!} \xi^5 - \frac{(\varepsilon - 3)(\varepsilon - 7)(\varepsilon - 11)}{7!} \xi^7 + \dots \right), \quad (7.17)$$

d. h. $H(\xi) = -H(-\xi)$ ist *ungerade*.

Die *allgemeine Lösung* erhält man durch Superposition von (7.16) und (7.17).

Für die Potenzreihen (7.12) sowie (7.16, 17) gilt wegen (7.14):

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n}. \quad (7.18)$$

Daraus folgt für das asymptotische Verhalten (Jelitto 4, S. 155, 156):

$$H(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} \dots e^{\xi^2}, \quad (7.19)$$

folglich ist wegen (7.9):

$$\chi(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} \dots e^{\xi^2/2} \quad (7.20)$$

nicht normierbar und kommt als Eigenzustand nicht in Frage. Genau dann jedoch, wenn

$$\varepsilon = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.21)$$

ist, bricht die Potenzreihe mit dem a_n -Term ab, und man erhält ein Polynom vom Grade n :

$$\begin{aligned}
 \varepsilon = 1 : \quad H_0(\xi) &= a_0 \\
 \varepsilon = 3 : \quad H_1(\xi) &= a_1 \xi \\
 \varepsilon = 5 : \quad H_2(\xi) &= a_0 (1 - 2\xi^2) \\
 \varepsilon = 7 : \quad H_3(\xi) &= a_1 \left(\xi - \frac{2}{3}\xi^3 \right) \\
 \varepsilon = 9 : \quad H_4(\xi) &= a_0 \left(1 - 4\xi^2 + \frac{4}{3}\xi^4 \right) \\
 \varepsilon = 11 : \quad H_5(\xi) &= a_1 \left(\xi - \frac{4}{3}\xi^3 + \frac{4}{15}\xi^5 \right)
 \end{aligned} \tag{7.22}$$

usw. – so dass man keine Normierungsprobleme mehr hat.

Konventionell wählt man a_0, a_1 (für jedes n anders) so, dass

$$a_n = 2^n \tag{7.23}$$

gilt. Die Polynome $H_n(\xi)$ bezeichnet man in dieser Normierung als **Hermite-Polynome**:

$$\begin{aligned}
 H_0(\xi) &= 1 \\
 H_1(\xi) &= 2\xi \\
 H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\
 H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\
 H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \\
 H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi
 \end{aligned} \tag{7.24}$$

Für sie gilt die als *Rodrigues-Formel* bezeichnete kompakte Darstellung:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, \tag{7.25}$$

siehe unten; aus dieser ergibt sich die folgende *Orthonormierung*:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_{n'}(\xi) H_n(\xi) = \delta_{n'n} 2^n n! \sqrt{\pi}. \quad (7.26)$$

Beweis: O. B. d. A. sei $n' \geq n$. Mit (7.25) ist die linke Seite von (7.26) gleich

$$(-1)^{n'} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left(\frac{d^{n'}}{d\xi^{n'}} e^{-\xi^2} \right) H_n(\xi);$$

durch n' -malige partielle Integration wird daraus

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} \frac{d^{n'}}{d\xi^{n'}} H_n(\xi),$$

was wegen (7.23) gleich der rechten Seite von (7.26) ist; das ist die *Behauptung*.

Mit (7.6, 9, 26) erhält man die *Energieeigenfunktionen*

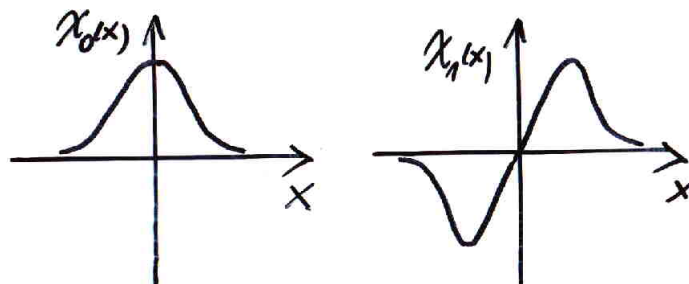
$$\begin{aligned} \chi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} x_0} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \\ &= \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \end{aligned} \quad (7.27)$$

zu den nach (7.6, 21) zu berechnenden *Energieeigenwerten*

$$E_n = E_0 (2n + 1) = \hbar\omega (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.28)$$

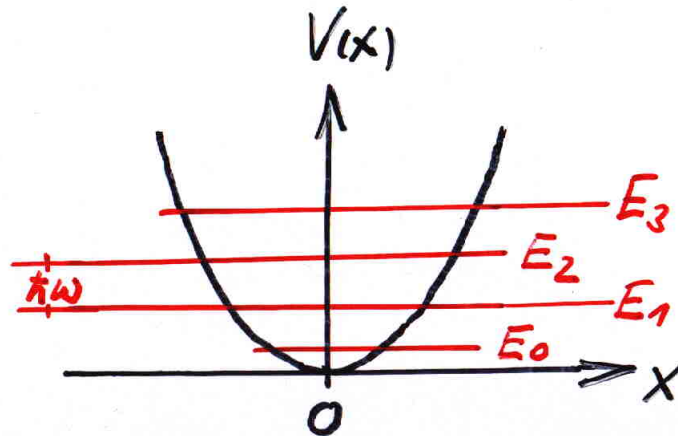
Die durch (7.11) definierte Grundzustandsdefinition $\chi_0(x)$, ist gleich dem zu $n = 0$ gehörigen Spezialfall von (7.27); die entsprechende Grundzustandsenergie E_0 ergibt sich für $n = 0$ aus (7.28) zu $E_0 = \hbar\omega / 2$.

Die Eigenfunktionen sind, ausgehend vom Grundzustand, abwechselnd



• Abbildung 7.1 •

gerade und ungerade; Konsequenz des symmetrischen Potentials $V(x) = V(-x)$; vgl. die gebundenen Zustände im bei $x = 0$ zentrierten Potentialtopf oder -kasten. Die Eigenwerte liegen äquidistant: $\Delta E = \hbar\omega$. „Nullpunktsenergie“ $E_0 > 0$; Konsequenz der Heisenbergschen Unschärfebeziehung. Erklärung?



• Abbildung 7.2 •

Algebraische Lösung

Das Eigenwertproblem des eindimensionalen Hamilton-Operators lässt sich auch noch auf ganz andere, für die QUM typische Weise lösen, und zwar allein auf Grund der algebraischen Struktur des Hamilton-Operators und der Heisenbergschen Vertauschungsrelation:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (7.29)$$

bzw.

$$[x, p] = i\hbar \mathbb{1}. \quad (7.30)$$

Einführung der *Stufenoperatoren*

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \quad (7.31 \text{ a})$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p. \quad (7.31 \text{ b})$$

a^+ zu a adjungiert: $(\varphi, a\psi) = (a^+\varphi, \psi)$; $a = a^{++}$ zu a^+ adjungiert: $(\varphi, a^+\psi) = (a\varphi, \psi)$; siehe unten. a, a^+ gestatten wegen (7.30) für (7.29) die Darstellungen

$$H = \hbar\omega(a^+a + 1/2) = \hbar\omega(aa^+ - 1/2). \quad (7.32)$$

Ferner hat man die Kommutatoren

$$[a, a^+] = \mathbb{1} \quad (7.33)$$

sowie

$$[H, a] = -\hbar\omega a \quad (7.34 \text{ a})$$

$$[H, a^+] = \hbar\omega a^+ \quad (7.34 \text{ b})$$

als Konsequenz des Kommutators (7.30). Beweise diese Gleichungen!

Sei nun χ_E Eigenvektor ($\chi_E \neq 0$, Element des Vektorraumes L_2) von H zum Eigenwert E :

$$H\chi_E = E\chi_E. \quad (7.35)$$

Dass χ_E existiert, wurde mit der vorherigen Methode aufgewiesen. Man kann zeigen, dass gilt:

$$E \geq \hbar\omega/2; \quad (7.36)$$

denn mit (7.32, 35) erhält man:

$$\begin{aligned} 0 &\leq (a\chi_E, a\chi_E) \\ &= (\chi_E, a^+a\chi_E) \\ &= \left(\chi_E, \left(\frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \right) \chi_E \right) \\ &= \left(\frac{1}{\hbar\omega} E - \frac{1}{2} \right) (\chi_E, \chi_E). \end{aligned} \quad (7.37)$$

Wegen $(\chi_E, \chi_E) > 0$ folgt aus (7.37) die obige Ungleichung (7.36).

$a\chi_E$ und $a^+\chi_E$ sind, falls ungleich null, ebenfalls Eigenvektoren von H zu den Eigenwerten $E - \hbar\omega$ bzw. $E + \hbar\omega$; wegen (7.34, 35) gilt nämlich

$$H(a\chi_E) = (aH - \hbar\omega a)\chi_E = (E - \hbar\omega)(a\chi_E) \quad (7.38)$$

$$H(a^+\chi_E) = (a^+H + \hbar\omega a^+)\chi_E = (E + \hbar\omega)(a^+\chi_E).$$

Wiederholte Anwendung von a bzw. a^+ : $a^n\chi_E$ bzw. $(a^+)^n\chi_E$ sind, falls ungleich null, ebenfalls Eigenvektoren von H zu den Eigenwerten $E - n\hbar\omega$ bzw. $E + n\hbar\omega$.

Wegen (7.36) muss es einen niedrigsten Eigenwert $E_0 \geq \hbar \omega / 2$ geben; für den zugehörigen Eigenvektor $\chi_0 \neq 0$ muss gelten:

$$a \chi_0 = 0, \quad (7.39)$$

folglich

$$E_0 = \hbar \omega / 2; \quad (7.40)$$

denn

$$0 = (a \chi_0, a \chi_0) = \left(\frac{1}{\hbar \omega} E_0 - \frac{1}{2} \right) (\chi_0, \chi_0), \quad (7.41)$$

woraus sich wegen $(\chi_0, \chi_0) \neq 0$ die Behauptung (7.40) ergibt.

Aus den vorstehenden Überlegungen folgt für das *Eigenwertspektrum*:

$$E_n = \hbar \omega (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.42)$$

was mit (7.28) übereinstimmt. Ferner folgt für die auf 1 normierten Eigenvektoren ($\|\chi_n\| = 1$ für alle n):

$$a \chi_n = \sqrt{n} \chi_{n-1} \quad (7.43 \text{ a})$$

$$a^+ \chi_n = \sqrt{n+1} \chi_{n+1}; \quad (7.43 \text{ b})$$

zu a):

$$a \chi_n = c_n \chi_{n-1}, \quad c_n \text{ Konstante}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \|a \chi_n\|^2 &= (\chi_n, a^+ a \chi_n) \\ &= \left(\frac{1}{\hbar \omega} E_n - \frac{1}{2} \right) \|\chi_n\|^2 \\ &= n, \end{aligned}$$

andererseits:

$$\begin{aligned} \|a \chi_n\|^2 &= \|c_n \chi_{n-1}\|^2 \\ &= |c_n|^2 \|\chi_{n-1}\|^2 \\ &= |c_n|^2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow c_n = \sqrt{n}$ (bis auf Phasenfaktor) \Rightarrow Behauptung;

zu b): analoge Beweisführung. Zur Übung ausführen!

Insbesondere aus (7.43 b) folgt:

$$\begin{aligned}
 \chi_n &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ \chi_{n-1} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} (a^+)^2 \chi_{n-2} \\
 &= \dots \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \chi_0, \tag{7.44}
 \end{aligned}$$

d. h. das gesamte *System der Eigenvektoren* ist durch wiederholte Anwendung von a^+ sukzessive aus dem Grundzustand χ_0 konstruierbar.

Ortsdarstellung. Gl. (7.39) wird mit (7.31 a, 6) zur Differentialgleichung

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \chi_0(x) = 0 \tag{7.45}$$

mit der (normierten) Lösung

$$\chi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2}; \tag{7.46}$$

das ist die Grundzustandswellenfunktion (7.11). Mit (7.44, 31 b, 6) folgt

$$\begin{aligned}
 \chi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)^n \chi_0(x) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi} x_0} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \tag{7.47}
 \end{aligned}$$

mit den *Hermite-Polynomen*

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}. \tag{7.48}$$

Die Äquivalenz von (7.48) mit (7.25) weist man durch vollständige Induktion nach. Übung! (7.47) stimmt mit (7.27) überein.

Der **dreidimensionale harmonische Oszillator** hat die Energieeigenwerte

$$\begin{aligned}
 E_{n_1 n_2 n_3} &= E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} \\
 &= \hbar \omega (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2); \tag{7.49}
 \end{aligned}$$

seine Grundzustandsenergie ist also $3\hbar\omega/2$; dann folgen äquidistant wie beim eindimensionalen Hamilton-Operator im Abstand $\hbar\omega$ die angeregten Energieniveaus. Diese sind jedoch beim dreidimensionalen Hamilton-Operator im Unterschied zum eindimensionalen Hamilton-Operator mit wachsender Anregung immer stärker entartet. Wie stark? Die Energieeigenfunktionen sind

$$\begin{aligned} \chi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) &= \chi_{n_1}(x_1) \chi_{n_2}(x_2) \chi_{n_3}(x_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3! \pi^{3/2} x_0^3}} \times \\ &\times H_{n_1}\left(\frac{x_1}{x_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{x_2}{x_0}\right) H_{n_3}\left(\frac{x_3}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{1}{2x_0^2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)\right). \end{aligned} \quad (7.50)$$

Das ist ein VONS im Vektorraum der quadratintegriblen Funktionen auf dem \mathbb{R}^3 .

8 Quantenmechanik des Drehimpulses

Satz über vertauschbare Observablen: Hermitesche Operatoren A, B mit

$$[A, B] = 0 \quad (8.1)$$

besitzen ein gemeinsames System von Eigenfunktionen.

Beweis. Betrachte das Eigenwertproblem von A :

$$A \chi_\nu(\vec{x}) = a \chi_\nu(\vec{x}) . \quad (8.2)$$

Der Eigenwert a ist im Allgemeinen entartet: $\nu = 1, 2, 3, \dots$ (Der Fall der Nichtentartung ist als Spezialfall in den nachfolgenden Betrachtungen enthalten.) Die Eigenfunktionen $\chi_\nu(\vec{x})$ bilden im zu a gehörigen Eigenraum eine orthonormierte Basis. Aus (8.1, 2) folgt:

$$A(B \chi_\nu(\vec{x})) = a(B \chi_\nu(\vec{x})) , \quad (8.3)$$

d. h. auch $B \chi_\nu(\vec{x})$ ist Eigenfunktion von A zum Eigenwert a und lässt sich folglich nach den $\chi_\nu(\vec{x})$ entwickeln:

$$B \chi_\nu(\vec{x}) = \sum_{\nu'} b_{\nu\nu'} \chi_{\nu'}(\vec{x}) . \quad (8.4)$$

Da B ein hermitescher Operator ist, bilden die Koeffizienten $b_{\nu\nu'}$ eine hermitesche Matrix:

$$b_{\nu\nu'}^* = b_{\nu'\nu} . \quad (8.5)$$

Zeige das! In der Linearen Algebra wird bewiesen: Jede hermitesche Matrix lässt sich durch eine unitäre Transformation diagonalisieren, d. h. zur Matrix $b_{\nu\nu'}$ gibt es eine Matrix $u_{\mu\mu'}$ mit

$$\sum_{\nu} u_{\mu\nu} u_{\mu'\nu}^* = \sum_{\nu} u_{\nu\mu}^* u_{\nu\mu'} = \delta_{\mu\mu'} \quad (8.6)$$

und

$$\sum_{\nu, \nu'} u_{\mu\nu} b_{\nu\nu'} u_{\mu'\nu'}^* = b_{\mu\mu'} \delta_{\mu\mu'} . \quad (8.7)$$

Statt der Funktionen $\chi_\nu(\vec{x})$ betrachte die Linearkombinationen

$$\tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) = \sum_{\nu} u_{\mu\nu} \chi_\nu(\vec{x}) . \quad (8.8)$$

Diese sind weiterhin Eigenfunktionen des Operators A zum Eigenwert a :

$$A \tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) = a \tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) . \quad (8.9)$$

Sie sind „simultan“ Eigenfunktionen des Operators B zu den Eigenwerten b_μ ; denn mit (8.4, 6, 8) erhält man

$$\begin{aligned} B \tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) &= \sum_\nu u_{\mu\nu} B \chi_\nu(\vec{x}) \\ &= \sum_{\nu, \nu'} u_{\mu\nu} b_{\nu\nu'} \chi_{\nu'}(\vec{x}) \\ &= \sum_{\mu'} \sum_{\nu, \nu'} u_{\mu\nu} b_{\nu\nu'} u_{\mu'\nu'}^* \tilde{\chi}_{\mu'}(\vec{x}) ; \end{aligned}$$

daraus folgt schließlich mit (8.7):

$$B \tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) = b_\mu \tilde{\chi}_\mu(\vec{x}) . \quad (8.10)$$

Die Eigenfunktionen von A lassen sich also so wählen, dass sie zugleich Eigenfunktionen von B sind – und umgekehrt, das ist die *Behauptung*.

Die *Umkehrung des Satzes* ist auch richtig: Wenn zwei Observablen ein gemeinsames System von Eigenfunktionen besitzen, dann kommutieren sie. Beweis: Darstellung der Observablen in der gemeinsamen Eigenbasis als Diagonalmatrizen; diese kommutieren. Äquivalente Formulierung: Wenn zwei Observablen *nicht* kommutieren, dann gibt es *kein* gemeinsames System von Eigenfunktionen. Siehe hierzu Jelitto 4, S. 184.

Bezeichnung der Observablen A, B als *kommensurabel*. In den Zuständen $\tilde{\chi}_\mu(\vec{x})$ nehmen A, B simultan die scharfen Messwerte a, b_μ an:

$$\langle A \rangle_\mu = a , \quad \langle B \rangle_\mu = b_\mu \quad (8.11)$$

mit

$$(\Delta A)_\mu = (\Delta B)_\mu = 0 . \quad (8.12)$$

Wenn A, B nicht kommutieren, gibt es (im Allgemeinen) keine gemeinsamen Eigenzustände, somit keine Kommensurabilität. Siehe Unschärfebeziehung (4.33).

Beispiele:

- Die kontinuierlichen Observablen p_1, p_2 und p_3 , d. h. die kartesischen Impulskomponenten, besitzen die ebenen Wellen $\chi_{\vec{k}}(\vec{x}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ als simultane Eigenfunktionen zu den Eigenwerten $\hbar k_1, \hbar k_2$ bzw. $\hbar k_3$.
- Spiegelungsoperator (Observable „Parität“):

$$S \psi(x) = \psi(-x) ; \quad (8.13)$$

dieser ist hermitesch:

$$(\varphi, S\psi) = (S\varphi, \psi) . \quad (8.14)$$

Zeige das! Eigenwertproblem:

$$S\chi(x) = s\chi(x) \quad (8.15)$$

mit den Eigenwerten $s = +1$ für alle geraden Funktionen $\chi(x) = \chi(-x)$ und $s = -1$ für alle ungeraden Funktionen $-\chi(x) = \chi(-x)$. Sei H der Hamilton-Operator eines Teilchens im symmetrischen Potential

$$V(x) = V(-x) ; \quad (8.16)$$

dann kommutieren H und S :

$$[H, S] = 0 . \quad (8.17)$$

Zeige das! Aus dem obigen Satz folgt: Wenn die Energieeigenwerte des Systems nicht entartet sind, dann sind die Energieeigenfunktionen simultan S -Eigenfunktionen, also gerade oder ungerade. Siehe oben: Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator. Dass sie – beginnend mit dem Grundzustand – abwechselnd die Parität $+1$ und -1 besitzen, folgt aus der wachsenden Knotenzahl $0, 1, 2, \dots$, Jelitto 4, S. 88. Wenn die Energieeigenwerte des Systems entartet sind, kann man die entsprechenden Energieeigenfunktionen so linearkombinieren, dass sie symmetrisch (gerade) oder antisymmetrisch (ungerade) sind. Siehe Jelitto 4, Kap. 2.8.4.

Nach (4.22) ist die Observable **Bahndrehimpuls** eines Teilchens in der QUM durch den hermiteschen Operator

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (8.18)$$

zu kennzeichnen. Beweis der Hermitezität in den Übungen. In Komponenten hat man

$$L_j = x_k p_l - x_l p_k = \frac{\hbar}{i} \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_l} - x_l \frac{\partial}{\partial x_k} \right) , \quad (8.19)$$

$jkl = 1, 2, 3$ zykl. Es gelten die **Kommutatoren**

$$[L_j, L_k] = i\hbar L_l . \quad (8.20)$$

Der *Beweis* ist mit Hilfe der Heisenbergschen Vertauschungsrelation (4.26) möglich, also rein *algebraisch*. Übungen! Hier *analytische* Begründung in der Ortsdarstellung; $\psi(\vec{x})$ beliebig:

$$\begin{aligned}
 \vec{L} \wedge \vec{L} \psi(\vec{x}) &= \vec{L} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{p}) \psi(\vec{x}) \\
 &= \vec{L} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{p}) \psi(\vec{x}) + \vec{L} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{p}) \psi(\vec{x}) \\
 &= \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{p}) \vec{x} \psi(\vec{x})} - \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{x}) \vec{p} \psi(\vec{x})} \\
 &+ \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{p}) \vec{x} \psi(\vec{x})} - \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{x}) \vec{p} \psi(\vec{x})} . \tag{8.21}
 \end{aligned}$$

Die „Haken“ markieren die Wirkungsweise des Differentialoperators \vec{L} . Der 2., 3. und 4. Term verschwindet. Man verbleibt – ohne $\psi(\vec{x})$ – mit

$$\begin{aligned}
 \vec{L} \wedge \vec{L} &= (\vec{x} \wedge \underbrace{\vec{p} \cdot \vec{p}}_{\vec{p} \cdot \vec{p}}) \vec{x} \\
 &= -(\vec{x} \wedge \vec{p} \cdot \vec{p}) \vec{x} \\
 &= i \hbar \vec{L} . \tag{8.22}
 \end{aligned}$$

Schreibt man diese Vektorgleichung in Komponenten auf, so erhält man die Beziehungen (8.20). – Beachte den Unterschied zur klassischen Beziehung $\vec{L} \wedge \vec{L} = \vec{0}$!

Konsequenz der Vertauschungsrelationen (8.20) sind nach (4.33) die **Unschärfebeziehungen**

$$\Delta L_j \Delta L_k \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_l \rangle| , \tag{8.23}$$

$j, k, l = 1, 2, 3$ zykl. Daraus folgt: Im Allgemeinen, d. h. in allen Zuständen mit $\langle \vec{L} \rangle \neq \vec{0}$, ist $\Delta \vec{L} \neq \vec{0}$, d. h. die \vec{L} -Komponenten haben simultan keine scharfen Werte. In dem Spezialfall $\langle \vec{L} \rangle = \vec{0}$ kann $\Delta \vec{L}$ verschwinden oder ungleich null sein; siehe unten.

Mit Hilfe des *Levi-Civita-Tensors* schreibt man die Kommutatoren (8.20) auch so:

$$[L_j, L_k] = i \hbar \sum_l \varepsilon_{jkl} L_l . \tag{8.24}$$

Entsprechend beweist man mit Hilfe der Heisenberg-Kommutatoren:

$$[L_j, x_k] = i \hbar \sum_l \varepsilon_{jkl} x_l \tag{8.25}$$

$$[L_j, p_k] = i \hbar \sum_l \varepsilon_{jkl} p_l ; \quad (8.26)$$

Jelitto 4, S. 192. Aus (8.25, 26) ergeben sich wieder die entsprechenden Unschärfebeziehungen. – Weitere wichtige Kommutatoren:

$$[L_i, \vec{x}^2] = 0 \quad (8.27)$$

$$[L_i, \vec{p}^2] = 0 \quad (8.28)$$

sowie

$$[L_i, \vec{L}^2] = 0 , \quad (8.29)$$

$i = 1, 2, 3$. Beweis mit (8.24, 25, 26); Jelitto 4, S. 194.

Aus (8.27) folgt (wie?):

$$[L_i, V(r)] = 0 , \quad (8.30)$$

d. h. die \vec{L} -Komponenten vertauschen mit jedem Zentralpotential $V(r)$. Da wegen (8.28) die \vec{L} -Komponenten auch mit der kinetischen Energie $T(p) = \vec{p}^2 / 2m$ vertauschen:

$$[L_i, T(p)] = 0 , \quad (8.31)$$

kommutiert \vec{L} mit dem Hamilton-Operator $H = T(p) + V(r)$ eines Teilchens im Zentralpotential:

$$[L_i, H] = 0 . \quad (8.32)$$

Das bedeutet nach (4.42):

$$\langle L_i \rangle = \text{konstant}, \quad \Delta L_i = \text{konstant} , \quad (8.33)$$

$i = 1, 2, 3$. \vec{L} ist im Zentralkraftfeld eine *Erhaltungsgröße* – wie in der KLM. Beachte jedoch die Unterschiede!

Wir wenden uns dem **Eigenwertproblem des Bahndrehimpulses** zu. Auf Grund der Umkehrung des einleitenden Satzes folgt aus (8.20): Die Observablen L_1, L_2, L_3 besitzen *kein* gemeinsames Eigenfunktionensystem. Dagegen folgt aus (8.29) auf Grund des einleitenden Satzes: Die Observablen \vec{L}^2 und L_i für $i = 1$ oder $i = 2$ oder $i = 3$ haben ein gemeinsames System von Eigenfunktionen. Konventionell wählt man $i = 3$:

$$\vec{L}^2 \chi(\vec{x}) = \lambda \chi(\vec{x}) , \quad L_3 \chi(\vec{x}) = \mu \chi(\vec{x}) . \quad (8.34)$$

Im folgenden geht es um die Lösung dieses *simultanen Eigenwertproblems* – zunächst analytisch, sodann algebraisch.

Übergang von kartesischen Koordinaten zu *Kugelkoordinaten*:

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\x_2 &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\x_3 &= r \cos \vartheta ,\end{aligned}\tag{8.35}$$

von der kartesischen Basis zur *lokalen Basis*:

$$\begin{aligned}\hat{r} &= \sin \vartheta \cos \varphi \hat{x}_1 + \sin \vartheta \sin \varphi \hat{x}_2 + \cos \vartheta \hat{x}_3 \\ \hat{\vartheta} &= \cos \vartheta \cos \varphi \hat{x}_1 + \cos \vartheta \sin \varphi \hat{x}_2 - \sin \vartheta \hat{x}_3 \\ \hat{\varphi} &= -\sin \varphi \hat{x}_1 + \cos \varphi \hat{x}_2 .\end{aligned}\tag{8.36}$$

Beweise diese Transformation! Der *Gradient* hat in der $\hat{r}, \hat{\vartheta}, \hat{\varphi}$ -Basis die folgende Gestalt:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\vartheta} \frac{\partial}{r \partial \vartheta} + \hat{\varphi} \frac{\partial}{r \sin \vartheta \partial \varphi} .\tag{8.37}$$

Wieso? (8.37) gestattet mit $\vec{x} = r \hat{r}$ für den *Bahndrehimpuls* die Darstellung:

$$\begin{aligned}\vec{L} &= r \hat{r} \wedge \frac{\hbar}{i} \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\vartheta} \frac{\partial}{r \partial \vartheta} + \hat{\varphi} \frac{\partial}{r \sin \vartheta \partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \hat{\vartheta} \frac{\partial}{\sin \vartheta \partial \varphi} \right)\end{aligned}\tag{8.38}$$

wegen $\hat{r} \wedge \hat{r} = \vec{0}$, $\hat{r} \wedge \hat{\vartheta} = \hat{\varphi}$, $\hat{r} \wedge \hat{\varphi} = -\hat{\vartheta}$. Mit (8.36) erhält man schließlich für die *kartesischen \vec{L} -Komponenten* in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned}L_1 &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_2 &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_3 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} .\end{aligned}\tag{8.39}$$

Das \vec{L} -Betragssquadrat in Kugelkoordinaten berechnet man zu:

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\
&= \dots \text{ (8.39) einsetzen } \dots \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\sin^2 \vartheta \partial \varphi^2} \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\sin \vartheta \partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\sin^2 \vartheta \partial \varphi^2} \right) .
\end{aligned} \tag{8.40}$$

Sämtliche Drehimpulsoperatoren (8.39, 40) sind unabhängig von r . Die geometrische Ursache ist darin zu sehen, dass \vec{L} infinitesimale Drehungen „erzeugt“:

$$\begin{aligned}
\Omega(\vec{\varepsilon}) \chi(\vec{x}) &= \chi(\vec{x} - \vec{\varepsilon} \wedge \vec{x}) \\
&= \chi(\vec{x}) - \vec{\varepsilon} \wedge \vec{x} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \chi(\vec{x}) \\
&= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{L} \right) \chi(\vec{x}) ;
\end{aligned} \tag{8.41 a}$$

für endliche Drehungen folgt:

$$\Omega(\vec{\varepsilon}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{L}} . \tag{8.41 b}$$

Genauereres hierzu später!

Wegen der r -Unabhängigkeit von \vec{L}^2 , L_3 machen wir in (8.34) für die Eigenfunktionen den *Produktansatz*

$$\chi(\vec{x}) = R(r) Y(\vartheta, \varphi) . \tag{8.42}$$

Dieser führt – da sich $R(r)$ herauskürzt – für $Y(\vartheta, \varphi)$ auf:

$$\vec{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \lambda Y(\vartheta, \varphi) , \quad L_3 Y(\vartheta, \varphi) = \mu Y(\vartheta, \varphi) . \tag{8.43}$$

$R(r)$ bezeichnet man als *radiale Wellenfunktion*; sie ist zunächst beliebig (später Festlegung durch Zentralfeld-Hamilton-Operator) bis auf (für eigentliche Zustände) die Normierung:

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = 1 . \tag{8.44}$$

Interpretation: $|R(r)|^2 r^2 dr$ = Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen in der Kugelschale dr bei r anzutreffen. – Da es Systeme von unendlich vielen Funktionen $R_n(r)$ gibt mit

$$\int_0^\infty dr r^2 R_m^*(r) R_n(r) = \delta_{mn} , \quad (8.45)$$

sind die Eigenwerte λ, μ unendlichfach entartet. Siehe Grawert, S. 59, und siehe unten!

Ferner normiert man:

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y(\vartheta, \varphi)|^2 = 1 . \quad (8.46)$$

Interpretation: $|Y(\Omega)|^2 d\Omega$ = Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Raumwinkelelement $d\Omega$ bei Ω vorzufinden. (8.44, 46) ergeben für die Gesamtwellenfunktion die (für eigentliche Zustände) übliche Normierung $\int d^3x |\chi(\vec{x})|^2 = 1$. Im folgenden setzen wir uns mit dem r -unabhängigen simultanen Eigenwertproblem (8.43) auseinander.

Separation der Eigenwertgleichungen für \vec{L}^2, L_3 durch den erneuten *Produktansatz*

$$Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi) . \quad (8.47)$$

Dieser führt mit der 3. Gl. (8.39) für $\Phi(\varphi)$ auf die Differentialgleichung:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} - \mu \right) \Phi(\varphi) = 0 \quad (8.48)$$

mit der Lösung

$$\Phi(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar} \mu \varphi} . \quad (8.49)$$

Die Forderung nach Eindeutigkeit von $\chi(\vec{x})$ erzwingt

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mu (\varphi + 2\pi)} = e^{\frac{i}{\hbar} \mu \varphi} ; \quad (8.50)$$

also hat L_3 die *Eigenwerte*

$$\mu = \hbar m , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \text{ ganz} , \quad (8.51)$$

und der φ -Anteil der simultanen *Eigenfunktionen* $Y(\vartheta, \varphi)$ ist

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \text{ ganz} . \quad (8.52)$$

Für $\Theta(\vartheta)$ erhält man mit (8.40, 52) die Differentialgleichung:

$$\left(\frac{d}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{\lambda}{\hbar^2} \right) \Theta(\vartheta) = 0 ; \quad (8.53)$$

diese geht durch die Transformation

$$\cos \vartheta = \zeta , \quad \Theta(\vartheta) = P(\zeta) \quad (8.54)$$

wegen $d\zeta = -\sin \vartheta d\vartheta$ über in die Differentialgleichung:

$$\left(\frac{d}{d\zeta} (1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} - \frac{m^2}{1 - \zeta^2} + \frac{\lambda}{\hbar^2} \right) P(\zeta) = 0 . \quad (8.55)$$

Wir betrachten zunächst den Spezialfall $\mathbf{m} = \mathbf{0}$. Dann handelt es sich bei (8.55) um die **Legendresche Differentialgleichung**:

$$\left(\frac{d}{d\zeta} (1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} + \frac{\lambda}{\hbar^2} \right) P(\zeta) = 0 . \quad (8.56)$$

Lösungsansatz in Form einer *Potenzreihe*:

$$P(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^n , \quad -1 \leq \zeta \leq +1 ; \quad (8.57)$$

die Koeffizienten a_n sind zu bestimmen. Einsetzen von (8.57) in die Legendresche Differentialgleichung liefert die *Rekursionsformel* (verifizieren!):

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - \lambda/\hbar^2}{(n+1)(n+2)} a_n . \quad (8.58)$$

Berechnung der a_n mit Hilfe von (8.58) und der *Randbedingungen*

$$P(0) = a_0 , \quad P'(0) = a_1 , \quad (8.59)$$

d. h. Vorgabe der Koeffizienten a_0 und a_1 .

Zwei *Spezialfälle*:

- $a_0 \neq 0, a_1 = 0 \Rightarrow P(-\zeta) = P(\zeta)$ gerade Funktion
- $a_0 = 0, a_1 \neq 0 \Rightarrow P(-\zeta) = -P(\zeta)$ ungerade Funktion.

$\zeta \rightarrow -\zeta$ bedeutet $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$, also hat man in den beiden Fällen Symmetrie bzw. Antisymmetrie von $\Theta(\vartheta)$ bezüglich der x_1, x_2 -Ebene. Durch Superposition gewinnt man die allgemeine Lösung.

Aus (8.58) folgt:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{n}{n+2}; \quad (8.60)$$

das bedeutet *singuläres* Verhalten von $P(\zeta)$ bei $\zeta = \pm 1$ (von $\Theta(\vartheta)$ bei $\vartheta = 0, \pi$) – sofern die Potenzreihe nicht abbricht. Begründung? Zu *regulärem* Verhalten von $P(\vartheta)$ im ganzen $[-1, +1]$ -Intervall (von $Y(\vartheta, \varphi)$ auf der ganzen Einheitskugel) gelangt man, wenn die Potenzreihe abbricht, so dass $P(\zeta)$ zu einem Polynom wird. Das ist der Fall für die folgenden *Eigenwerte* von \vec{L}^2 :

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (8.61)$$

und zwar für gerades l bei der geraden Potenzreihe ($a_0 \neq 0, a_1 = 0$) und für ungerades l bei der ungeraden Potenzreihe ($a_0 = 0, a_1 \neq 0$). (Für gerades/ungerades l bricht die ungerade/gerade Potenzreihe nicht ab: *singuläre* Lösungen.) Bezeichnung der resultierenden abwechselnd symmetrischen und antisymmetrischen Polynome $P_l(\zeta)$ als **Legendre-Polynome**:

$$\begin{aligned} P_0(\zeta) &= a_0 \\ P_1(\zeta) &= a_1 \zeta \\ P_2(\zeta) &= a_0(1 - 3\zeta^2) \end{aligned} \quad (8.62)$$

$$P_3(\zeta) = a_1 \zeta \left(1 - \frac{5}{3} \zeta^2 \right)$$

usw. Man verfügt über a_0, a_1 üblicherweise so, dass gilt:

$$P_l(1) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad P_l(-1) = (-1)^l; \quad (8.63)$$

dann erhält man

$$\begin{aligned} P_0(\zeta) &= 1 \\ P_1(\zeta) &= \zeta \\ P_2(\zeta) &= \frac{1}{2}(3\zeta^2 - 1) \end{aligned} \quad (8.64)$$

$$P_3(\zeta) = \frac{1}{2}(5\zeta^3 - 3\zeta)$$

usw. Darstellung der Legendre-Polynome durch die *Rodrigues-Formel*:

$$P_l(\zeta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\zeta^l} (\zeta^2 - 1)^l. \quad (8.65)$$

Beweis: (8.65) befriedigt (8.56, 61), ist regulär, erfüllt die Normierung (8.63). Übung! Der Beweis ist auch mit Hilfe von Stufenoperatoren möglich (siehe unten; vgl. (7.25, 48) im Falle der Hermite-Polynome). Verifiziere die Gültigkeit von (8.65) für die niedrigsten l -Werte!

Orthogonalität und Normierung:

$$\int_{-1}^{+1} d\zeta P_{l'}(\zeta) P_l(\zeta) = \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}. \quad (8.66)$$

Beweis mit (8.56, 61, 65) und partieller Integration. Wie? Die Festlegung $P_l(1) = 1$ und eine Normierung auf 1 sind unvereinbar!

Vollständigkeit: Jede reguläre Funktion $g(\zeta)$ lässt sich im Intervall $[-1, +1]$ nach den $P_l(\zeta)$ entwickeln:

$$g(\zeta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\zeta). \quad (8.67)$$

Beweis: $1, \zeta, \zeta^2, \zeta^3, \dots$ vollständig, $P_l(\zeta)$ durch Orthogonalisierung nach Schmidt! Vgl. Übungen. Berechne die a_l , leite eine „Vollständigkeitsrelation“ her:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\zeta) P_l(\zeta') = 2\delta(\zeta - \zeta'). \quad (8.68)$$

Wir wenden uns dem Fall $m \neq 0$ zu. Anwendung des Operators

$$D_m = (1 - \zeta^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\zeta^m} \quad (8.69)$$

auf die Legendresche Differentialgleichung führt nach einiger Rechnung (die hier nicht vorgeführt werden soll) auf die Differentialgleichung (8.55):

$$\left(\frac{d}{d\zeta} (1 - \zeta^2) \frac{d}{d\zeta} - \frac{m^2}{1 - \zeta^2} + l(l+1) \right) D_m P_l(\zeta) = 0, \quad (8.70)$$

wobei λ gemäß (8.61) substituiert wurde. Bezeichnung der Funktionen

$$\begin{aligned} P_l^m(\zeta) &= D_m P_l(\zeta) \\ &= \frac{1}{2^l l!} (1 - \zeta^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d\zeta^{l+m}} (\zeta^2 - 1)^l, \end{aligned} \quad (8.71)$$

wobei (8.65, 69) benutzt wurde, als **zugeordnete Legendre-Funktionen**; durch (8.71) definiert für

$$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l ; \quad (8.72)$$

dabei ist $P_l^0(\zeta) = P_l(\zeta)$. (8.71, 72) ist die reguläre Lösung von (8.55, 61) (ohne Beweis).

Symmetrien:

$$P_l^{-m}(\zeta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\zeta) \quad (8.73)$$

$$P_l^m(-\zeta) = (-1)^{l+m} P_l^m(\zeta) . \quad (8.74)$$

Beweis von (8.73) durch Nachrechnen. *Beweis* von (8.74) trivial!

Orthogonalität und Normierung:

$$\int_{-1}^{+1} d\zeta P_l^m(\zeta) P_l^m(\zeta) = \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1} . \quad (8.75)$$

Beweis analog zum Beweis von (8.66): Benutze die Differentialgleichung und die verallgemeinerte Rodrigues-Formel!

Nach den vorstehenden Ausführungen ist der ϑ -Anteil der simultanen *Eigenfunktionen* $Y(\vartheta, \varphi)$ gegeben durch:

$$\Theta(\vartheta) = P_l^m(\cos \vartheta) , \quad \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, \dots \\ m = -l, \dots, +l \end{array} . \quad (8.76)$$

Die simultane Eigenfunktion $Y(\vartheta, \varphi)$ bildet man gemäß (8.47) durch die Multiplikation von $\Theta(\vartheta)$ aus (8.76) und $\Phi(\varphi)$ aus (8.52) – bis auf die Normierung.

Kugelfunktionen:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} ; \quad (8.77)$$

auf der Einheitskugel *orthonormiert*:

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm} , \quad (8.78)$$

was unmittelbar aus (8.75) und aus

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i(m'-m)\varphi} = 2\pi \delta_{m'm} \quad (8.79)$$

folgt; ferner *vollständig* auf der Einheitskugel: Jede auf der Einheitskugel reguläre Funktion $f(\vartheta, \varphi)$ lässt sich nach Kugelfunktionen entwickeln:

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (8.80)$$

mit

$$a_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi). \quad (8.81)$$

Zum Beweis siehe Grawert, Kap. 4.2. *Vollständigkeitsrelation*:

$$\sum_{l,m} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (8.82)$$

Kugelfunktionen mit den niedrigsten Indizes:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \\ Y_{1,\pm 1}(\vartheta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \\ Y_{20}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \\ Y_{2,\pm 1}(\vartheta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2,\pm 2}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi} \quad \text{usw.} \end{aligned} \quad (8.83)$$

Weitere Eigenschaften:

$$Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta) \quad (8.84)$$

folgt aus den vorstehenden Definitionen;

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad (8.85)$$

folgt mit (8.73) und wegen $e^{-im\varphi} = (e^{im\varphi})^*$;

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (8.86)$$

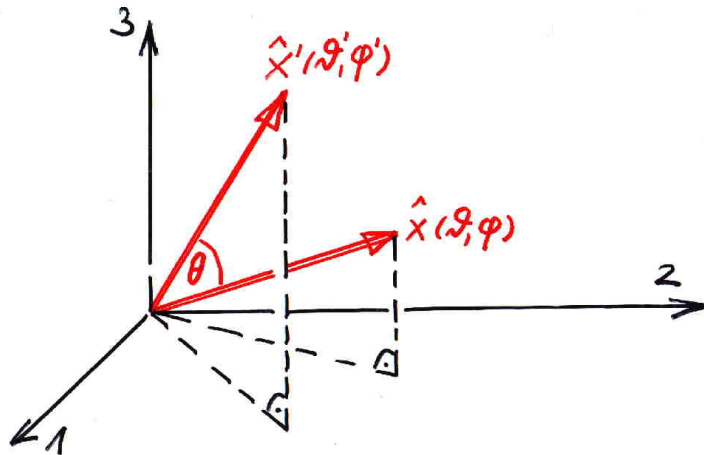
folgt mit (8.74) und wegen $e^{im\pi} = (-1)^m$: Vorzeichenwechsel bei Inversion am Koordinatenursprung, d. h. ungerade (negative) *Parität* für $l = 1, 3, 5, \dots$; kein Vorzeichenwechsel bei dieser Operation, d. h. gerade (positive) *Parität*, für $l = 0, 2, 4, \dots$

Additionstheorem:

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

$$\cos \theta = \hat{x}' \cdot \hat{x} \quad (8.87)$$

$$= \cos \vartheta' \cos \vartheta + \sin \vartheta' \sin \vartheta \cos(\varphi' - \varphi)$$



• Abbildung 8.1 •

Beweis: Entwicklung von $P_l(\cos \theta)$ nach den $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Als Entwicklungskoeffizienten erhält man $\frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi')$, wobei nur diejenigen l beitragen, die dem Index von $P_l(\cos \theta)$ entsprechen. Zeige das! Siehe Grawert S. 70.

Die für die QUM wichtigste Eigenschaft der Kugelfunktionen besteht darin, dass sie das *simultane Eigenwertproblem* der Observablen \vec{L}^2 und L_3 lösen:

$$\vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (8.88)$$

$$L_3 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (8.89)$$

$l = 0, 1, 2, \dots, m = -l, \dots, +l$.

Die **physikalische Interpretation** dieses Resultates erfolgt in Anlehnung an Kap. 6. Eine Gesamtheit von Teilchen sei durch die normierte Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ beschrieben. Die Vollständigkeit der Kugelfunktionen gestattet die Entwicklung

$$\psi(\vec{x}) = \psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l,m} a_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (8.90)$$

mit

$$a_{lm}(r) = \int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \psi(r, \vartheta, \varphi). \quad (8.91)$$

Daraus folgen mit (8.88, 89) bei Benutzung der Orthonormiertheit der Kugelfunktionen die Beziehungen – vgl (6.34, 33):

$$1 = \int d^3x \psi^* \psi = \sum_{l,m} w_{lm} \quad (8.92)$$

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \int d^3x \psi^* \vec{L}^2 \psi = \sum_{l,m} \hbar^2 l(l+1) w_{lm} \quad (8.93)$$

$$\langle L_3 \rangle = \int d^3x \psi^* L_3 \psi = \sum_{l,m} \hbar m w_{lm} \quad (8.94)$$

mit

$$w_{lm} = \int_0^\infty dr r^2 |a_{lm}(r)|^2. \quad (8.95)$$

Messwerte und Messwahrscheinlichkeiten von \vec{L}^2 und L_3 : Bei simultaner Messung von \vec{L}^2 und L_3 an den Teilchen der Gesamtheit erhält man jeweils einen der Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ bzw. $\hbar m$, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit w_{lm} . Vgl. zentrales Postulat der QUM!

Sei *speziell*

$$\psi(\vec{x}) = R(r) Y_{l_0 m_0}(\vartheta, \varphi), \quad (8.96)$$

d. h. gemeinsamer Eigenzustand von \vec{L}^2 und L_3 zu den Eigenwerten $\hbar^2 l_0(l_0+1)$ bzw. $\hbar m_0$; dann ist

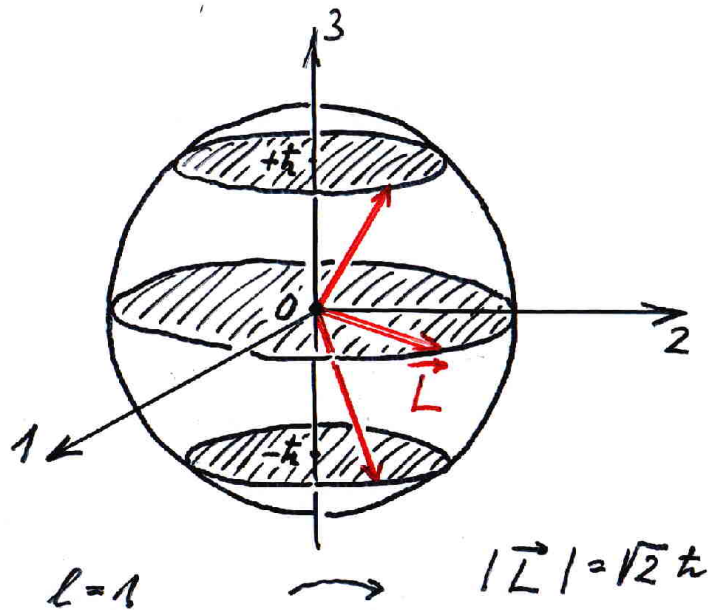
$$a_{lm}(r) = R(r) \delta_{ll_0} \delta_{mm_0}$$

$$\Rightarrow w_{lm} = \underbrace{\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2}_{=1} \delta_{ll_0} \delta_{mm_0} = \delta_{ll_0} \delta_{mm_0} , \quad (8.97)$$

d. h. man erhält bei \vec{L}^2, L_3 -Messung mit Sicherheit die Messwerte $\hbar^2 l_0(l_0 + 1)$ bzw. $\hbar m_0$.

Bezeichnung von l als *Drehimpulsquantenzahl* ($l = 0, 1, 2, \dots$: s-, p-, d-, ... Zustände), von m als *Richtungs- oder magnetische Quantenzahl*.

Richtungsquantelung. Das Teilchen (die Gesamtheit) befinde sich im Zustand $\psi(\vec{x}) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Die Quantenzahl l bedeutet: Der Bahndrehimpuls hat den Betrag $\hbar \sqrt{l(l + 1)}$; die Quantenzahl m bedeutet: Die 3-Komponente von \vec{L} hat den Wert $\hbar m$. Zu festem Betrag (l) gibt es $2l + 1$ „Richtungen / Einstellungen“ (m).



• Abbildung 8.2 •

L_1, L_2 sind *nicht* scharf; man erhält von Teilchen zu Teilchen verschiedene Messwerte: möglich sind $-\hbar l, \dots, +\hbar l$; im Mittel über die Gesamtheit ist

$$\langle L_1 \rangle = \langle L_2 \rangle = 0 . \quad (8.98)$$

Beweis mit Hilfe der Unschärfebeziehungen (8.23) und $\Delta L_3 = 0$. Wie? Die Streuung der Messwerte um (8.98) ist

$$\Delta L_1 = \Delta L_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{l(l+1) - m^2} . \quad (8.99)$$

Sie ist umso größer, je kleiner $|m|$ ist. *Beweis* von (8.99):

$$(\Delta L_i)^2 = \langle L_i^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle \vec{L}^2 \rangle - \langle L_3^2 \rangle) , \quad i = 1, 2 . \quad (8.100)$$

Wie im Falle der Energie des harmonischen Oszillators (Kap. 7) kann man auch das Eigenwertproblem des Drehimpulses **rein algebraisch** lösen. Neue Bezeichnung des Drehimpulses mit \vec{J} , da dieses Verfahren zu allgemeineren Resultaten führt: gültig nicht nur für den Bahndrehimpuls \vec{L} , sondern auch für den Spindrehimpuls \vec{S} und überhaupt für jeden (zusammengesetzten) Drehimpuls. Man geht dabei aus von einer entsprechenden *Verallgemeinerung der Kommutatoren* (8.20, 29):

$$[J_j, J_k] = i \hbar J_l , \quad j k l = 1 2 3 \text{ zykl.} \quad (8.101)$$

$$\Rightarrow [J^2, J_k] = 0 , \quad k = 1, 2, 3 , \quad (8.102)$$

mit $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$. Die Gln. (8.101) werden *nicht* aus irgendeiner Darstellung von J *hergeleitet* (z. B. Herleitung von (8.20) aus der Ortsdarstellung (8.18)), *sondern postuliert*. (8.102) folgt daraus.

Ferner führt man wieder *Stufenoperatoren* ein:

$$J_+ = J_1 + i J_2 , \quad J_- = J_1 - i J_2 ; \quad (8.103)$$

somit ist J_+ zu J_- und J_- zu J_+ adjungiert (J_k hermitesch!):

$$J_+^\dagger = J_- , \quad J_-^\dagger = J_+ . \quad (8.104)$$

Aus der Definition (8.103) und den Kommutatoren (8.101, 102) folgen die für das Weitere wichtigen Kommutatoren

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_-] = 0 \quad (8.105)$$

$$[J_3, J_+] = +\hbar J_+ , \quad [J_3, J_-] = -\hbar J_- . \quad (8.106)$$

Im folgenden geht es um die Lösung des **simultanen Eigenwertproblems** der Observablen J^2 und J_3 . Sei $\chi_{\lambda\mu}$ simultaner Eigenvektor ($\chi_{\lambda\mu} \neq 0$) von J^2 und J_3 zu den Eigenwerten λ bzw. μ – Existenz vorausgesetzt:

$$J^2 \chi_{\lambda\mu} = \lambda \chi_{\lambda\mu} , \quad J_3 \chi_{\lambda\mu} = \mu \chi_{\lambda\mu} . \quad (8.107)$$

Dann gilt: $J_+ \chi_{\lambda\mu}$ und $J_- \chi_{\lambda\mu}$ sind – falls \neq Nullvektor – ebenfalls Eigenvektoren von J^2 und J_3 zu den Eigenwerten λ und $\mu + \hbar$ bzw. λ und $\mu - \hbar$:

$$\begin{aligned} J^2 (J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}) &\stackrel{(8.105)}{=} J_{\pm} (J^2 \chi_{\lambda\mu}) \stackrel{(8.107)}{=} \lambda (J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}) \\ J_3 (J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}) &\stackrel{(8.106)}{=} (J_{\pm} J_3 \pm \hbar J_{\pm}) \chi_{\lambda\mu} \stackrel{(8.107)}{=} (\mu \pm \hbar) (J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}) . \end{aligned} \quad (8.108)$$

Wiederholte Anwendung von J_+ bzw. J_- :

$$(J_{\pm})^n \chi_{\lambda\mu} = \chi_{\lambda, \mu \pm n\hbar} , \quad n = 0, 1, 2, \dots , \quad (8.109)$$

sind – falls \neq Nullvektor – ebenfalls Eigenvektoren von J^2, J_3 zu den Eigenwerten $\lambda, \mu + n\hbar$ bzw. $\lambda, \mu - n\hbar$. Aber: Die J_3 -Eigenwerte sind – bei festem J^2 -Eigenwert λ – beschränkt. Wegen

$$\begin{aligned} J_{\mp} J_{\pm} &= (J_1 \mp i J_2)(J_1 \pm i J_2) \\ &= J_1^2 + J_2^2 \pm i (J_1 J_2 - J_2 J_1) \\ &= J^2 - J_3 (J_3 \pm \hbar) \end{aligned} \quad (8.110)$$

gilt nämlich bei Berücksichtigung von (8.104, 110):

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}\|^2 \\ &= (\chi_{\lambda\mu}, J_{\mp} J_{\pm} \chi_{\lambda\mu}) \\ &= (\lambda - \mu(\mu \pm \hbar)) \|\chi_{\lambda\mu}\|^2 \end{aligned} \quad (8.111)$$

und folglich – wegen $\|\chi_{\lambda\mu}\|^2 > 0$:

$$\mu(\mu \pm \hbar) \leq \lambda . \quad (8.112)$$

Es muss also – bei festem λ – einen *höchsten* J_3 -Wert μ_+ geben mit

$$\begin{aligned} J_+ \chi_{\lambda\mu_+} &= 0 , \\ \Rightarrow \quad \lambda &= \mu_+(\mu_+ + \hbar) \end{aligned} \quad (8.113)$$

wegen (8.111) und einen *niedrigsten* J_3 -Wert μ_- mit der Eigenschaft

$$J_- \chi_{\lambda\mu_-} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \lambda = \mu_- (\mu_- - \hbar) \quad (8.114)$$

ebenfalls wegen (8.111). Die Differenz zwischen den beiden μ -Werten muss ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar sein:

$$\mu_+ - \mu_- = 2\hbar j, \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (8.115)$$

Aus (8.113 - 115) folgt

$$\mu_{\pm} = \pm \hbar j, \quad (8.116)$$

also hat man die **Eigenwerte**

$$J^2 : \quad \lambda = \hbar^2 j(j+1), \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (8.117)$$

$$J_3 : \quad \mu = \hbar m, \quad m = -j, \dots, +j.$$

Die Drehimpulsquantenzahl j nimmt also im allgemeinen Fall halb- oder ganzzahlige Werte an. Im speziellen Fall des reinen Bahndrehimpulses sind nur ganzzahlige l -Werte erlaubt. Diese Einschränkung beruht auf der Ortsdarstellung (8.18) für \vec{L} (die über die Kommutatoren (8.20) hinausgeht) und der Forderung nach Eindeutigkeit der Eigenfunktionen $\chi(\vec{x})$ in der Ortsdarstellung; siehe (8.50). Ein Beispiel für eine halbzahlige Drehimpulsquantenzahl ist der *Spin* des Elektrons mit $j = 1/2$ (siehe unten). Wenn j halbzahlig ist, ist auch m halbzahlig; z. B. $j = 1/2 \Rightarrow m = \pm 1/2$.

Bezeichnung der **Eigenvektoren** mit χ_{jm} ; diese seien auf 1 normiert: $\|\chi_{jm}\| = 1$; dann gilt

$$J_{\pm} \chi_{jm} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \chi_{j, m \pm 1} \quad (8.118)$$

Beweis:

$$J_{\pm} \chi_{jm} = \hbar C_{jm}^{\pm} \chi_{j, m \pm 1};$$

mit (8.104) sowie (8.110, 117) erhält man

$$\begin{aligned} \|J_{\pm} \chi_{jm}\|^2 &= (\chi_{jm}, J_{\mp} J_{\pm} \chi_{jm}) \\ &= (\chi_{jm}, (J^2 - J_3(J_3 \pm \hbar)) \chi_{jm}) \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m(m \pm 1)) \|\chi_{jm}\|^2 \\ &= \hbar^2 |C_{jm}^{\pm}|^2 \|\chi_{j, m \pm 1}\|^2, \end{aligned}$$

woraus schließlich wegen $\| \dots \| = 1$

$$\begin{aligned} C_{jm}^\pm &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \\ &= \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} \end{aligned}$$

folgt – bis auf einen Phasenfaktor •

Formel (8.118) gestattet die *Berechnung der Eigenvektoren* zu beliebigem, aber festem j nach folgendem Schema:

$$J_- \chi_{j,-j} = 0 \quad \Rightarrow \quad \chi_{j,-j} \quad (8.119)$$

$$\Rightarrow \quad \chi_{jm} = \frac{1}{\hbar^{j+m} C_{j,m-1}^+ \cdots C_{j,-j}^+} (J_+)^{j+m} \chi_{j,-j} , \quad (8.120)$$

$m = -j + 1, \dots, +j$.

Anwendung auf die Berechnung der *Kugelfunktionen* $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. In Kugelkoordinaten ist gemäß (8.39):

$$L_\pm = \frac{\hbar}{i} e^{\pm i\varphi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) . \quad (8.121)$$

Mit $L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ gelangt man – wie oben – schnell auf

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} . \quad (8.122)$$

Das Problem ist der ϑ -Anteil, dessen Berechnung wir uns jetzt zuwenden. Gemäß (8.119) hat man zunächst die Differentialgleichung

$$L_- Y_{l,-l}(\vartheta, \varphi) = 0 ,$$

d. h. wegen (8.121) gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} e^{-i\varphi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Theta_{l,-l}(\vartheta) e^{-il\varphi} &= 0 \\ \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - l \cot \vartheta \right) \Theta_{l,-l}(\vartheta) &= 0 \end{aligned} \quad (8.123)$$

mit der Lösung

$$\Theta_{l,-l}(\vartheta) = C_l \sin^l \vartheta , \quad (8.124)$$

C_l = Normierungskonstante. Diese legt man fest durch die Bedingung:

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l,-l}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l,-l}(\vartheta, \varphi) \\
&= 4\pi |C_l|^2 \int_0^{\pi/2} d\vartheta \sin^{2l+1}\vartheta \\
&= 4\pi |C_l|^2 \frac{(2^l l!)^2}{(2l+1)!}
\end{aligned} \tag{8.125}$$

durch partielle Integration. Zu zeigen! Es folgt:

$$C_l = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \tag{8.126}$$

– bis auf einen Phasenfaktor. Sodann verfährt man gemäß (8.120) wie folgt:

$$\begin{aligned}
Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\hbar^{l+m} C_{l,m-1}^+ \dots C_{l,-l}^+} (L_+)^{l+m} Y_{l,-l}(\vartheta, \varphi) \\
&= \frac{C_l}{\sqrt{(l-m+1)(l+m)} \dots \sqrt{(2l-2)3} \sqrt{(2l-1)2} \sqrt{2l}} \times \\
&\times \left(e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right)^{l+m} \sin^l \vartheta e^{-il\varphi} \\
&= \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{2(l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \times \\
&\times \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - (m-1) \cot \vartheta \right) \dots \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + l \cot \vartheta \right) \sin^l \vartheta e^{im\varphi}, \tag{8.127}
\end{aligned}$$

wobei im zweiten Schritt (8.118, 121) und im dritten Schritt (8.126) benutzt wurde. Mit Hilfe der Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} - k \cot \vartheta = -\sin^{k+1} \vartheta \frac{\partial}{\partial \cos \vartheta} \sin^{-k} \vartheta \tag{8.128}$$

(nachrechnen!) erhält man schließlich:

$$\begin{aligned}
Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)}{4\pi(l+m)!}} \times \\
&\times \sin^m \vartheta \left(\frac{\partial}{\partial \cos \vartheta} \right)^{l+m} \sin^{2l} \vartheta e^{im\varphi}. \tag{8.129}
\end{aligned}$$

Dieses Resultat stimmt exakt mit dem früheren Ergebnis (8.77, 71) überein. Für $m = 0$ folgt mit (8.84) die Rodriguez-Formel (8.65).

9 Teilchen im Zentralpotential

In diesem Kapitel wird die Bewegung eines Teilchens der Masse m in einem Zentralkraftfeld mit Potential $V(r)$ analysiert. Grundaufgabe der Atom- und Kernphysik. **Beispiele:**

- $V(r) = \frac{m}{2} \omega^2 r^2$ harmonischer Oszillator
- $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ Wasserstoffatom
- $V(r) = 0$ freies Teilchen .

Der Hamilton-Operator derartiger Systeme ist

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) . \quad (9.1)$$

Von besonderer Bedeutung für die Dynamik des Systems sind die *Erhaltungsgrößen*. Wegen – siehe (8.32) –

$$[H, \vec{L}] = [H, \vec{L}^2] = [H, H] = 0 \quad (9.2)$$

sind der Bahndrehimpuls (seine drei Komponenten und folglich sein Betrag) sowie die Energie *Konstanten der Bewegung* im quantenmechanischen Sinne: Die Messwahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte und Unschärfen dieser Observablen sind in *jedem* Zustand $\psi(\vec{x}, t)$, der Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, zeitlich konstant.

Unter den Zuständen $\psi(\vec{x}, t)$ des Systems (9.1) sind vor allem die *stationären Zustände* bedeutsam – existent wegen $\partial H / \partial t = 0$; siehe Kap. 2:

$$\psi(\vec{x}, t) = \chi(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (9.3)$$

mit

$$H \chi(\vec{x}) = E \chi(\vec{x}) , \quad (9.4)$$

$\chi(\vec{x})$ normiert oder wenigstens asymptotisch beschränkt. In diesen Zuständen sind die Messwahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte und Unschärfen *aller* nicht explizit t -abhängigen Observablen zeitlich konstant. Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung gewinnt man durch Überlagerung der stationären Zustände.

Wir befassen uns im folgenden mit der Lösung von (9.4): **Stationäre Schrödinger-Gleichung = Energieeigenwertgleichung**. Die Eigenwerte E des Hamilton-Operators sind i. a. entartet. Wegen

$$[H, \vec{L}^2] = [\vec{L}^2, L_3] = [L_3, H] = 0 \quad (9.5)$$

können die entsprechenden Eigenfunktionen $\chi(\vec{x})$ so gewählt werden, dass sie simultan Eigenfunktionen der drei Operatoren H , \vec{L}^2 und L_3 sind; folglich sind sie – nach Kap. 8 – von der Gestalt:

$$\chi(\vec{x}) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) . \quad (9.6)$$

Bevor wir mit dem Ansatz (9.6) weiterarbeiten, ist der in H auftretende *Laplace-Operator in Kugelkoordinaten* darzustellen. Aus (8.37) folgt zunächst:

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} - \frac{\partial \hat{r}}{\partial r} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} \hat{\vartheta} - \frac{\partial \hat{\vartheta}}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r \sin \vartheta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} - \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} \right) ; \quad (9.7)$$

wegen (8.36) ist

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial r} = 0 , \quad \frac{\partial \hat{\vartheta}}{\partial \vartheta} = -\hat{r} , \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -\sin \vartheta \hat{r} - \cos \vartheta \hat{\vartheta} \quad (9.8)$$

und somit

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} \right) \hat{r} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \right) \hat{\vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} ; \quad (9.9)$$

damit und erneut (8.37) folgt:

$$\begin{aligned} \Delta &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \right) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) . \end{aligned} \quad (9.10)$$

Mit (9.10) und (8.40) nimmt der Hamilton-Operator (9.1) die folgende Gestalt an:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{2m r^2} + V(r) . \quad (9.11)$$

Die ersten beiden Terme entsprechen der Separation der kinetischen Energie in Radial- und Winkelanteil. In der KLM hat man:

$$L^2 = (\vec{x} \wedge \vec{p})^2 = r^2 p^2 - (\vec{x} \cdot \vec{p})^2$$

$$\Rightarrow T = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hat{r} \cdot \vec{p})^2}{2m} + \frac{L^2}{2m r^2} ; \quad (9.12)$$

in der QUM wird ersetzt: die Radialkomponente $\hat{r} \cdot \vec{p}$ des Impulses durch den hermiteschen Operator – beachte (8.37) bzw. (9.9) –

$$\frac{\hbar}{2i} (\hat{r} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \hat{r}) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) , \quad (9.13)$$

der Bahndrehimpuls durch den hermiteschen Operator (8.18). Diese Substitutionen liefern den Hamilton-Operator (9.11).

Der Hamilton-Operator (9.11) ist in (9.4) zu verwenden. Setzt man dann dort den Ansatz (9.6) für die Energieeigenfunktionen ein, so erhält man, da $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ Eigenfunktion von \vec{L}^2 zum Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ ist, für die *radiale Wellenfunktion* $R(r)$ die **radiale Schrödinger-Gleichung**:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 . \quad (9.14)$$

Im Falle *gebundener Zustände* ist $\chi(\vec{x})$ auf 1 normiert; das macht für $R(r)$ wegen der Normierung der Kugelfunktionen auf 1 die *Normierung*

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = 1 \quad (9.15)$$

erforderlich. Im folgenden befassen wir uns mit dem Problem (9.14, 15): erst für allgemeines $V(r)$, dann für spezielle Potentiale.

Zu festem $l = 0, 1, 2, \dots$ besitzt (9.14, 15) *abzählbar viele Lösungen* (evtl. gar keine oder endlich viele oder unendlich viele): $R(r) = R_{nl}(r)$ zu *diskreten Energien* $E = E_{nl}$, $n = (0,) 1, 2, 3, \dots$. Der Hamilton-Operator (9.1) hat also die normierten *Eigenfunktionen*

$$\chi(\vec{x}) = \chi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) , \quad (9.16)$$

$n = (0,) 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = -l, \dots, +l$ zu den diskreten *Eigenwerten* $E = E_{nl}$; diese sind $(2l+1)$ -fach entartet, da unabhängig von m .

Die Normierung:

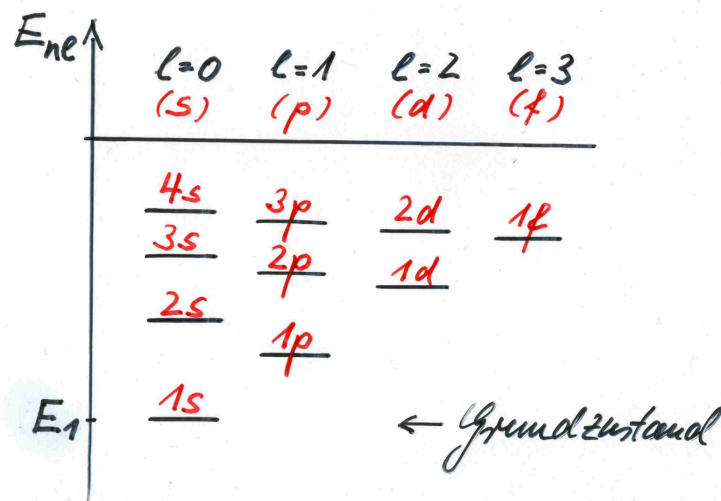
$$\int d^3 x |\chi(\vec{x})|^2 = 1$$

impliziert

$$|\chi(\vec{x})|^2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0,$$

demnach eine Lokalisierung des Teilchens in der Umgebung des Kraftzentrums: gebundene Zustände. Daneben gibt es nichtnormierbare (gleichwohl asymptotisch beschränkte) Eigenfunktionen zu kontinuierlichen Eigenwerten: Streuzustände – siehe unten.

Die Existenz gebundener Zustände und die Struktur des E_{nl} -Spektrums hängen von der funktionalen Gestalt von $V(r)$ ab. *Termschema*:



• Abbildung 9.1 •

Jeder Term (–) ist $(2l + 1)$ -fach entartet; E_1 (u. U. auch E_0) entspricht dem *Grundzustand*.

Allgemeine Eigenschaften des E_{nl} -Spektrums (ohne Beweise):

- Beschränktheit nach unten:

a)

$$V(r) \geq V_0 \Rightarrow E_0 > V_0$$

Beispiel:

$$V(r) = \frac{m}{2} \omega^2 r^2 \geq 0 \Rightarrow E_0 = \frac{3\hbar\omega}{2} > 0$$

b)

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\frac{a}{r^{2-\varepsilon}} \Rightarrow E_1 \text{ endlich}$$

Beispiel:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Rightarrow E_1 = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar} \right)^2 \text{ endlich}$$

• Beschränktheit nach oben:

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \Rightarrow E_{nl} < 0$$

Beispiel:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Rightarrow E_n = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar n} \right)^2 < 0.$$

• Anzahl der Terme zu festem l :

$$N_l < \frac{2m}{\hbar^2(2l+1)} \int_0^\infty dr r |V(r)|; \tag{9.17}$$

also (u. U.) viele gebundene Zustände bei tiefem, weitreichendem Potential, großer Masse (klm. Kontinuum), niedrigem Drehimpuls. Siehe Grawert, Kap. 6.4.

Beispiele: Sowohl beim *harmonischen Oszillator*, als auch beim *H-Atom* divergiert das Integral in (9.17); beide Systeme besitzen zu festem l unendlich viele gebundene Zustände. Für den *Potentialtopf* der Tiefe $-V_0 > 0$ vom Radius a ergibt (9.17) bei verschwindendem Drehimpuls ($l = 0$):

$$N_0 < -\frac{m a^2 V_0}{\hbar^2} = \tilde{N}_0;$$

die Rechnung (siehe unten) liefert

$$N_0 \simeq \frac{1}{\pi} \sqrt{-\frac{2m a^2 V_0}{\hbar^2}} = \frac{1}{\pi} \sqrt{2\tilde{N}_0} \quad \bullet$$

Durch den **Lösungsansatz**

$$R(r) = \frac{1}{r} u(r) \tag{9.18}$$

geht (9.14) in die ebenfalls als radiale Schrödinger-Gleichung bezeichnete Differentialgleichung

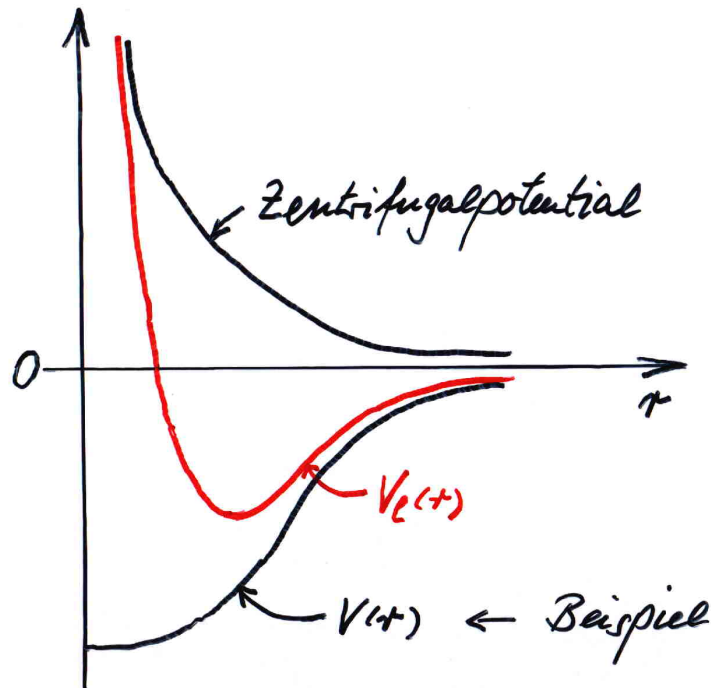
$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0 \tag{9.19}$$

über mit – statt (9.15) – der Normierungsbedingung

$$\int_0^{\infty} dr |u(r)|^2 = 1 . \quad (9.20)$$

Formal handelt es sich hierbei um die *eindimensionale Bewegung* – auf dem r -Strahl – eines Teilchens der Masse m im l -abhängigen **Effektivpotential**

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} . \quad (9.21)$$



• Abbildung 9.2 •

Konsequenzen: Der tiefste diskrete Energiewert, der zu gegebenem l möglich ist, wächst mit l . Insbesondere ist also der Grundzustand für ein Teilchen in einem Zentralpotential ein s -Zustand. Der erste angeregte Zustand ist entweder der tiefste p -Zustand oder ein zweiter s -Zustand. (Beim attraktiven Coulomb-Potential sind der 2 s - und der 1 p -Term miteinander entartet; siehe unten.) Man sieht auch, dass die Anzahl der zu festem

l gehörigen gebundenen Zustände umso kleiner ist, je größer l ist; siehe (9.17). – Im folgenden wenden wir uns speziellen Potentialen $V(r)$ zu.

Harmonischer Oszillator:

$$V(r) = \frac{m}{2} \omega^2 r^2 . \quad (9.22)$$

In *kartesischen Koordinaten* wurde dieses Problem bereits in Kap. 7 behandelt. Wegen der Separabilität des Hamilton-Operators

$$H = \sum_{i=1}^3 h_i , \quad (9.23)$$

$$h_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x_i^2 ,$$

gewinnt man die Energieeigenwerte additiv und die Energieeigenfunktionen multiplikativ aus den eindimensionalen Resultaten:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) , \quad (9.24)$$

$$\chi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{x}) = N_{n_1 n_2 n_3} H_{n_1} \left(\frac{x_1}{x_0} \right) H_{n_2} \left(\frac{x_2}{x_0} \right) H_{n_3} \left(\frac{x_3}{x_0} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{x_0} \right)^2} ,$$

$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$, $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ Oszillatorlänge, $N_{n_1 n_2 n_3}$ Normierungskonstante. Die Energieniveaus, die sich auch in der Form

$$E_N = \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right) , \quad (9.25)$$

$N = 0, 1, 2, \dots$, schreiben lassen, sind g_N -fach entartet mit

$$g_N = \sum_{k=0}^N (N + 1 - k) = \frac{(N + 1)(N + 2)}{2} ; \quad (9.26)$$

sie liegen äquidistant: $\Delta E = \hbar \omega$. Nullpunktsenergie $E_0 = 3 \hbar \omega / 2$.

Die zu E_N gehörigen g_N linear unabhängigen Zustandsfunktionen $\chi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{x})$ lassen sich so linearkombinieren, dass sie simultan außer von H auch Eigenfunktionen von \vec{L}^2 und L_3 sind. Wie geht das? Welche l kommen bei festem N vor? Um Aussagen über den Drehimpuls der Zustände $\chi_{n_1 n_2, n_3}(\vec{x})$ machen zu können, und zur Einübung des

vorstehenden Formalismus, behandeln wir den 3-dimensionalen harmonischen Oszillator auch in *Kugelkoordinaten*.

Der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 \quad (9.27)$$

führt über $(H - E) \chi(\vec{x}) = 0$ und $\chi(\vec{x}) = \frac{1}{r} u(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ auf die radiale Schrödinger-Gleichung (9.19):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m}{2} \omega^2 r^2 \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0. \quad (9.28)$$

Mit

$$\begin{aligned} \rho = \frac{r}{r_0}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad & \text{Oszillatorlänge,} \\ \varepsilon = \frac{3E}{E_0}, \quad E_0 = \frac{3\hbar\omega}{2} \quad & \text{Nullpunktsenergie,} \end{aligned} \quad (9.29)$$

gelangt man – wie mit (7.6) – zu einer dimensionslosen Schreibweise:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon - \rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0, \quad (9.30)$$

wo für $u(r) = u(r_0 \rho) = \tilde{u}(\rho)$ einfach $u(\rho)$ gesetzt wurde.

Asymptotik der Lösungen von (9.30):

• $\rho \rightarrow 0$:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \quad \Rightarrow \quad u(\rho) = \rho^{l+1}. \quad (9.31)$$

Die Lösung $u(\rho) = \rho^{-l}$ wird wegen ihres singulären Verhaltens ausgeschlossen.

• $\rho \rightarrow \infty$:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 \right) u(\rho) = 0 \quad \Rightarrow \quad u(\rho) = e^{-\frac{\rho^2}{2}}. \quad (9.32)$$

Die Lösung $e^{+\frac{\rho^2}{2}}$ wird wegen fehlender Normierbarkeit ausgeschlossen.

Die Resultate (9.31, 32) legen den folgenden *Lösungsansatz* nahe:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho^2/2} v(\rho). \quad (9.33)$$

Einsetzen in (9.30) führt für $v(\rho)$ auf die Differentialgleichung:

$$\left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho^2) \frac{d}{d\rho} - (2l+3-\varepsilon)\rho \right) v(\rho) = 0. \quad (9.34)$$

Diese geht mit der *Substitution*

$$\rho^2 = \xi \quad (9.35)$$

schließlich in die folgende Differentialgleichung über:

$$\left(\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + \left(l + \frac{3}{2} - \xi \right) \frac{d}{d\xi} - \frac{1}{4}(2l+3-\varepsilon) \right) v(\xi) = 0; \quad (9.36)$$

hierbei wurde wieder $v(\rho) = v(\sqrt{\xi}) = \tilde{v}(\xi)$ durch $v(\xi)$ ersetzt.

Bei (9.36) handelt es sich um die *Kummersche Differentialgleichung*:

$$\left(\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (b-\xi) \frac{d}{d\xi} - a \right) v(\xi) = 0. \quad (9.37)$$

Die bei $\xi = 0$ reguläre Lösung dieser Differentialgleichung ist die sog. *konfluente hypergeometrische Reihe* (ohne Beweis):

$$\begin{aligned} v(\xi) &= F(a, b; \xi) \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{a(a+1)(a+2)\dots(a+\nu-1)}{b(b+1)(b+2)\dots(b+\nu-1)} \frac{\xi^\nu}{\nu!} \\ &= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+\nu)}{\Gamma(b+\nu)} \frac{\xi^\nu}{\nu!}; \end{aligned} \quad (9.38)$$

dabei ist $\Gamma(z)$ die *Gamma-Funktion* mit

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) = z! = z(z-1)!, \quad (9.39)$$

$z \in \mathbf{C}$. Asymptotik von (9.38) (ohne Beweis):

$$v(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \xi^{a-b} e^\xi, \quad (9.40)$$

d. h. exponentielles Anwachsen: $u(\rho) \sim e^{+\frac{\rho^2}{2}}$; widerspricht der Normierungsbedingung (9.20); ist als physikalisch sinnvolle Lösung auszuschließen. Das exponentielle Anwachsen

wird vermieden, wenn die konfluente hypergeometrische Reihe abbricht; das ist der Fall für $a = -n$:

$$v(\xi) = F(-n, b; \xi) = \sum_{\nu=0}^n \frac{(-n)(1-n)\dots(\nu-1-n)}{b(b+1)\dots(b+\nu-1)} \frac{\xi^\nu}{\nu!}, \quad (9.41)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$. Das resultierende Polynom vom Grade n ist – bis auf einen Faktor – ein „verallgemeinertes Laguerre-Polynom“; siehe unten.

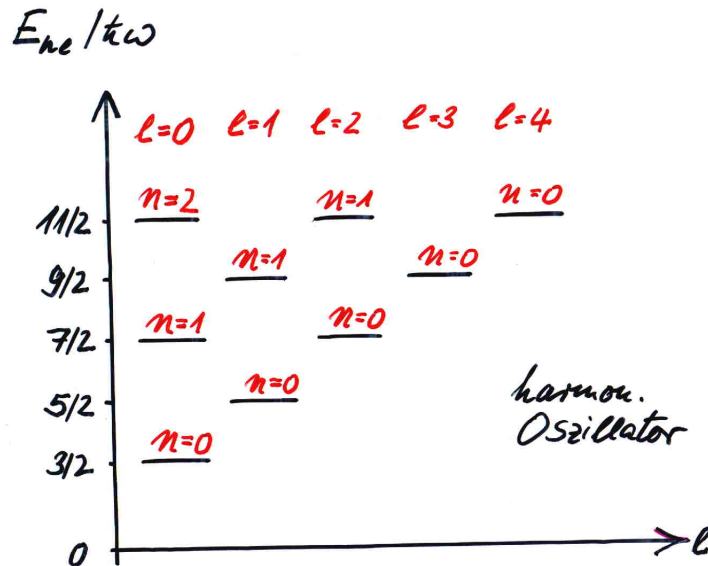
Damit ergibt sich – vgl. (7.21, 8.61) – die Quantisierung der Oszillatorenergie als Konsequenz der Normierungsbedingung:

$$\frac{1}{4}(2l + 3 - \varepsilon) = -n, \quad (9.42)$$

woraus mit (9.29) die **Energieeigenwerte** des dreidimensionalen harmonischen Oszillators folgen:

$$E_{nl} = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad \begin{array}{l} n = 0, 1, 2, \dots \\ l = 0, 1, 2, \dots \end{array} \quad (9.43)$$

Das sind dieselben Energieniveaus wie in kartesischen Koordinaten. Auch der Entartungsgrad ist derselbe. Zeige das! *Termschema*:



• Abbildung 9.3 •

Nullpunktsenergie $E_0 = 3\hbar\omega/2$; Grundzustand = s -Zustand, 1. angeregter Zustand = p -Zustand, 2. angeregter Zustand = s - und d -Zustand, ... Die Zustandsfunktionen sind im Unterschied zu (9.24) nach ihren Drehimpulseigenschaften (l, m) klassifiziert. Zu ihrer Darstellung benötigt man die (verallgemeinerten) Laguerre-Polynome. Die folgenden Ausführungen sämtlich ohne Beweis; siehe Spezialliteratur über „Funktionen der Mathematischen Physik“.

Die **Laguerre-Polynome** lassen sich – eine von mehreren Möglichkeiten – durch die Rodrigues-Formel

$$L_n(\xi) = \frac{1}{n!} e^\xi \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n) \quad (9.44)$$

definieren. Dabei handelt es sich um die reguläre Lösung der speziellen Kummerschen Differentialgleichung

$$\left(\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (1 - \xi) \frac{d}{d\xi} + n \right) L_n(\xi) = 0, \quad (9.45)$$

nämlich um die (abbrechende) konfluente hypergeometrische Reihe

$$L_n(\xi) = F(-n, 1; \xi). \quad (9.46)$$

Die Laguerre-Polynome sind wie folgt orthonormiert:

$$\int_0^\infty d\xi e^{-\xi} L_{n'}(\xi) L_n(\xi) = \delta_{n'n}. \quad (9.47)$$

Sie sind ein Spezialfall der **verallgemeinerten Laguerre-Polynome**:

$$L_n^{(\alpha)}(\xi) = \frac{1}{n!} e^\xi \xi^{-\alpha} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^{\alpha+n}) \quad (9.48)$$

$$\Leftrightarrow L_n^{(\alpha)}(\xi) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} F(-n, 1 + \alpha; \xi) \quad (9.49)$$

als reguläre Lösung von

$$\left(\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + (1 + \alpha - \xi) \frac{d}{d\xi} + n \right) L_n^{(\alpha)}(\xi) = 0 \quad (9.50)$$

mit der Orthonormierung

$$\int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^\alpha L_{n'}^{(\alpha)}(\xi) L_n^{(\alpha)}(\xi) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \delta_{n'n}. \quad (9.51)$$

Es ist also

$$L_n(\xi) = L_n^{(0)}(\xi); \quad (9.52)$$

ferner gilt für $\alpha = m \geq 0$, m ganz, die Darstellung:

$$L_n^{(m)}(\xi) = (-1)^m \frac{d^m}{d\xi^m} L_{n+m}(\xi). \quad (9.53)$$

Die Beweise der vorstehenden Behauptungen ähneln den Beweisen, die im Zusammenhang mit den Legendre-Polynomen und den zugeordneten Legendre-Funktionen zu führen waren. Unterschiede: Der Definitionsbereich der $P_l(\zeta)$, $P_l^m(\zeta)$ ist das Intervall $[-1, +1]$; der Definitionsbereich der $L_n(\xi)$, $L_n^{(\alpha)}(\xi)$ ist das Intervall $[0, \infty)$. Die $L_n^{(\alpha)}(\xi)$ sind Polynome – von demselben Grad wie die $L_n(\xi)$; die $P_l^{(m)}(\zeta)$ sind – im Unterschied zu den $P_l(\zeta)$ – im Allgemeinen keine Polynome. α beliebig reell, m nicht-negativ ganz.

Zu den **Energieeigenfunktionen** des dreidimensionalen harmonischen Oszillators gelangt man, indem man zunächst in (9.38) $a = -n$, $b = l + 3/2$ setzt und die Definition (9.49) beachtet:

$$v_{nl}(\xi) = F(-n, l + 3/2; \xi) \sim L_n^{(l+1/2)}(\xi). \quad (9.54)$$

Mit (9.33, 35) erhält man sodann die radiale Wellenfunktion:

$$u_{nl}(\rho) \sim \rho^{l+1} e^{-\rho^2/2} L_n^{(l+1/2)}(\rho^2). \quad (9.55)$$

Die dreidimensionale Wellenfunktion ergibt sich mit (9.16, 18, 29) schließlich zu

$$\chi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = C_{nl} \left(\frac{r}{r_0}\right)^l L_n^{(l+1/2)}\left(\left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (9.56)$$

mit der Normierungskonstanten

$$C_{nl} = \sqrt{\frac{2}{r_0^3} \frac{n!}{\Gamma(n + l + 3/2)}}. \quad (9.57)$$

Diese berechnet man, indem man $u_{nl}(r/r_0)$ der Bedingung (9.20) unterwirft. Benutze dabei (9.51). Übung!

Zu festem $N = n_1 + n_2 + n_3 = 2n + l$ spannen die Zustände $\chi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2, x_3)$ gemäß (9.24) und die Zustände $\chi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$ gemäß (9.56) gleichermaßen den zur Energie E_N gehörigen g_N -dimensionalen Eigenraum auf. In (9.24) sind die Observablen h_1 , h_2 und h_3 scharf (und damit $H = h_1 + h_2 + h_3$), in (9.56) die Observablen H , \vec{L}^2 und

L_3 . Übergang zwischen den beiden Basissystemen durch Bildung passender Linearkombinationen. Sowohl die $\chi_{n_1 n_2 n_3}$ als auch die χ_{nlm} bilden ein VONS in $L_2(\mathbb{R}^3)$.

Wasserstoffatom:

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r}, \quad (9.58)$$

d. h. für $Z = 1$ betrachtet man ein H-Atom, für $Z = 2$ ein He^+ -Ion, für $Z = 3$ ein Li^{++} -Ion, ... Die radiale Schrödinger-Gleichung (9.19) für $u(r)$ ist

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Z e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0. \quad (9.59)$$

Mit den Abkürzungen

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad r_1 = \frac{4 \pi \varepsilon_0 \hbar^2}{m e^2}, \quad (9.60)$$

wo κ die Dimension einer reziproken Länge hat und $r_1 = 0.529 \dots \overset{\circ}{\text{Å}}$ der Bohrsche Radius ist, vereinfacht sich (9.59) zu

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \kappa^2 + \frac{2Z}{r_1 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0. \quad (9.61)$$

Asymptotik der Lösungen von (9.61):

• $r \rightarrow 0$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0 \quad \Rightarrow \quad u(r) = r^{l+1} \quad (9.62)$$

wie in (9.31); singuläre Lösung r^{-l} auszuschließen.

• $r \rightarrow \infty$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \kappa^2 \right) u(r) = 0 \quad \Rightarrow \quad u(r) = e^{-\kappa r} \quad (9.63)$$

normierbar, falls κ reell, d. h. $E < 0$; Lösung $e^{+\kappa r}$ nicht normierbar, wird ausgeschlossen.

Lösungsansatz:

$$\rho = 2 \kappa r \quad (9.64)$$

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} v(\rho).$$

Dieser führt (9.61) in die Kummersche Differentialgleichung über:

$$\left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{d}{d\rho} - \left(l+1 - \frac{Z}{\kappa r_1} \right) \right) v(\rho) = 0 \quad (9.65)$$

mit der bei $\rho = 0$ regulären Lösung

$$v(\rho) = F\left(l + 1 - \frac{Z}{\kappa r_1}, 2l + 2; \rho\right). \quad (9.66)$$

Die Forderung nach Normierbarkeit (wir wollen hier nur gebundene Zustände betrachten) erzwingt, wie beim harmonischen Oszillator, das Abbrechen der konfluenten hypergeometrischen Reihe. Für

$$l + 1 - \frac{Z}{\kappa r_1} = -N, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (9.67)$$

wird aus dieser ein verallgemeinertes Laguerre-Polynom vom Grade N :

$$v(\rho) \sim L_N^{(2l+1)}(\rho). \quad (9.68)$$

Die negativen **Energieeigenwerte** des Wasserstoffatoms ergeben sich aus (9.67, 60) zu

$$E_{Nl} = -\frac{\hbar^2}{2m r_1^2} \frac{Z^2}{(N + l + 1)^2}, \quad (9.69)$$

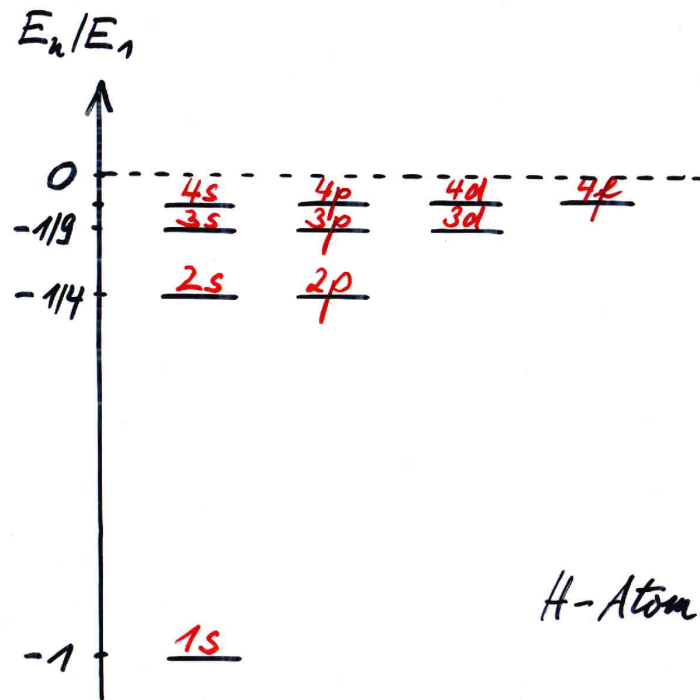
$N, l = 0, 1, 2, \dots$ Es ist üblich, die sog. *Hauptquantenzahl*

$$n = N + l + 1 \quad (9.70)$$

einzuführen; damit geht (9.69) über in

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m r_1^2} \frac{Z^2}{n^2}, \quad \begin{array}{l} n = 0, 1, 2, \dots \\ l = 0, 1, \dots, n - 1 \end{array}. \quad (9.71)$$

Außer der *m-Entartung*, die in jedem $V(r)$ vorliegt, hat man hier zusätzlich eine *l-Entartung*, die eine spezielle Eigenschaft des Coulomb-Potentials ist. *Termschema*:



• Abbildung 9.4 •

Entartungsgrad des n -ten Energieniveaus (ohne Spin):

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 . \tag{9.72}$$

Der Grundzustand liegt bei $E_1 = -13.6 Z^2 eV$. Die Terme häufen sich gegen die Ionisierungsschwelle $E_\infty = 0$.

Die **Energieeigenfunktionen** (für die gebundenen Zustände) des Wasserstoffatoms erhält man, indem man (9.68, 64, 70, 18, 16) zusammenfügt:

$$\chi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = C_{nl} (2\kappa_n r)^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(2\kappa_n r) e^{-\kappa_n r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{9.73}$$

mit

$$\kappa_n = \sqrt{-\frac{2mE_n}{\hbar^2}} = \frac{Z}{nr_1} \tag{9.74}$$

und der Normierungskonstanten

$$C_{nl} = \sqrt{(2\kappa_n)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} , \tag{9.75}$$

die man aus der Forderung (9.20) mit (9.51) berechnet. Übung!

Für die energetisch niedrigsten Zustände: den Grundzustand und den vierfach entarteten ersten angeregten Zustand gilt z. B. ($Z = 1$):

$$\begin{aligned}
 1s : \quad \chi_{100}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi} r_1^3} e^{-\frac{r}{r_1}} \\
 2s : \quad \chi_{200}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{8\pi} r_1^3} \left(1 - \frac{r}{2r_1}\right) e^{-\frac{r}{2r_1}} \\
 2p : \quad \chi_{210}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{8\pi} r_1^3} \frac{r}{2r_1} e^{-\frac{r}{2r_1}} \cos \vartheta \\
 \chi_{21\pm 1}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{16\pi} r_1^3} \frac{r}{2r_1} e^{-\frac{r}{2r_1}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} .
 \end{aligned} \tag{9.76}$$

Statistische Interpretation. Betrachte eine statistische Gesamtheit von H -Atomen in einem durch die Quantenzahlen (n, l, m) charakterisierten Zustand. Dann ist $|\chi_{nlm}(\vec{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messungen des Elektronenortes \vec{x} (bzgl. Kern = Ursprung) im H -Atom.

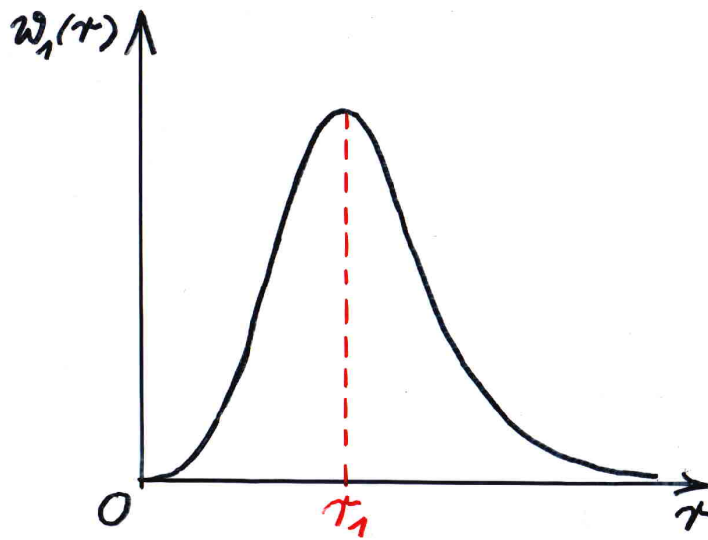
$l = 0$. Kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsdichte (s -Zustand):

$$w_n(r) = r^2 \int d\Omega |\chi_{n00}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = |u_{n0}(r)|^2 \tag{9.77}$$

$w_n(r) dr$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron im Abstand r vom Kern in dr anzutreffen. *Beispiel:* $n = 1$ (Grundzustand):

$$w_1(r) = \frac{4r^2}{r_1^3} e^{-\frac{2r}{r_1}} . \tag{9.78}$$

Maximum bei r_1 ; vgl. *Bohrsches Atommodell*:

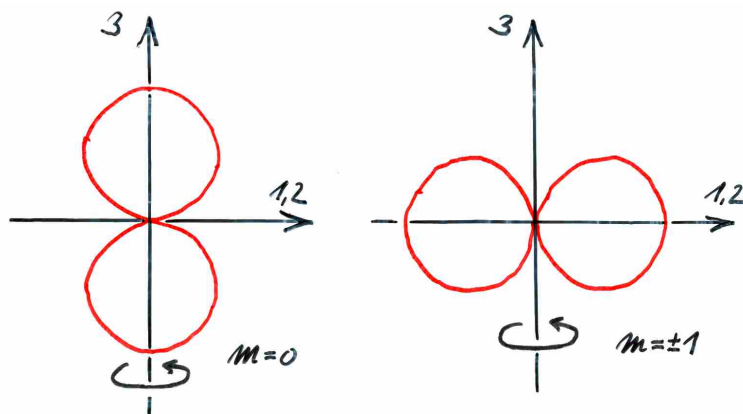


• Abbildung 9.5 •

Elektron im Grundzustand auf Kreisbahn vom Radius r_1 .

$l > 0$. Wahrscheinlichkeitsdichte ϑ -abhängig, jedoch unabhängig von φ . *Beispiel:* $l = 1, n = 2$ (2p-Zustand):

$$|\chi_{21m}|^2 \sim \begin{cases} \cos^2 \vartheta, & m = 0 \\ \sin^2 \vartheta, & m = \pm 1 \end{cases} \quad (9.79)$$



• Abbildung 9.6 •

Bedeutsam für atomphysikalische Diskussionen sind die *Erwartungswerte von r^k* in den Zuständen χ_{nlm} für diverse k , z. B.

$$\langle r \rangle_{nlm} = (3n^2 - l(l+1)) \frac{r_1}{2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{n^2 r_1} .$$
(9.80)

Bei der Interpretation beachte, dass $r_n = n^2 r_1$ der Radius der n -ten Bohrschen Bahn (für $Z = 1$) ist. Beweis von (9.80) in den Übungen!

Anmerkungen zum Wasserstoffatom:

1. *Reduzierte Masse:*

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

H-Atom ($p + e^-$):

$$m \simeq 0.998 m_e \Rightarrow \text{kleine Korrektur ,}$$

$$\text{z. B. } E_1 = -13.605 \text{ eV} \rightarrow E_1 = -13.598 \text{ eV} .$$

Positronium ($e^+ + e^-$):

$$m = m_e / 2 \Rightarrow \text{große Korrektur}$$

$$E_n \rightarrow E_n / 2 .$$

Isotopieeffekt bei Deuterium ($d + e^-$) und Tritium ($t + e^-$).

2. *Ausgedehnter Kern*, keine Punktladung:

$$r_K \simeq 1.3 \times A^{1/3} \times 10^{-15} m .$$

Radius der 1. Bohrschen Kreisbahn für ein Elektron im Coulomb-Feld eines Kerns der Ordnungszahl Z :

$$r_1^e \simeq 5.3 \times \frac{m_K + m_e}{m_K Z} \times 10^{-11} m .$$

Speziell für das H-Atom ($m_e \ll m_K, A = Z = 1$) folgt

$$r_K / r_1^e \simeq 2.5 \times 10^{-5} ,$$

d. h. kein *Volumeneffekt*. Für ein μ^- -Atom mit

$$r_1^\mu = \frac{m_e (m_K + m_\mu)}{m_\mu (m_K + m_e)} r_1^e$$

erhält man hingegen (mit $m_e, m_\mu \ll m_K$)

$$r_K / r_1^\mu \simeq 5 \times 10^{-3} \times A^{1/3} Z$$

mit im Allgemeinen messbarem Volumeneffekt.

3. Die (relativistische) Berücksichtigung des *Elektronenspins* liefert die *Feinstruktur* des Wasserstoffspektrums. Dirac-Gleichung, Spin-Bahn-Wechselwirkung, ...

4. Die zusätzliche Betrachtung von *magnetischem Dipolmoment* (Kernspin) und *elektrischem Quadrupolmoment* des Kerns führt auf die *Hyperfeinstruktur* des Wasserstoffspektrums.

5. Eine *quantenelektrodynamische Behandlung* des Wasserstoffatoms erklärt u. a. die sog. *Lamb-Shift*.

6. Für *positive Energie* erhält man ein kontinuierliches Spektrum; die zugehörigen ungebundenen Zustände sind als *Streuzustände* zu interpretieren •

Zur Vorbereitung auf die Streuung am Zentralpotential behandeln wir (noch einmal, siehe Kap. 3) das **freie Teilchen**:

$$V(r) = 0. \quad (9.81)$$

Der Hamilton-Operator (nur kinetische Energie)

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (9.82)$$

vertauscht einerseits mit dem *Impuls*:

$$[H_0, \vec{p}] = \vec{0}. \quad (9.83)$$

Darum können die Energieeigenfunktionen so gewählt werden, dass sie simultan Impuls-eigenfunktionen sind. In *kartesischen Koordinaten*:

$$\chi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (9.84)$$

zu den Eigenwerten

$$H_0 : E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad \text{bzw.} \quad \vec{p} : \hbar \vec{k}. \quad (9.85)$$

Die ebenen Wellen (9.84) sind uneigentliche Wellenfunktionen (Streuzustände) mit δ -Orthonormierung:

$$\int d^3 x \chi_{\vec{k}'}^*(\vec{x}) \chi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{k}' - \vec{k}) . \quad (9.86)$$

Die Eigenwerte (9.85) bilden ein kontinuierliches Spektrum.

Andererseits vertauscht H_0 mit dem *Bahndrehimpuls*:

$$[H_0, \vec{L}] = \vec{0} , \quad (9.87)$$

siehe (8.32). Darum können die Energieeigenfunktionen auch so gewählt werden, dass sie – siehe Kap. 8 – simultan \vec{L}^2 , L_3 – Eigenfunktionen sind. In *Kugelkoordinaten*:

$$\chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (9.88)$$

zu den Eigenwerten

$$H_0 : E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{bzw.} \quad \vec{L}^2 : \hbar^2 l(l+1) , \quad L_3 : \hbar m . \quad (9.89)$$

Im folgenden sind zunächst die radialen Wellenfunktionen $R_{kl}(r)$ zu bestimmen; sodann ist der Zusammenhang zwischen $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ und den $\chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi)$ herzustellen: Entwicklung ebener Wellen nach Kugelwellen.

Mit (9.81, 89) erhält man aus (9.14) die **freie radiale Schrödinger-Gleichung**:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl}(r) = 0 . \quad (9.90)$$

Mit der Substitution

$$\rho = k r \quad (9.91)$$

wird daraus (Index k weggelassen):

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_l(\rho) = 0 . \quad (9.92)$$

Bezeichnung der Lösungen als **sphärische Zylinderfunktionen**.

$l = 0$. Die Differentialgleichung (siehe „Schwingungsgleichung“)

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 \right) \rho R_0(\rho) = 0 \quad (9.93)$$

hat die Lösungen – je zwei davon linear unabhängig –

$$R_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad \frac{e^{\pm i \rho}}{\rho}. \quad (9.94)$$

$l > 0$. Die Lösungen zu höheren l -Werten berechnet man aus $R_0(\rho)$ durch die Operation

$$R_l(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l R_0(\rho). \quad (9.95)$$

Beweis: Man schreibt die radiale Schrödinger-Gleichung (9.92) in der Gestalt

$$A_l R_l(\rho) = R_l(\rho) \quad (9.96)$$

mit dem „radialen Hamilton-Operator“

$$A_l = -\frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \quad (9.97)$$

und führt einen „Stufenoperator“ ein:

$$B_l = -\rho^l \frac{d}{d\rho} \rho^{-l}. \quad (9.98)$$

Man kann zeigen (hier nicht, Übung), dass gilt:

$$B_l A_l = A_{l+1} B_l. \quad (9.99)$$

Anwendung von B_l auf (9.96) führt mit (9.99) auf

$$A_{l+1}(B_l R_l(\rho)) = B_l R_l(\rho). \quad (9.100)$$

Das bedeutet: Aus der Lösung $R_l(\rho)$ zum Index l gewinnt man die Lösung $R_{l+1}(\rho)$ zum Index $l+1$ durch Anwendung des Stufenoperators:

$$R_{l+1}(\rho) = B_l R_l(\rho) = -\rho^l \frac{d}{d\rho} \rho^{-l} R_l(\rho). \quad (9.101)$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} R_l(\rho) &= -\rho^{l-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{-l+1} R_{l-1}(\rho) \\ &= \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \rho^{-l+1} R_{l-1}(\rho) \\ &= \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \rho^{-l+1} \left(-\rho^{l-2} \frac{d}{d\rho} \rho^{-l+2} \right) R_{l-2}(\rho) \\ &= \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \rho^{-l+2} R_{l-2}(\rho) = \dots \end{aligned} \quad (9.102)$$

Die Fortsetzung dieses Verfahrens begründet die *Behauptung* •

Die Anwendung von (9.95) auf (9.94) liefert vier verschiedene (linear unabhängige) sphärische Zylinderfunktionen zu jedem l .

Sphärische Hankel-Funktionen:

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (9.103)$$

$h_l^{(+)}(\rho), h_l^{(-)}(\rho)$ bilden eine Basis – wegen nichtverschwindender Wronski-Determinante:

$$W \left(h_l^{(+)}(\rho), h_l^{(-)}(\rho) \right) = -\frac{2i}{\rho^2}; \quad (9.104)$$

zeige das! – der freien radialen Schrödinger-Gleichung (9.92): Jede Lösung dieser Differentialgleichung lässt sich als Linearkombination von $h_l^{(+)}(\rho), h_l^{(-)}(\rho)$ darstellen.

Für die Streutheorie (nachfolgend) ist das *asymptotische Verhalten* bedeutsam:

$$h_l^{(\pm)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots 2l - 1}{\rho^{l+1}}, \quad (9.105)$$

d. h. singular im Ursprung (für $l = 0$ ist der Zähler gleich 1 zu setzen);

$$h_l^{(\pm)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{e^{\pm i(\rho - l\pi/2)}}{\rho}, \quad (9.106)$$

d. h. auslaufende/einlaufende Kugelwelle. Beweise durch vollständige Induktion. Wie?

Sphärische Bessel- und Neumann-Funktionen:

$$j_l(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (9.106)$$

$$n_l(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$\Leftrightarrow \begin{aligned} j_l(\rho) &= \frac{1}{2i} \left(h_l^{(+)}(\rho) - h_l^{(-)}(\rho) \right) \\ n_l(\rho) &= \frac{1}{2} \left(h_l^{(+)}(\rho) + h_l^{(-)}(\rho) \right). \end{aligned} \quad (9.106)$$

$j_l(\rho)$, $n_l(\rho)$ sind eine alternative Basis mit der *Asymptotik*:

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)} \\ n_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l-1)}{\rho^{l+1}}, \end{aligned} \quad (9.109)$$

d. h. $j_l(\rho)$ regulär im Ursprung, $n_l(\rho)$ dagegen singulär;

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho} \\ n_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\cos(\rho - l\pi/2)}{\rho}, \end{aligned} \quad (9.110)$$

d. h. stehende Kugelwellen. Beweise wie bei (9.105, 106).

Die sphärischen Bessel-Funktionen sind wie folgt δ -*orthonormiert*:

$$\int_0^\infty dr r^2 j_l(k' r) j_l(k r) = \frac{\pi}{2 k' k} \delta(k' - k). \quad (9.111)$$

Beweis: Verifiziere die Gültigkeit von (9.111) für $l = 0$. Zeige dann, dass der Stufenoperator B_l die Normierung der $R_l(\rho)$ nicht ändert. – Die sphärischen Hankel- und Neumann-Funktionen sind genauso δ -*orthonormiert*.

Aufgrund der vorstehenden Ausführungen sind die **regulären Lösungen des H_0 , \vec{L}^2 , L_3 -Eigenwertproblems** gegeben durch

$$\chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_l(k r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (9.112)$$

$0 \leq k < \infty$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = -l, \dots, +l$. Wegen (9.111) und (8.78) unterliegen die Zustände (9.112) der folgenden δ -*Orthonormierung*:

$$\int dr r^2 \int d\Omega \chi_{k'l'm'}^*(r, \vartheta, \varphi) \chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = \delta(k' - k) \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (9.113)$$

Uneigentliche Freiteilchenzustände; kontinuierliches Eigenwertspektrum.

Die *singulären Lösungen* mit $h_l^{(\pm)}(kr)$, $n_l(kr)$ sind auszuschließen, da sie nicht Lösungen von $(H_0 - E)\chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = 0$ im \mathbb{R}^3 sind, z. B.:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) h_0^{(+)}(kr) Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi} k} (\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= -\frac{\sqrt{4\pi}}{k} \delta(\vec{x}) \\ &\neq 0. \end{aligned} \quad (9.114)$$

Anmerkung: $-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}$ ist Greensche Funktion des Helmholtz-Operators $\Delta + k^2$.

Entwicklung ebener Wellen nach Kugelwellen. Betrachte ein freies Teilchen der Energie $E > 0$. Der zugehörige Eigenraum wird sowohl durch die ebenen Wellen $\chi_{\vec{k}}(\vec{x})$ in (9.84), als auch durch die Kugelwellen $\chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi)$ in (9.112) aufgespannt; dabei ist $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Man kann die eine Basis durch die andere Basis ausdrücken (linear-kombinieren):

$$\chi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{l,m} a_{lm}(\vec{k}) \chi_{klm}(r, \vartheta, \varphi). \quad (9.115)$$

Wie findet man die Koeffizienten?

Die *Vollständigkeit* (8.67) der Legendre-Polynome gestattet die Entwicklung:

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_l b_l(kr) P_l(\cos \theta); \quad (9.116)$$

dabei ist θ der Winkel zwischen \vec{k} und \vec{x} . Die *Orthonormierung* (8.66) impliziert:

$$b_l(kr) = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} d\zeta e^{ikr\zeta} P_l(\zeta). \quad (9.117)$$

Das ist – bis auf einen Faktor – die *Integraldarstellung* der sphärischen Bessel-Funktion vom Index l :

$$j_l(kr) = \frac{(-i)^l}{2} \int_{-1}^{+1} d\zeta e^{ikr\zeta} P_l(\zeta). \quad (9.118)$$

Diese beweist man, indem man zeigt: 1. Sie befriedigt die radiale Schrödinger-Gleichung (9.91, 92). 2. Sie hat die richtige Asymptotik (9.109, 110). Übung! Der Vergleich von (9.117) und (9.118) ergibt:

$$b_l(kr) = (2l+1) i^l j_l(kr), \quad (9.119)$$

was in (9.116) einzusetzen ist. Das führt auf

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_l (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) . \quad (9.120)$$

Drückt man schließlich die Legendre-Polynome $P_l(\cos\theta)$ mit Hilfe des *Additionstheorems* (8.87) aus, so erhält man

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\vartheta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) . \quad (9.121)$$

Mit (9.84, 112) folgt aus (9.115, 121):

$$a_{lm}(\vec{k}) = \frac{i^l}{k} Y_{lm}^*(\vartheta_k, \varphi_k) . \quad (9.122)$$

Damit ist die Transformation $\vec{k} \leftarrow klm$ vollständig erfasst. *Interpretation:* $|a_{lm}(\vec{k})|^2$ ist die (relative) Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine \vec{L}^2, L_3 -Messung an einer Teilchengesamtheit vom Impuls $\hbar\vec{k}$ die Werte $\hbar^2 l(l+1)$ bzw. $\hbar m$ liefert.

Ein wichtiger *Spezialfall* liegt vor, wenn $\vec{k} = k\hat{z}$ in die 3-Richtung zeigt. Dann ist $\theta = \vartheta$, und aus (9.120) wird

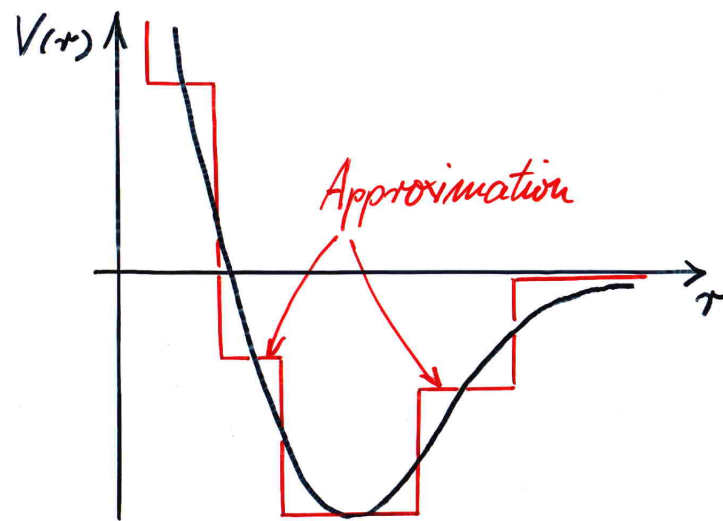
$$e^{ikz} = \sum_l (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\vartheta) . \quad (9.123)$$

Gleichung (9.122) reduziert sich in diesem Falle wegen $Y_{lm}(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}$ zu

$$a_{lm}(k\hat{z}) = \frac{i^l}{k} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} . \quad (9.124)$$

Während die ebene Welle im Allgemeinen *alle* Drehimpulszustände (l, m) enthält, sind darin bei Ausbreitung in 3-Richtung *nur* die Drehimpulszustände $(l, 0)$ enthalten. KLM: Für ein Teilchen, das sich in 3-Richtung bewegt, ist $L_3 = 0$. – Bezeichnung der Summanden in (9.123) als *Partialwellen*.

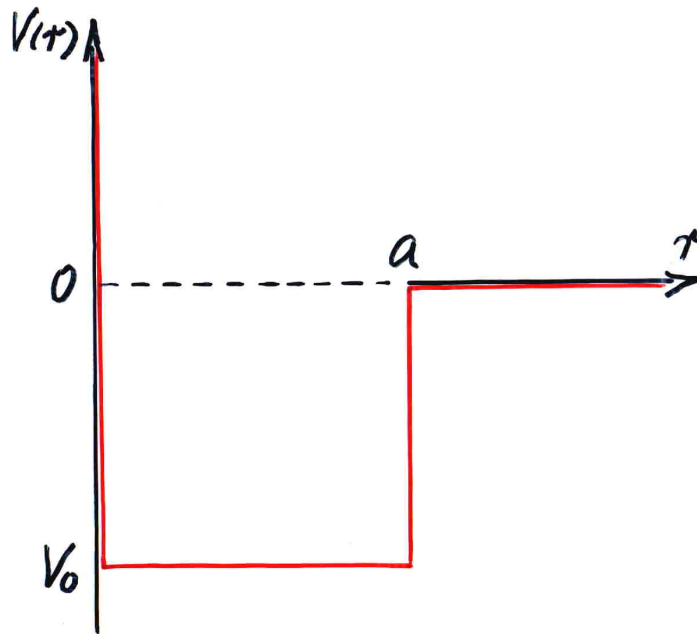
In Kap. 5 wurde die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem stückweise konstanten Potential analysiert. Dabei hatte man die freien Bewegungen in den Intervallen (ebene Wellen) an den Sprungstellen stetig differenzierbar anzuschließen und die richtige Asymptotik bei $x = \pm\infty$ zu berücksichtigen. Vergleichbares ist bei der Bewegung im **stückweise**, d. h. kugelschalenweise **konstanten Zentralpotential** (Approximation eines glatten $V(r)$) möglich:



• Abbildung 9.7 •

Die r -intervallweise freie Bewegung ist durch sphärische Zylinderfunktionen (allgemeine Lösung der freien radialen Schrödinger-Gleichung) zu beschreiben. Diese sind an den Sprungstellen stetig differenzierbar anzuschließen. Ferner ist die Asymptotik bei $r = 0$ und $r = \infty$ richtig zu formulieren.

Hier wird im folgenden nicht der allgemeine Fall, sondern nur ein spezielles (wichtiges) **Beispiel** diskutiert, die **gebundenen Zustände im Potentialtopf**:



• Abbildung 9.8 •

$$V(r) = \begin{cases} V_0 < 0, & r < a \\ 0 & r > a. \end{cases} \quad (9.125)$$

Modell für ein Potential der „Tiefe“ V_0 und der „Reichweite“ a . Freie radiale Schrödinger-Gleichung in den Intervallen

$r < a$:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \kappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0 \quad (9.126 \text{ a})$$

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)};$$

$r > a$:

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0 \quad (9.126 \text{ b})$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

mit der bei $r = 0$ regulären, ansonsten allgemeinen Lösung:

$$R_l(r) = \begin{cases} A_l j_l(\kappa r) & , \quad r < a \\ B_l^{(+)} h_l^{(+)}(kr) + B_l^{(-)} h_l^{(-)}(kr) & , \quad r > a \end{cases} . \quad (9.127)$$

Wir beschränken die Analyse auf *gebundene Zustände*; diese gibt es nur für $E < 0$; dann ist k rein imaginär und die Normierungsbedingung (9.15) erfüllbar:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Im } k > 0 \quad , \quad B_l^{(-)} = 0 \quad \Rightarrow \quad R_l(r) = B_l^{(+)} h_l^{(+)}(kr) \\ \text{Im } k < 0 \quad , \quad B_l^{(+)} = 0 \quad \Rightarrow \quad R_l(r) = B_l^{(-)} h_l^{(-)}(kr) \end{array} \right\} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-|k|r}}{r}$$

\Rightarrow *Normierbarkeit!* Festlegung auf $\text{Im } k > 0$, somit $B_l^{(-)} = 0$. Stetig differenzierbarer Anschluss bei $r = a$:

$$A_l j_l(\kappa a) = B_l^{(+)} h_l^{(+)}(\kappa a) \quad (9.128)$$

$$A_l j_l'(\kappa a) = B_l^{(+)} h_l^{(+)' }(\kappa a) .$$

Achtung: ' bedeutet Ableitung nach r , nicht nach κr bzw. kr . *Lösbarkeitsbedingung*:

$$j_l(\kappa a) h_l^{(+)' }(\kappa a) - j_l'(\kappa a) h_l^{(+)}(\kappa a) = 0 , \quad (9.129)$$

woraus man die Energieeigenwerte E_{nl} berechnet. Die Energieeigenfunktionen gewinnt man dann aus (9.127) mit $B_l^{(-)} = 0$ sowie (9.15, 16).

Wir betrachten den *Spezialfall* $l = 0$. Mit

$$j_0(\kappa r) = \frac{\sin \kappa r}{\kappa r} , \quad h_0^{(+)}(kr) = \frac{e^{ikr}}{kr}$$

erhält man aus (9.129):

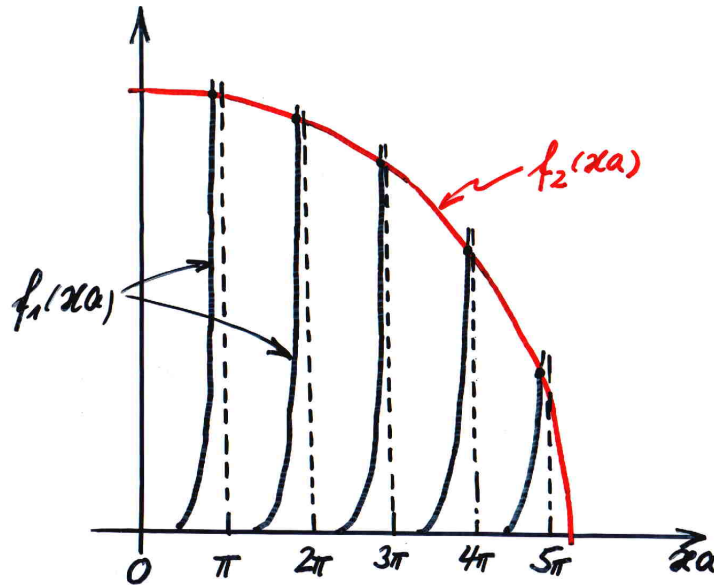
$$|ka| = \kappa a \tan(\kappa a - \pi/2) =: f_1(\kappa a) ;$$

andererseits folgt aus (9.126):

$$|ka| = \sqrt{-\frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 - (\kappa a)^2} =: f_2(\kappa a) .$$

Aus $f_1(\kappa a) = f_2(\kappa a)$ berechnet man κ_n , daraus die Energieeigenwerte

$$E_n = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} + V_0 . \quad (9.130)$$



• Abbildung 9.9 •

Der Skizze entnimmt man, dass die Anzahl N_0 gebundener Zustände durch die Größe $-a^2 V_0$ bestimmt ist:

$$\frac{1}{\pi} \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0} - \frac{1}{2} < N_0 < \frac{1}{\pi} \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0} + \frac{1}{2}. \quad (9.131)$$

N_0 ist umso größer, je tiefer und weitreichender das Potential ist. Für

$$\frac{1}{\pi} \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0} < \frac{1}{2}$$

gibt es *keinen* gebundenen Zustand! Vgl. mit der Diskussion im Anschluss an (9.17).

Für $l > 0$ gibt es weniger gebundene Zustände ($N_l < N_0$) wegen des Zentrifugalpotentials $\hbar^2 l(l+1) / 2m r^2$ •

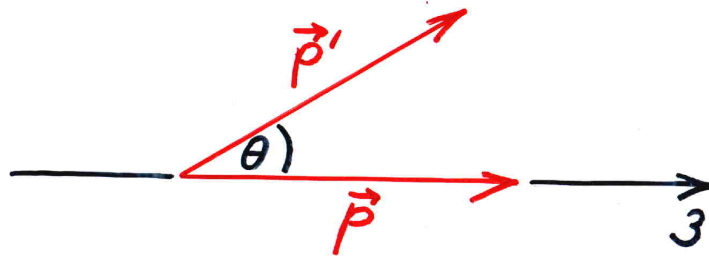
Wir wenden uns der **Streuung** eines Teilchens der Masse m an einem **Zentralpotential** $V(r)$ zu. Sei – um asymptotisch eine freie Bewegung zu erhalten –

$$r V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (9.132)$$

Durch die Forderung (9.132) wird das wichtige (!) Coulomb-Potential ausgeschlossen, das wegen seiner „Langreichweitigkeit“ asymptotisch gewisse Schwierigkeiten macht. Diese

Komplikationen sollen hier nicht näher besprochen werden; zur sog. *Coulomb-Streuung* siehe jedoch z. B. Grawert, Kap. 5.6.

Das Teilchen läuft aus großer Entfernung mit dem Impuls \vec{p} (üblicherweise in z -Richtung) auf das Kraftzentrum zu. Wechselwirkung mit dem Kraftfeld. Dann entfernt sich das Teilchen wieder vom Kraftzentrum mit dem asymptotischen Impuls \vec{p}' .



• Abbildung 9.10 •

Wegen der Elastizität des Streuprozesses hat man die *Energieerhaltung*:

$$E' = \frac{\vec{p}'^2}{2m} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = E, \quad (9.133)$$

folglich

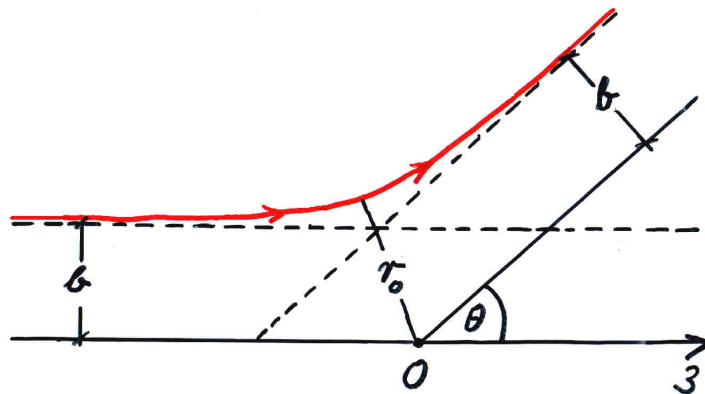
$$|\vec{p}'| = |\vec{p}|. \quad (9.134)$$

Der *Streuwinkel* ist wie folgt definiert:

$$\theta = \arccos \frac{\vec{p}' \cdot \vec{p}}{p' p}. \quad (9.135)$$

KLM. Die Trajektorie verläuft in einer Ebene durch das Kraftzentrum 0. Konstanten der Bewegung sind die Energie E und der Bahndrehimpuls (betrug) $L = |\vec{L}|$. *Stoßparameter*

$$b = \frac{L}{\sqrt{2mE}}. \quad (9.136)$$



• Abbildung 9.11 •

Der Streuwinkel ist durch die *klassische Ablenkfunktion* gegeben:

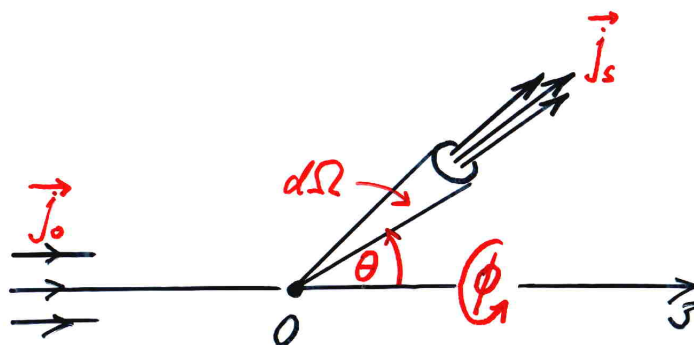
$$\theta(E, L) = \pi - 2L \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 p(r, E, L)} \quad (9.137)$$

(genauer: $\theta = |\theta(E, L) + 2\pi N|$ so, dass $0 \leq \theta \leq \pi$ gilt) mit dem Radialimpuls

$$p(r, E, L) = \sqrt{2m(E - V(r)) - L^2/r^2} . \quad (9.138)$$

Der *klassische Umkehrpunkt* $r_0(E, L)$ ist aus der Bedingung $p(r_0, E, L) = 0$ zu bestimmen.

An dem Potential werde nicht nur ein einzelnes Teilchen, sondern ein Strahl der Stromdichte $\vec{j}_0 = j_0 \hat{z}$ gestreut. Mit einem Detektor



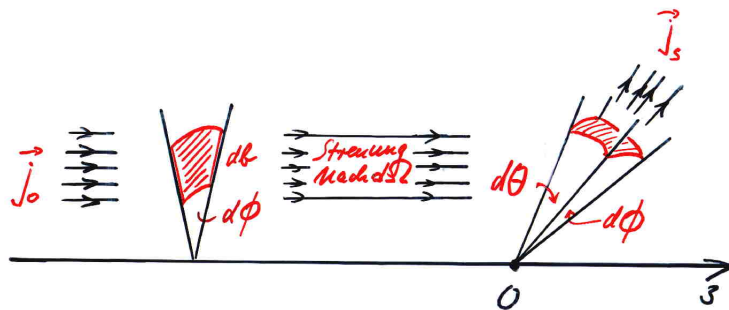
• Abbildung 9.12 •

registriert man die pro Zeiteinheit in das Raumwinkelement $d\Omega(\theta, \phi)$ gestreuten Teilchen. **Differentieller Wirkungsquerschnitt:**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Streustrom nach } d\Omega}{j_0 d\Omega}(\theta, \phi) \quad (9.139)$$

von der Dimension Fläche/Raumwinkel; hängt im Zentralpotential nur von θ , nicht von ϕ ab. Zylindersymmetrie der Anordnung.

Der Teilchenstrom nach $d\Omega$ ist $b db d\phi j_0$, folglich nach (9.139):



• Abbildung 9.13 •

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b db d\phi}{d\Omega} = \left| \frac{b db}{\sin\theta d\theta} \right| \quad (9.140)$$

wegen $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Mit (9.136) hat man auch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2mE} \left| \frac{L}{\sin\theta} \left(\frac{\partial\theta}{\partial L} \right)_E^{-1} \right| \quad (9.141)$$

– unabhängig von ϕ . Im Allgemeinen führen verschiedene b oder L zu einem und demselben Streuwinkel, dann hat man in (9.140, 141) entsprechend viele Terme aufzusummieren.

QUM: Die Gesamtheit der Teilchen, die den Stoßprozess durchlaufen, ist durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ zu beschreiben;

• ohne Kraftfeld:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{i(kz - \omega t)}, \quad (9.142)$$

d. i. eine ebene Welle in z -Richtung ($k = p / \hbar$, $\omega = E / \hbar$),

• mit Kraftfeld:

$$\psi(\vec{x}, t) = \chi_k(\vec{x}) e^{-i\omega t}, \quad (9.143)$$

d. i. ein stationärer Zustand der Energie $E = \hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Stationäre Schrödinger-Gleichung zur Bestimmung von $\chi_k(\vec{x})$:

$$(\Delta + k^2 - U(r)) \chi_k(\vec{x}) = 0 \quad (9.144)$$

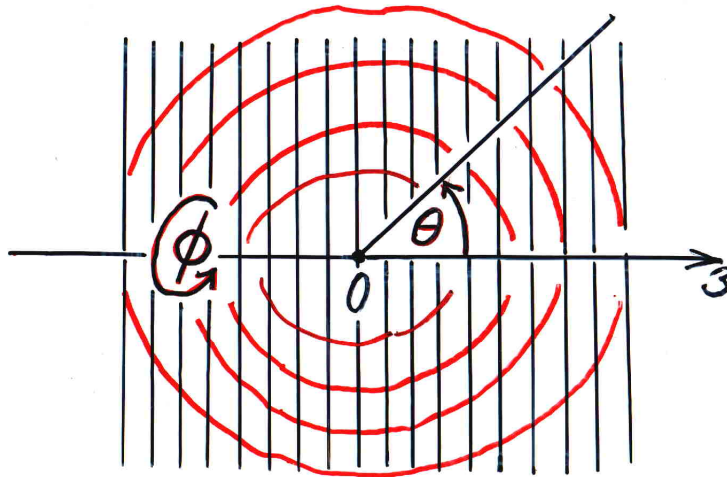
mit

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$$

zu lösen unter der Randbedingung:

$$\chi_k(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (9.145)$$

d. i. eine ebene Wellen in z -Richtung, entsprechend der ungestörten



• Abbildung 9.14 •

Bewegung, überlagert von einer auslaufenden Kugelwelle infolge Streuung. Die **Streuamplitude** $f(\theta)$ ist (im Zentralpotential) unabhängig von ϕ .

Zusammenhang von Streuamplitude und differentiellem WQ. Die zur ebenen Welle e^{ikz} gehörige einlaufende Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist nach (2.20):

$$\vec{j}_0 = \frac{\hbar}{m} k \hat{z}; \quad (9.146)$$

die zur Streuwelle $f(\theta) e^{i k r} / r$ gehörige auslaufende Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist nach (2.20) und (8.37):

$$\begin{aligned}\vec{j}_s &= \frac{\hbar}{2 i m} \left(f^* \frac{e^{-i k r}}{r} \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{\partial}{r \partial \theta} + \hat{\phi} \frac{\partial}{r \sin \theta \partial \phi} \right) f \frac{e^{i k r}}{r} - k.k. \right) \\ &= \frac{\hbar}{m} \left(k \frac{|f|^2}{r^2} \hat{r} + \frac{\text{Im} f^* d f / d \theta}{r^3} \hat{\theta} \right) \\ &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} j_0 \frac{|f|^2}{r^2} \hat{r}\end{aligned}\tag{9.147}$$

wegen (9.146). Mit (9.139) und $d\vec{S} = r^2 d\Omega \hat{r}$ erhält man:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\vec{j}_s \cdot d\vec{S}}{j_0 d\Omega} = \frac{\vec{j}_s \cdot r^2 \hat{r}}{j_0};$$

mit (9.147) folgt schließlich:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2.\tag{9.148}$$

Der differentielle WQ ist also gleich dem Betragsquadrat der (im Allgemeinen komplexen) Streuamplitude •

Totaler Wirkungsquerschnitt:

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{\text{gesamter Streustrom}}{j_0} \\ &= \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \\ &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\ &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f(\theta)|^2.\end{aligned}\tag{9.149}$$

Unter Streuung versteht man Ablenkung aus der Einfallsrichtung (hier: z -Richtung). Der Streustrom ist die Anzahl der gestreuten Teilchen/Zeit, d.i. die Anzahl der in „Vorwärtsrichtung“ $\theta = 0$ fehlenden Teilchen/Zeit. Diesen Tatbestand quantifiziert das **Optische Theorem:**

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0),\tag{9.150}$$

wobei man $f(0)$ als „Vorwärtsstreuamplitude“ bezeichnet. Wellenbild: Schwächung der ebenen Welle in Vorwärtsrichtung durch Interferenz mit der Streuwelle \Rightarrow Schatten.

Beweis. Die zur Wellenfunktion $\chi_k(\vec{x})$ gehörige asymptotische Wahrscheinlichkeitsstromdichte berechnet man aus (9.145) mit Hilfe von (2.20) zu

$$\vec{j} = \vec{j}_0 + \vec{j}_s + \vec{j}_i, \quad (9.151)$$

wo \vec{j}_0, \vec{j}_s durch (9.146, 147) gegeben sind und

$$\vec{j}_i = \vec{j}_0 \frac{\operatorname{Re}(f e^{ik(r-z)})}{r} (\hat{r} + \hat{z}) \quad (9.152)$$

die „Interferenzwahrscheinlichkeitsstromdichte“ ist. Bitte nachrechnen! Da $\chi_k(\vec{x}) e^{-i\omega t}$ ein stationärer Zustand ist, verschwindet wegen (2.21) die Divergenz von \vec{j} – nicht nur asymptotisch, sondern überall. Folglich (Gaußscher Satz) verschwindet in diesem Zustand der Wahrscheinlichkeitsstrom durch jede geschlossene Fläche, also insbesondere auch durch die „unendlich ferne Kugelfläche“:

$$I = \oint \vec{j} \cdot d\vec{S} = I_0 + I_s + I_i = 0 \quad (9.153)$$

mit

$$I_0 = \oint \vec{j}_0 \cdot d\vec{S} = 0$$

$$I_s = \oint \vec{j}_s \cdot d\vec{S} = j_0 \sigma \quad (9.154)$$

$$I_i = \oint \vec{j}_i \cdot d\vec{S} = -j_0 \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0).$$

Bitte nachrechnen! Setzt man (9.154) in (9.153) ein, so folgt die *Behauptung* (1.50) •

Entwicklung der Streuamplitude nach Legendre-Polynomen:

$$f(\theta) = \sum_l (2l + 1) f_l P_l(\cos \theta) \quad (9.155)$$

mit zunächst unbekanntem Koeffizienten f_l , von denen zur Vereinfachung späterer Formeln ein Faktor $2l + 1$ abgespalten wurde. Bezeichnung der f_l als **Partialwellenstreuamplituden**. Entwicklung der ebenen Welle e^{ikz} gemäß (9.123). Setzt man diese beiden Reihen in (9.145) ein und berücksichtigt man die Asymptotik (9.106) der sphärischen Hankel-Funktionen $h_l^{(+)}(kr)$, so nimmt die Randbedingung die folgende Gestalt an:

$$\chi_k(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_l (2l + 1) i^l (j_l(kr) + k f_l h_l^{(+)}(kr)) P_l(\cos \theta). \quad (9.156)$$

Die Asymptotik (9.156) erzwingt als Lösungsansatz für die Wellenfunktion die **Partialwellenentwicklung**:

$$\chi_k(\vec{x}) = \sum_l (2l + 1) i^l R_l(k, r) P_l(\cos \theta). \quad (9.157)$$

Keine ϕ -Abhängigkeit im Zentralpotential! Der l -te Summand ist simultan Eigenfunktion von \vec{L}^2, L_3 zu den Eigenwerten $\hbar^2 l(l + 1)$ bzw. 0 – wegen $P_l \sim Y_{l0}$ nach (8.84). Er beschreibt einen Zustand, in dem das Teilchen einen Bahndrehimpuls vom Betrage $\hbar \sqrt{l(l + 1)}$ hat, der senkrecht zur z -Achse steht. Vgl. KLM. Die noch unbekannte radiale Wellenfunktion $R_l(k, r)$ ist so zu bestimmen, dass der l -te Summand und damit die ganze l -Summe $\chi_k(\vec{x})$ Eigenfunktion von H zum (kontinuierlichen) Eigenwert $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ist.

Einsetzen von (9.157) in die stationäre Schrödinger-Gleichung (9.144) führt für die radiale Wellenfunktion $R_l(k, r)$ auf die *radiale Schrödinger-Gleichung* (9.14):

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + k^2 - U(r) - \frac{l(l + 1)}{r^2} \right) R_l(k, r) = 0. \quad (9.158)$$

Diese ist wegen (9.156, 157) zu lösen unter der *Randbedingung*:

$$R_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} j_l(kr) + k f_l h_l^{(+)}(kr). \quad (9.159)$$

Ferner ist Regularität von $R_l(k, r)$ im Ursprung zu fordern.

Mit (9.110, 106) lässt sich die Asymptotik (9.159) auch so darstellen:

$$R_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{s_l e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}}{2ikr} \quad (9.160)$$

mit

$$s_l = 1 + 2ikf_l, \quad (9.161)$$

d. i. die Superposition einer einlaufenden Kugelwelle e^{-ikr}/r und einer auslaufenden Kugelwelle e^{ikr}/r . Wegen $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ müssen die Amplituden dieser beiden Wellen denselben Betrag haben (weise das nach!), d. h. $|s_l| = 1$, folglich

$$s_l = e^{2i\delta_l} \quad (9.162)$$

mit *reellem* δ_l . Die Abspaltung des Faktors 2 vereinfacht die nachfolgende Analyse. Mit (9.162) geht (9.160) über in:

$$R_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}. \quad (9.163)$$

Diese Asymptotik der radialen Wellenfunktion *mit* Potential ist zu vergleichen mit der Asymptotik der radialen Wellenfunktion *ohne* Potential:

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} . \quad (9.164)$$

Dabei erweist sich δ_l als **Streuphase** der l -ten Partialwelle: die asymptotische Phasenverschiebung der l -ten radialen Wellenfunktion infolge Wechselwirkung mit dem Kraftfeld.

Wirkungsquerschnitte. Aus (9.161, 162) erhält man für die l -te Partialwellenstreuamplitude den Ausdruck:

$$f_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l . \quad (9.165)$$

Dieser wird in (9.155) eingesetzt; das ergibt für die Streuamplitude $f(\theta)$ die Entwicklung:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) . \quad (9.166)$$

Hiervon das Betragsquadrat liefert nach (9.148) den *differentiellen* WQ:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l', l} (2l' + 1) (2l + 1) e^{-i(\delta_{l'} - \delta_l)} \sin \delta_{l'} \sin \delta_l P_{l'}(\cos \theta) P_l(\cos \theta) . \end{aligned} \quad (9.167)$$

Durch Integration über alle Richtungen θ, ϕ berechnet man daraus den *totalen* WQ:

$$\begin{aligned} \sigma &= 2\pi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \sin^2 \delta_l , \end{aligned} \quad (9.168)$$

wobei von der Orthogonalität (8.66) der Legendre-Polynome Gebrauch gemacht wurde. (9.168) lässt sich wegen (9.165) auch in der folgenden Gestalt schreiben:

$$\sigma = 4\pi \sum_l (2l + 1) |f_l|^2 . \quad (9.169)$$

Der vorstehende Formalismus wird nachfolgend an einem wichtigen Beispiel erläutert, der **Streuung am Potentialtopf**. Wie im Falle der gebundenen Zustände, nur jetzt

$E > 0$. Die radiale Wellenfunktion $R_l(k, r)$ ist durch (9.127) gegeben, jedoch mit *reellem* k . Diese Streulösung ist zwar nicht normierbar, sie ist jedoch asymptotisch beschränkt. Die Stetigkeit von $R_l(k, r)$ und $R_l'(k, r)$ bei $r = a$ impliziert:

$$\begin{aligned}
 B_l^{(\pm)} &= \pm \frac{j_l(\kappa a) h_l^{(\mp)'}(ka) - j_l'(\kappa a) h_l^{(\mp)}(ka)}{h_l^{(+)}(ka) h_l^{(-)'}(ka) - h_l^{(+)'}(ka) h_l^{(-)}(ka)} A_l \\
 &= \pm \frac{i}{2} k a^2 (j_l(\kappa a) h_l^{(\mp)'}(ka) - j_l'(\kappa a) h_l^{(\mp)}(ka)) A_l
 \end{aligned} \tag{9.170}$$

wegen (9.104). Die radiale Wellenfunktion (9.127) verhält sich wegen (9.106) asymptotisch wie

$$R_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{B_l^{(+)} e^{i(kr - l\pi/2)} + B_l^{(-)} e^{-i(kr - l\pi/2)}}{kr}. \tag{9.171}$$

Koeffizientenvergleich mit (9.160, 161) ergibt:

$$B_l^{(+)} = \frac{1 + 2ik f_l}{2i}, \quad B_l^{(-)} = -\frac{1}{2i}. \tag{9.172}$$

Daraus und mit (9.170, 108) folgt für die *Partialwellenstreuamplituden*:

$$\begin{aligned}
 f_l &= -\frac{1}{2ik} \left(1 + \frac{B_l^{(+)}}{B_l^{(-)}} \right) \\
 &= -\frac{1}{k} \frac{j_l(\kappa a) j_l'(ka) - j_l'(\kappa a) j_l(ka)}{j_l(\kappa a) h_l^{(+)'}(ka) - j_l'(\kappa a) h_l^{(+)}(ka)}.
 \end{aligned} \tag{9.173}$$

Der Nenner verschwindet wegen (9.129) bei den gebundenen Energien $E = E_{nl} < 0$, d. h. f_l singularär daselbst; sonst, insbesondere bei den Streuenergien $E > 0$, ist er ungleich null.

Zur Berechnung des differentiellen WQ hat man den Ausdruck (9.173) für f_l in die l -Entwicklung (9.155) der Streuamplitude $f(\theta)$ einzusetzen und davon gemäß (9.148) das Betragsquadrat zu bilden. Das ist sehr kompliziert! Daher Beschränkung auf den

niederenergetischen Grenzfall $k \rightarrow 0$; mit (9.126) sowie (9.109, 105) erhält man:

$$\begin{aligned}
 E \ll -V_0 &\implies \kappa \simeq \kappa_0 = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} V_0} \\
 k \ll \frac{1}{a} &\implies j_l(ka) \simeq \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} \\
 &h_l^{(+)}(ka) \simeq \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}},
 \end{aligned} \tag{9.174}$$

$(2l \pm 1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l \pm 1)$; d. h. die de Broglie-Wellenlänge ist groß gegen den Potentialradius. Mit (9.174) vereinfacht sich (9.173) zu:

$$f_l \simeq a \frac{(ka)^{2l}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{l j_l(\kappa_0 a) - a j_l'(\kappa_0 a)}{(l+1) j_l(\kappa_0 a) + a j_l'(\kappa_0 a)}. \tag{9.175}$$

Wegen $f_l \sim k^{2l}$ kommt der Hauptbeitrag zur Streuung im Limes $k \rightarrow 0$ von der Partialwelle $l = 0$, der *s-Welle*:

$$f(\theta) \simeq f_0. \tag{9.176}$$

Der *differentielle WQ* ist in diesem Grenzfall *isotrop*:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq |f_0|^2. \tag{9.177}$$

Das ist typisch für *alle* Zentralpotentiale. Der *totale WQ* ist in diesem Limes:

$$\sigma \simeq 4\pi |f_0|^2. \tag{9.178}$$

Mit $j_0(\rho) = \sin \rho / \rho$ berechnet man aus (9.175) die *s-Wellenstreuamplitude*:

$$f_0 \simeq a \left(\frac{\tan \kappa_0 a}{\kappa_0 a} - 1 \right). \tag{9.179}$$

Divergenz dieses Ausdrucks, damit des differentiellen und totalen Wirkungsquerschnittes, für $\kappa_0 a = (n + 1/2)\pi$, $n = 0, 1, \dots$; dann bildet sich jeweils ein neuer gebundener Zustand im Potentialtopf aus. Siehe Abbildung 9.9. $f_0 = 0$, damit Verschwinden der Wirkungsquerschnitte, für $\tan \kappa_0 a = \kappa_0 a$. Interpretation?

Die *Streuphasen* δ_l berechnet man allgemein mit (9.161, 162) aus den Partialwellenstreuamplituden f_l ; letztere sind speziell (im Beispiel) durch das Verhältnis $B_l^{(+)} / B_l^{(-)}$

gegeben; mit (9.172, 170) erhält man:

$$\begin{aligned}
 e^{2i\delta_l} &= 1 + 2ikf_l \\
 &= -\frac{B_l^{(+)}}{B_l^{(-)}} \\
 &= \frac{j_l(\kappa a) h_l^{(-)'}(ka) - j_l'(\kappa a) h_l^{(-)}(ka)}{j_l(\kappa a) h_l^{(+)'}(ka) - j_l'(\kappa a) h_l^{(+)}(ka)}. \quad (9.180)
 \end{aligned}$$

Führt man die *logarithmische Ableitung* der radialen Wellenfunktion

$$\gamma_l = \frac{d}{dr} \ln R_l(k, r)|_{r=a} = \frac{j_l'(\kappa a)}{j_l(\kappa a)} \quad (9.181)$$

bei $r = a$ ein, so lässt sich (9.180) wie folgt schreiben:

$$e^{2i\delta_l} = \frac{h_l^{(-)'}(ka) - \gamma_l h_l^{(-)}(ka)}{h_l^{(+)'}(ka) - \gamma_l h_l^{(+)}(ka)}. \quad (9.182)$$

Die Wirkung des Potentials auf den Streuprozess hängt also nur von den γ_l ab. Die Formel (9.182) gilt allgemein für Potentiale mit (exakt) endlicher Reichweite.

$l = 0$. Mit (9.94) berechnet man (üben!) aus (9.180):

$$\begin{aligned}
 e^{2i\delta_0} &= e^{-2ika} \frac{1 + i\frac{k}{\kappa} \tan \kappa a}{1 - i\frac{k}{\kappa} \tan \kappa a} \\
 \Rightarrow \quad \frac{\tan(ka + \delta_0)}{\tan \kappa a} &= \frac{k}{\kappa}. \quad (9.183)
 \end{aligned}$$

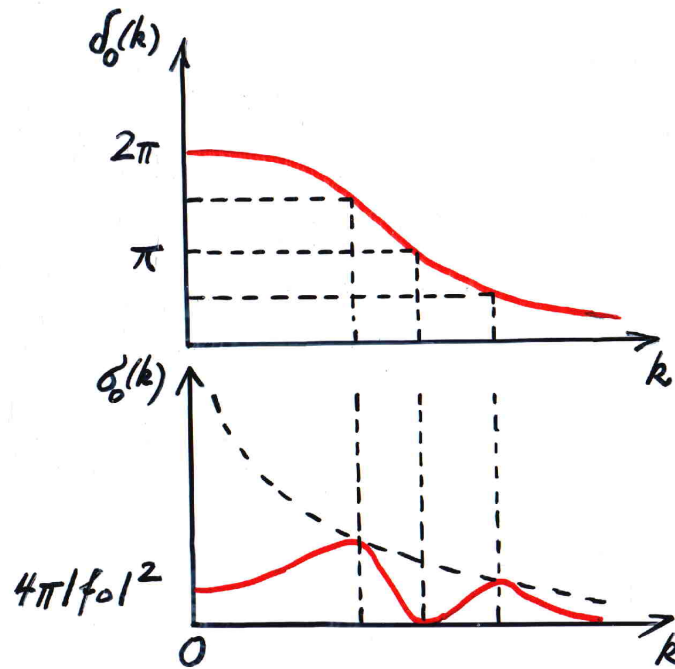
Man liest ab: Für $k \rightarrow 0$ und für $k \rightarrow \infty$ wird δ_0 ein ganzzahliges Vielfaches von π :

$$\begin{aligned}
 \delta_0(k) &\xrightarrow{k \rightarrow 0} n_0 \pi \\
 \delta_0(k) &\xrightarrow{k \rightarrow \infty} n_\infty \pi. \quad (9.184)
 \end{aligned}$$

Wieso? Konvention:

$$n_\infty = 0; \quad (9.185)$$

erfüllbar, da δ_0 durch (9.183) nur mod π festgelegt ist. *Beispiel:* $n_0 = 2$ (siehe Grawert, S. 83).



• Abbildung 9.15 •

Positives δ_0 bedeutet: Die radiale Wellenfunktion $R_0(k, r)$ wird durch den Potentialtopf asymptotisch im Vergleich zu $j_0(kr)$ zum Zentrum *hin* verschoben. Diese Attraktion gilt für alle l . s -Wellen-Beitrag zum totalen WQ:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 . \tag{9.186}$$

Charakteristische Maxima (Resonanzen) und Minima in Abhängigkeit von k . Siehe Abbildung 9.15. Analog für alle l .

Levinson-Theorem. Betrachte die Intervalle $I_n : (n - 1/2)\pi < x < (n + 1/2)\pi$, in denen jeweils $\tan x$ von $-\infty$ bis $+\infty$ läuft. Aus (9.183) zusammen mit (9.185) folgt (wie? genau überlegen!): $ka + \delta_0(k)$ und $\kappa(k)a$ liegen für alle k stets in demselben I_n , also insbesondere $\delta_0(0)$ und $\kappa_0 a$ gemeinsam in I_{n_0} . Für $\delta_0(0)$ ist das wegen (9.184) klar, für $\kappa_0 a$ bedeutet es:

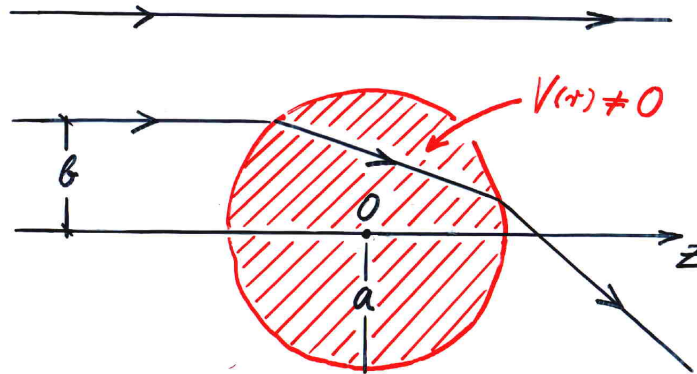
$$(n_0 - 1/2)\pi < \kappa_0 a < (n_0 + 1/2)\pi . \tag{9.187}$$

Der Vergleich mit (9.131) zeigt, dass gilt:

$$n_0 = N_0 , \tag{9.188}$$

d. i. die Anzahl der im Potentialtopf mit $l = 0$ gebundenen Zustände. Dieses Resultat gilt für alle l und für alle Potentiale endlicher Reichweite! Die Beziehung zwischen gebundenen (N_0) und Streuzuständen (n_0), die schon in den Singularitäten der f_l bei den Energien E_{nl} aufschien (ein ebenfalls allgemeingültiges Resultat), wird in der quantenmechanischen Streutheorie vertieft.

Bei *höheren Stoßenergien* ist es im Allgemeinen nicht mehr gerechtfertigt, sich auf die s -Streuung zu beschränken. Wieviele Partialwellen sind dann zu berücksichtigen? *Halbklassisches Argument*: Streuung ereignet sich, sofern der Stoßparameter b die Potentialreichweite a



• Abbildung 9.16 •

nicht überschreitet: $b \leq a$. Wegen $b = L/p$, $L = \hbar l$, $p = \hbar k$ bedeutet das

$$l \leq k a = l_{\max} . \quad (9.189)$$

Dieses Kriterium gilt allgemein für Potentiale endlicher Reichweite. *Andere Argumentation*: Die (relative) radiale Dichte $(k r)^2 j_l^2(k r)$ der l -ten Partialwelle ist für $k r < l$ verschwindend klein und oszilliert für $k r > l$ zwischen 0 und 1 (ungefähr); folglich dringt das Teilchen für $l > k a$ nur mit vernachlässigbarer Wahrscheinlichkeit in den Potentialbereich ein; $l > l_{\max}$ tragen also nicht zur Streuung bei; siehe Messiah I, Fig. X 6. Typische Werte für l_{\max} sind in der Kernphysik 1 - 10, in der Atomphysik 100 - 1000 •

Beispiel: Streuung am Coulomb-Potential. Sprengt wegen seiner langen Reichweite ($V(r) \sim r^{-1}$) den Rahmen der hier vorgestellten Theorie. Die Asymptotik (9.145) bzw.

(9.163) ist in diesem Potential nicht erfüllbar. Ein Ausweg aus dieser Problematik ist in Grawert, Kap. 5.6 skizziert. Resultat: Der qum. differentielle WQ ist gleich dem klm. differentiellen WQ: *Rutherford-WQ*.

Die Analyse der Potentialstreuung beruhte bislang auf der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung (9.144) unter der Asymptotik (9.145). Dieser Formulierung des Streuproblems als „Differentialgleichung + Randbedingung“ ist die folgende *Integralgleichung* äquivalent:

$$\chi_k = e^{ikz} + \int G_k(\vec{x}, \vec{x}') U(r') \chi_k(\vec{x}') d^3 x' \quad (9.190)$$

mit

$$G_k(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}. \quad (9.191)$$

Bezeichnung von (9.190, 191) als **Lippmann-Schwinger-Gleichung** – in der Ortsdarstellung. Im folgenden wird bewiesen: $\chi_k(\vec{x})$ aus (9.190, 191) befriedigt (9.144, 145). Beweis der Umkehrung als Übung!

- $G_k(\vec{x}, \vec{x}')$ ist die Greensche Funktion des Helmholtz-Operators $\Delta + k^2$:

$$(\Delta + k^2) G_k(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (9.192)$$

vgl. (9.114). Anwendung von $\Delta + k^2$ auf (9.190) führt wegen

$$(\Delta + k^2) e^{ikz} = 0 \quad (9.193)$$

mit (9.192) auf die *stationäre Schrödinger-Gleichung* (9.144):

$$(\Delta + k^2) \chi_k(\vec{x}) = U(r) \chi_k(\vec{x}).$$

- $U(r')$ ist nur in einem endlichen Raumbereich wesentlich von null verschieden (Potential endlicher Reichweite); die \vec{x}' -Integration ist auf diesen Raumbereich beschränkt. Für $r \gg r'$ folgt:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| \simeq r - \vec{x}' \cdot \hat{r}$$

$$\Rightarrow G_k(\vec{x}, \vec{x}') \simeq -\frac{e^{ik(r - \vec{x}' \cdot \hat{r})}}{4\pi r}; \quad (9.194)$$

somit erhält man die Randbedingung (9.145) mit der folgenden *Integraldarstellung* der *Streuamplitude*:

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\hat{r} \cdot \vec{x}'} U(r') \chi_k(\vec{x}') d^3 x'. \quad (9.195)$$

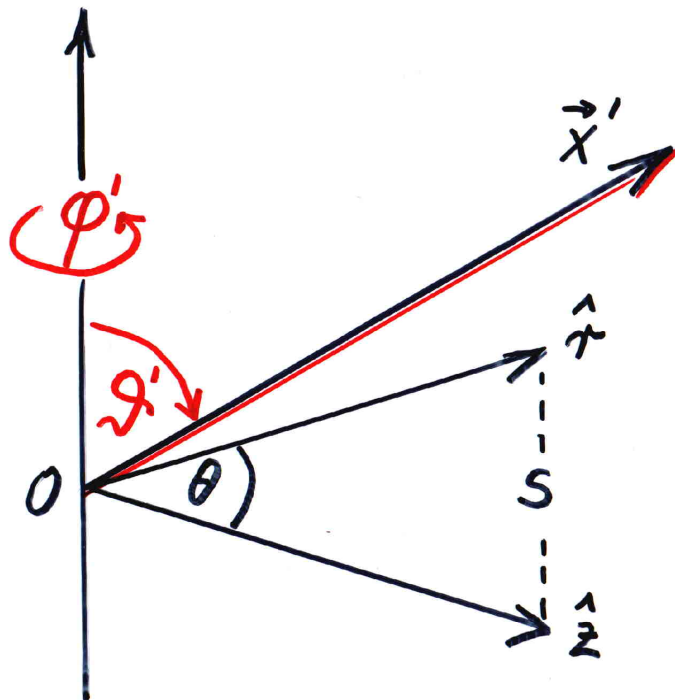
Der Streuwinkel θ liegt zwischen \hat{r} (Streurichtung) und \hat{z} (Einfallrichtung): Formel (9.195) bedeutet *nicht* die Lösung des Streuproblems: Zur Berechnung von $f(\theta)$ benötigt man ja nach wie vor die Kenntnis von $\chi_k(\vec{x})$. Die obige Darstellung erweist sich aber für viele Diskussionen (Streutheorie) und die Einführung von Näherungen als vorteilhaft.

Bornsche Näherung. Bei schwacher Distorsion der ebenen Wellen durch das Kraftfeld (z. B. falls $-V_0 \ll E$) setzt man approximativ:

$$\chi_k(\vec{x}') \simeq e^{ikz'} = e^{ik\vec{x}' \cdot \hat{z}}$$

$$\Rightarrow f(\theta) \simeq f^B(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik(\hat{r} - \hat{z}) \cdot \vec{x}'} U(r') d^3x' . \quad (9.196)$$

Auswertung in Kugelkoordinaten, Polarachse in Richtung $\hat{r} - \hat{z}$ (Striche an \vec{x}' -Variablen weggelassen):



• Abbildung 9.17 •

$$\begin{aligned}
 f^B(\theta) &= -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \int_{-1}^{+1} d \cos \vartheta e^{-i k s(\theta) r \cos \vartheta} \\
 &= -\frac{1}{k s(\theta)} \int_0^\infty dr r U(r) \sin(k s(\theta) r)
 \end{aligned} \tag{9.197}$$

mit

$$s(\theta) = 2 \sin \theta / 2 . \tag{9.198}$$

Beispiel: Streuung am Yukawa-Potential:

$$V(r) = \alpha \frac{e^{-r/a}}{r} ; \tag{9.199}$$

dafür folgt mit (9.197) in Bornscher Näherung:

$$f^B(\theta) = -\frac{2 m \alpha}{\hbar^2} \frac{1}{k^2 s^2(\theta) + 1/a^2} . \tag{9.200}$$

Nachrechnen!

Im Limes $a \rightarrow \infty$ geht das Yukawa-Potential (Reichweite a) in das Coulomb-Potential (Reichweite ∞) über:

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} . \tag{9.201}$$

Aus der Bornschen Streuamplitude (9.200) wird im Grenzfall (9.201) – mit (9.85, 198):

$$\begin{aligned}
 f^B(\theta) &= -\frac{2 m \alpha}{\hbar^2 k^2 s^2(\theta)} \\
 &= -\frac{\alpha}{4 E \sin^2 \theta / 2} .
 \end{aligned} \tag{9.202}$$

Dieses Resultat ist (merkwürdigerweise) exakt; sein Betragsquadrat liefert den **Rutherford'schen Streuquerschnitt**; für das Coulomb-Potential gilt also: $\text{WQ}^{\text{KLM}} = \text{WQ}^{\text{QUM}} = \text{WQ}^B$, nämlich:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{16 E^2 \sin^4 \theta / 2} . \tag{9.203}$$

Abschließend betrachten wir die **Integraldarstellung der Partialwellenstreuamplitude** f_l . Ausgangspunkt sind die radialen Schrödinger-Gleichungen für den Fall mit und

ohne Potential (9.158) bzw. (9.90):

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - U(r) \right) R_l(k, r) = 0 \quad (9.204 \text{ a})$$

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) j_l(kr) = 0. \quad (9.204 \text{ b})$$

Wende auf (a) die Operation $\int_0^\infty dr r^2 j_l(kr) \dots$, auf (b) die Operation $\int_0^\infty dr r^2 R_l(k, r)$... an und subtrahiere; man erhält:

$$\int_0^\infty dr \left((r j_l) \frac{d^2}{dr^2} (r R_l) - (r R_l) \frac{d^2}{dr^2} (r j_l) \right) = \int_0^\infty dr r^2 j_l U R_l. \quad (9.205)$$

Durch partielle Integration wird aus der linken Seite – mit (9.159):

$$\begin{aligned} \text{l.S.} &= \left((r j_l) \frac{d}{dr} (r R_l) - (r R_l) \frac{d}{dr} (r j_l) \right) \Big|_0^\infty \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \left(j_l \frac{d}{dr} R_l - R_l \frac{d}{dr} j_l \right) \\ &= k f_l \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \left(j_l \frac{d}{dr} h_l^{(+)} - h_l^{(+)} \frac{d}{dr} j_l \right) \\ &= -f_l \end{aligned} \quad (9.206)$$

wegen

$$j_l(kr) \frac{d}{dr} h_l^{(+)}(kr) - h_l^{(+)}(kr) \frac{d}{dr} j_l(kr) = -\frac{1}{k r^2}; \quad (9.207)$$

mit Hilfe der Wronski-Determinante (9.104) sowie (9.108) zu zeigen! Aus (9.206, 205) folgt:

$$f_l = - \int_0^\infty dr r^2 j_l(kr) U(r) R_l(k, r). \quad (9.208)$$

Zu demselben Resultat gelangt man, wenn man im Integral (9.195) die Faktoren $e^{-ik\hat{r} \cdot \vec{x}'}$ und $\chi_k(\vec{x}')$ nach Partialwellen entwickelt, die Orthonormiertheit der Kugelfunktionen ausnutzt und das Ergebnis mit (9.155) vergleicht. Übung! Wie im Dreidimensionalen löst das Integral (9.208) *nicht* das Problem der f_l -Berechnung, weil man ja zu seiner Auswertung $R_l(k, r)$ benötigt. Es ist aber wieder für Diskussionen und Approximationen von Vorteil.

Bornsche Näherung. Ersetzung der exakten radialen Wellenfunktion $R_l(k, r)$ durch die freie radiale Wellenfunktion $j_l(kr)$ – schwache Störung durch das Potential angenommen:

$$f_l^B = - \int_0^\infty dr r^2 j_l^2(kr) U(r) . \quad (9.209)$$

Zu dieser Formel gelangt man auch, wenn man im dreidimensionalen Integral (9.196) die Faktoren $e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{x}'}$ und $e^{ikz\cdot\vec{x}'}$ nach Partialwellen entwickelt und von der Orthonormiertheit der Kugelfunktionen Gebrauch macht. Zeige das! Also: erst Bornsche Näherung, dann Partialwellenzerlegung führt auf dasselbe Resultat wie: erste Partialwellenzerlegung, dann Bornsche Näherung:

$$\begin{array}{ccc} f(\theta) & \longrightarrow & f^B(\theta) \\ \downarrow & & \downarrow \\ f_l & \longrightarrow & f_l^B \end{array}$$

Beispiel: Streuung am Potentialtopf. Mit (9.125) folgt aus (9.209):

$$f_l^B = - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int_0^a dr r^2 j_l^2(kr) . \quad (9.212)$$

Im *hochenergetischen Grenzfall* $k \rightarrow \infty$ wird daraus mit (9.110):

$$f_l^B \simeq - \frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} \int_0^a dr \sin^2(kr - l\pi/2) \simeq - \frac{V_0 a}{2E} \quad (9.211)$$

– unabhängig von l . Einsetzen dieses Ausdrucks in die Partialwellenentwicklung (9.155) der Streuamplitude ergibt mit (8.63) und wegen der Vollständigkeit (8.68) der Legendre-Polynome:

$$\begin{aligned} f^B(\theta) &\simeq - \frac{V_0 a}{E} \sum_l \frac{2l+1}{2} P_l(\cos\theta) P_l(1) \\ &= - \frac{V_0 a}{E} \delta(\cos\theta - 1) , \end{aligned} \quad (9.212)$$

d. i. reine „Vorwärtsstreuung“ – ein für den Hochenergielimes sehr plausibles Resultat!

Anmerkung: So wie man zur Differentialgleichung + Randbedingung (9.144, 145) die äquivalente dreidimensionale, inhomogene Integralgleichung (9.190, 191) aufstellen konnte, gibt es im Bereich der Partialwellen eine zur radialen Schrödinger-Gleichung (9.158) und Asymptotik (9.159) äquivalente eindimensionale, inhomogene l -abhängige Integralgleichung. – Iteration dieser Integralgleichungen \Rightarrow Bornsche Reihen. Siehe Streutheorie.

10 Mathematischer Formalismus und allgemeine Grundlagen

Zur begleitenden Lektüre wird dringend empfohlen: Jelitto 4, Kap. 3 und Grawert, Kap. 7 und 8. Ferner wird an Kap. 6 dieser Vorlesung erinnert.

Bisher haben wir gelernt: Der **Zustand eines Teilchens**, d. h. einer Gesamtheit identisch präparierter Teilchen derselben Sorte, wird in der QUM durch eine komplexe Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ beschrieben (zu einem Zeitpunkt, Argument t weggelassen). Äquivalent zu dieser *Ortsdarstellung* des Zustandes ist die *Impulsdarstellung* $\varphi(\vec{p})$, die gemäß (2.41) durch Fourier-Transformation mit $\psi(\vec{x})$ verknüpft ist. Eine weitere Möglichkeit ist die *A-Darstellung*: die komplexen Entwicklungskoeffizienten $\alpha_n, \alpha(k)$ von $\psi(\vec{x})$ bzw. $\varphi(\vec{p})$ nach den *A*-Eigenfunktionen $\chi_n, \chi(k)$. Also:

$$\psi(\vec{x}) \Leftrightarrow \varphi(\vec{p}) \Leftrightarrow \alpha_n, \alpha(k). \quad (10.1)$$

Hinter den verschiedenen Zustandsbeschreibungen steckt das folgende abstrakte mathematische Konzept: *Die Zustandsfunktion, der Zustandsvektor ist Element eines Hilbert-Raumes!* Diese Erkenntnis wird im folgenden genauer dargelegt; sie gestattet sodann eine vielfältige Erweiterung der bisherigen Überlegungen:

- beliebige Darstellungen eines Zustandes und Übergang zwischen denselben: *Transformationstheorie*
- konsistente Zustandsbeschreibung komplizierterer physikalischer Systeme (als der bisher ausschließlich betrachteten Einteilchensysteme): *N-Körpersysteme, Spin \Rightarrow Atome, Kerne, Moleküle, Festkörper, ...*
- Beschreibung von Zuständen mit nicht-maximaler Information: *statistischer Operator, ...*

Eine Menge $\mathcal{H} = \{\varphi, \chi, \psi, \dots\}$ heißt **Hilbert-Raum**, falls gilt:

- \mathcal{H} ist ein *linearer* Raum (Vektorraum) über dem Körper der komplexen Zahlen.
- Der Raum ist *unitär*, d. h. in \mathcal{H} ist ein komplexes inneres Produkt erklärt.
- Der Raum ist *vollständig*, d. h. alle Limites von konvergenten Folgen in \mathcal{H} sind selbst Element von \mathcal{H} .

-
- Der Raum ist *separabel*, d. h. \mathcal{H} ist höchstens von abzählbarer Dimension (endlich oder unendlich).

Die Elemente von \mathcal{H} werden nachfolgend zumeist als *Vektoren* bezeichnet.

\mathcal{H} **linearer Raum** über den *komplexen Zahlen*:

1. *Addition* von Vektoren:

$$\varphi, \chi \in \mathcal{H} \Rightarrow \varphi + \chi \in \mathcal{H} \quad (10.2)$$

mit den Eigenschaften der *Kommutativität*:

$$\varphi + \chi = \chi + \varphi \quad (10.3)$$

und der *Assoziativität*:

$$\varphi + (\chi + \psi) = (\varphi + \chi) + \psi ; \quad (10.4)$$

ferner gibt es einen *Nullvektor* in \mathcal{H} :

$$\varphi + \underline{0} = \varphi \quad (10.5)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{H}$, und zu jedem $\varphi \in \mathcal{H}$ gibt es den *negativen Vektor*:

$$\varphi + (-\varphi) = \underline{0} . \quad (10.6)$$

Bezeichnung:

$$\varphi + (-\chi) =: \varphi - \chi . \quad (10.7)$$

2. *Multiplikation* mit komplexer Zahl:

$$\alpha \in \mathbf{C} , \quad \varphi \in \mathcal{H} \Rightarrow \alpha \varphi \in \mathcal{H} \quad (10.8)$$

mit den Eigenschaften der *Distributivität*:

$$\alpha(\varphi + \chi) = \alpha\varphi + \alpha\chi \quad (10.9)$$

$$(\alpha + \beta)\varphi = \alpha\varphi + \beta\varphi \quad (10.10)$$

und *Assoziativität*:

$$(\alpha\beta)\varphi = \alpha(\beta\varphi) \quad (10.11)$$

für beliebige komplexe Zahlen $\alpha, \beta, \dots \in \mathbf{C}$ und beliebige Vektoren $\varphi, \chi, \dots \in \mathcal{H}$; ferner gilt für alle $\varphi \in \mathcal{H}$:

$$1\varphi = \varphi . \tag{10.12}$$

Ohne Beweis seien zwei *Folgerungen* angegeben:

$$0\varphi = \alpha\mathbf{0} = \mathbf{0} \tag{10.13}$$

sowie

$$(-1)\varphi = -\varphi . \tag{10.14}$$

\mathcal{H} mit *innerem Produkt* ausgestattet, also **unitärer Raum**:

$$\varphi, \chi \in \mathcal{H} \Rightarrow (\varphi, \chi) \in \mathbf{C} \tag{10.15}$$

mit den *Eigenschaften* – axiomatisch gefordert:

$$\begin{aligned} (\varphi, \chi_1 + \chi_2) &= (\varphi, \chi_1) + (\varphi, \chi_2) \\ (\varphi, \alpha\chi) &= \alpha(\varphi, \chi) \\ (\chi, \varphi) &= (\varphi, \chi)^* \\ (\varphi, \varphi) &\geq 0 \end{aligned} \tag{10.16}$$

mit $(\varphi, \varphi) = 0$ genau dann, wenn $\varphi = \mathbf{0}$ ist. Wiederum ergeben sich (ohne Beweis) zwei einfache *Folgerungen*:

$$(\alpha\varphi, \chi) = \alpha^*(\varphi, \chi) \tag{10.17}$$

sowie

$$(\varphi_1 + \varphi_2, \chi) = (\varphi_1, \chi) + (\varphi_2, \chi) . \tag{10.18}$$

Zwei Vektoren $\varphi, \chi \in \mathcal{H}$ heißen *orthogonal* zueinander, falls $(\varphi, \chi) = 0$ ist; man bezeichnet sie als *parallel* zueinander, wenn $\varphi = \alpha\chi$ gilt. Unter der *Norm* (auch *Länge* oder *Betrag*) eines Vektors $\psi \in \mathcal{H}$ versteht man die nicht-negativ reelle Zahl

$$\|\psi\| = (\psi, \psi)^{1/2} \geq 0 ; \tag{10.19}$$

diese ist genau dann gleich null, wenn ψ der Nullvektor ist.

Man vergleiche mit den entsprechenden Begriffsbildungen im *euklidischen Vektorraum* $E_3 = \{\vec{a}, \vec{b}, \dots\}$, der ein Vektorraum über den reellen Zahlen mit reellem inneren Produkt ist:

$$\vec{a}, \vec{b} \in E_3 \Rightarrow \vec{a} + \vec{b} \in E_3 \quad (10.20)$$

$$\alpha \in \mathbb{R}, \vec{c} \in E_3 \Rightarrow \alpha \vec{c} \in E_3$$

bzw.

$$\vec{a}, \vec{b} \in E_3 \Rightarrow \vec{a} \cdot \vec{b} \in \mathbb{R}; \quad (10.21)$$

ferner $\vec{a} \perp \vec{b} \Leftrightarrow \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$, $\vec{a} \parallel \vec{b} \Leftrightarrow \vec{a} = \gamma \vec{b}$, $\|\vec{a}\| = \sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}} \geq 0$.

Schwarzsche Ungleichung. Für je zwei Vektoren $\varphi, \chi \in \mathcal{H}$ gilt:

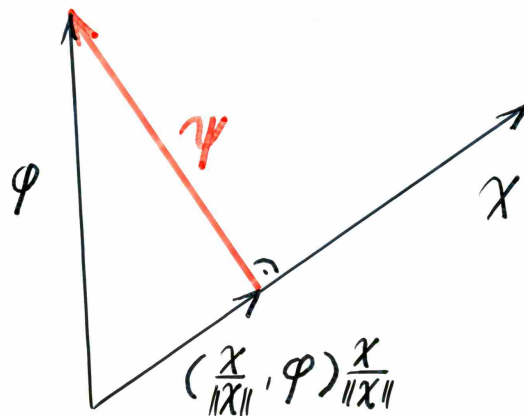
$$|(\varphi, \chi)| \leq \|\varphi\| \|\chi\|. \quad (10.22)$$

Beweis: Wenn einer der Vektoren φ, χ der Nullvektor ist, dann ist (10.22) trivial; seien also φ, χ beide ungleich dem Nullvektor. Der Vektor

$$\psi = \varphi - \left(\frac{\chi}{\|\chi\|}, \varphi \right) \frac{\chi}{\|\chi\|}$$

ist orthogonal zum Vektor χ : $(\chi, \psi) = 0$, folglich ist

$$\|\varphi\|^2 = \frac{|(\chi, \varphi)|^2}{\|\chi\|^2} + \|\psi\|^2.$$



• Abbildung 10.1 •

Wegen $\|\psi\|^2 \geq 0$ folgt hieraus:

$$\|\varphi\|^2 \geq \frac{|(\chi, \varphi)|^2}{\|\chi\|^2},$$

woraus man durch Wurzelziehen die *Behauptung* erhält. Das Gleichheitszeichen steht genau dann, wenn $\psi = \underline{0}$ ist, wenn also φ, χ parallel zueinander sind.

Dreiecksungleichung. Für je zwei Vektoren $\varphi, \chi \in \mathcal{H}$ gilt:

$$\left| \|\varphi\| - \|\chi\| \right| \leq \|\varphi + \chi\| \leq \|\varphi\| + \|\chi\|. \quad (10.23)$$

Beweis. Auch (10.23) ist nur dann nicht trivial, wenn φ, χ beide vom Nullvektor verschieden sind. Wegen

$$\|\varphi + \chi\|^2 = \|\varphi\|^2 + \|\chi\|^2 + 2 \operatorname{Re}(\varphi, \chi)$$

und

$$-|(\varphi, \chi)| \leq \operatorname{Re}(\varphi, \chi) \leq |(\varphi, \chi)|$$

hat man zunächst:

$$\|\varphi\|^2 + \|\chi\|^2 - 2|(\varphi, \chi)| \leq \|\varphi + \chi\|^2 \leq \|\varphi\|^2 + \|\chi\|^2 + 2|(\varphi, \chi)|;$$

daraus folgt mit der Schwarzschen Ungleichung:

$$\left(\|\varphi\| - \|\chi\| \right)^2 \leq \|\varphi + \chi\|^2 \leq \left(\|\varphi\| + \|\chi\| \right)^2,$$

woraus sich unmittelbar die *Behauptung* ergibt.

\mathcal{H} vollständiger Raum: Zu jeder Cauchy-Folge von Vektoren $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m, \dots, \varphi_n, \dots \in \mathcal{H}$ existiert ein Limes $\varphi \in \mathcal{H}$:

$$\|\varphi_n - \varphi_m\| < \varepsilon, \quad n, m > N(\varepsilon)$$

$$\Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \|\varphi_n - \varphi\| = 0. \quad (10.24)$$

Starke Konvergenz. Den von Jelitto ebenfalls erörterten Begriff der *schwachen Konvergenz* benötigen wir nicht.

\mathcal{H} separabler Raum. Es gibt eine abzählbare Teilmenge, die in \mathcal{H} dicht liegt. \Leftrightarrow Es gibt eine abzählbare Basis in \mathcal{H} : $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_i, \dots \in \mathcal{H}$ mit $\varphi = \sum_i \alpha_i \varphi_i$ für beliebige

$\varphi \in \mathcal{H}$; insbesondere kann man die φ_i orthonormiert wählen, dann hat man ein VONS in \mathcal{H} . Siehe Jelitto 4, S. 244.

Beispiele für Hilbert-Räume:

L_2 : **Raum der (absolut) quadratintegrablen Funktionen:**

$$L_2 = \left\{ \psi = \psi(\vec{x}) \mid \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \right\}. \quad (10.25)$$

$\psi(\vec{x})$ komplexwertig; Integration nach *Lebesgueschem Maß*.

Dass L_2 *unitär*, d. h. ein Vektorraum mit komplexem inneren Produkt ist, wurde bereits zu Beginn von Kap. 6 festgestellt:

$$\begin{aligned} \varphi + \chi &:= \varphi(\vec{x}) + \chi(\vec{x}) \\ \alpha \varphi &:= \alpha \varphi(\vec{x}) \\ (\varphi, \chi) &:= \int d^3x \varphi^*(\vec{x}) \chi(\vec{x}) \quad \text{usw.} \end{aligned} \quad (10.26)$$

$\varphi(\vec{x}), \chi(\vec{x}) \in L_2$ impliziert Konvergenz des (φ, χ) -Integrals.

Der Raum L_2 ist auch *vollständig*: Limesfunktionen von Folgen Lebesgue-quadrat-integrabler Funktionen sind ihrerseits Lebesgue-quadratintegrabel und gehören somit wieder zu L_2 . Das gilt bei Beschränkung auf Riemann-quadratintegrable Funktionen im Allgemeinen nicht.

Schließlich ist der Raum L_2 *separabel*: Es gibt eine abzählbare Basis $\{\chi_n(\vec{x})\}$ in L_2 , z. B. das VONS der Energieeigenfunktionen des (dreidimensionalen) harmonischen Oszillators gemäß (7.50) oder (9.56). Dabei bedeutet

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \chi_n(\vec{x}) \quad (10.27)$$

nicht punktweise Konvergenz, sondern *Konvergenz im Mittel*:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3x |\psi(\vec{x}) - \sum_{n=1}^N \alpha_n \chi_n(\vec{x})|^2 = 0; \quad (10.28)$$

folglich können sich rechte und linke Seite von Gleichung (10.27) auf einer Punktmenge vom Lebesgue-Maße 0 voneinander unterscheiden. Daher Einteilung der L_2 -Elemente

in Äquivalenzklassen von Funktionen, die jeweils höchstens auf einer Punktmenge vom Lebesgue-Maße 0 voneinander verschieden sind.

Anmerkung: Riemann-Integrabilität \Rightarrow Lebesgue-Integrabilität mit gleichem Resultat. Die Umkehrung gilt nicht! Beispiel? Alle in dieser Vorlesung auftretenden L_2 -Funktionen sind Riemann-quadratintegabel, somit Lebesgue-quadratintegabel. L_2 -Funktionen, die zwar Lebesgue-quadratintegabel, aber nicht Riemann-quadratintegabel sind, kommen im folgenden (explizit) nicht vor.

Darstellung eigentlicher Quantenzustände in L_2 :

- Ortsdarstellung: $\psi(\vec{x}) \in L_2$, denn $\int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = 1$;
- Impulsdarstellung: $\varphi(\vec{p}) \in L_2$, denn $\int d^3p |\varphi(\vec{p})|^2 = 1$;

Sofern $\psi(\vec{x})$ und $\varphi(\vec{p})$ gemäß (2.41) durch Fourier-Transformation miteinander zusammenhängen, handelt es sich um zwei verschiedene Darstellungen eines und desselben Zustandes. Uneigentliche Quantenzustände, wie z. B. die ebenen Wellen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ bzw. $\delta(\vec{p} - \hbar\vec{k})$, sind *nicht* Elemente von L_2 !

l_2 : Raum der (absolut) quadratsummablen Spaltenvektoren:

$$l_2 = \left\{ c = (c_1, c_2, \dots, c_n, \dots)^T \mid \sum_n |c_n|^2 < \infty \right\}, \tag{10.29}$$

c_n komplex. Addition zweier Vektoren, Multiplikation eines Vektors mit einer (komplexen) Zahl, inneres Produkt:

$$\begin{aligned} c + d &:= (c_1 + d_1, c_2 + d_2, \dots, c_n + d_n, \dots)^T \\ \alpha c &:= (\alpha c_1, \alpha c_2, \dots, \alpha c_n, \dots)^T \\ (c, d) &:= \sum_n c_n^* d_n \qquad \text{usw.} \end{aligned} \tag{10.30}$$

$c, d \in l_2 \Rightarrow (c, d)$ -Summe konvergent. Axiome des *unitären* Vektorraumes erfüllt. l_2 ist

darüberhinaus *vollständig* (zeige das!) und *separabel*: Die Vektoren

$$\begin{aligned}
 & (1, 0, \dots, 0, \dots)^T \\
 & (0, 1, \dots, 0, \dots)^T \\
 & \dots\dots\dots \\
 & (0, 0, \dots, 1, \dots)^T \\
 & \dots\dots\dots
 \end{aligned} \tag{10.31}$$

bilden ein VONS in l_2 (zeige das!). Jelitto 4, S. 249, 250.

Isomorphie der Räume L_2 und l_2 : bijektive Zuordnung

$$\psi(\vec{x}) \longleftrightarrow (c_1, c_2, \dots, c_n, \dots)^T$$

so, dass Verknüpfungen (Addition, inneres Produkt usw.) zwischen \mathcal{H} -Elementen erhalten bleiben. Sei $\{\chi_n\}$ VONS in L_2 und $\psi \in L_2 \Rightarrow \psi = \sum_n c_n \chi_n \Rightarrow c = (c_1, c_2, \dots, c_n, \dots)^T \in l_2$. Umgekehrt sei $c \in l_2 \Rightarrow \psi = \sum_n c_n \chi_n \in L_2$. Also $\psi \leftrightarrow c$ mit z. B. *Erhaltung des inneren Produkts*:

$$\begin{aligned}
 \psi &= \sum_n c_n \chi_n, & \varphi &= \sum_n d_n \chi_n \\
 \Rightarrow & (\psi, \varphi) = \int d^3 x \psi^* \varphi \\
 &= \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* d_n \underbrace{\int d^3 x \chi_{n'}^* \chi_n}_{=\delta_{n'n}} \\
 &= \sum_n c_n^* d_n \\
 &= (c, d).
 \end{aligned} \tag{10.32}$$

Speziell folgt aus (10.32) die *Erhaltung der Norm*:

$$\int d^3 x |\psi|^2 = \sum_n |c_n|^2 \tag{10.33}$$

Man macht sich leicht klar, dass auch die Addition zweier Vektoren und die Multiplikation eines Vektors mit einer \mathbf{C} -Zahl unter $\psi \leftrightarrow c$ erhalten bleibt.

Darstellung eigentlicher Quantenzustände in l_2 : Betrachte z. B. in der Ortsdarstellung $\psi(\vec{x}) \in L_2$ und ein VONS $\{\chi_n(\vec{x})\}$ in L_2 . Entwickle $\psi(\vec{x}) = \sum_n \alpha_n \chi_n(\vec{x})$ mit $\alpha_n = (\chi_n, \psi)$. Darstellung des Zustandes durch $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots)^T \in l_2$. Falls es sich bei den $\chi_n(\vec{x})$ um die Eigenfunktionen einer Observablen A handelt, bezeichnet man α als die *A-Darstellung* des Zustandes, z. B. *Energiedarstellung* im Falle $A = H$. Wegen (10.33) ist $\|\alpha\| = \|\psi\|$. – Die *A-Darstellung* hängt nicht davon ab, dass der Zustand zunächst in der Ortsdarstellung $\psi(\vec{x})$ vorlag. Startet man nämlich stattdessen mit der entsprechenden Impulsdarstellung $\varphi(\vec{p})$ und entwickelt man nach den zu den $\chi_n(\vec{x})$ gemäß (2.41) gehörigen $\tilde{\chi}_n(\vec{p})$, so erhält man $\varphi(\vec{p}) = \sum_n \tilde{\alpha}_n \tilde{\psi}_n(\vec{p})$ mit $\tilde{\alpha}_n = (\tilde{\chi}_n, \varphi)$. Es ist aber $\tilde{\alpha}_n = \alpha_n$ (zeige das!); somit erhält man denselben Vektor $\tilde{\alpha} = \alpha \in l_2$. – Uneigentliche Zustände, z. B. die *A-Darstellung* von $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ bzw. $\delta(\vec{p} - \hbar\vec{k})$, liegen *nicht* in l_2 ; für diese gilt nämlich $\sum_n |\alpha_n|^2 = \infty$.

Neben der *A-Darstellung* gibt es entsprechend eine *B-Darstellung*, eine *C-Darstellung*, ... : die Entwicklungskoeffizienten der Zustandsfunktion nach den Eigenfunktionen der Observablen B, C, \dots . Alle diese Darstellungen in l_2 , zusammen mit der \vec{x} -Darstellung, der \vec{p} -Darstellung, ... in L_2 , sind äquivalente Beschreibungen eines und desselben (eigentlichen) Quantenzustandes. Sie können sämtlich in eindeutiger Weise ineinander umgerechnet werden.

Den beiden Möglichkeiten der Darstellung des Quantenzustandes als quadratsummable Zahlenfolgen in l_2 bzw. als quadratintegrale Funktionen in L_2 liegt ein **gemeinsames Konzept** zu Grunde: In beiden Fällen handelt es sich um die Entwicklungskoeffizienten der ψ -Funktion nach den Eigenfunktionen einer Observablen A . Dabei geht man von einer bestimmten Darstellung aus, z. B. der Ortsdarstellung. (Man könnte auch mit jeder beliebigen anderen Darstellung starten; dazu hätte man sich aber vorher mit der Darstellungstheorie von Operatoren zu befassen; siehe unten):

- A besitze ein **rein diskretes Spektrum** von Eigenwerten $a_n \Rightarrow$ Eigenfunktionen $\chi_n(\vec{x}) \in L_2$ mit $(\chi_{n'}, \chi_n) = \delta_{n'n}$ und vollständig (wegen A hermitesch): $\psi(\vec{x}) \in L_2 \Rightarrow \psi(\vec{x}) = \sum_n \alpha_n \chi_n(\vec{x})$ mit $\alpha_n = (\chi_n, \psi) \Rightarrow$ *A-Darstellung* $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots)^T \in l_2$, denn $\sum_n |\alpha_n|^2 = \|\psi\|^2 < \infty$. *Beispiel*: Energie des harmonischen Oszillators.

• A besitze ein **rein kontinuierliches Spektrum** von Eigenwerten $a(k) \Rightarrow$ Eigenfunktionen $\chi(k, \vec{x}) \notin L_2$ mit $(\chi(k'), \chi(k)) = \delta(k' - k)$ und vollständig (wegen A hermitesch): $\psi(\vec{x}) \in L_2 \Rightarrow \psi(\vec{x}) = \int dk \alpha(k) \chi(k, \vec{x})$ mit $\alpha(k) = (\chi(k), \psi) \Rightarrow A$ -Darstellung $\alpha = \alpha(k) \in L_2$, denn $\int dk |\alpha(k)|^2 = \|\psi\|^2 < \infty$. Beachte, dass die $\chi(k, \vec{x})$ zwar vollständig in dem Sinne sind, dass man alle $\psi(\vec{x}) \in L_2$ danach entwickeln kann, dass sie aber keine Basis *in* L_2 bilden, weil sie gar nicht zu L_2 gehören! *Beispiele* – siehe (6.43) bzw. (6.36):

$A = \vec{x}$: Eigenfunktionen $\chi(\vec{x}', \vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \notin L_2$ zu Eigenwerten $\vec{x}' \Rightarrow \psi(\vec{x}) = \int d^3 x' \alpha(\vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') \in L_2$ mit $\alpha(\vec{x}') = \psi(\vec{x}') \in L_2$: Ortsdarstellung.

$A = \vec{p}$: Eigenfunktionen $\chi(\vec{p}, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \notin L_2$ zu Eigenwerten $\vec{p} \Rightarrow \psi(\vec{x}) = \int d^3 p \alpha(\vec{p}) \chi(\vec{p}, \vec{x}) \in L_2$ mit $\alpha(\vec{p}) = \varphi(\vec{p}) \in L_2$: Impulsdarstellung.

• A besitze ein **teils diskretes, teils kontinuierliches Spektrum** von Eigenwerten $a_n, a(k) \Rightarrow$ Eigenfunktionen $\chi_n(\vec{x}) \in L_2$ und $\chi(k, \vec{x}) \notin L_2$, orthonormiert bzw. δ -orthonormiert und vollständig wegen (A hermitesch): $\psi(\vec{x}) \in L_2 \Rightarrow \psi(\vec{x}) = \sum_n \alpha_n \chi_n(\vec{x}) + \int dk \alpha(k) \chi(k, \vec{x}) \Rightarrow A$ -Darstellung $\alpha = ((\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \dots)^T, \alpha(k)) \in l_2 \oplus L_2$, denn $\sum_n |\alpha_n|^2 + \int dk |\alpha(k)|^2 = \|\psi\|^2 < \infty$. *Beispiel*: Energie des Wasserstoffatoms.

Im Hinblick auf das im 6. Kapitel formulierte „zentrale Postulat“ der QUM kann man sagen: Die A -Darstellung eines Zustandes wird von den Wahrscheinlichkeitsamplituden $\alpha_n, \alpha(k)$ für die Messung der erlaubten A -Werte, d. h. der Eigenwerte a_n bzw. $a(k)$, in diesem Zustand gebildet. $\psi(\vec{x})$ selbst ist ein spezielles Beispiel: Wahrscheinlichkeitsamplituden der \vec{x} -Messung, d. i. die Ortsdarstellung.

Auf Grund der vorstehenden Ausführungen gelangt man abstrahierend zu dem folgenden **Postulat** der Quantentheorie:

I. $\left\| \begin{array}{l} \text{Der } \mathbf{Zustand} \text{ eines physikalischen Systems (einer Gesamtheit} \\ \text{derartiger Systeme) ist durch einen Vektor } \psi \in \mathcal{H}, \text{ wo } \mathcal{H} \text{ ein} \\ \text{Hilbert-Raum ist, mit der Norm } \|\psi\| = 1 \text{ zu beschreiben.} \end{array} \right\|$

Hierzu sind einige *Anmerkungen* zu machen:

1. Die Zustandsbeschreibung durch ein $\psi \in \mathcal{H}$ gilt nur im Spezialfall *reiner Zustände*. Später haben wir es allgemeiner mit *Zustandsgemischen* zu tun, die durch einen *Statistischen Operator* zu beschreiben sind. Siehe *Statistische Physik, Quantenstatistik*.
2. Das Postulat gilt nicht nur für die bisher behandelten Einteilchensysteme, sondern für beliebige Mehrteilchen- (Vielteilchen-)Systeme ohne und mit Spin, Isospin, ...: Kerne, Atome, Moleküle, ... Gase, Flüssigkeiten, Festkörper, ...

3. Die uneigentlichen (zwar asymptotisch beschränkten, aber nicht auf 1 normierbaren) ψ -Funktionen, d. h. insbesondere die Kontinuumseigenfunktionen $\chi(k, \vec{x})$ (z. B. die stationären Streuzustände $\chi_k(\vec{x})$), sind nach dem Postulat keine erlaubten Zustände! Es gibt keinen Zustand, in dem das System mit Sicherheit den Kontinuumseigenwert $a(k)$ als Messwert (der Observablen A) besitzt. Dagegen ist das *Wellenpaket*

$$\chi^{\Delta k}(k, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} \int_k^{k+\Delta k} dk' \chi(k', \vec{x}) \quad (10.34)$$

auf 1 normiert (sofern die $\chi(k, \vec{x})$ δ -orthonormiert sind) und somit ein erlaubter Zustand. Dass man gleichwohl mit der einfacheren Eigenfunktion $\chi(k, \vec{x})$ statt mit dem Eigenpaket $\chi^{\Delta k}(k, \vec{x})$ rechnet, ist dadurch gerechtfertigt, dass man $\chi(k, \vec{x})$ durch $\chi^{\Delta k}(k, \vec{x})$ für hinreichend kleines Δk beliebig gut approximieren kann. Siehe hierzu Jelitto 4, S. 99 und Grawert, Kap. 2.5 (Ende).

4. Die A -Darstellung von ψ ist durch $\alpha = \{(\chi_n, \psi), (\chi(k), \psi)\} \in l_2, L_2, l_2 \oplus L_2$ in der oben ausführlich erläuterten Weise gegeben. Die Ortsdarstellung $\psi(\vec{x}) \in L_2$ ist ein wichtiger Spezialfall.

Man kann die verschiedenen Darstellungen von ψ ineinander umrechnen: *Beispiel:* A -Darstellung $\alpha = (\dots \alpha_n, \dots)^T$ mit $\alpha_n = (\chi_n, \psi)$ und B -Darstellung $\beta = (\dots \beta_m, \dots)^T$ mit $\beta_m = (\varphi_m, \psi)$; der Zusammenhang ist

$$\beta_m = \sum_n (\varphi_m, \chi_n) \alpha_n, \quad \alpha_n = \sum_m (\chi_n, \varphi_m) \beta_m. \quad (10.35)$$

Wieso? Im Falle kontinuierlicher Darstellungen erhält man analoge Transformationsformeln. *Beispiel:* Fourier-Transformation (2.41) zwischen Orts- und Impulsdarstellung $\psi(\vec{x})$ bzw. $\varphi(\vec{p})$. Inwiefern? Übersichtliche Darstellung der Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Darstellungen mit Hilfe der

Dirac-Notation. Vektoren $\varphi, \psi, \dots \in \mathcal{H}$ mit $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \dots$ bezeichnet: *ket-Vektoren*. Für die mit $\varphi, \psi, \dots \in \mathcal{H}$ gebildeten (linearen) Funktionale $L(\varphi), L(\psi), \dots : \mathcal{H} \rightarrow \mathbf{C}$, die durch $L(\varphi)\chi = (\varphi, \chi), L(\psi)\chi = (\psi, \chi), \dots \chi \in \mathcal{H}$ definiert sind, schreibt man $\langle\varphi|, \langle\psi|, \dots$ und nennt sie *bra-Vektoren*. Es handelt sich dabei um Elemente des zu \mathcal{H} dualen Hilbert-Raumes \mathcal{H}^* ; dieser ist zu \mathcal{H} isomorph. Somit wird das innere Produkt zu einem „bra(c)ket“ $\langle\varphi|\psi\rangle$.

Eigenwertproblem:

$$\begin{aligned} A\chi_n &= a_n \chi_n & \longrightarrow & A|n\rangle = a_n |n\rangle \\ A\chi(k) &= a(k) \chi(k) & \longrightarrow & A|k\rangle = a(k) |k\rangle \end{aligned} \quad (10.36)$$

Orthonormierung:

$$\begin{aligned}
 (\chi_{n'}, \chi_n) = \delta_{n'n} & \quad \longrightarrow \quad \langle n' | n \rangle = \delta_{n'n} \\
 (\chi(k'), \chi(k)) = \delta(k' - k) & \quad \longrightarrow \quad \langle k' | k \rangle = \delta(k' - k)
 \end{aligned}
 \tag{10.37}$$

Vollständigkeit:

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle + \int dk |k\rangle \langle k|\psi\rangle \\
 \Rightarrow \sum_n |n\rangle \langle n| + \int dk |k\rangle \langle k| &= \mathbb{1} .
 \end{aligned}
 \tag{10.38}$$

Bezeichnung dieser Gleichung als *Zerlegung der Einheit (Identität)*.

Unter der *A-Darstellung* des Zustandes $\psi \in \mathcal{H}$ versteht man die (abzählbar vielen) Amplituden $\langle n|\psi\rangle$ und/oder die (überabzählbar vielen) Amplituden $\langle k|\psi\rangle$. Man schreibt auch $|a_n\rangle$, $|a(k)\rangle$, also $\langle a_n|\psi\rangle$ bzw. $\langle a(k)|\psi\rangle$, um die Beziehung zur Observablen A und deren Mess-(Eigen-)Werten zu verdeutlichen.

- $A = \vec{x}$:

$$\vec{x}_{op} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle$$

mit

$$\langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x})$$

und

$$\int |\vec{x}\rangle d^3x \langle \vec{x}| = \mathbb{1} . \tag{10.39}$$

Im Zustand $|\vec{x}\rangle$ befindet sich das Teilchen mit Sicherheit an der Stelle \vec{x} . Genau genommen ist das falsch: $|\vec{x}\rangle \notin \mathcal{H}$, einen derartigen Zustand gibt es gar nicht. In einem Kontinuum möglicher \vec{x} -Werte kann nicht ein bestimmtes \vec{x} mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit auftreten! Trotzdem rechnet man bequemlichkeitshalber mit uneigentlichen Zuständen $|\vec{x}\rangle$, weil sie beliebig gut durch eigentliche Zustände $\int_{U(\vec{x})} |\vec{x}'\rangle d^3x' \in \mathcal{H}$, wo $U(\vec{x})$ eine kleine Umgebung von \vec{x} ist, approximiert werden können. (Die Wahrscheinlichkeit, dass \vec{x} in einem U liegt, kann positiv sein.) – Zur Ortsdarstellung eines beliebigen Zustandes $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$ gelangt man durch Projektion von $|\psi\rangle$ auf die $|\vec{x}\rangle$ -„Basis“: $\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(\vec{x}) \in L_2$. Das ist die ursprünglich

eingeführte, auf 1 normierte Wellenfunktion; mit (10.39) erhält man nämlich:

$$\begin{aligned} \int d^3 x \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) &= \int \langle \psi | \vec{x} \rangle d^3 x \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \psi \rangle \\ &= 1 . \end{aligned} \tag{10.40}$$

• $A = \vec{p}$:

$$\vec{p}_{op} | \vec{p} \rangle = \vec{p} | \vec{p} \rangle$$

mit

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

und

$$\int | \vec{p} \rangle d^3 p \langle \vec{p} | = \mathbb{1} . \tag{10.41}$$

Kommentierung der Zustände $| \vec{p} \rangle$ analog den Zuständen $| \vec{x} \rangle$. \vec{p} -Darstellung: $\langle \vec{p} | \psi \rangle = \varphi(\vec{p})$ usw. Die Ortsdarstellung der Zustände $| \vec{p} \rangle$ (der \vec{p} -Eigenfunktionen) sind die ebenen Wellen:

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} . \tag{10.42}$$

Zusammenhang von Orts- und Impulsdarstellung – mit (10.41, 42):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= \int \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle d^3 p \langle \vec{p} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \varphi(\vec{p}) \end{aligned} \tag{10.43}$$

bzw. – mit (10.39, 42):

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \psi \rangle \\ &= \int \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle d^3 x \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) . \end{aligned} \tag{10.44}$$

Das ist die Fourier-Transformation (2.41 a, b). Vgl. (10.35) •

In den bisherigen QUM-Darlegungen spielten **Operatoren** eine zentrale Rolle: Orts-, Impuls-, Hamilton-Operator, ... – zumeist in der Ortsdarstellung gegeben – zur Beschreibung der entsprechenden Observablen. Wie beim darstellungsfreien $\psi \in \mathcal{H}$ müssen wir uns nun mit dem abstrakten Konzept des *Operators im Hilbert-Raum* befassen; anschließend mit den Darstellungen von Operatoren und den Transformationen zwischen diesen Darstellungen.

Ein Operator A im Hilbert-Raum ist definiert durch

- eine *Abbildungsvorschrift*

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \chi \mapsto \varphi = A\chi, \quad (10.45)$$

- einen *Definitionsbereich* $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}$. Es gibt Operatoren mit $\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}$; im Allgemeinen ist jedoch $\mathcal{D}(A)$ echt kleiner als \mathcal{H} : $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}$. Zu beachten ist, dass $\mathcal{D}(A)$ nur diejenigen $\chi \in \mathcal{H}$ enthält, deren Bilder $\varphi = A\chi$ wieder in \mathcal{H} liegen. Für den *Wertebereich (Bildbereich)* soll also gelten: $\mathcal{W}(A) \subseteq \mathcal{H}$, wobei wieder beide Fälle $\mathcal{W}(A) = \mathcal{H}$ und $\mathcal{W}(A) \subset \mathcal{H}$ möglich sind.

Zwei Operatoren A, A' sind genau dann gleich: $A = A'$, wenn sie in puncto Abbildungsvorschrift *und* in puncto Definitionsbereich miteinander übereinstimmen.

Bezüglich des Definitionsbereiches gilt (wird vorausgesetzt) im folgenden stets:

- $\mathcal{D}(A)$ liegt *dicht* in \mathcal{H} : Zu jedem $\psi \in \mathcal{H}$ und $\varepsilon > 0$ gibt es $\chi \in \mathcal{D}(A)$ mit $\|\chi - \psi\| < \varepsilon$.
- $\mathcal{D}(A)$ ist *Linearmannigfaltigkeit*:

$$\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n \in \mathcal{D}(A) \Rightarrow \sum_{\nu=1}^n \beta_\nu \chi_\nu \in \mathcal{D}(A), \quad \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n \in \mathbf{C}.$$

Beispiele: Die Operatoren \vec{x} und $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$ und daraus gebildete Polynome im Hilbert-Raum L_2 . (*)

Alle Operatoren der QUM sind **linear**:

$$A(\alpha\varphi + \beta\chi) = \alpha(A\varphi) + \beta(A\chi), \quad (10.46)$$

$\alpha, \beta \in \mathbf{C}, \varphi, \chi \in \mathcal{D}(A)$. Für die Einschränkung auf die Linearität spricht die (relative) mathematische Einfachheit dieser Operatoren. Wichtige physikalische Konsequenzen: Superpositionsprinzip, ... Die Beispiele sind sämtlich linear.

Der zu A **adjungierte** Operator A^+ ist wie folgt definiert: Sei $\varphi \in \mathcal{D}(A)$. Betrachte diejenigen $\chi \in \mathcal{H}$, zu denen es $\tilde{\chi}$ gibt mit

$$(\chi, A\varphi) = (\tilde{\chi}, \varphi) . \quad (10.47)$$

Die Menge der χ bildet den Definitionsbereich $\mathcal{D}(A^+)$ eines Operators A^+ mit der Abbildungsvorschrift

$$A^+ : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \chi \mapsto \tilde{\chi} = A^+ \chi . \quad (10.48)$$

Aus (10.47, 48) folgt für beliebige $\varphi \in \mathcal{D}(A)$, $\chi \in \mathcal{D}(A^+)$:

$$(\chi, A\varphi) = (A^+ \chi, \varphi) = (\varphi, A^+ \chi)^* . \quad (10.49)$$

Der Operator heißt **hermitesch**, wenn $\mathcal{D}(A^+) \supseteq \mathcal{D}(A)$ und $A^+ \varphi = A\varphi$ für alle $\varphi \in \mathcal{D}(A)$ gilt; dann ist

$$(\chi, A\varphi) = (A\chi, \varphi) \quad (10.50)$$

für alle $\varphi, \chi \in \mathcal{D}(A)$, folglich

$$(\varphi, A\varphi) = (\varphi, A\varphi)^* \quad (10.51)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{D}(A)$, d. h. die *Erwartungswerte* von A sind *reell*. Will man qum. Observablen durch Operatoren A beschreiben und will man den Erwartungswert von A im Zustand φ als Mittelwert einer A -Messung an den Systemen der im Zustand befindlichen Gesamtheit deuten, so hat man Hermitizität für die Operatoren A zu fordern. Die Beispiele (*) sind im Allgemeinen *nicht* hermitesch, z. B. nicht $A = \vec{x} \cdot \vec{p}$; jedoch sind \vec{x} , \vec{x}^2 , ... $f(\vec{x})$, \vec{p} , \vec{p}^2 , ... $g(\vec{p})$, $\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$, $A = 1/2(\vec{x} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{x})$, die Hamilton-Operatoren $H = \vec{p}^2/2m + V(\vec{x})$, ... hermitesch.

Man muss von den die Observablen kennzeichnenden Operatoren noch mehr verlangen! Ein hermitescher Operator heißt **selbstadjungiert**, wenn $\mathcal{D}(A^+) = \mathcal{D}(A)$ ist, wenn also gilt:

$$A^+ = A . \quad (10.52)$$

Die obigen hermiteschen Beispiele sind selbstadjungiert. Selbstadjungierte Operatoren haben eine für die physikalische Interpretation sehr wichtige Eigenschaft: Sie besitzen eine sog. **Spektraldarstellung**. Was das genau bedeutet, wird später besprochen. Grob gesagt, heißt es: Selbstadjungierte Operatoren besitzen ein vollständiges System von Eigenvektoren zu einem reellen Spektrum von Eigenwerten. (Das mathematische Problem liegt darin, dass die uneigentlichen Eigenvektoren des kontinuierlichen Spektrums nicht in \mathcal{H} somit nicht in $\mathcal{D}(A)$ liegen und folglich strenggenommen gar keine Eigenvektoren

sind.) Die physikalischen Konsequenzen betr. Messwerte und Messwahrscheinlichkeiten der Observablen A wurden in Kap. 6 dargelegt. Man hat also nicht nur Hermitezität, sondern darüber hinaus Selbstadjungiertheit der die Observablen kennzeichnenden Operatoren zu fordern!

Anmerkung: Wichtige Observablen der QUM sind nur „wesentlich“ selbstadjungiert: zwar $A^+ \neq A$, aber $A^{++} = A^+$. Aus $A^+ = A$ folgt $A^{++} = A^+$, jedoch nicht umgekehrt. Für die Existenz der Spektraldarstellung genügt die schwächere Voraussetzung der wesentlichen Selbstadjungiertheit. Wir lassen diesen Unterschied im folgenden außer acht. Siehe Jelitto 4, S. 256.

Darstellung von Operatoren: Wie die abstrakten Zustandsvektoren $\psi \in \mathcal{H}$, so kann man auch die abstrakten Observablenoperatoren $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ auf verschiedene Weisen darstellen. Im folgenden soll geklärt werden, was man unter der *B-Darstellung von A* versteht; dabei ist B eine beliebige qum. Observable (kann z. B. auch A sein). Ausgangspunkt ist (10.45) in Dirac-Notation:

$$A |\chi\rangle = |\varphi\rangle . \quad (10.53)$$

Zur B -Darstellung von A gelangt man durch Projektion dieser Gleichung auf die Eigenvektoren von B und Beachtung von deren Vollständigkeit.

- B habe ein *rein diskretes Spektrum*:

$$B |b_n\rangle = b_n |b_n\rangle$$

mit

$$\sum_n |b_n\rangle \langle b_n| = \mathbb{1} ; \quad (10.54)$$

damit folgt aus (10.53):

$$\sum_n \langle b_{n'}|A|b_n\rangle \langle b_n|\chi\rangle = \langle b_{n'}|\varphi\rangle . \quad (10.55)$$

Unter der B -Darstellung von A versteht man die $\infty \times \infty$ -Matrix

$$A_{n'n} = \langle b_{n'}|A|b_n\rangle . \quad (10.56)$$

Da es sich bei den Spaltenvektoren $c_n = \langle b_n|\varphi\rangle$, $d_n = \langle b_n|\chi\rangle$ um die B -Darstellung der Vektoren $|\varphi\rangle$ bzw. $|\chi\rangle$ handelt, bezeichnet man Gleichung (10.55):

$$\sum_n A_{n'n} d_n = c_{n'} , \quad (10.57)$$

als B -Darstellung der darstellungsfreien Gleichung (10.53). \Rightarrow Bezeichnung der QUM als *Matrizenmechanik*.

In dem wichtigen Spezialfall $B = A$ ist

$$A_{n'n} = a_n \langle a_{n'} | a_n \rangle = a_n \delta_{n'n} . \quad (10.58)$$

Die *Eigendarstellung* von A ist eine Diagonalmatrix; auf der Diagonalen stehen die Eigenwerte von A .

Beispiel: Drehimpulskomponenten J_1, J_2, J_3 in der $|j m\rangle$ -Basis; d. i. die J^2, J_3 -Basis. Nach (8.103) ist

$$J_1 = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \quad (10.59)$$

$$J_2 = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-) ;$$

ferner nach (8.118):

$$J_{\pm} |j m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle . \quad (10.60)$$

Damit folgt für die J_1, J_2 -Matrizen:

$$\begin{aligned} \langle j' m' | J_1 | j m \rangle &= \frac{\hbar}{2} \delta_{j'j} \left(\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m',m+1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m',m-1} \right) \end{aligned} \quad (10.61)$$

$$\begin{aligned} \langle j' m' | J_2 | j m \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \delta_{j'j} \left(\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m',m+1} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m',m-1} \right) . \end{aligned}$$

Die J_3 -Matrix ist (in ihrer Eigenbasis) diagonal:

$$\langle j' m' | J_3 | j m \rangle = \hbar m \delta_{j'j} \delta_{m'm} . \quad (10.62)$$

Speziell im zweidimensionalen $j = 1/2$ -Unterraum erhält man die 2×2 -Matrizen:

$$J_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad J_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad J_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (10.63)$$

Man erkennt die Selbstadjungiertheit: $J_k^T = J_k^*$, $k = 1, 2, 3$ •

Unter der C -Darstellung von A versteht man (sofern C ebenfalls ein rein diskretes Spektrum besitzt) diejenige Matrix, deren Elemente entsprechend (10.56) mit den Eigenvektoren $|c_n\rangle$ der Observablen C gebildet werden:

$$\tilde{A}_{n'n} = \langle c_{n'} | A | c_n \rangle . \quad (10.64)$$

Man kann die C -Darstellung aus der B -Darstellung berechnen:

$$\tilde{A}_{n'n} = \sum_{m', m} \langle c_{n'} | b_{m'} \rangle A_{m'm} \langle b_m | c_n \rangle \quad (10.65)$$

– und umgekehrt. Führe die Rechnung durch!

Die Eigenwerte der Observablen A sind unabhängig von ihrer Darstellung:

$$A | a_n \rangle = a_n | a_n \rangle \quad (10.66)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \sum_m A_{m'm} \langle b_m | a_n \rangle &= a_n \langle b_{m'} | a_n \rangle \\ \sum_m \tilde{A}_{m'm} \langle c_m | a_n \rangle &= a_n \langle c_{m'} | a_n \rangle , \end{aligned} \quad (10.67)$$

d. i. die Eigenwertgleichung (10.66) in B - bzw. in C -Darstellung mit jeweils denselben Eigenwerten a_n . Diese Invarianz der a_n ist notwendige Voraussetzung für ihre Interpretation als mögliche Messwerte von A . Die Eigenvektoren sind hingegen von Darstellung zu Darstellung verschieden.

• B habe ein *rein kontinuierliches Spektrum*:

$$B | b(k) \rangle = b(k) | b(k) \rangle$$

mit

$$\int | b(k) \rangle dk \langle b(k) | = \mathbb{1} ; \quad (10.68)$$

damit wird aus (10.53):

$$\int \langle b(k') | A | b(k) \rangle \langle b(k) | \chi \rangle dk = \langle b(k') | \varphi \rangle . \quad (10.69)$$

Unter der B -Darstellung von A versteht man in diesem Fall die „kontinuierliche Matrix“

$$A(k', k) = \langle b(k') | A | b(k) \rangle . \quad (10.70)$$

Da es sich bei den Funktionen $\varphi(k) = \langle b(k)|\varphi\rangle$, $\chi(k) = \langle b(k)|\chi\rangle$ um die B -Darstellung der Vektoren $|\varphi\rangle$ bzw. $|\chi\rangle$ handelt, bezeichnet man Gleichung (10.69):

$$\int A(k', k) \chi(k) dk = \varphi(k') \quad (10.71)$$

– entsprechend (10.57) – als B -Darstellung der darstellungsfreien Gleichung (10.53).

Im speziellen Fall $B = A$ ist

$$A(k', k) = a(k) \langle a(k')|a(k)\rangle = a(k) \delta(k' - k); \quad (10.72)$$

die *Eigendarstellung* von A ist auch hier „diagonal“.

Beispiel: Ortsdarstellung des Impulsoperators. Mit (10.41, 42) erhält man

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | \vec{p}_{op} | \vec{x} \rangle &= \int \int \langle \vec{x}' | \vec{p}' \rangle d^3 p' \underbrace{\langle \vec{p}' | \vec{p}_{op} | \vec{p} \rangle}_{= \vec{p} \delta(\vec{p}' - \vec{p})} d^3 p \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \\ &= \int \langle \vec{x}' | \vec{p} \rangle \vec{p} \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle d^3 p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \vec{p} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} d^3 p \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} d^3 p \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta(\vec{x}' - \vec{x}). \end{aligned}$$

Anwendung dieser „Matrix“ auf eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$:

$$\begin{aligned} \int \langle \vec{x}' | \vec{p}_{op} | \vec{x} \rangle \psi(\vec{x}) d^3 x &= -\frac{\hbar}{i} \int \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \right) \psi(\vec{x}) d^3 x \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}) d^3 x \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}'} \psi(\vec{x}') \end{aligned} \quad (10.74)$$

mit partieller Integration im zweiten Schritt. Das ist der bekannte Impulsoperator in der Ortsdarstellung! Dieser Differentialoperator passt also auch in das „Matrizenschema“.

Auch der Ortsoperator passt in diesen Kalkül. In der Ortsdarstellung (Eigendarstellung) hat man

$$\langle \vec{x}' | \vec{x}_{op} | \vec{x} \rangle = \vec{x} \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \quad (10.75)$$

d. i. eine „Diagonalmatrix“. Anwendung auf eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ ergibt:

$$\begin{aligned} \int \langle \vec{x}' | \vec{x}_{op} | \vec{x} \rangle \psi(\vec{x}) d^3 x &= \int \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \vec{x} \psi(\vec{x}) d^3 x \\ &= \vec{x}' \psi(\vec{x}') , \end{aligned} \quad (10.76)$$

das ist der bekannte Multiplikationsoperator. – Diskutiere in gleicher Weise Orts- und Impulsoperator in der Impulsdarstellung.

• Wenn B ein *teils diskretes, teils kontinuierliches Spektrum* besitzt, besteht die A -Matrix aus einem diskreten und einem kontinuierlichen Anteil. Wir geben die entsprechenden Formeln hier nicht an. Siehe Jelitto 4, S. 236.

Die vorstehenden Ausführungen gestatten es, abstrakte Operatorgleichungen in verschiedenen Darstellungen (je nach Bedarf) zu formulieren, z. B. die eindimensionale **Heisenbergsche Vertauschungsrelation**

$$[x, p] = i \hbar . \quad (10.77)$$

Ortsdarstellung:

$$x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x = i \hbar ; \quad (10.78)$$

Impulsdarstellung:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} p + p \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} = i \hbar ; \quad (10.79)$$

diskrete B -Darstellung:

$$\sum_m (x_{n'm} p_{mn} - p_{n'm} x_{mn}) = i \hbar \delta_{n'n} \quad (10.80)$$

mit $x_{mn} = \langle b_m | x | b_n \rangle$ usw. Hinter den drei Darstellungen (10.78, 79, 80) steht die darstellungsfreie Aussage (10.77).

Eine von speziellen Darstellungen abstrahierende Zusammenfassung der vorstehenden

Ausführungen liefert ein weiteres **Postulat** der QUM:

II. Die **Observablen** eines physikalischen Systems sind durch selbstadjungierte Operatoren $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ im Hilbert-Raum der Zustandsvektoren zu beschreiben. Von den Operatoren des Ortes \vec{x} und des Impulses \vec{p} wird zusätzlich verlangt, dass sie den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (4.26) genügen:

$$[x_j, p_k] = i \hbar \delta_{jk}, \quad [x_j, x_k] = 0, \quad [p_j, p_k] = 0, \quad (10.81)$$

und dass sie ein rein kontinuierliches Spektrum in ganz \mathbb{R} besitzen:

$$-\infty < x_j < +\infty, \quad -\infty < p_k < +\infty. \quad (10.82)$$

Observablen mit klm. Analogon $A(\vec{x}, \vec{p})$ werden durch diejenigen selbstadjungierten Operatoren gekennzeichnet, die entstehen, wenn man \vec{x} und \vec{p} (in geeigneter Weise) durch die entsprechenden qum. Operatoren ersetzt.

Dazu sind wieder einige *Anmerkungen* zu machen:

1. Das Postulat gilt nicht nur für die bisher behandelten Einteilchensysteme, sondern auch für die Observablen von N -Teilchensystemen; z. B. Gesamtimpuls, Gesamtdrehimpuls, Gesamtenergie, ... derartiger Systeme; in diesem Fall ist $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{3N})$ und $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_{3N})$.
2. Satz 1 des Postulates gilt auch für diejenigen qum. Observablen, die kein klm. Analogon in Form einer Phasenraumfunktion $A(\vec{x}, \vec{p})$ besitzen, z. B. für den Spin.
3. Die verschiedenen Darstellungen von A ergeben sich durch „Sandwichen“ des Operators mit den diversen Eigenvektorsystemen – in der vorstehend beschriebenen Weise.

Das erste Postulat handelt von den Zuständen ψ , das zweite Postulat von den Observablen A eines Systems. In einem dritten Postulat werden (siehe unten) die Begriffe *Zustand* und *Observable* zusammengeführt in Beantwortung der Frage: Was ergibt die Messung der Observablen A im Zustand ψ ? Die Beantwortung wird im wesentlichen in dem „zentralen Postulat“ des 6. Kapitels bestehen – nur in abstrakter (darstellungsfreier) Form. Zur Vorbereitung ist zu reden über

Projektionsoperatoren. Gegeben sei ein Unterraum $h \supseteq \mathcal{H}$, darin ein VONS

$\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_\nu, \dots$ Projektion auf h :

$$P_h \psi = \sum_{\nu} \chi_{\nu} (\chi_{\nu}, \psi) \quad (10.83)$$

für beliebige $\psi \in \mathcal{H}$. Der *Projektor* P_h ist ein *linearer* Operator; sein Definitionsbereich ist der ganze Hilbert-Raum: $\mathcal{D}(P_h) = \mathcal{H}$. In Dirac-Notation hat man

$$P_h = \sum_{\nu} |\chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu}| . \quad (10.84)$$

P_h hängt nur von h ab, nicht von der in h gewählten Basis. Sei $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{\mu}, \dots$ ein anderes VONS in h , dann ist

$$\begin{aligned} |\chi_{\nu}\rangle &= \sum_{\mu} |\varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu} | \chi_{\nu}\rangle \\ \Rightarrow \sum_{\nu} |\chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu}| &= \sum_{\mu', \mu, \nu} |\varphi_{\mu'}\rangle \langle \varphi_{\mu'} | \chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu} | \varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu}| . \end{aligned} \quad (10.85)$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned} |\varphi_{\mu}\rangle &= \sum_{\nu} |\chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu} | \varphi_{\mu}\rangle \\ \Rightarrow \langle \varphi_{\mu'} | \varphi_{\mu}\rangle &= \sum_{\nu} \langle \varphi_{\mu'} | \chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu} | \varphi_{\mu}\rangle = \delta_{\mu' \mu} . \end{aligned} \quad (10.86)$$

Aus (10.85, 86) folgt

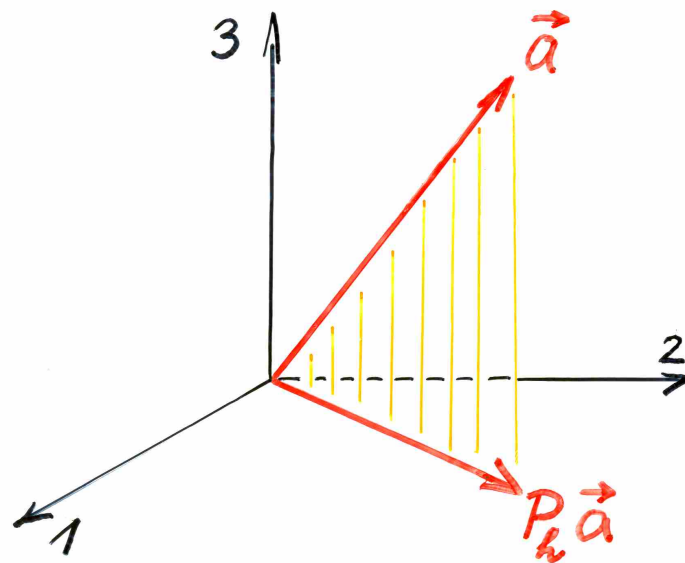
$$\sum_{\nu} |\chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu}| = \sum_{\mu} |\varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu}| , \quad (10.87)$$

was zu beweisen war.

Erläuterung im Euklidischen Vektorraum E_3 . Sei h die von \hat{x}_1, \hat{x}_2 aufgespannte Ebene:

$$\begin{aligned} P_h \vec{a} &= \hat{x}_1 (\hat{x}_1 \cdot \vec{a}) + \hat{x}_2 (\hat{x}_2 \cdot \vec{a}) \\ \Rightarrow P_h &= \hat{x}_1 \hat{x}_1 + \hat{x}_2 \hat{x}_2 ; \end{aligned} \quad (10.88)$$

Tensor, Dyade. Projektion unabhängig von der in der Ebene gewählten Basis.



• Abbildung 10.2 •

Eigenschaften der Projektoren:

- Für $h = \mathcal{H}$ ist P_h der *Einsoperator*, die *Identität*:

$$P_{\mathcal{H}} = \mathbb{1} . \tag{10.89}$$

(10.84) geht in diesem Fall in die *Vollständigkeitsrelation*

$$\sum_{\nu} |\chi_{\nu}\rangle \langle \chi_{\nu}| = \mathbb{1} \tag{10.90}$$

über; vgl. (10.38). h kann auch eindimensional sein: $P_{\varphi} = |\varphi\rangle \langle \varphi|$ projiziert auf den von $\varphi \in \mathcal{H}$, $\|\varphi\| = 1$, aufgespannte *Strahl*.

- Jeder Projektor ist *selbstadjungiert*:

$$P^{+} = P \tag{10.91}$$

und *idempotent*:

$$P^2 = P . \tag{10.92}$$

Beweis? Umgekehrt: Ein auf ganz \mathcal{H} definierter Operator mit den Eigenschaften (10.91, 92) ist ein Projektor! Der zu P^{-1} inverse Operator P existiert nicht. Warum nicht?

• Gegeben seien zwei Projektoren P und Q . Die *Summe* $P + Q$ ist genau dann ein Projektor, wenn $PQ = 0$ ist; das *Produkt* PQ ist genau dann ein Projektor, wenn $[P, Q] = 0$ ist. Beweis und Veranschaulichung in den Übungen.

• *Eigenwertproblem.* Für den Projektor P_h gilt

$$P_h \psi = \begin{cases} \psi & \psi \in h \\ 0 & \psi \in \tilde{h} \end{cases} \quad (10.93)$$

mit $h \oplus \tilde{h} = \mathcal{H}$ und $h \perp \tilde{h}$; \tilde{h} wird als *Orthogonalkomplement* von h bezeichnet. P_h hat also die Eigenwerte 1 zum Eigenraum h und 0 zum Eigenraum \tilde{h} . Für den Projektor $P_{\tilde{h}}$ gilt das Umgekehrte. Wegen (10.90) ist

$$P_h + P_{\tilde{h}} = \mathbb{1} . \quad (10.94)$$

• *Erwartungswerte* von P_h wegen (10.91) reell. Sei $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$. Einerseits ist wegen (10.92):

$$\langle \psi | P_h | \psi \rangle = \|P_h \psi\|^2 \geq 0 ; \quad (10.95)$$

andererseits hat man wegen (10.94, 92)

$$\langle \psi | P_h | \psi \rangle = 1 - \|P_{\tilde{h}} \psi\|^2 \leq 1 ; \quad (10.96)$$

insgesamt folgt

$$0 \leq \langle \psi | P_h | \psi \rangle \leq 1 . \quad (10.97)$$

Sei $h \subset h'$, dann gilt $\langle \psi | P_h | \psi \rangle \leq \langle \psi | P_{h'} | \psi \rangle$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$; man schreibt dafür $P_h < P_{h'}$.

Physikalische Interpretation. P_h kennzeichnet eine Observable mit den Messwerten 1 und 0. Bei der Messung wird festgestellt, ob die *Eigenschaft* h des Systems vorliegt oder nicht (Zustand in h bzw. Zustand im Orthogonalkomplement von h): *ja* entspricht dem Eigenwert 1, *nein* entspricht dem Eigenwert 0. Der Erwartungswert – gedeutet als Mittelwert der 1, 0-Resultate an den Systemen der durch ψ beschriebenen Gesamtheit – ist dann die *Messwahrscheinlichkeit* für die Eigenschaft h .

Beispiel: $h = h_n$ sei der zum Eigenwert a_n einer Observablen A gehörige Eigenraum. Damit ist $\langle \psi | P_h | \psi \rangle$ die Wahrscheinlichkeit dafür, bei A -Messung im Zustand ψ den Wert a_n festzustellen. Falls h mehrere Eigenräume umfasst: $h = \dots \oplus h_n \oplus h_{n'} \oplus \dots$, ist $\langle \psi | P_h | \psi \rangle$ als Messwahrscheinlichkeit für einen Wert aus $\dots a_n, a_{n'}, \dots$ zu deuten. Für

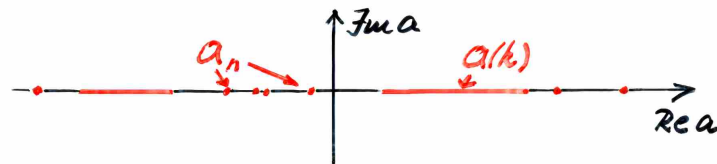
$h = \mathcal{H}$ ist $\langle \psi | P_h | \psi \rangle = 1$ (siehe (10.89)), das heißt: Mit Sicherheit stellt man bei A -Messung einen erlaubten A -Wert fest!

Wir kehren zum qum. **Eigenwertproblem** zurück; vgl. Kap. 6. Für den selbstadjungierten Operator $A = A^\dagger$ hat man in Dirac-Notation (10.36):

$$A |n\rangle = a_n |n\rangle \tag{10.98}$$

$$A |k\rangle = a(k) |k\rangle$$

mit eigentlichen Eigenvektoren $|n\rangle \in \mathcal{H}$ und uneigentlichen Eigenvektoren $|k\rangle \notin \mathcal{H}$. Die entsprechenden a_n und $a(k)$ bilden den diskreten bzw. kontinuierlichen Teil des Spektrums von A :



• Abbildung 10.3 •

Sie liegen auf der reellen Achse der komplexen a -Ebene. Das System der Eigenvektoren ist vollständig und orthonormiert bzw. δ -orthonormiert: ein VONS.

Bei Einführung der *Projektoren*

$$P_n = |n\rangle \langle n| \tag{10.99}$$

bzw. der *Projektordichte*

$$P(k) = |k\rangle \langle k| \tag{10.100}$$

nimmt die *Vollständigkeitsrelation* (10.38) folgende Gestalt an:

$$\sum_n P_n + \int dk P(k) = \mathbb{1} . \tag{10.101}$$

P_n projiziert auf den zu a_n gehörigen Eigenraum $h_n \subset \mathcal{H}$; dieser ist im Allgemeinen mehrdimensional (Entartung). $\int dk P(k)$ projiziert auf den zu Δk gehörigen Eigenraum $h_{\Delta k} \subset \mathcal{H}$; auch die $a(k)$ sind im Allgemeinen entartet.

Bei Anwendung von A auf (10.101) gelangt man mit (10.98 - 100) zur **Spektraldarstellung** der Observablen A :

$$A = \sum_n a_n P_n + \int dk a(k) P(k) . \quad (10.102)$$

Bildet man mit beliebigem, auf 1 normiertem $\psi \in \mathcal{H}$ den Erwartungswert der Operatorgleichungen (10.101, 102), so erhält man:

$$\sum_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle + \int dk \langle \psi | P(k) | \psi \rangle = 1 \quad (10.103)$$

und

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n a_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle + \int dk a(k) \langle \psi | P(k) | \psi \rangle . \quad (10.104)$$

Diese beiden Gleichungen sind die darstellungsfreie Verallgemeinerung der Gleichungen (6.34, 33), die auf der Ortsdarstellung basierten. Die Interpretation von (10.103, 104) erfolgt in Anlehnung an Kap. 6 und führt auf das nächste quantenmechanische **Postulat**:

III.

Für die Messung einer Observablen A an einem System (einer Gesamtheit derartiger Systeme) im Zustand ψ gilt: Die möglichen **Messwerte** sind durch das Spektrum von A gegeben: die Eigenwerte a_n und $a(k)$. Die **Messwahrscheinlichkeit** für das Intervall (a, a') (die relative Häufigkeit, mit der die Messwerte in diesem Intervall liegen) ist gegeben durch $(a, a' \neq a_n)$:

$$w(a, a') = \sum_{a_n \in (a, a')} \langle \psi | P_n | \psi \rangle + \int_{a(k) \in (a, a')} dk \langle \psi | P(k) | \psi \rangle ; \quad (10.105)$$

der Mittelwert der A -Messung ist gleich dem Erwartungswert $\langle \psi | A | \psi \rangle$.

Das ist die darstellungsfreie Verallgemeinerung des *zentralen Postulates*, welches in Kap. 6 im Rahmen der Ortsdarstellung „hergeleitet“ wurde.

Für die mathematische Grundlegung der QUM sind die Begriffe des *uneigentlichen Eigenvektors*, der *Projektordichte*, unbefriedigend, weil sie aus dem in Postulat I als Zustandsraum geforderten Hilbert-Raum hinausführen. Im Rahmen einer etwas abstrakteren Formulierung der Theorie lassen sich die Größen $\chi(k)$, $P(k)$, ... jedoch vermeiden;

im Mittelpunkt dieser Bemühungen steht der Begriff der **Spektralschar**. Dazu nachfolgend ein kurzer Abriss; siehe auch Grawert, Kap. 7.4, Jelitto 4, 3.2.2.3.

Wir beginnen mit dem rein *diskreten Fall*, in dem sich (10.101 - 104) auf

$$\sum_n P_n = \mathbb{1} , \tag{10.106}$$

$$A = \sum_n a_n P_n \tag{10.107}$$

sowie

$$\sum_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle = 1 \tag{10.108}$$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n a_n \langle \psi | P_n | \psi \rangle \tag{10.109}$$

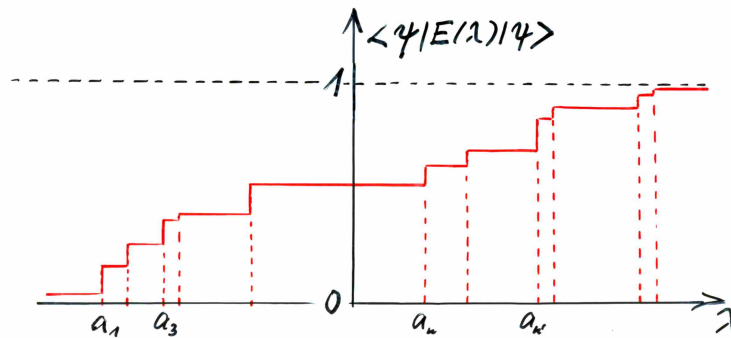
reduzieren. Hier treten die genannten Probleme nicht auf! Dieser Fall wird nun so umformuliert, dass eine Verallgemeinerung auf den teilweise oder ganz *kontinuierlichen Fall* möglich wird, welche die obigen Probleme ebenfalls vermeidet. Dazu betrachten wir die folgende einparametrische Schar von Projektoren:

$$E(\lambda) = \sum_{a_n \leq \lambda} P_n , \quad \lambda \in \mathbb{R} , \tag{10.110}$$

die man als **Spektralschar** bezeichnet. Der Erwartungswert von $E(\lambda)$ im Zustand ψ (auf 1 normiert, ansonsten beliebig):

$$\langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle = \sum_{a_n \leq \lambda} \langle \psi | P_n | \psi \rangle \tag{10.111}$$

ist eine reelle Funktion der reellen Variablen λ , die wegen (10.108) im Intervall $-\infty < \lambda < +\infty$ von 0 auf 1 monoton anwächst, und zwar unstetig an den Stellen $\lambda = a_n$. Die Höhe der Stufe bei a_n ist gleich der entsprechenden Messwahrscheinlichkeit (abhängig von ψ). In Intervallen ohne Eigenwerte ist die Größe $\langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle$ konstant.



• Abbildung 10.4 •

Mit Hilfe von $\langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle$ schreibt man (10.108, 109) als *Stieltjes-Integrale* wie folgt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d \langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle = 1 \quad (10.112)$$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d \langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle . \quad (10.113)$$

Hieraus folgen auf \mathcal{H} bzw. auf $\mathcal{D}(A)$ die Operatorgleichungen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE(\lambda) = \mathbb{1} \quad (10.114)$$

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda) . \quad (10.115)$$

Das sind nur andere Schreibweisen von (10.106, 107); sie bilden die Voraussetzung für die nachfolgende Verallgemeinerung.

Die *spezielle* Spektralschar (10.110) hat die folgenden *Eigenschaften*:

$$E(\lambda') \geq E(\lambda) \quad \text{für} \quad \lambda' > \lambda , \quad (10.116 \text{ a})$$

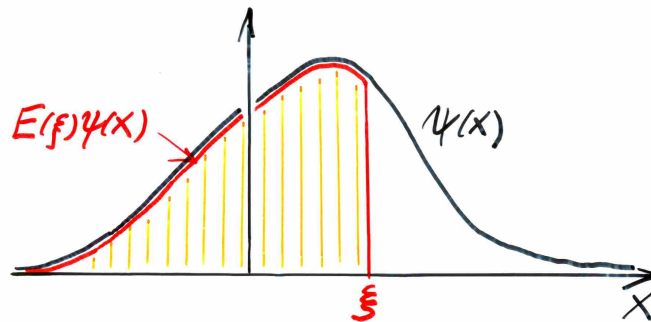
$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} E(\lambda + \varepsilon) = E(\lambda) , \quad (10.116 \text{ b})$$

$$E(-\infty) = 0, \quad E(+\infty) = \mathbb{1}. \quad (10.116 \text{ c})$$

Allgemein bezeichnet man eine einparametrische Schar von Projektoren mit den Eigenschaften (10.116) als **Spektralschar**.

$E(\lambda)$ gemäß (10.110) ist eine sprunghaft veränderliche Spektralschar; es gibt aber auch kontinuierlich veränderliche Spektralscharen. **Beispiel:**

$$E(\xi)\psi(x) = \begin{cases} \psi(x) & , \quad x \leq \xi \\ 0 & , \quad x > \xi \end{cases}, \quad (10.117)$$

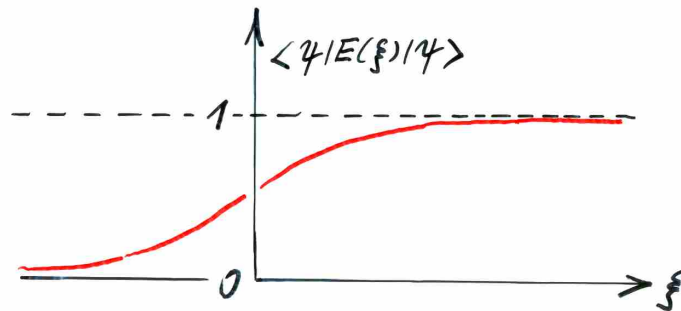


• Abbildung 10.5 •

$\psi(x) \in L_2$; ξ -abhängige Schar von Projektoren ($E^+ = E, E^2 = E$) mit den Eigenschaften (10.116). $E(\xi)$ ohne Sprungstellen, da sich die Funktion

$$\langle \psi | E(\xi) | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\xi} |\psi(x)|^2 dx \quad (10.118)$$

für alle $\xi \in \mathbb{R}$ stetig verhält, und zwar streng monoton von 0 auf 1 wachsend ($\|\psi\| = 1$). Die genaue Gestalt dieses Anstiegs hängt natürlich von $\psi(x)$ ab.



• Abbildung 10.6 •

Mit Hilfe der Spektralschar (10.117) lässt sich der *Ortsoperator* wie folgt darstellen:

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi dE(\xi); \quad (10.119)$$

denn mit (10.118) folgt für beliebiges $\psi(x) \in L_2$ ($\|\psi\| = 1$):

$$\begin{aligned} \langle \psi | x | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \xi |\psi(\xi)|^2 d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \xi d\langle \psi | E(\xi) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \int_{-\infty}^{+\infty} \xi dE(\xi) | \psi \rangle \end{aligned} \quad (10.120)$$

als Erwartungswert von (10.119). Vgl. (10.113, 115). Entsprechend (10.112, 114) gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\langle \psi | E(\xi) | \psi \rangle = 1 \quad (10.121)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE(\xi) = \mathbb{1}. \quad (10.122)$$

Ende des Beispiels •

Ganz allgemein gilt der **Satz**: Zu jedem selbstadjungierten Operator A im Hilbert-Raum gibt es eine Spektralschar $E(\lambda)$ von Projektoren mit

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda) . \tag{10.123}$$

Umgekehrt gilt: Jeder Operator von der Gestalt (10.123) ist selbstadjungiert.

Beweis: Sehr aufwendig; siehe *Funktionalanalysis*.

Der Satz impliziert einige *Folgerungen* und *Anmerkungen*:

1. Die zu A gehörige Spektralschar $E(\lambda)$ hat die Eigenschaft:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE(\lambda) = \mathbb{1} , \tag{10.124}$$

was direkt aus der dritten Eigenschaft (10.116) folgt. (10.124, 123) verallgemeinern die Operatorgleichungen (10.114, 115), die bislang nur für Observablen mit rein diskrettem Spektrum galten, auf beliebige selbstadjungierte Operatoren. Sie ersetzen die „problematischen“ Gleichungen (10.101, 102).

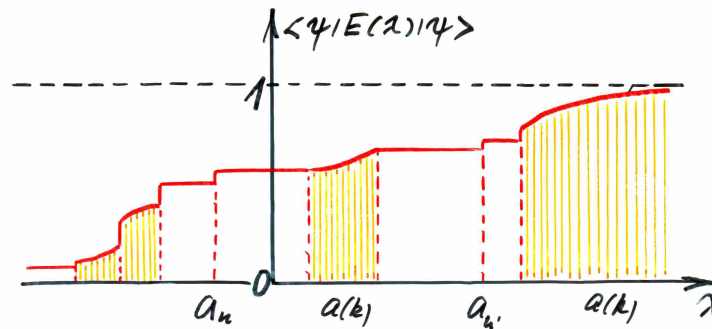
2. Genau für selbstadjungierte A gelten (10.112, 113) – jetzt allgemein:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\langle\psi|E(\lambda)|\psi\rangle = 1 \tag{10.125}$$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\langle\psi|E(\lambda)|\psi\rangle \tag{10.126}$$

für beliebige Zustandsvektoren $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$. Sie ersetzen die im Zentrum der qum. Interpretation stehenden „problematischen“ Gleichungen (10.103, 104).

3. Der Erwartungswert $\langle\psi|E(\lambda)|\psi\rangle$ wächst als Funktion von λ im Intervall $-\infty < \lambda < +\infty$ von 0 auf 1 monoton an (abhängig von ψ): im Allgemeinen teils unstetig, teils stetig.



• Abbildung 10.7 •

Der Anstieg im Intervall (a, a') (a, a' keine Sprungstellen):

$$\begin{aligned}
 w(a, a') &= \int_a^{a'} d \langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | E(a') - E(a) | \psi \rangle \\
 &\geq 0
 \end{aligned}
 \tag{10.127}$$

ist – in Verallgemeinerung des diskreten Falles – als *Messwahrscheinlichkeit* dafür zu interpretieren, bei einer A -Messung im Zustand ψ einen Wert im Intervall (a, a') zu messen. Der Ausdruck (10.127) ersetzt die *problematische* Formel (10.105).

4. Summiert (integriert) man alle $dw = d \langle \psi | E(\lambda) | \psi \rangle$ auf, so erhält man $\int dw = 1$: Mit Sicherheit liefert die A -Messung irgendeinen Wert! Summiert (integriert) man alle λdw auf, so erhält man $\int \lambda dw = \langle \psi | A | \psi \rangle$: Der Mittelwert der A -Messung ist durch den Erwartungswert gegeben!

5. Die Spektralschar $E(\lambda)$ heißt an der Stelle λ *konstant*, wenn es ein Intervall (λ_1, λ_2) gibt mit $\lambda \in (\lambda_1, \lambda_2)$ und

$$E(\lambda_2) = E(\lambda_1) . \tag{10.128}$$

Das **Spektrum** von A besteht (p. def.) aus allen (reellen) Zahlen λ , in denen $E(\lambda)$ *nicht konstant* ist: den Punkten, in denen $E(\lambda)$

- unstetig anwächst: *diskretes* Spektrum
- stetig anwächst: *kontinuierliches* Spektrum.

Diese λ -Werte werden – in Verallgemeinerung des diskreten Falles – als die bei einer A -Messung möglichen *Messwerte* gedeutet: $w > 0$ für (a, a') -Intervalle, welche solche λ

enthalten (für gewisse ψ). Die nicht zum Spektrum gehörigen λ -Werte werden – zusammen mit einer (a, a') -Umgebung – wegen (10.128) mit der Wahrscheinlichkeit $w = 0$ gemessen (für alle ψ); sie sind keine möglichen A -Werte.

6. Das unter 5. eingeführte Spektrum von A ist identisch mit dem zuvor laufend diskutierten „Eigenwertspektrum“; siehe Abbildung 10.3. Für den diskreten Teil ist das klar; für den kontinuierlichen Teil wird es ohne Beweis behauptet; siehe jedoch das Beispiel $A = x$. – Gleichung (10.127) liefert für die Messwahrscheinlichkeit $w(a, a')$ dasselbe Resultat wie die bisherige Berechnungsmethode mit Hilfe der „Eigenvektorbasis“ von A gemäß (10.105), was wiederum für den diskreten Anteil klar ist und für den kontinuierlichen Anteil unbewiesen behauptet wird.

7. Auf Grund der vorstehenden Darlegungen ist Postulat III wie folgt neu zu fassen:

III'.

Für die Messung einer Observablen A an einem System im Zustand ψ gilt: Die möglichen **Messwerte** sind durch das Spektrum von A gegeben, d. h. durch diejenigen a , in denen $E(a)$ nicht konstant ist. Die **Messwahrscheinlichkeit** für das Intervall (a, a') ist durch

$$w(a, a') = \langle \psi | E(a') - E(a) | \psi \rangle \tag{10.127}$$

gegeben; der Mittelwert ist gleich dem Erwartungswert:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} a d \langle \psi | E(a) | \psi \rangle . \tag{10.126}$$

$E(a)$ ist die zum selbstadjungierten Operator A gehörige Spektralschar.

Der Sinn der Einführung der Spektralschar $E(\lambda)$ besteht darin, die problematischen Größen $|k\rangle, |k\rangle \langle k|, \dots$ zu vermeiden – wenigstens im Bereich der Grundlegung der qum. Theorie. In der qum. Praxis werden wir jedoch einfachheitshalber weiter mit $|k\rangle, |k\rangle \langle k|, \dots$ arbeiten, weil die Resultate dieselben sind.

Wir wenden uns der **zeitlichen Entwicklung**, d. h. der **Dynamik** von Quantensystemen zu. Zur Formulierung der entsprechenden Theorie benötigt man **unitäre Operatoren** im Hilbert-Raum:

Ein Operator U heißt unitär, wenn er auf ganz \mathcal{H} definiert ist: $\mathcal{D}(U) = \mathcal{H}$, wenn er linear ist und wenn gilt:

$$U^+ = U^{-1} \quad \Longleftrightarrow \quad U^+ U = U U^+ = \mathbb{1} . \quad (10.131)$$

Ein unitärer Operator ist also im Allgemeinen nicht selbstadjungiert!

Eigenschaften:

1. U ist eine Bijektion auf dem gesamten Hilbert-Raum: $\mathcal{W}(U) = \mathcal{H}$.
2. Ein unitärer Operator ist *längen- und winkeltreu*:

$$(U\varphi, U\chi) = (\varphi, U^+U\chi) = (\varphi, \chi) \quad (10.132)$$

für alle $\varphi, \chi \in \mathcal{H}$. Umgekehrt folgt aus Längen (- und Winkel)treue einer linearen Abbildung V zwar: $V^+V = \mathbb{1}$, aber nicht automatisch auch $VV^+ = \mathbb{1}$; letzteres nur, wenn zusätzlich $\mathcal{W}(V) = \mathcal{H}$ gilt. Operatoren mit $V^+V = \mathbb{1}$, $VV^+ \neq \mathbb{1}$ heißen *isometrisch*; in Räumen mit $\dim \mathcal{H} = \infty$ bedeutsam; Anwendungen in der qum. Streutheorie.

3. Sei A selbstadjungiert, dann ist

$$U = e^{i\alpha A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!} A^n , \quad (10.133)$$

$\alpha \in \mathbb{R}$, unitär. *Beweis:*

$$\begin{aligned} U^+ &= (e^{i\alpha A})^+ = \left(\sum_n \frac{(i\alpha)^n}{n!} A^n \right)^+ \\ &= \sum_n \frac{(-i\alpha)^n}{n!} A^n = e^{-i\alpha A} = U^{-1} , \end{aligned} \quad (10.134)$$

q. e. d. *Anmerkung:* Obwohl A im Allgemeinen nur auf einer Teilmenge des Hilbert-Raumes definiert ist: $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}$, ist gleichwohl $e^{i\alpha A}$ auf dem ganzen Hilbert-Raum definiert: $\mathcal{D}(e^{i\alpha A}) = \mathcal{H}$.

4. Sei $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_\nu, \dots$ ein VONS in \mathcal{H} ; U ein unitärer Operator. Dann ist $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_\nu, \dots$ mit

$$\varphi_\nu = U \chi_\nu , \quad \nu = 1, 2, \dots \quad (10.135)$$

ebenfalls ein VONS in \mathcal{H} . *Beweis:*

• *ON*:

$$\begin{aligned} & \langle \chi_\mu | \chi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} \\ \Rightarrow & \langle \varphi_\mu | \varphi_\nu \rangle = \langle \chi_\mu | U^\dagger U | \chi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (10.136)$$

• *V*:

$$\begin{aligned} & \sum_\nu |\chi_\nu\rangle \langle \chi_\nu| = \mathbb{1} \\ \Rightarrow & \sum_\nu U |\chi_\nu\rangle \langle \chi_\nu| U^\dagger = \mathbb{1} \\ \Rightarrow & \sum_\nu |\varphi_\nu\rangle \langle \varphi_\nu| = \mathbb{1} , \end{aligned} \quad (10.137)$$

q. e. d. *Umgekehrt*: Ein linearer Operator, der ein VONS auf ein VONS abbildet, ist unitär. Die unitären Operatoren entsprechen also den „Drehungen“ des Hilbert-Raumes. Vgl. die orthogonalen Transformationen im E_3 .

Die zeitliche Entwicklung $\psi(t)$ des qum. Zustandsvektors wird durch die **Schrödinger-Gleichung** gesteuert:

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi}(t) = H \psi(t) , \quad (10.138)$$

wo H der Hamilton-Operator des Systems ist. $\psi(t)$ entwickelt sich eindeutig aus $\psi(t_0)$ und umgekehrt: zu $\psi(t)$ gibt es eindeutig $\psi(t_0)$. Die Abbildung $\psi(t_0) \leftrightarrow \psi(t)$ ist eine lineare Bijektion des Hilbert-Raumes auf sich. Wieso? Sie ist obendrein längentreu (normerhaltend), denn mit (10.138) und $H^\dagger = H$ erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 &= \frac{d}{dt} (\psi(t), \psi(t)) \\ &= (\dot{\psi}(t), \psi(t)) + (\psi(t), \dot{\psi}(t)) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left((H \psi(t), \psi(t)) - (\psi(t), H \psi(t)) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

und damit

$$\|\psi(t)\| = \|\psi(t_0)\| . \quad (10.139)$$

Folglich ist die Abbildung unitär:

$$\psi(t) = U(t, t_0) \psi(t_0) \quad (10.140)$$

Bezeichnung von $U(t, t_0)$ als **Zeitentwicklungsoperator**.

Eigenschaften:

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$$

$$U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t) \quad (10.141)$$

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1} .$$

Beweise als Übung. In dem wichtigen Spezialfall $U(t, t_0) = U(t - t_0)$ (falls $\partial H / \partial t = 0$ ist, siehe unten) stellen die Gleichungen (10.141) sicher, dass die U 's eine Gruppe bilden: die *dynamische Gruppe*. Die qum. dynamische Gruppe besteht also aus unitären Transformationen des Hilbert-Raumes, die klm. dynamische Gruppe aus kanonischen Transformationen des Phasenraumes (auch dort nur im Falle $\partial H / \partial t = 0$).

Man kann eine – ebenfalls als **Schrödinger-Gleichung** bezeichnete – Differentialgleichung für $U(t, t_0)$ aufstellen. Einsetzen von (10.140) in (10.138) führt auf die Operatorgleichung

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{U}(t, t_0) = H U(t, t_0) . \quad (10.142)$$

Diese ist unter der Anfangsbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ zu lösen. In dem Spezialfall, dass der Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit t abhängt, ist die Lösung:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} ; \quad (10.143)$$

diese ist von der Gestalt $U = U(t - t_0)$, siehe oben. Der Operator (10.143) ist wegen $H^\dagger = H$ unitär; siehe (10.133).

Ortsdarstellung der Zeitentwicklung. Aus (10.140) folgt:

$$\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int \langle \vec{x} | U(t, t_0) | \vec{x}' \rangle d^3 x' \langle \vec{x}' | \psi(t_0) \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \psi(\vec{x}, t) = \int G(\vec{x}, \vec{x}'; t, t_0) \psi(\vec{x}', t_0) d^3 x' \quad (10.144)$$

mit dem **Propagator**

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; t, t_0) = \langle \vec{x} | U(t, t_0) | \vec{x}' \rangle ; \quad (10.145)$$

dieser ist also die Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators. Im Spezialfall (10.143) ist

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; t, t_0) = \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} | \vec{x}' \rangle = G(\vec{x}, \vec{x}'; t - t_0) . \quad (10.146)$$

Sei

$$H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad H |E(k)\rangle = E(k) |E(k)\rangle$$

mit

$$\sum_n |E_n\rangle \langle E_n| + \int |E(k)\rangle \langle E(k)| dk = \mathbb{1}; \quad (10.147)$$

dann folgt aus (10.146):

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, \vec{x}'; t - t_0) \\ = \sum_n \chi_n(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \chi_n^*(\vec{x}') + \int dk \chi(k, \vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E(k)(t-t_0)} \chi^*(k, \vec{x}') \end{aligned} \quad (10.148)$$

mit $\chi_n(\vec{x}) = \langle \vec{x} | E_n \rangle$, $\chi(k, \vec{x}) = \langle \vec{x} | E(k) \rangle$. Vgl. (6.32). Man kennt also die Dynamik des Systems, wenn man alle stationären Zustände, d. i. die Lösung des Eigenwertproblems von H , kennt.

Die bisherige Betrachtung der Dynamik: t -Abhängigkeit des Zustandsvektors ψ , bezeichnet man auch als **Schrödinger-Bild**. Eine äquivalente Betrachtungsweise: t -Entwicklung der Observablen A , ist das **Heisenberg-Bild**. Betrachte eine Observable A , die einfachheitshalber nicht explizit von der Zeit abhängen möge. (Der allgemeine Fall wird in Jelitto 4, Kap. 3.4.2 behandelt). Sei ferner $t_0 = 0$, $U(t, 0) = U(t)$ gesetzt. Für den Erwartungswert im Zustand ψ gilt mit (10.140):

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle_t &= (\psi(t), A \psi(t)) \\ &= (U(t) \psi(0), A U(t) \psi(0)) \\ &= (\psi(0), U^\dagger(t) A U(t) \psi(0)) \\ &= (\psi(0), A(t) \psi(0)) \end{aligned} \quad (10.149)$$

mit

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t). \quad (10.150)$$

In dieser Betrachtungsweise ist die zeitliche Entwicklung von ψ auf A verlagert worden. Für die Messgröße $\langle \psi | A | \psi \rangle_t$ ist das ohne Bedeutung: Schrödinger- und Heisenberg-Bild liefern denselben Wert.

Der Operator $A(t)$ ist – sofern $A^\dagger = A$ gilt – selbstadjungiert, verliert also durch die unitäre Transformation (10.150) nicht seinen Charakter als Observable. Auch das Spektrum ist invariant gegenüber dieser Transformation:

$$A \chi_\nu = a_\nu \chi_\nu$$

$$\Rightarrow U^+(t) A U(t) U^+(t) \chi_\nu = a_\nu U^+(t) \chi_\nu . \quad (10.151)$$

Mit (10.150) hat man also

$$A(t) \chi_\nu(t) = a_\nu \chi_\nu(t) , \quad (10.152)$$

wobei

$$\chi_\nu(t) = U^+(t) \chi_\nu \quad (10.153)$$

bedeutet. Die Eigenwerte a_ν , d. h. die *Messwerte* bleiben also erhalten; dafür werden die Eigenvektoren gemäß (10.153) zeitabhängig. Jedoch bleiben die *Messwahrscheinlichkeiten* unverändert:

$$\langle \psi(t) | P_\nu | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | P_\nu | \psi(0) \rangle \quad (10.154)$$

mit

$$P_\nu(t) = U^+(t) P_\nu U(t) ; \quad (10.155)$$

Spezialfall von (10.149, 150) für $A = P_\nu = |\chi_\nu\rangle \langle \chi_\nu|$. Also: *Messwerte und Messwahrscheinlichkeiten sind in beiden Bildern gleich!*

Im Schrödinger-Bild hat man die Differentialgleichung (10.138) zur Berechnung von $\psi(t)$. Entsprechend kann man im Heisenberg-Bild eine Differentialgleichung zur Berechnung von $A(t)$ aufstellen. Zeitableitung von (10.150):

$$\dot{A}(t) = \dot{U}^+(t) A U(t) + U^+(t) A \dot{U}(t) . \quad (10.156)$$

Mit (10.142) folgt daraus:

$$\begin{aligned} \dot{A}(t) &= \frac{i}{\hbar} \left(U^+(t) H A U(t) - U^+(t) A H U(t) \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(U^+(t) H U(t) U^+(t) A U(t) - U^+(t) A U(t) U^+(t) H U(t) \right) , \end{aligned} \quad (10.157)$$

und mit (10.150) folgt schließlich:

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [H(t), A(t)] \quad (10.158)$$

mit dem transformierten Hamilton-Operator

$$H(t) = U^+(t) H U(t) . \quad (10.159)$$

(10.158) ist die **Heisenberg-Gleichung** zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung der Observablen $A(t)$. Vgl. mit der entsprechenden Bewegungsgleichung (2.4) der KLM:

$$\frac{dA}{dt} = \{H, A\} .$$

In dem *speziellen Fall*, dass H nicht explizit von t abhängt, ist nach (10.158):

$$\begin{aligned} \dot{H}(t) &= 0 \\ \Rightarrow H(t) &= \text{konstant} \\ \Rightarrow H(t) &= H . \end{aligned} \tag{10.160}$$

Der Hamilton-Operator ist in diesem Fall in beiden Bildern gleich. Klar, denn

$$H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right) H \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) = H$$

gemäß (10.143).

Beispiel: $A = x, A = p$. Mit $H(t) = H = H(x(t), p(t))$ erhält man für diese Observablen die Heisenberg-Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \frac{i}{\hbar} [H(x(t), p(t)), x(t)] = \frac{\partial H}{\partial p}(x(t), p(t)) \\ \dot{p}(t) &= \frac{i}{\hbar} [H(x(t), p(t)), p(t)] = -\frac{\partial H}{\partial x}(x(t), p(t)) . \end{aligned} \tag{10.161}$$

Zum jeweils zweiten Gleichungsschritt siehe Übungen. Die Observablen $x(t), p(t)$ befriedigen also im Heisenberg-Bild die kanonischen Bewegungsgleichungen der KLM. Beachte jedoch die fundamentalen Unterschiede der QUM zur KLM!

Die vorstehenden Ausführungen lassen sich in dem folgenden **Postulat** der QUM zusammenfassen:

IV. Die **Dynamik** des Systems wird durch einen unitären Operator $U(t)$ bestimmt, welcher der Differentialgleichung

$$i \hbar \dot{U}(t) = H U(t) \tag{10.162}$$

genügt (Anfangsbedingung: $U(0) = \mathbb{1}$), wo H der Hamilton-Operator ist. Die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes einer Observablen A im Zustand ψ ist durch $\langle \psi | U^\dagger(t) A U(t) | \psi \rangle$ gegeben.

Anmerkungen dazu:

1. Aus der dynamischen Grundgleichung (10.162) leitet man sowohl die Schrödinger-Gleichung (10.138) für $\psi(t)$, als auch die Heisenberg-Gleichung (10.158) für $A(t)$ her. Sie ist also bei den Bewegungsgleichungen übergeordnet.
2. Die beiden Bilder der zeitlichen Entwicklung unterscheiden sich darin, wie man in dem Ausdruck für den Erwartungswert mit $U(t)$ verfährt. Anwendung auf $\psi \Rightarrow$ Schrödinger-Bild; Transformation von $A \Rightarrow$ Heisenberg-Bild. Man kann die Wirkung von $U(t)$ auch „splitten“: teils Anwendung auf ψ , teils Transformation von $A \Rightarrow$ Dirac-Bild (auch: Wechselwirkungsbild); siehe Grawert, S. 146/147.

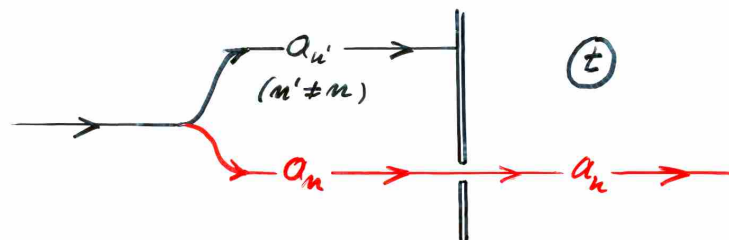
Im 2. Kapitel wurde eine qum. **statistische Gesamtheit** als große Anzahl *identisch präparierter* Systeme derselben Sorte definiert. Im Hinblick auf diese Definition und auf Postulat I erhebt sich die Frage:

- Gegeben sei eine Gesamtheit. Welches (normierte) ψ ist dieser Gesamtheit zuzuordnen?

Antwort: Eine Gesamtheit ist im Allgemeinen *nicht* durch ein ψ beschreibbar; im Allgemeinen benötigt man zur Beschreibung einer Gesamtheit einen *Statistischen Operator*; siehe Anmerkung 1 zu Postulat I. Allerdings gibt es spezielle Gesamtheiten, die durch ein ψ beschreibbar sind: *reine Gesamtheiten* im Unterschied zu *gemischten Gesamtheiten*; siehe unten – sonst wäre Postulat I sinnlos. Daraus ergeben sich die weiteren Fragen:

- Wie stellt man experimentell eine Gesamtheit her, die durch ein (normiertes) ψ beschreibbar ist? Welches ψ ? Gibt es zu jedem (normierten) ψ eine Gesamtheit? Der Beantwortung dieser Fragen wenden wir uns jetzt zu.

Gegeben sei eine große Zahl von Systemen derselben Sorte (z. B. H-Atome). Messung diverser Observablen A, B, \dots , die einfachheitshalber alle ein rein diskretes Spektrum haben mögen. **A-Messung** zu festem Zeitpunkt (z. B. S_2 -Messung durch Stern-Gerlach-Filter):



• Abbildung 10.8 •

Messwerte $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$; Selektion derjenigen Systeme, die den Messwert a_n liefern. Zwei Fälle sind denkbar:

1. Fall: Der Eigenwert a_n ist *nicht entartet*; er gehört zum Eigenvektor $|a_n\rangle$:

$$A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle ; \tag{10.163}$$

dann befindet sich die ausgesonderte Teilgesamtheit (unmittelbar nach t) im Zustand

$$|\psi\rangle = |a_n\rangle . \tag{10.164}$$

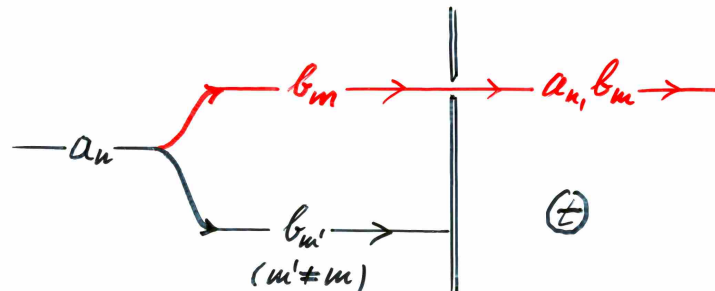
Begründung: Die Eigenschaft des Systems, den A -Wert a_n zu besitzen, wird durch den von $|a_n\rangle$ aufgespannten eindimensionalen Unterraum repräsentiert. Die (experimentelle) Abfrage, ob das System diese Eigenschaft besitzt, wird durch den Projektor auf diesen Eigenraum, d. h. durch die Observable

$$P_n = |a_n\rangle\langle a_n| , \tag{10.165}$$

beschrieben. Der Erwartungswert dieser Observablen ist die Messwahrscheinlichkeit für die Eigenschaft a_n . Misst man unmittelbar nach der Selektion die Observable P_n , so müssen *alle* Systeme der ausgesonderten Teilgesamtheit als Bestätigung der Selektion den Wert 1 liefern. Also muss die Messwahrscheinlichkeit für die Eigenschaften a_n , damit der Erwartungswert von P_n , gleich 1 sein. Das ist aber genau im Zustand (10.164) der Fall:

$$\langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle a_n|P_n|a_n\rangle = 1 . \tag{10.166}$$

2. Fall. Der Eigenwert a_n ist *entartet*. Weitere Spezifikation des Zustandes durch **simultane B-Messung** zum selben Zeitpunkt t :



• Abbildung 10.9 •

Messwerte $b_1, b_2, \dots, b_m, \dots$; Selektion der Systeme mit dem Messwert b_m . Die B -Messung soll das Resultat der A -Messung nicht stören, B soll mit A verträglich – **kommensurabel** – sein. Eine unmittelbar an die B -Messung anschließende A -Messung soll mit Sicherheit den Wert a_n ergeben. Notwendige und hinreichende *Bedingung*:

$$[A, B] = 0 , \quad (10.167)$$

weil genau dann simultane Eigenvektoren von A, B existieren. Wieder sind zwei Fälle denkbar:

2.1. Der zu a_n, b_m gehörige Eigenraum ist *eindimensional*, aufgespannt durch den simultanen Eigenvektor $|a_n, b_m\rangle$:

$$A |a_n, b_m\rangle = a_n |a_n, b_m\rangle \quad (10.168)$$

$$B |a_n, b_m\rangle = b_m |a_n, b_m\rangle ;$$

dann befindet sich die ausgesonderte Teilgesamtheit (unmittelbar nach t) im Zustand

$$|\psi\rangle = |a_n, b_m\rangle . \quad (10.169)$$

Begründung wie oben: P_{nm} -Messung direkt im Anschluss an die zweifache Selektion muss – als Bestätigung der Selektion – den Wert 1 liefern, d. h. mit Sicherheit haben die Systeme der selektierten Teilgesamtheit die Eigenschaften a_n, b_m .

2.2. Der (a_n, b_m) -Eigenraum ist *mehrdimensional*; dann ist weitere Spezifizierung durch **simultane C, D, \dots -Messung** und Selektion der Messwerte c_l, d_k, \dots erforderlich. Die Observablen C, D, \dots müssen mit A, B und untereinander verträglich sein (kommutieren). Fortsetzung des Verfahrens – bis der simultane $(a_n, b_m, c_l, d_k, \dots)$ -Eigenraum eindimensional ist. Die letztlich ausgesonderte Teilgesamtheit befindet sich dann – unmittelbar im Anschluss an die **Präparation** – im Zustand

$$|\psi\rangle = |a_n, b_m, c_l, d_k, \dots\rangle , \quad (10.170)$$

dem zum Eigenwerttupel $a_n, b_m, c_l, d_k, \dots$ gehörigen simultanen Eigenvektor der Observablen A, B, C, D, \dots :

$$\left. \begin{array}{l} (A - a_n) \\ (B - b_m) \\ (C - c_l) \\ (D - d_k) \\ \dots \end{array} \right\} |a_n, b_m, c_l, d_k, \dots\rangle = 0 . \quad (10.170)$$

Begründung wie oben im Falle von (10.164, 169).

A, B, C, D, \dots bezeichnet man als **vollständigen Satz** von kommutierbaren Observablen: eine minimale (!) Menge kommutierender Observablen, die ein VONS in \mathcal{H} festlegen (evtl. uneigentlich im Falle kontinuierlicher Spektren). *Beispiel:* H, L^2, L_3 , siehe Kap. 8, 9. Siehe auch Jelitto 5, Kap. 4.2.2.1.

Ohne auf die qum. Theorie des Messprozesses weiter einzugehen, formulieren wir als **Postulat** der QUM:

Va. $\left\| \begin{array}{l} \text{Durch simultane Messung der Observablen } A, B, C, D, \dots \text{ eines vollständigen Satzes wird das System } \mathbf{so\ präpariert}, \text{ dass es sich unmittelbar} \\ \text{nach der Messung mit Sicherheit im Zustand } |a_n, b_m, c_l, d_k, \dots\rangle \text{ befindet.} \end{array} \right\|$

Damit ist gesagt, wie man (experimentell) eine Gesamtheit herstellt, die durch ein (normiertes) ψ beschreibbar ist. Gibt man umgekehrt irgendein (normiertes) ψ vor, so präpariert man eine entsprechende Gesamtheit mit Hilfe eines vollständigen Satzes, der so zu wählen ist, dass ψ simultaner Eigenzustand dieser Observablen ist. Wie das im einzelnen geht, kann hier nicht erörtert werden.

Das $|a_n, b_m, c_l, d_k, \dots\rangle$ -Resultat der Präparation gemäß Postulat Va hängt *nicht* vom Zustand der Gesamtheit *vor* der Messung ab. Dieser Zustand darf natürlich nicht so beschaffen sein, dass die $(a_n, b_m, c_l, d_k, \dots)$ -Selektion überhaupt keine Systeme „durchlässt“, was z. B. dann der Fall ist, wenn der primäre Zustand durch einen zu $|a_n, b_m, c_l, d_k, \dots\rangle$ orthogonalen ψ -Vektor beschreibbar ist. Im Allgemeinen beeinflusst der Zustand vor der Messung den Zustand nach der Messung. Umgekehrt: Der Zustand eines Systems (einer Gesamtheit) wird durch eine Messung verändert. Dazu das ergänzende **Postulat** der QUM:

Vb. $\left\| \begin{array}{l} \text{Ein System (eine Gesamtheit) befinde sich im Zustand } \psi. \text{ Durch Messung} \\ \text{werde die Eigenschaft } h \mathbf{selektiert}. \text{ Dann befindet sich das System (die selektierte} \\ \text{Teilgesamtheit) unmittelbar anschließend im Zustand} \end{array} \right\|$

$$\psi' = \frac{P_h \psi}{\|P_h \psi\|} . \tag{10.171}$$

Erläuterung: Sei z. B. h der zum Eigenwert a_n der Observablen A gehörige Eigenraum, also

$$P_h = P_n = \sum_{\nu} |\chi_{n\nu}\rangle \langle \chi_{n\nu}| . \tag{10.172}$$

Entwicklung von ψ nach dem VONS der Eigenvektoren von A :

$$|\psi\rangle = \sum_{n,\nu} |\chi_{n\nu}\rangle \langle \chi_{n\nu}|\psi\rangle . \quad (10.173)$$

Durch die a_n -Selektion werden alle Komponenten $n' \neq n$ unterdrückt:

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_{\nu} |\chi_{n\nu}\rangle \langle \chi_{n\nu}|\psi\rangle}{\|\sum_{\nu} |\chi_{n\nu}\rangle \langle \chi_{n\nu}|\psi\rangle\|} . \quad (10.173)$$

Weitere *Anmerkungen*:

1. ψ darf nicht im Orthogonalkomplement von h liegen, weil dann $\psi' = \underline{0}/0$ nicht definiert ist. Die Selektion lässt in diesem Falle keine Systeme passieren. Auf $\psi \in h$ hat die Selektion keinen verändernden Einfluss: $\psi' = \psi$.
2. In der QUM hat man zwei verschiedene Formen der Zustandsänderung: infolge der Dynamik (Postulat IV) und aufgrund einer Messung (Postulat V). In der KLM ändert die Messung (im Idealfall) den Zustand nicht.

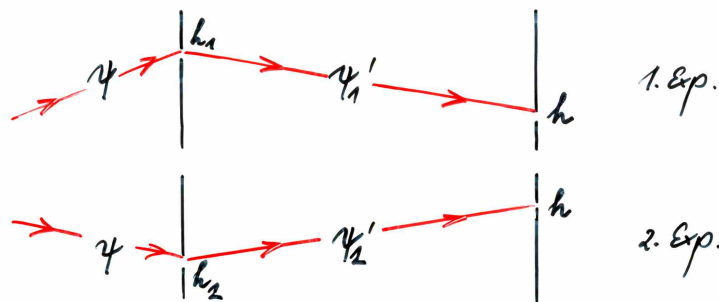
Eine wichtige Konsequenz von Postulat Vb ist die qum. **Interferenz von Wahrscheinlichkeiten**; siehe Kap. 1. Gegeben sei eine Gesamtheit im Zustand ψ :

1. *Experiment*: Selektion der Eigenschaft h_1 (Projektor P_1) mit der Wahrscheinlichkeit $\langle \psi|P_1|\psi\rangle$. Der Zustand nach der Selektion ist

$$\psi'_1 = \frac{P_1 \psi}{\|P_1 \psi\|} . \quad (10.175)$$

Anschließend Messung der Eigenschaft h (Projektor P) mit der Wahrscheinlichkeit $\langle \psi'_1|P|\psi'_1\rangle$. Gesamtwahrscheinlichkeit für „Route“ 1 (mit (10.175)):

$$\begin{aligned} w_1 &= \langle \psi|P_1|\psi\rangle \langle \psi'_1|P|\psi'_1\rangle \\ &= \langle \psi|P_1 P P_1|\psi\rangle . \end{aligned} \quad (10.176)$$

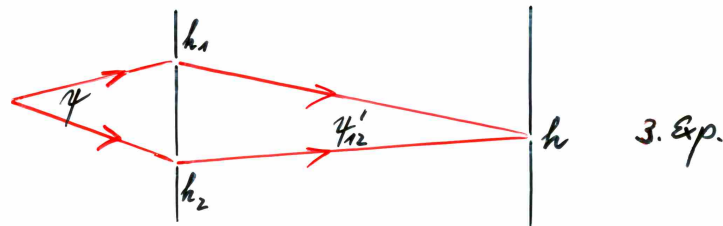


• Abbildung 10.10 •

2. *Experiment*: Entsprechend für „Route“ 2 erhält man

$$w_2 = \langle \psi | P_2 P P_2 | \psi \rangle . \quad (10.177)$$

3. *Experiment*: Öffnung beider „Kanäle“. Selektion der Eigenschaft $h_1 \oplus h_2$; Projektor $P_1 + P_2$ mit $P_1 P_2 = 0$ ($h_1 \perp h_2$ vorausgesetzt);



• Abbildung 10.11 •

dann h -Messung mit der Gesamtwahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} w_{12} &= \langle \psi | P_1 + P_2 | \psi \rangle \langle \psi'_{12} | P | \psi'_{12} \rangle \\ &= w_1 + w_2 + \langle \psi | P_1 P P_2 + P_2 P P_1 | \psi \rangle \\ &\neq w_1 + w_2 . \end{aligned} \quad (10.178)$$

Entgegen der klm. Entartung ist qum. die Wahrscheinlichkeit für Route 1 + 2 nicht gleich der Summe der Wahrscheinlichkeiten für Routen 1 und 2.

Beispiel: Beugung von Elektronenstrahlen am Doppelspalt.

11 Der Teilchenspin

Unter dem **Spin** eines Teilchens versteht man seinen Eigendrehimpuls \vec{S} im Unterschied zum Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$. Die Observable Spin ist durch einen dreikomponentigen selbstadjungierten Drehimpulsoperator $\vec{S} = (S_1, S_2, S_3)$ zu beschreiben mit – vgl. (8.101, 102) – den Kommutatoren:

$$[S_j, S_k] = i \hbar S_l, \quad j k l = 1 2 3 \text{ zykl.} \quad (11.1)$$

$$\Rightarrow [S^2, S_k] = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (11.2)$$

Aus (11.1, 2) folgt – gemäß Kap. 8 – für das simultane Eigenwertproblem von S^2 und S_3 :

$$(S^2 - \hbar^2 s(s+1))|s, m\rangle = 0 \quad (11.3)$$

$$(S_3 - \hbar m)|s, m\rangle = 0,$$

$s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$; $m = -s, -s+1, \dots, +s$. s wird als *Spinquantenzahl* bezeichnet, m ist die dazugehörige *magnetische Quantenzahl*.

Die Messwerte von S^2 und S_3 sind die Eigenwerte $\hbar^2 s(s+1)$ bzw. $\hbar m$. Im Unterschied zur KLM hat S^2 in der QUM einen *festen* Wert. Für jede Teilchensorte gibt es eine charakteristische *feste* Spinquantenzahl s , z. B. $s = 0$ für π -Mesonen, $s = 1/2$ für Elektronen, Nukleonen, $s = 1$ für Photonen, ... Es ist keine Wechselwirkung bekannt, die den s -Wert eines qum. Teilchens verändert. Dagegen sind für S_3 *alle* $2s+1$ Werte und Übergänge zwischen diesen möglich.

Im folgenden beschränken wir die Diskussion zunächst auf den einen Freiheitsgrad „Spinorientierung“; die Freiheitsgrade der räumlichen (Translations-) Bewegung werden zunächst (durch Zwangsbedingungen) unterdrückt. Ferner beschränken wir uns zunächst auf **Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen**, also z. B. auf Elektronen.

Experimentelle Evidenz für den Elektronenspin z. B. durch

- Stern-Gerlach-Versuch
- Zeeman-Effekt;

siehe z. B. Jelitto 5, Kap. 4.2.1, sowie die Vorlesung „Atom- und Molekülphysik“.

Eigenzustände $|\pm 3\rangle$ von S_3 zu den Eigenwerten $\pm \hbar/2$:

$$S_3 | + 3 \rangle = \frac{\hbar}{2} | + 3 \rangle , \quad S_3 | - 3 \rangle = -\frac{\hbar}{2} | - 3 \rangle . \quad (11.4)$$

Die $|\pm 3\rangle$ -Symbolik bedeutet: Spin „parallel“ (+) bzw. „antiparallel“ (-) zur 3-Achse; genauer: S_3 -Komponente mit den scharfen Werten $+\hbar/2$ bzw. $-\hbar/2$.

Experimentelle Präparation der Zustände $|\pm 3\rangle$ durch **Stern-Gerlach-Filter**: Mit dem Spin \vec{S} ist das magnetische Moment

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m} \vec{S} \quad (11.5)$$

verknüpft. e = Elementarladung, m = Elektronenmasse. (In der klassischen Mechanik/Elektrodynamik ist mit dem Eigendrehimpuls \vec{S} eines Körpers das magnetische Moment $\vec{\mu} = (1/2)$ (Ladung/Masse) \vec{S} verknüpft. Den Quotienten $\mu/S = (1/2)$ (Ladung/Masse) bezeichnet man als *gyromagnetisches Verhältnis*. Dieses ist für das Elektron doppelt so groß wie in der klassischen Physik: *magnetomechanische Anomalie* des Elektrons.) Kraft auf magnetischen Dipol im inhomogenen Magnetfeld:

$$\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} . \quad (11.6)$$

Sei $\vec{B} \simeq (0, 0, B(x_3))$; daraus folgt $\vec{F} \simeq (0, 0, F(x_3))$ mit

$$F = \mu_3 \frac{\partial}{\partial x_3} B . \quad (11.7)$$

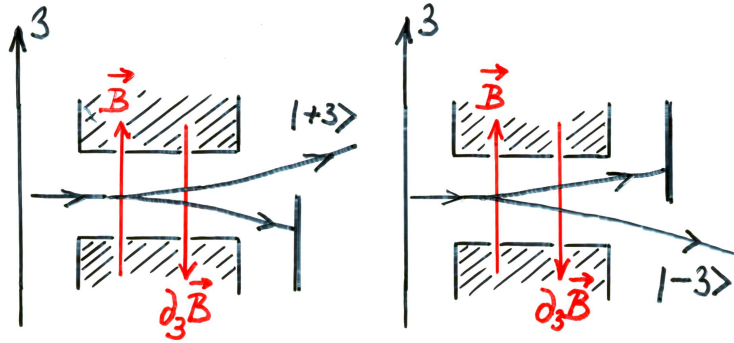
Zwei diskrete S_3 -Werte ($\pm \hbar/2$) implizieren zwei diskrete μ_3 -Werte:

$$\mu_3 = \mp \frac{e \hbar}{2m} = \mp \mu_B , \quad (11.8)$$

$\mu_B = \text{Bohrsches Magneton}$; folglich hat man zwei diskrete F -Werte:

$$F = \mp \mu_B \frac{\partial}{\partial x_3} B . \quad (11.9)$$

Konsequenz: Aufspaltung eines senkrecht zur 3-Richtung einlaufenden Elektronenstrahls. Ausblendung des einen oder des anderen Teilstrahles ergibt den Zustand $|+3\rangle$ oder $|-3\rangle$.



• Abbildung 11.1 •

Hinweis: Zur Neutralisierung der Lorentz-Kraft arbeitet man nicht mit freien Elektronen, sondern mit Elektronen, die als äußerstes Hüllenelektron je an ein Atom gebunden sind, z. B. mit Ag-Atomen.

Hilbert-Raum der Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustände. Die Zustände $|\pm 3\rangle$ spannen den zweidimensionalen Hilbert-Raum $\Sigma_{1/2}$ auf:

$$\psi \in \Sigma_{1/2} \Rightarrow |\psi\rangle = \alpha | +3\rangle + \beta | -3\rangle . \quad (11.10)$$

Die S_3 -Darstellung von ψ ist durch den *Spinor*

$$\langle \pm 3 | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (11.11)$$

gegeben. Aus $\|\psi\| = 1$ folgt

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 . \quad (11.12)$$

Physikalische Bedeutung: $|\alpha|^2, |\beta|^2$ sind die Messwahrscheinlichkeiten für die S_3 -Werte $+\hbar/2, -\hbar/2$ im Zustand ψ . Realisierung von ψ durch geeignete räumliche Orientierung des Stern-Gerlach-Filters (s. u.).

S_3 -Darstellung der Spinkomponenten S_k allgemein durch $(2s+1) \times (2s+1)$ -Matrizen gemäß (10.61, 62). Speziell für $s = 1/2$ folgt aus (10.63):

$$\langle \pm 3 | S_k | \pm 3 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma_k , \quad k = 1, 2, 3 , \quad (11.13)$$

mit den **Paulischen Spinmatrizen**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (11.14)$$

Eigenschaften (ohne Beweise):

$$\sigma_k^+ = \sigma_k, \quad k = 1, 2, 3 \quad (11.15)$$

$$\sigma_k^2 = \mathbb{1}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (11.16)$$

$$\sigma_j \sigma_k = i \sigma_l, \quad j k l = 1 2 3 \text{ zykl.} \quad (11.17)$$

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j = 2 i \sigma_l \quad (11.18)$$

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 2 \delta_{jk}; \quad (11.19)$$

dabei bezeichnet $[\dots, \dots]$ den *Kommutator* und $\{\dots, \dots\}$ den *Antikommutator*. Ferner gilt: Jede (komplexe) 2×2 -Matrix A lässt sich als (komplexe) Linearkombination der Pauli-Matrizen und der Einheitsmatrix

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11.20)$$

darstellen:

$$A = \alpha_0 \sigma_0 + \alpha_1 \sigma_1 + \alpha_2 \sigma_2 + \alpha_3 \sigma_3. \quad (11.21)$$

Die Koeffizienten $\alpha_0, \dots, \alpha_3$ sind genau dann reell, wenn A selbstadjungiert ist: $A^+ = A$.

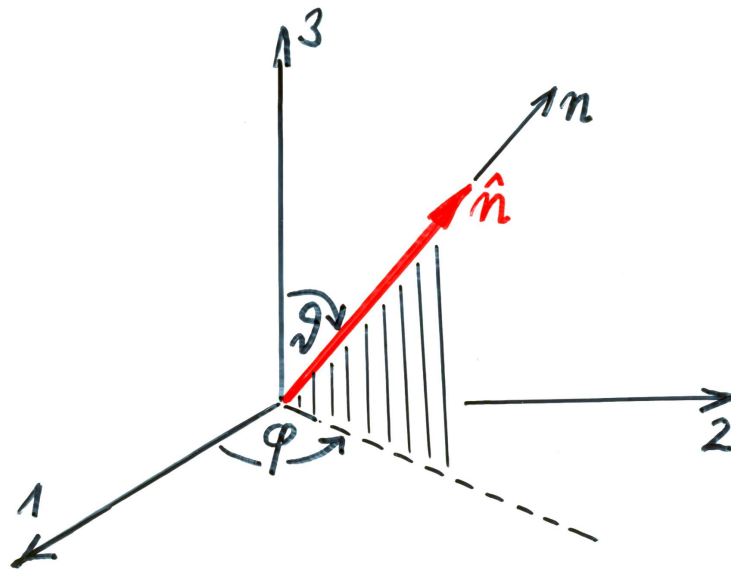
$\vec{\sigma}$ -Komponente in n -Richtung:

$$\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \hat{n}. \quad (11.22)$$

Mit $\hat{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$ folgt

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (11.23)$$

Das ist – in Einheiten $\hbar/2$ – die Spinkomponente in n -Richtung in der $|\pm 3\rangle$ -Basis.



• Abbildung 11.2 •

Eigenwertproblem von σ_n :

$$\begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (11.24)$$

mit der Lösbarkeitsbedingung (der charakteristischen Gleichung)

$$\det \begin{pmatrix} \cos \vartheta - m & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta - m \end{pmatrix} = 0 ; \quad (11.25)$$

diese liefert die *Eigenwerte*:

$$m = \pm 1 . \quad (11.26)$$

Die Messung der Elektronenspin-Komponente ergibt bezüglich *jeder* Richtung dieselben Werte: $+\hbar/2$ oder $-\hbar/2$!

Eigenvektoren $|+n\rangle$ und $|-n\rangle$ in S_3 -Darstellung (bis auf Phasenfaktor):

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_+ = \begin{pmatrix} \langle +3 | +n \rangle \\ \langle -3 | +n \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix} \quad (11.27 \text{ a})$$

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_- = \begin{pmatrix} \langle +3 | -n \rangle \\ \langle -3 | -n \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \sin(\vartheta/2) \\ -\cos(\vartheta/2) \end{pmatrix} . \quad (11.27 \text{ b})$$

Überprüfe die Resultate (11.26, 27)! Zeige: Durch $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$, $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ geht $|+n\rangle$ in $|-n\rangle$ über und umgekehrt: $|-n\rangle$ geht in $|+n\rangle$ über – jeweils bis auf einen Phasenfaktor.

Im Zustand $|\pm n\rangle$ ist der Elektronenspin „parallel/antiparallel“ zur n -Richtung. Die Größen

$$|\langle \pm 3 | + n \rangle|^2 = \begin{cases} \cos^2(\vartheta/2) \\ \sin^2(\vartheta/2) \end{cases} \quad (11.28 \text{ a})$$

sind die Messwahrscheinlichkeiten für die S_3 -Werte $\pm \hbar/2$ im Zustand $|+n\rangle$; entsprechende Bedeutung der Größen

$$|\langle \pm 3 | - n \rangle|^2 = \begin{cases} \sin^2(\vartheta/2) \\ \cos^2(\vartheta/2) \end{cases} . \quad (11.28 \text{ b})$$

Alternativ sind die Größen (11.28) auch deutbar als die Messwahrscheinlichkeiten für die S_n -Werte $\pm \hbar/2$ in den Zuständen $|\pm 3\rangle$.

Beispiel: Sei $\vartheta = \pi/2$, d. h. die Elektronen der Gesamtheit seien senkrecht zur 3-Richtung *polarisiert*; dann ergibt die S_3 -Messung zu je 50% die Werte $+\hbar/2$ und $-\hbar/2$.

Präparation der Zustände $|\pm n\rangle$ durch Stern-Gerlach-Filter in n -Richtung. Umgekehrt: Zu jedem $\psi \in \Sigma_{1/2}$ gibt es eine Richtung n , so dass $|\psi\rangle \sim |+n\rangle \sim |-(n)\rangle$ ist; \sim bedeutet Gleichheit bis auf einen Phasenfaktor.

Spinpräzession als Beispiel für die Dynamik des Spins. Wechselwirkung des magnetischen Momentes $\vec{\mu}$ eines Elektrons mit einem (homogenen) Magnetfeld: $\vec{B} = (0, 0, B)$. Hamilton-Operator – bei Vernachlässigung räumlicher Freiheitsgrade:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_3 B = \frac{eB}{m} S_3 ; \quad (11.29)$$

in S_3 -Darstellung hat man also

$$\langle \pm 3 | H | \pm 3 \rangle = \hbar \omega \sigma_3 = \begin{pmatrix} \hbar \omega & 0 \\ 0 & -\hbar \omega \end{pmatrix} \quad (11.30)$$

mit der *Larmor-Frequenz*

$$\omega = \frac{eB}{2m} . \quad (11.31)$$

Die S_3 -Eigenzustände $|\pm 3\rangle$ sind demnach simultan H -Eigenzustände zu den Energieeigenwerten $\pm \hbar \omega$.

Mit (11.30) kann man – nach Belieben – in die Schrödinger-Gleichung (10.138) oder in die Heisenberg-Gleichung (10.158) eingehen, um die zeitliche Entwicklung des Zustandes

$\psi(t)$ bzw. der Observablen $A(t)$ zu bestimmen. Wir betrachten stattdessen zunächst den *Zeitentwicklungsoperator* (10.143):

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{-\frac{2i}{\hbar} \omega S_3 t}, \quad (11.32)$$

in S_3 -Darstellung:

$$\langle \pm 3 | U(t) | \pm 3 \rangle = e^{-i\omega \sigma_3 t} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}; \quad (11.33)$$

dieser wird sodann dazu benutzt, um gemäß (10.140) und (10.150) $\psi(t)$ bzw. $A(t)$ zu berechnen.

• *Schrödinger-Bild.* Für die zeitliche Entwicklung des *Zustandes* (11.27 a) erhält man mit (11.33) nach (10.140):

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}_+ &= \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i(\varphi+2\omega t)} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix} e^{-i\omega t}; \end{aligned} \quad (11.34)$$

das entspricht einer Präzession der *Spinrichtung* $\hat{n}(t)$ um die \vec{B} -Achse mit der Frequenz

$$\Omega = 2\omega = \frac{eB}{m} \quad (11.35)$$

– im mathematisch positiven Sinne!

• *Heisenberg-Bild.* Für die zeitliche Entwicklung der *Observablen* (11.23) erhält man mit (11.33) nach (10.150):

$$\begin{aligned} \sigma_n(t) &= \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i(\varphi-2\omega t)} \sin \vartheta \\ e^{i(\varphi-2\omega t)} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (11.36)$$

gemäß (11.21, 14) folgt:

$$\sigma_n(t) = \sin \vartheta \cos(\varphi - 2\omega t) \sigma_1 + \sin \vartheta \sin(\varphi - 2\omega t) \sigma_2 + \cos \vartheta \sigma_3; \quad (11.37)$$

das entspricht einer Präzession der *Referenzrichtung* $\hat{n}(t)$ um die \vec{B} -Achse mit der Frequenz Ω – im mathematisch negativen Sinne!

Erwartungswert von σ_n in beliebigem Zustand $\psi \in \Sigma_{1/2}$: Aus (11.37) folgt (Heisenberg-Bild)

$$\langle \sigma_n \rangle_t = \sin \vartheta \cos(\varphi - 2\omega t) \langle \sigma_1 \rangle_0 + \sin \vartheta \sin(\varphi - 2\omega t) \langle \sigma_2 \rangle_0 + \cos \vartheta \langle \sigma_3 \rangle_0 . \quad (11.38)$$

Dasselbe Resultat erhält man, wenn man den Erwartungswert von (11.23) mit (11.34) bildet (Schrödinger-Bild).

Aus (11.38) folgt speziell für $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0, \pi/2$:

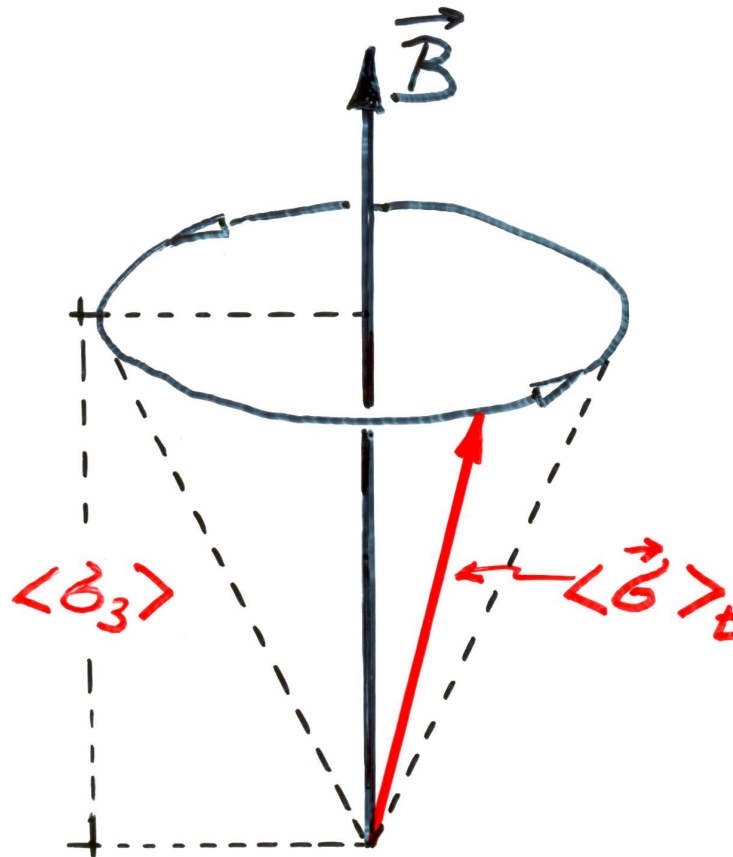
$$\langle \sigma_1 \rangle_t = \cos 2\omega t \langle \sigma_1 \rangle_0 - \sin 2\omega t \langle \sigma_2 \rangle_0 \quad (11.39 \text{ a})$$

$$\langle \sigma_2 \rangle_t = \sin 2\omega t \langle \sigma_1 \rangle_0 + \cos 2\omega t \langle \sigma_2 \rangle_0 ; \quad (11.39 \text{ b})$$

für $\vartheta = 0$, φ beliebig folgt aus (11.38):

$$\langle \sigma_3 \rangle_t = \langle \sigma_3 \rangle_0 = \text{konstant} . \quad (11.39 \text{ c})$$

Der Spin führt also im Mittel (unabhängig vom Anfangszustand) eine *Präzessionsbewegung um die 3-Richtung* mit der Frequenz Ω aus, d. h. mit der doppelten Larmor-Frequenz.



• Abbildung 11.3 •

In der klassischen Mechanik/Elektrodynamik erfolgt die Präzession mit der Frequenz $\omega = \Omega/2$, d.h. mit der einfachen Larmor-Frequenz. Die Diskrepanz von ω und Ω (Faktor 2) beruht auf der magnetomechanischen Anomalie des Elektrons. – Bedeutung der Spinpräzession in der Festkörperphysik: *magnetische Resonanzmethoden*. •

Der Zustand eines Teilchens ist durch die Angabe seiner Spinstellung in der Regel nicht hinreichend spezifiziert: Entartung des S_3 -Eigenwertes $\hbar m$. Im Allgemeinen hat man bei der Zustandspezifikation auch die räumlichen (translatorischen) Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Zu einem eindeutig spezifizierten Zustand gelangt man nach Postulat Va durch simultane Messung eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen A, B, \dots, S_3 . Unmittelbar nach dieser Präparation befindet sich das System (die Gesamtheit) im simultanen Eigenzustand $|a_k, b_l, \dots, \hbar m\rangle$. **Postulat:**

VI.

Die kartesischen Ortskomponenten x_1, x_2, x_3 und die Spin-
komponente S_3 bilden einen vollständigen Satz kommutie-
render Observablen für ein Teilchen.

Der simultane Eigenvektor $|x_1, x_2, x_3, \hbar m\rangle$ ist ein Zustand scharfer räumlicher Lokalisierung (Eigenwerte x_1, x_2, x_3) und scharfer Spinstellung (Eigenwert $\hbar m$). Der allgemeine Teilchenzustand ψ ist eine Überlagerung derartiger Eigenzustände. Da diese im Zustandsraum ein VONS bilden, hat man:

$$|\psi\rangle = \int dx_1 \int dx_2 \int dx_3 \sum_m |x_1, x_2, x_3, \hbar m\rangle \langle x_1, x_2, x_3, \hbar m|\psi\rangle . \quad (11.40)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $\langle x_1, x_2, x_3, \hbar m|\psi\rangle$ bilden die **Orts-Spin-Darstellung** des Zustandes ψ . Man schreibt auch (z. B. im Falle $s = 1/2 \Rightarrow m = \pm 1/2$):

$$\psi = \begin{pmatrix} \langle x_1, x_2, x_3, +\hbar/2|\psi\rangle \\ \langle x_1, x_2, x_3, -\hbar/2|\psi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} . \quad (11.41)$$

Der Zustand ψ wird also durch einen zweikomponentigen Spinor aus zwei Wellenfunktionen beschrieben: die eine (ψ_+) für die up-Stellung, die andere (ψ_-) für die down-Stellung des Spins. Wegen $\psi_+(\vec{x}), \psi_-(\vec{x}) \in L_2$ ist ψ Element des *Produkt-Hilbert-Raumes* $L_2 \otimes \Sigma_{1/2}$:

$$L_2 : \psi(\vec{x}), \dots \Sigma_{1/2} : \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \dots L_2 \otimes \Sigma_{1/2} : \psi(\vec{x}) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Lin. komb.}} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} ;$$

zum Konzept des *Produktraumes* siehe Jelitto 5, Kap. 5.3.

Physikalische Interpretation: $\int_V d^3 x |\psi_{\pm}(\vec{x})|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen bei simultaner \vec{x}, S_3 -Messung im Volumen V mit der Spinstellung up/down zu registrieren. Normierung $\|\psi\| = 1$:

$$\int d^3 x (|\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2) = 1 . \quad (11.42)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei simultaner \vec{x}, S_3 -Messung räumlich *irgendwo* mit *beliebiger* Spinstellung anzuschaffen, ist 1. $|\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2$ ist die \vec{x} -Wahrscheinlichkeitsdichte bei beliebigem S_3 -Wert; $\int d^3 x |\psi_{\pm}(\vec{x})|^2$ sind die beiden S_3 -Wahrscheinlichkeiten bei beliebigem \vec{x} -Wert.

Spinoren. Als Elemente eines Hilbert-Raumes (hier: $L_2 \otimes \Sigma_{1/2}$) lassen sich die Spinoren *linearkombinieren* (s. o.):

$$a_1 \varphi + a_2 \chi = a_1 \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{x}) \\ \varphi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} \chi_+(\vec{x}) \\ \chi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \varphi_+(\vec{x}) + a_2 \chi_+(\vec{x}) \\ a_1 \varphi_-(\vec{x}) + a_2 \chi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (11.43)$$

Ferner gibt es zu je zwei Spinoren ein *inneres Produkt*:

$$(\varphi, \chi) = \int d^3 x (\varphi_+^*(\vec{x}) \chi_+(\vec{x}) + \varphi_-^*(\vec{x}) \chi_-(\vec{x})). \quad (11.44)$$

Wirkung *wichtiger Observablen* auf den Zustandsspinor:

$$x_k \psi = \begin{pmatrix} x_k \psi_+(\vec{x}) \\ x_k \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad p_k \psi = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi_+(\vec{x}) \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (11.45)$$

$$\sigma_1 \psi = \begin{pmatrix} \psi_-(\vec{x}) \\ \psi_+(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 \psi = \begin{pmatrix} -i \psi_-(\vec{x}) \\ i \psi_+(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \psi = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ -\psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (11.46)$$

Daraus folgt z. B. für die *Erwartungswerte* von \vec{x} und S_3 :

$$(\psi, \vec{x} \psi) = \int d^3 x \vec{x} (|\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2) \quad (11.47)$$

bzw.

$$(\psi, S_3 \psi) = \frac{\hbar}{2} \int d^3 x (|\psi_+(\vec{x})|^2 - |\psi_-(\vec{x})|^2). \quad (11.48)$$

Für Fragen der *Energie* und der *Dynamik* des Teilchens ist der *Hamilton-Operator* zuständig. Dieser hängt im Allgemeinen sowohl von den Orts- und Impulskomponenten als auch von den Spinkomponenten ab:

$$H = H(\vec{x}, \vec{p}, \vec{S}) \quad (11.49)$$

– und evtl. von der Zeit. In Orts-Spin-Darstellung hat man:

$$H = H\left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}, \vec{\sigma}\right). \quad (11.50)$$

Die zeitliche Entwicklung der Spinoren genügt der mit (11.50) gebildeten *Schrödinger-Gleichung* (11.40):

$$\left(H \left(\vec{x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}, \vec{\sigma} \right) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = 0. \quad (11.51)$$

Falls H – wie in (11.50) – nicht explizit von t abhängt, führt der *Separationsansatz*

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_+(\vec{x}) \\ \chi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (11.52)$$

– wie im spinlosen Fall – auf die *stationäre Schrödinger-Gleichung*:

$$(H - E) \begin{pmatrix} \chi_+(\vec{x}) \\ \chi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} = 0. \quad (11.53)$$

Die Lösungen (11.52, 53) bezeichnet man hier ebenfalls als *stationäre Zustände*. Die Hamilton-Eigenwertgleichung (11.53) hat man im Falle gebundener Zustände (diskretes Energiespektrum) unter der Normierungsbedingung (11.42), im Falle von Streuzuständen (kontinuierliches Energiespektrum) unter einer zum Streuprozess passenden Randbedingung (analog zu (9.145)) zu lösen. Die (diskreten) Energieniveaus und die Streuamplituden werden spinabhängig; abhängig von der Quantenzahl $m = \pm 1/2$.

Falls H *nicht* von \vec{S} abhängt, separiert die Schrödinger-Gleichung in zwei identische spinlose Schrödinger-Gleichungen für ψ_+ und ψ_- . Die Energieniveaus hängen nicht von m ab, sind demnach zweifach entartet; auch die Streuamplituden sind für beide m -Werte gleich.

Beispiel: Elektron im elektromagnetischen Feld:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = -\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \phi(\vec{x}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{x}, t) \quad (11.54)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \wedge \vec{A}(\vec{x}, t).$$

Der Hamilton-Operator dieses Systems **ohne Spin** ist durch (2.4) gegeben:

$$H_0 = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A}(\vec{x}, t))^2 - e\phi(\vec{x}, t); \quad (11.55)$$

damit bildet man in der Ortsdarstellung die Schrödinger-Gleichung

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + e\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 - e\phi(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\vec{x}, t) = 0. \quad (11.56)$$

Hierzu einige *Anmerkungen*:

1. Wie in Kap. 2 leitet man aus (11.56) zur Begründung der statistischen Interpretation der Wellenfunktion die *Kontinuitätsgleichung* $\partial \rho / \partial t + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ her mit

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \quad (11.57)$$

– übereinstimmend mit (2.19) – für die \vec{x} -Wahrscheinlichkeitsdichte, jedoch

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi^*(\vec{x}, t) \right) \\ &\quad + \frac{e}{m} \vec{A}(\vec{x}, t) \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (11.58)$$

– abweichend von (2.20) – für die \vec{x} -Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Beweis?

2. Die *Eichtransformation* der Potentiale

$$\vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, t) \quad (11.59)$$

$$\phi'(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}, t) - \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, t)$$

mit beliebigem skalarem Feld $f(\vec{x}, t)$ lässt das elektromagnetische Feld $\vec{E}, \vec{B}(\vec{x}, t)$ invariant. Für die Wellenfunktion resultiert die Transformation

$$\psi'(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) e^{-\frac{ie}{\hbar} f(\vec{x}, t)}. \quad (11.60)$$

Beweis? Die Transformation (11.60) ist ohne messbare Konsequenz: Invarianz der Erwartungswerte. Siehe Jelitto 5, Kap. 4.1.2.2.

3. Der Hamilton-Operator in (11.56) ist wie folgt anzuwenden:

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{e\hbar}{2im} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{e^2}{2m} \vec{A} \cdot \vec{A} - e\phi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{e\hbar}{2im} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{A} \right) + \frac{e\hbar}{im} \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 - e\phi. \end{aligned} \quad (11.61)$$

Im Falle der *Coulomb-Eichung*, z. B. im statisch-stationären Fall:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{A} = 0, \quad (11.62)$$

vereinfacht er sich zu

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{e\hbar}{im} \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 - e\phi. \quad (11.63)$$

Erläuterung für den Spezialfall eines **homogenen, stationären Magnetfeldes**:

$$\vec{B} = \text{konstant} \quad (11.64)$$

räumlich und zeitlich; herleitbar aus dem Vektorpotential

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \wedge \vec{x}). \quad (11.65)$$

Zeige, dass dieser Ansatz $\vec{\nabla} \wedge \vec{A} = \vec{B}$ und $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ impliziert. Wegen

$$\frac{\hbar}{i} \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{1}{2} (\vec{B} \wedge \vec{x}) \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{p}) = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{L} \quad (11.66)$$

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4} (\vec{B} \wedge \vec{x}) \cdot (\vec{B} \wedge \vec{x}) = -\frac{1}{4} \vec{B} \cdot (\vec{x} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{B}))$$

nimmt (11.63) die folgende Gestalt an

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} - e\phi - \vec{M} \cdot \vec{B} \quad (11.67)$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \vec{\mu}_0 + \vec{\mu}_1(\vec{B}) \\ &= -\frac{e}{2m} \vec{L} + \frac{e^2}{8m} \vec{x} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{B}). \end{aligned} \quad (11.68)$$

Der erste und der zweite Term in (11.67) entsprechen der kinetischen und der potentiellen Energie (bezüglich des elektrischen Feldes) des Elektrons; der dritte Term beschreibt die Wechselwirkung des magnetischen Momentes \vec{M} des Elektrons (einstweilen noch ohne Spin!) mit dem Magnetfeld. \vec{M} besteht aus zwei Anteilen: dem magnetischen Moment $\vec{\mu}_0 = -(e/2m)\vec{L}$ der Bahnbewegung (paramagnetischer Anteil) und dem durch \vec{B} induzierten magnetischen Moment $\vec{\mu}_1(\vec{B}) = (e^2/8m)\vec{x} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{B})$ (diamagnetischer Anteil).

Im folgenden vernachlässigen wir den diamagnetischen gegen den paramagnetischen Anteil; siehe Jelitto 5, S. 15. Ferner Beschränkung auf den Spezialfall eines **statischen elektrischen Zentralfeldes**:

$$-e\phi = V(r). \quad (11.69)$$

Legt man schließlich das \vec{B} -Feld in die 3-Richtung: $\vec{B} = (0, 0, B)$, dann reduziert sich der Hamilton-Operator (11.67) auf

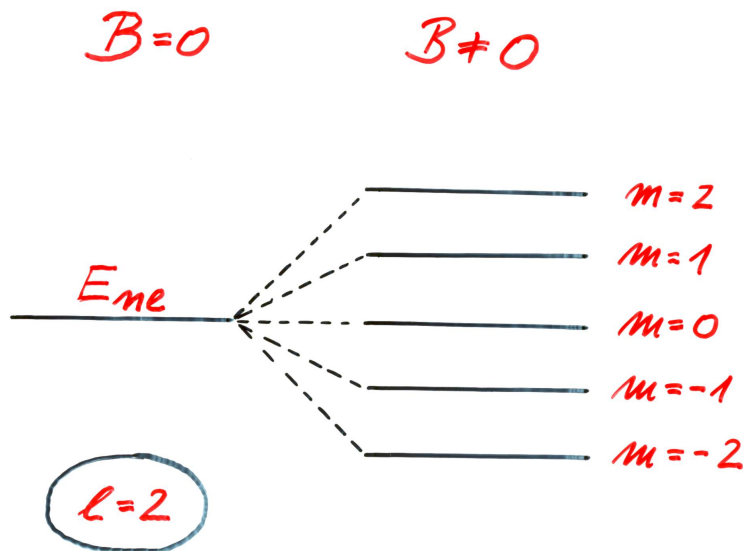
$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \frac{1}{\hbar} \mu_B B L_3 \quad (11.70)$$

als Modell eines Eielektronenatoms (H, Na, ...) im Magnetfeld.

Energieeigenwertproblem: H_0 hat dieselben Eigenvektoren $|n, l, m\rangle$ wie der atomare Hamiltonian $-(\hbar^2/2m)\Delta + V(r)$, jedoch sind wegen des Zusatzterms $(\mu_B B/\hbar)L_3$ die Eigenwerte E_{nl} um $\mu_B B m$ verschoben:

$$H_0 |nlm\rangle = (E_{nl} + \mu_B B m) |nlm\rangle. \quad (11.71)$$

Im \vec{B} -Feld ist also die m -Entartung der Energieniveaus im Zentralpotential aufgehoben. Wegen der Auszeichnung der 3-Richtung durch \vec{B} ist es energetisch nicht mehr egal (wie in Kap. 9), wie \vec{L} räumlich orientiert ist. Jedes E_{nl} spaltet in $2l + 1$ -Terme $E_{nlm} = E_{nl} + \mu_B B m$ auf: **Zeeman-Effekt** – spinlose Version.



• Abbildung 11.4 •

Der Hamilton-Operator für ein Elektron **mit Spin** im \vec{E} , \vec{B} -Feld ist

$$\begin{aligned} H &= H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{B} \\ &= \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A}(\vec{x}, t))^2 - e\phi(\vec{x}, t) + \frac{e}{m} \vec{B}(\vec{x}, t) \cdot \vec{S}. \end{aligned} \quad (11.72)$$

Hierbei wurde die Wechselwirkung des magnetischen Spinmomentes $\vec{\mu}$ mit dem *externen* \vec{B} -Feld berücksichtigt; *nicht* berücksichtigt wurde die Wechselwirkung von $\vec{\mu}$ mit dem *internen* \vec{B} -Feld, das von der Bahnbewegung des Elektrons herrührt und dem Bahndrehimpuls \vec{L} proportional ist: *Spin-Bahn-Wechselwirkung* $\sim \vec{L} \cdot \vec{S}$, die für die Feinstruktur der Atomspektren verantwortlich ist (siehe unten). Die Schrödinger-Gleichung (11.51) bezeichnet man in diesem Fall als **Pauli-Gleichung**:

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + e \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 - e \phi(\vec{x}, t) + \mu_B \vec{B}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = 0. \quad (11.73)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist für beliebiges $\vec{E}, \vec{B}(\vec{x}, t)$ außerordentlich schwierig und soll hier nicht weiter verfolgt werden.

Beschränkt man sich auf dieselben *Spezialisierungen* und *Näherungen* wie im spinlosen Fall, nämlich:

- statisch-stationärer Fall, Coulomb-Eichung;
- \vec{B} homogen in 3-Richtung, \vec{E} zentralsymmetrisch;
- Vernachlässigung der diamagnetischen Wechselwirkung,

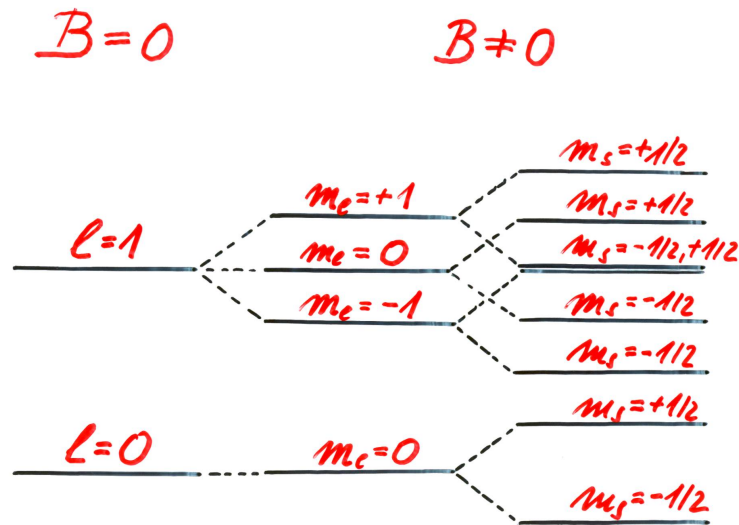
so hat man es mit dem folgenden Hamilton-Operator zu tun:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \frac{e}{m} B S_3 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \frac{1}{\hbar} \mu_B B (L_3 + 2S_3). \end{aligned} \quad (11.74)$$

Eigenwertproblem – stationäre Pauli-Gleichung:

$$H |n, l, m_l, m_s\rangle = (E_{nl} + \mu_B B (m_l + 2m_s)) |n, l, m_l, m_s\rangle; \quad (11.75)$$

dabei sind m_l, m_s die zur Bahndrehimpulsquantenzahl l bzw. zur Spinquantenzahl s (fest) gehörigen magnetischen Quantenzahlen. $s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$; man hat also die Energienniveaus $E_{nl} + \mu_B B (m_l \pm 1)$:



• Abbildung 11.5 •

s -Zustände spalten 2-fach auf, p -Zustände 5-fach (statt nur 3-fach ohne Spin), d -Zustände 7-fach (statt nur 5-fach ohne Spin), ... : **Zeeman-Effekt** – Version mit Spin; jedoch im Allgemeinen erhebliche Komplikationen durch *Spin-Bahn-Aufspaltung* (siehe unten) •

Addition von Drehimpulsen. Wir betrachten ein System, das aus zwei Teilen oder Eigenschaften mit den Drehimpulsen \vec{J}_1 und \vec{J}_2 besteht; z. B. Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S} eines Teilchens oder die Bahndrehimpulse \vec{L}_1 und \vec{L}_2 zweier Teilchen oder die Spins \vec{S}_1 und \vec{S}_2 zweier Teilchen usw.

\vec{J}_1 und \vec{J}_2 kommutieren miteinander und befriedigen jeweils für sich die üblichen Drehimpulsvertauschungsrelationen:

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0, \quad k, l = 1, 2, 3 \quad (11.76)$$

$$[J_{kl}, J_{km}] = i\hbar J_{kn}, \quad k = 1, 2, \quad lmn = 123 \text{ zykl.} \quad (11.77)$$

Es gibt also simultane Eigenvektoren von \vec{J}_1^2 , J_{1z} , \vec{J}_2^2 und J_{2z} zu den Eigenwerten $\hbar^2 j_1(j_1 + 1)$, $\hbar m_1$, $\hbar^2 j_2(j_2 + 1)$ bzw. $\hbar m_2$:

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (11.78)$$

Diese spannen für feste Werte von j_1 und j_2 einen $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -dimensionalen Zustandsraum $h(j_1, j_2)$ auf; sie bilden in diesem Raum eine *Orthonormal-Basis*:

$$\langle j_1 m'_1; j_2 m'_2 | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2}. \quad (11.79)$$

Gesamtdrehimpuls:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (11.80)$$

mit – Konsequenz von (11.76, 77) –

$$[J_l, J_m] = i \hbar J_n, \quad l m n = 1 2 3 \text{ zykl.} \quad (11.81)$$

Hieraus folgt (wie üblich) die Vertauschbarkeit von $\vec{J}^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2$ mit $J_z = J_{1z} + J_{2z}$. Da diese beiden Observablen außerdem mit \vec{J}_1^2 und \vec{J}_2^2 kommutieren, gibt es simultane Eigenvektoren von \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , \vec{J}^2 und J_z zu den Eigenvektoren $\hbar^2 j_1(j_1 + 1)$, $\hbar^2 j_2(j_2 + 1)$, $\hbar^2 j(j + 1)$ bzw. $\hbar m$:

$$|j_1 j_2; j m\rangle. \quad (11.82)$$

Die **gekoppelten Zustände** $|j_1 j_2; j m\rangle$ sind i. a. keine Eigenzustände von J_{1z} und J_{2z} , während die **ungekoppelten Zustände** $|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$ i. a. keine Eigenzustände von \vec{J}^2 sind (wohl aber von J_z , s. u.).

Bei Vorgabe von j_1 und j_2 liegen die Zustände $|j_1 j_2; j m\rangle$ im Zustandsraum $h(j_1, j_2)$; sie lassen sich nach den Zuständen $|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$ entwickeln:

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle. \quad (11.83)$$

Nach der allgemeinen Theorie (Kap. 8) sind für j und m die Werte $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ bzw. $m = +j, \dots, -j$ möglich. Welche von diesen möglichen Werten sind in $h(j_1, j_2)$ tatsächlich realisiert?

Zur *Abkürzung* werden die Quantenzahlen j_1, j_2 weggelassen:

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle =: |m_1 m_2\rangle, \quad |j_1 j_2; j m\rangle =: |j m\rangle \quad (11.84)$$

$$|j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | j m\rangle. \quad (11.85)$$

\Rightarrow

Im folgenden geht es um die Berechnung der (nichtverschwindenden) Koeffizienten $\langle m_1 m_2 | j m\rangle$ zu vorgegebenem j_1, j_2 .

Die ungekoppelten Zustände $|m_1 m_2\rangle$ sind bereits Eigenzustände von $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ zum Eigenwert (in Einheiten von \hbar)

$$m = m_1 + m_2. \quad (11.86)$$

Darum erhält man die in $h(j_1, j_2)$ vorkommenden m -Werte, indem man in (11.86) $m_1 = +j_1, \dots, -j_1$ und $m_2 = +j_2, \dots, -j_2$ setzt, also

$$m = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, -j_1 - j_2 + 1, -j_1 - j_2. \quad (11.87)$$

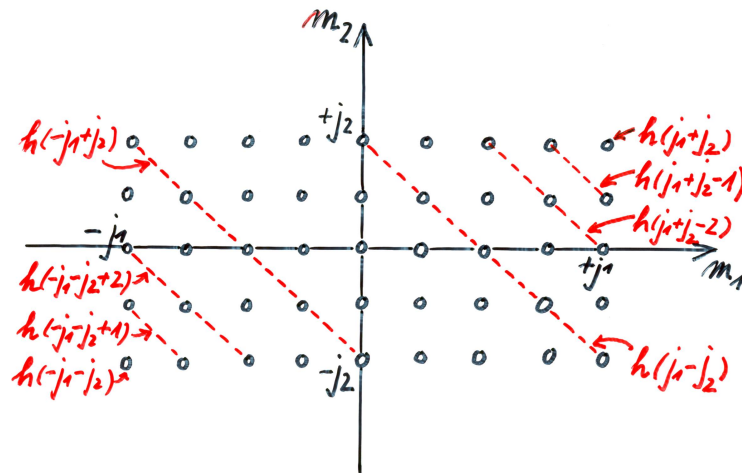
Zu jedem m -Wert gibt es einen Unterraum $h(m)$. Für $h(j_1, j_2)$ resultiert die folgende **Zerlegung in orthogonale Unterräume**:

$$h(j_1, j_2) = h(j_1 + j_2) \oplus h(j_1 + j_2 - 1) \oplus \dots \oplus h(-j_1 - j_2 + 1) \oplus h(-j_1 - j_2). \quad (11.88)$$

O. B. d. A. sei $j_1 \geq j_2$. Nachfolgend sind Basisvektoren und Dimensionen der $h(m)$ aufgelistet:

m	Basisvektoren in $h(m)$	$\dim h(m)$
$j_1 + j_2$	$ j_1 j_2\rangle$	1
$j_1 + j_2 - 1$	$ j_1 - 1, j_2\rangle, j_1, j_2 - 1\rangle$	2
$j_1 + j_2 - 2$	$ j_1 - 2, j_2\rangle, j_1 - 1, j_2 - 1\rangle, j_1, j_2 - 2\rangle$	3
...
$j_1 - j_2$		$2j_2 + 1$
...		...
$-j_1 + j_2$		$2j_2 + 1$
...		...
$-j_1 - j_2 + 2$	$ -j_1 + 2, -j_2\rangle, -j_1 + 1, -j_2 + 1\rangle, -j_1, -j_2 + 2\rangle$	3
$-j_1 - j_2 + 1$	$ -j_1 + 1, -j_2\rangle, -j_1, -j_2 + 1\rangle$	2
$-j_1 - j_2$	$ -j_1, -j_2\rangle$	1

Graphische Darstellung, z. B. für $j_1 = 4, j_2 = 2$:



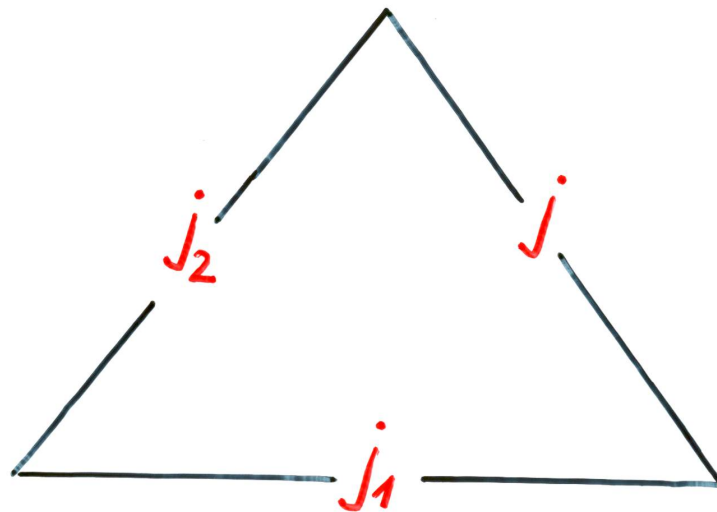
• Abbildung 11.6 •

Die zu einem erlaubten m -Wert gehörigen gekoppelten Zustände $|j m\rangle$ entstehen durch Linearkombination der Basisvektoren von $h(m)$. Zur Zustandskopplung gemäß (11.85) tragen nur diejenigen ungekoppelten Zustände $|m_1, m_2\rangle$ bei, welche die Bedingung (11.86) erfüllen. Die Kopplungskoeffizienten verschwinden, falls $m_1 + m_2 \neq m$ ist.

Welche j -Werte kommen in $h(j_1, j_2)$ vor? O. B. d. A. sei weiterhin $j_1 \geq j_2$, dann gilt die **Dreiecksbedingung** in der Form

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, j_1 - j_2. \quad (11.89)$$

Falls die Quantenzahlen j_1, j_2 und j diese Bedingung nicht erfüllen, verschwinden die entsprechenden Kopplungskoeffizienten.



$$j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2$$

• Abbildung 11.7 •

Zu jedem j -Wert gibt es einen Unterraum $\tilde{h}(j)$, der Dimension $2j + 1$ entsprechend den darin möglichen m -Werten: $m = +j, \dots, -j$. Statt (11.88) hat man die alternative **Zerlegung in orthogonale Unterräume**:

$$h(j_1, j_2) = \tilde{h}(j_1 + j_2) \oplus \tilde{h}(j_1 + j_2 - 1) \oplus \dots \oplus \tilde{h}(j_1 - j_2 + 1) \oplus \tilde{h}(j_1 - j_2). \quad (11.90)$$

Diese Zerlegung ist zumindest dimensionsmäßig möglich, denn es gilt:

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j=j_1+j_2} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \quad (11.91)$$

Konstruktion der Unterräume $\tilde{h}(j)$: Wir beginnen mit $j = j_1 + j_2$. Der Basisvektor $|j_1, j_2\rangle$ ist nicht nur Eigenvektor von J_z zum Eigenwert $\hbar(j_1 + j_2)$, sondern auch Eigenvektor von \vec{J}^2 zum Eigenwert $\hbar^2(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)$ – wie sich leicht verifizieren

lässt:

$$\begin{aligned}
\vec{J}^2 |j_1, j_2\rangle &= (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 |j_1 j_2\rangle \\
&= (\vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2 \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2) |j_1 j_2\rangle \\
&= (\vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2 J_{1z} J_{2z} + J_{1+} J_{2-} + J_{1-} J_{2+}) |j_1 j_2\rangle \\
&= \hbar^2 (j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2 j_1 j_2) |j_1 j_2\rangle \\
&= \hbar^2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1 j_2\rangle ; \tag{11.92}
\end{aligned}$$

folglich ist

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2\rangle . \tag{11.93}$$

Stufenoperatoren:

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y = J_{1\pm} + J_{2\pm} . \tag{11.94}$$

Anwendung von J_+ auf (11.93) ergibt

$$J_+ |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = (J_{1+} + J_{2+}) |j_1 j_2\rangle = 0 . \tag{11.95}$$

Dagegen kann man durch Anwendung von J_- weitere gekoppelte Zustände zu $j = j_1 + j_2$ konstruieren, nämlich zu $m = j_1 + j_2 - 1, \dots$ Nach (8.118) erhält man aus (11.93):

$$\begin{aligned}
J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
&= (J_{1-} + J_{2-}) |j_1 j_2\rangle \tag{11.96} \\
&= \hbar \sqrt{2 j_1} |j_1 - 1, j_2\rangle + \hbar \sqrt{2 j_2} |j_1, j_2 - 1\rangle ,
\end{aligned}$$

folglich ist

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle . \tag{11.97}$$

Durch weitere Anwendungen von J_- gelangt man sukzessive zu den gekoppelten Zuständen $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle, \dots |j_1 + j_2, -j_1 - j_2\rangle$. Damit ist der Unterraum $\tilde{h}(j_1 + j_2)$ konstruiert.

Die Konstruktion von $\tilde{h}(j_1 + j_2 - 1)$ beginnt mit dem gekoppelten Zustand

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle . \tag{11.98}$$

Dieser Vektor ist Eigenvektor von \vec{J}^2 zum Eigenwert $\hbar^2 j(j + 1)$ mit $j = j_1 + j_2 - 1$ und von J_z zum Eigenwert $\hbar m = \hbar(j_1 + j_2 - 1)$. (Er ist orthogonal zu $|j_1 + j_2, j_1 +$

$j_2 - 1$) in (11.97) und spannt zusammen mit diesem den zweidimensionalen Unterraum $h(j_1 + j_2 - 1)$ auf.) Sukzessive Anwendung von J_- liefert die gekoppelten Zustände $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle, \dots |j_1 + j_2 - 1, -j_1 - j_2 + 1\rangle$, d. h. die gekoppelten Basisvektoren des Unterraumes $\tilde{h}(j_1 + j_2 - 1)$.

Die Konstruktion von $\tilde{h}(j_1 + j_2 - 2)$ beginnt mit dem Zustand $|j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle$. Dieser ist orthogonal zu den Zuständen $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle$ und $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle$ anzusetzen (orthonormale Basis in $h(j_1 + j_2 - 2)$). Dann wieder Anwendung von J_- usw.

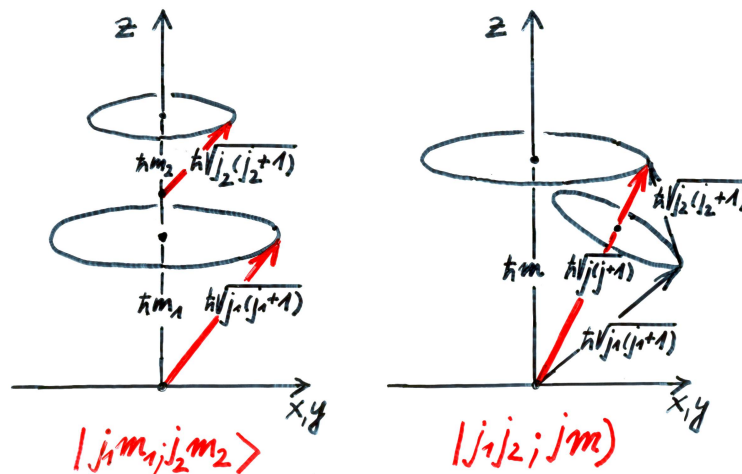
Auf diese Weise gelangt man schließlich zum Unterraum $\tilde{h}(j_1 - j_2)$.

Die gekoppelten Zustände $|j, m\rangle$ sind – wie die ungekoppelten Zustände $|m_1, m_2\rangle$ gemäß (11.79) – orthonormiert:

$$\langle j' m' | j m \rangle = \delta_{j' j} \delta_{m' m}. \quad (11.99)$$

Sie bilden – wie die $|m_1 m_2\rangle$ – eine *Orthonormalbasis* im Zustandsraum $h(j_1, j_2)$.

Veranschaulichung der gekoppelten und ungekoppelten Zustände:



• Abbildung 11.8 •

Die Entwicklungskoeffizienten in (11.83, 85)

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle =: \langle m_1 m_2 | j m \rangle \quad (11.100)$$

werden als (**Vektor-**) **Kopplungskoeffizienten** oder **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** bezeichnet. Sie verschwinden, falls eine der Bedingungen (11.86, 89) verletzt ist.

Wegen (11.79, 99) ist die Matrix dieser Koeffizienten unitär. Es gelten die *Orthogonalitätsrelationen*:

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} (j' m' | m_1 m_2 \rangle \langle m_1 m_2 | j m \rangle = \delta_{j' j} \delta_{m' m} \quad (11.101)$$

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{+j} \langle m'_1 m'_2 | j m \rangle (j m | m_1 m_2 \rangle = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} .$$

Bei geeigneter Phasenwahl der gekoppelten Zustände $|j m\rangle$ sind alle Clebsch-Gordan-Koeffizienten *reell*. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten hängen von *fünf* unabhängigen Quantenzahlen ab: den drei j -Quantenzahlen j_1, j_2 und j sowie von drei m -Quantenzahlen, die aber durch die Bedingung $m_1 + m_2 = m$ verknüpft sind. Die Unabhängigkeit der j -Quantenzahlen ist durch die Dreiecksbedingung eingeschränkt. Man kann eine *geschlossene Formel* für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten ableiten (Wigner, Racah, ...), die jedoch sehr kompliziert ist; siehe z. B. Grawert, Gleichung (12.4.17).

1. Beispiel. Bahndrehimpuls $j_1 = l$ und Spin $j_2 = 1/2$ für ein Elektron; **Spin-Bahn-Kopplung**:

$$|l + 1/2, m\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} |m-1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} |m+1/2, -1/2\rangle \quad (11.102)$$

$$|l - 1/2, m\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} |m-1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} |m+1/2, -1/2\rangle .$$

Zwei gekoppelte Zustände zu $j = l \pm 1/2$ ($\Rightarrow m = l + 1/2, \dots, -l - 1/2$ bzw. $m = l - 1/2, \dots, -l + 1/2$): \vec{S} „parallel“ bzw. „antiparallel“ zu \vec{L} .

2. Beispiel. Bei der **Kopplung zweier Elektronenspins**, also $j_1 = j_2 = 1/2$, erhält man drei *Tripletzustände* mit $j = 1$:

$$|1, m\rangle = \sqrt{\frac{1+m}{2}} |m-1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{1-m}{2}} |m+1/2, -1/2\rangle$$

$$= \begin{cases} |1/2, 1/2\rangle & , \quad m = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle) & , \quad m = 0 \\ |-1/2, -1/2\rangle & , \quad m = -1 , \end{cases} \quad (11.103 \text{ a})$$

d. h. „parallele“ Spinstellung, und einen *Singulettzustand* mit $j = m = 0$:

$$|0, 0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2, 1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle) , \quad (11.103 \text{ b})$$

d. h. „antiparallele“ Spinstellung. Verifiziere (11.102, 103)!

Zu 1. Elektron im elektrostatischen Zentralpotential mit **Spin-Bahn-Wechselwirkung**; Hamilton-Operator:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) + W(r) \vec{L} \cdot \vec{S} . \quad (11.104)$$

Erläuterung des $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Terms: Das Elektron „sieht“ in seinem Ruhesystem das Magnetfeld

$$\begin{aligned} \vec{B} &\stackrel{*}{=} \vec{E} \wedge \frac{\vec{v}}{c^2} \\ &= \frac{1}{ec^2} \vec{\nabla} V(r) \wedge \vec{v} \\ &= \frac{1}{emc^2} \frac{V'(r)}{r} \vec{L} , \end{aligned} \quad (11.105)$$

wobei * den nichtrelativistischen Grenzfall bedeutet. Mit $\vec{\mu} = -(e/m) \vec{S}$ folgt

$$\begin{aligned} H_{Spin-Bahn} &= -\frac{1}{2} \vec{\mu} \cdot \vec{B} \\ &= \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{V'(r)}{r} \vec{L} \cdot \vec{S} . \end{aligned} \quad (11.106)$$

Der Faktor 1/2 (Thomas-Faktor) trägt der Tatsache Rechnung, dass das Ruhesystem des Elektrons kein Inertialsystem ist (siehe Dirac-Theorie). Aus (11.106) entnimmt man:

$$W(r) = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} . \quad (11.107)$$

Der Hamilton-Operator (11.104) vertauscht mit den Observablen \vec{J}^2 und J_3 , wo $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ den Gesamtdrehimpuls des Elektrons bedeutet; ferner mit \vec{L}^2 und \vec{S}^2 – hingegen

nicht mit L_3 und S_3 ! Die Energieeigenvektoren sind daher als gekoppelte Drehimpuls-zustände $|l s; j m\rangle$ anzusetzen. **Stationäre Pauli-Gleichung:**

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) + W(r) \vec{L} \cdot \vec{S} - E \right) |l s; j m\rangle = 0. \quad (11.108)$$

Mit

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad (11.109)$$

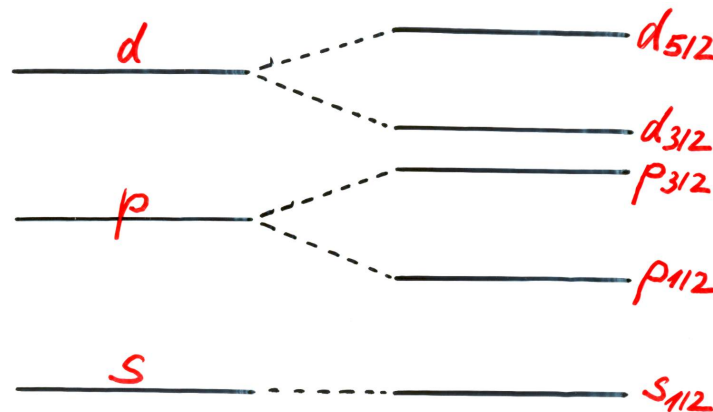
geht diese über in

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) W(r) - E \right) |l s; j m\rangle = 0; \quad (11.110)$$

schließlich mit $s = 1/2 \Rightarrow j = l \pm 1/2$ und Abkürzung (11.84) über in

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} W(r) - E \right) |l \pm 1/2, m\rangle = 0. \quad (11.111)$$

Man sieht, dass die *Energieeigenwerte* j -abhängig sind:



• Abbildung 11.9 •

Unter dem Einfluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung spaltet jedes Energieniveau E_{nl} (außer $l = 0$) in ein Dublett von Energieniveaus E_{nlj} auf: **Feinstruktur**. Im Coulomb-Potential sind Zustände mit gleichem $n j$, aber verschiedenem l miteinander entartet (siehe Dirac-Theorie). Näherungsweise Berechnung der Spin-Bahn-Aufspaltung durch *Störungsrechnung*; siehe unten.

Die *Energieeigenspinoren* sind nach (11.102) in Orts- (Kugelkoordinaten)-Spin-Darstellung von der Gestalt

$$\langle r, \vartheta, \varphi, \pm \hbar / 2 | l \pm 1/2, m \rangle = \frac{R(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + 1/2} Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi) \\ \sqrt{l \mp m + 1/2} Y_{l, m+1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (11.112)$$

wobei die radiale Wellenfunktion $R(r)$ nach (9.11) und (11.111) aus der radialen Pauli-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -l-1 \end{pmatrix} W(r) - E \right) R(r) = 0 \quad (11.113)$$

unter geeigneten Randbedingungen zu berechnen ist. Auch $R(r)$ ist j -abhängig. In (11.113) steht l im Falle $j = l + 1/2$ und $-l - 1$ im Falle $j = l - 1/2$.

Zu 2. Bedeutsam für **Elektron-Elektron-Streuung** oder Spektren der **Zweielektronenatome**: He; Erdalkaliatome, ...

12 Das quantenmechanische Mehrkörperproblem

Bisher wurden nur Einteilchensysteme behandelt. Nun betrachten wir ein **System aus N Teilchen**: Darauf sind die Postulate I bis VI voll anwendbar – mit offensichtlicher Verallgemeinerung bezüglich der vervielfachten Anzahl der Freiheitsgrade ($3 \rightarrow 3N$ ohne Spin, $4 \rightarrow 4N$ mit Spin). **Zwei Fälle** sind zu unterscheiden: Die Teilchen sind

- *verschieden* = unterscheidbar hinsichtlich irgendwelcher experimentell feststellbaren Merkmale (Masse, Ladung, Spin, ...), z. B. Elektron und Proton; dann ist kein zusätzliches Postulat für die qum. Beschreibung erforderlich;
- *gleich* = nicht unterscheidbar im obigen Sinne, z. B. Elektron und Elektron oder Proton und Proton; dann ist ein zusätzliches Symmetriepostulat (das *Pauli-Prinzip*) zu formulieren. Übliche Bezeichnung: *identische Teilchen*.

In der KLM sind alle Körper grundsätzlich unterscheidbar (weil markierbar), in der QUM nicht. Wir diskutieren zunächst den qum. Fall unterscheidbarer Teilchen. Die nachfolgenden Ausführungen gelten *auch* für Systeme identischer Teilchen.

Die **Observablen** des N -Teilchen-Systems sind durch selbstadjungierte Operatoren in einem Hilbert-Raum zu beschreiben (Postulat II). Den kartesischen Ortskoordinaten sind Operatoren $x_k^{(\nu)}$, den kanonisch konjugierten Impulsen Operatoren $p_k^{(\nu)}$ zuzuordnen ($\nu = 1, 2, \dots, N$; $k = 1, 2, 3$) mit den Kommutatoren:

$$[x_j^{(\mu)}, x_k^{(\nu)}] = 0 = [p_j^{(\mu)}, p_k^{(\nu)}] \quad (12.1)$$

$$[x_j^{(\mu)}, p_k^{(\nu)}] = i \hbar \delta_{\mu\nu} \delta_{jk} ;$$

ferner hat man Operatoren $S_k^{(\nu)}$ für die k -te Spinkomponente des ν -ten Teilchens mit den Kommutatoren:

$$[S_j^{(\mu)}, S_k^{(\nu)}] = i \hbar \delta_{\mu\nu} S_l^{(\mu)} , \quad (12.2)$$

$jkl = 123$ zykl. Darüber hinaus fordert man Vertauschbarkeit aller Spin- mit allen Orts- und Impulskomponenten.

Nach Postulat VI stellen $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, S_3^{(1)}, \dots, x_1^{(N)}, x_2^{(N)}, x_3^{(N)}, S_3^{(N)}$ einen **vollständigen Satz** verträglicher Observablen des N -Teilchen-Systems dar. Der simultane Eigenvektor $|\vec{x}^{(1)}, \hbar m^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}, \hbar m^{(N)}\rangle$ repräsentiert einen Zustand, in dem die obigen Observablen simultan die scharfen Messwerte $\vec{x}^{(1)}, \dots, \hbar m^{(N)}$ annehmen. Bezeichnung von $m^{(\nu)}$ als *Spinvariable* des ν -ten Teilchens: $m^{(\nu)} = -s^{(\nu)}, \dots, +s^{(\nu)}$ ($2s^{(\nu)} + 1$ Werte), wo $s^{(\nu)}$ die feste *Spinquantenzahl* des ν -ten Teilchens ist.

Unter der **Orts-Spin-Darstellung** des N -Teilchen-Zustandes ψ (Postulat I) versteht man die Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x}^{(1)}, \hbar m^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}, \hbar m^{(N)} | \psi \rangle \\ &= \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}, m^{(N)}) \\ &=: \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) \end{aligned} \quad (12.3)$$

mit der *Interpretation*: $|\psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)})|^2 =$ Wahrscheinlichkeit(sdichte) dafür, bei simultaner Messung der Orts- und 3-Komponenten des Spins aller N Teilchen die Werte $\vec{x}^{(\nu)}$ bzw. $\hbar m^{(\nu)}$ zur erhalten. Normierung:

$$\sum_{m^{(1)}, \dots, m^{(N)}} \int \dots \int d^3 x^{(1)} \dots d^3 x^{(N)} |\psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)})|^2 = 1. \quad (12.4)$$

Durch Fourier-Transformation bzgl. der $3N$ Ortskoordinaten gelangt man zur *Impuls-Spin-Darstellung* des Zustandes usw.

Wirkungsweise der Orts-, Impuls- und Spinoperatoren in Orts-Spin-Darstellung:

$$\begin{aligned} \hat{x}_k^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) &= x_k^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) \\ \hat{p}_k^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k^{(\mu)}} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}); \end{aligned} \quad (12.5)$$

zur Unterscheidung des Operators vom Eigenwert. Ferner gemäß (8.118):

$$\begin{aligned} S_{\pm}^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) &= (S_1^{(\mu)} \pm i S_2^{(\mu)}) \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) \\ &= \hbar \sqrt{s^{(\mu)}(s^{(\mu)} + 1) - m^{(\mu)}(m^{(\mu)} \pm 1)} \times \\ &\times \psi(\dots \vec{x}^{(\mu-1)}, m^{(\mu-1)}, \vec{x}^{(\mu)}, m^{(\mu)} \pm 1, \vec{x}^{(\mu+1)}, m^{(\mu+1)} \dots) \\ S_3^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}) &= \hbar m^{(\mu)} \psi(\vec{x}^{(\nu)}, m^{(\nu)}). \end{aligned} \quad (12.6)$$

Die anderen Observablen des N -Teilchen-Systems sind Funktionen der Operatoren

$x_k^{(\mu)}, p_k^{(\mu)}, S_3^{(\mu)}, S_{\pm}^{(\mu)}$; z. B. **Schwerpunkt, Gesamtimpuls, Gesamtdrehimpuls**:

$$\begin{aligned}\vec{X} &= \sum_{\nu} m_{\nu} \vec{x}^{(\nu)} / \sum_{\nu} m_{\nu} \\ \vec{P} &= \sum_{\nu} \vec{p}^{(\nu)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\nu} \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(\nu)}} \\ \vec{L} &= \sum_{\nu} \vec{L}^{(\nu)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\nu} \vec{x}^{(\nu)} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(\nu)}} \\ \vec{S} &= \sum_{\nu} \vec{S}^{(\nu)} \\ \vec{J} &= \sum_{\nu} \vec{J}^{(\nu)} = \sum_{\nu} (\vec{L}^{(\nu)} + \vec{S}^{(\nu)}) = \vec{L} + \vec{S},\end{aligned}\tag{12.7}$$

wo m_{ν} die Masse des ν -ten Teilchens und $\sum_{\nu} m_{\nu}$ die Gesamtmasse des Systems ist.

Beispiel eines Hamilton-Operators:

$$H = \sum_{\nu} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\nu}} \Delta^{(\nu)} + V_{\nu}(\vec{x}^{(\nu)}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} ' V_{\mu\nu} (|\vec{x}^{(\mu)} - \vec{x}^{(\nu)}|)\tag{12.8}$$

für N spinlose Teilchen im konservativen äußeren Kraftfeld; die inneren Kräfte seien Zentralkräfte. Der Hamilton-Operator bestimmt gemäß Postulat IV die Dynamik des Systems; die Eigenwerte von H sind gleich den erlaubten Energieniveaus des Systems (Postulat III).

Theorem von Ehrenfest. Betrachte eine Gesamtheit von N -Teilchen-Systemen (ohne Spin) im Zustand $\psi(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}, t)$ (Schrödinger-Bild). In Verallgemeinerung von (2.46, 47) gilt (mit (4.41)):

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \vec{X} \rangle &= \left(\psi(t), \frac{i}{\hbar} [H, \vec{X}] \psi(t) \right) = \langle \vec{P} \rangle / \sum_{\nu} m_{\nu} \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle &= \left(\psi(t), \frac{i}{\hbar} [H, \vec{P}] \psi(t) \right) = \left\langle - \sum_{\nu} \partial V_{\nu} / \partial \vec{x}^{(\nu)} \right\rangle.\end{aligned}\tag{12.9}$$

Beweis? Im Mittel über die Gesamtheit hat man also:

- Schwerpunktgeschwindigkeit = Gesamtimpuls / Gesamtmasse
- Zeitableitung des Gesamtimpulses = resultierende *äußere* Kraft

wie in der KLM, nur gilt das dort für jedes einzelne System. Ferner ist

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{L} \rangle = \left(\psi(t), \frac{i}{\hbar} [H, \vec{L}] \psi(t) \right) = \left\langle - \sum_{\nu} \vec{x}^{(\nu)} \wedge \partial V_{\nu} / \partial \vec{x}^{(\nu)} \right\rangle.\tag{12.10}$$

Beweis? Im Mittel über die Gesamtheit gilt also:

- Zeitableitung des gesamten Bahndrehimpulses = resultierendes *äußeres* Drehmoment wie in der KLM, jedoch ... s. o.!

Wasserstoffatom als Zweikörpersystem aus Elektron (Teilchen 1) und Proton (Teilchen 2). Hamilton-Operator bei Vernachlässigung spinabhängiger Terme (z. B. Spin-Bahn-Wechselwirkung) und Abgeschlossenheit (keine äußeren Kräfte):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta^{(2)} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|}. \quad (12.11)$$

Übergang zu *Schwerpunkt-* und *Relativkoordinaten*:

$$\vec{X} = \frac{m_1 \vec{x}^{(1)} + m_2 \vec{x}^{(2)}}{m_1 + m_2} \quad (12.12)$$

$$\vec{x} = \vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}$$

transformiert H auf die folgende Gestalt (zu zeigen!):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta(\vec{X}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\vec{x}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{x}|} \quad (12.13)$$

mit der *Gesamtmasse* bzw. der *reduzierten Masse*

$$M = m_1 + m_2 \quad (12.14)$$

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Der erste Term in (12.13) ist die kinetische Energie der *Schwerpunktbewegung*:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta(\vec{X}) = \frac{1}{2M} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} \right)^2 = \frac{1}{2M} \vec{P}^2 \quad (12.15)$$

mit dem *Gesamtimpuls* (kanonisch konjugiert zu \vec{X})

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(1)}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(2)}} \right) = \vec{p}^{(1)} + \vec{p}^{(2)}; \quad (12.16)$$

der zweite Term ist die kinetische Energie der *Relativbewegung*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\vec{x}) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right)^2 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 \quad (12.17)$$

mit dem *Relativimpuls* (kanonisch konjugiert zu \vec{x})

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{\hbar}{iM} \left(m_2 \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(1)}} - m_1 \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(2)}} \right) = \frac{1}{M} \left(m_2 \vec{p}^{(1)} - m_1 \vec{p}^{(2)} \right) \quad (12.18)$$

der dritte Term ist die potentielle Energie der Coulomb-Wechselwirkung.

Durch die Transformation ist H in den neuen Koordinaten \vec{X}, \vec{x} *entkoppelt*, was eine wesentliche Erleichterung für die Lösung des Eigenwertproblems von H darstellt: H separabel $\Rightarrow \psi$ multiplikativ, E additiv.

Energieeigenwertproblem:

$$(H - E) \psi(\vec{X}, \vec{x}) = 0. \quad (12.19)$$

Der Produktansatz

$$\psi(\vec{X}, \vec{x}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{X}} \phi(\vec{x}) \quad (12.20)$$

zusammen mit der Energiebilanz

$$E = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2M} + \varepsilon \quad (12.21)$$

führt zur Bestimmung von $\phi(\vec{x})$ und ε auf die Differentialgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\vec{x}) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{x}|} - \varepsilon \right) \phi(\vec{x}) = 0. \quad (12.22)$$

Verifiziere das! *Interpretation:* Die Schwerpunktbewegung erfolgt mit dem konstanten Impuls $\vec{P} = \hbar \vec{K}$ und der Energie $E = \hbar^2 \vec{K}^2 / 2M$; sie wird durch die ebene Welle $e^{i\vec{K} \cdot \vec{X}}$ beschrieben. Die Relativbewegung ist durch die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung (12.22) gegeben: ε ist die Energie der Relativbewegung (innere Energie), $\phi(\vec{x})$ ist die entsprechende Wellenfunktion.

Anmerkungen:

1. Die Separation des N -Körper-Problems in N Einkörperprobleme ist i. a. nur im Falle $N = 2$ möglich; das gilt für KLM und QUM gleichermaßen. In dem trivialen Fall fehlender Wechselwirkung (ideales Gas) ist die Separation für beliebige N möglich; das gilt auch für den Fall linearer Kopplung (Normalschwingungen).

2. Auf das Erfordernis, bei der Analyse der inneren Struktur des H -Atoms die Elektronenmasse durch die reduzierte Masse von Elektron und Proton zu ersetzen, wurde bereits hingewiesen. Im übrigen sind ε und $\phi(\vec{x})$ durch (9.71) bzw. (9.73, 74, 75) gegeben •

Wir wenden uns **Systemen identischer Teilchen** zu. Sei zunächst $N = 2$, z. B. die Elektronenhülle des Helium-Atoms. Die Wellenfunktion, d. h. der Zustandsvektor des Systems in Orts-Spin-Darstellung (beliebige Darstellung siehe Jelitto 5, Kap. 6), ist von der Gestalt:

$$\psi = \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}) =: \psi(1, 2) \quad (12.23)$$

mit

$$\|\psi\|^2 = \sum_{m^{(1)}, m^{(2)} = -s}^{+s} \int d^3 x^{(1)} \int d^3 x^{(2)} |\psi(1, 2)|^2 = 1 .$$

Im Falle unterscheidbarer Teilchen sind beliebige Funktionen (12.23) zur Zustandsbeschreibung zugelassen. Nachfolgend wird gezeigt, dass die Nichtunterscheidbarkeit diesen Spielraum erheblich beschränkt.

Aus der Nichtunterscheidbarkeit der beiden Teilchen folgt für die *Observablen* des Zweikörpersystems deren *Symmetrie*:

$$A(1, 2) = A(2, 1) , \quad (12.24)$$

d. h. deren Invarianz gegen Vertauschung der beiden Teilchen. Keines der beiden Teilchen ist vor dem anderen ausgezeichnet. *Beispiel*: Hamilton-Operator (ohne magnetische Wechselwirkungen, ohne Spin):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta^{(1)} + \Delta^{(2)}) + V(|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|) . \quad (12.25)$$

Operatoren $B(1)$ und $B(2)$ sind also keine sinnvollen Observablen, wohl aber $B(1) + B(2)$.

Für die folgende Diskussion benötigt man die **Transposition**

$$\Pi_{12} \psi(1, 2) = \psi(2, 1) ; \quad (12.26)$$

diese hat die Eigenschaft

$$\Pi_{12} \Pi_{12} = \mathbb{1} . \quad (12.27)$$

Die Invarianzbedingung (12.24) ist damit äquivalent zur Forderung:

$$[\Pi_{12}, A(1, 2)] = 0 . \quad (12.28)$$

Wieso? Anwendung dieser Beziehung auf die Observable

$$A(1, 2) = P_{\psi(1,2)} ,$$

d. h. auf den Projektor auf $\psi(1, 2)$, der die Ja-Nein-Entscheidung über die Eigenschaft $\psi(1, 2)$ repräsentiert. (12.24) impliziert $P_{\psi(1,2)} = P_{\psi(2,1)}$, d. h. $\psi(2, 1)$ ist proportional zu $\psi(1, 2)$.

Man erhält mit (12.28) dasselbe Resultat:

$$\Pi_{12} P_{\psi(1,2)} = P_{\psi(1,2)} \Pi_{12}$$

$$\Rightarrow \quad \Pi_{12} \psi(1, 2) = \Pi_{12} P_{\psi(1,2)} \psi(1, 2) = P_{\psi(1,2)} \Pi_{12} \psi(1, 2); \quad (12.29)$$

folglich ist $\Pi_{12} \psi(1, 2)$ proportional zu $\psi(1, 2)$:

$$\Pi_{12} \psi(1, 2) = p \psi(1, 2), \quad p = \text{konstant}. \quad (12.30)$$

Anwendung von Π_{12} auf diese Gleichung führt mit (12.27) auf

$$\Pi_{12} \Pi_{12} \psi(1, 2) = p^2 \psi(1, 2) = \psi(1, 2); \quad (12.31)$$

folglich ist

$$p^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad p = \pm 1$$

$$\Rightarrow \quad \Pi_{12} \psi(1, 2) = \pm \psi(1, 2). \quad (12.32)$$

$\psi(1, 2)$ ist also entweder **symmetrisch**:

$$\psi(2, 1) = \psi(1, 2) \quad (12.33 \text{ a})$$

oder **antisymmetrisch**:

$$\psi(2, 1) = -\psi(1, 2) \quad (12.33 \text{ b})$$

gegenüber Vertauschung der Koordinatensätze 1 und 2. Andere $\psi(1, 2)$ sind für (zwei) identische Teilchen nicht zugelassen.

Der **Hilbert-Raum** der normierbaren Wellenfunktionen (12.23):

$$\mathcal{H} = \left\{ \psi(1, 2) \mid \sum_{m^{(1)}, m^{(2)}} \int d^3 x^{(1)} \int d^3 x^{(2)} |\psi(1, 2)|^2 < \infty \right\}, \quad (12.34)$$

zerfällt in zwei orthogonale Teilräume:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_- \quad (12.35)$$

mit

$$\mathcal{H}_{\pm} = \left\{ \psi(1, 2) \mid \psi(1, 2) \in \mathcal{H} \text{ und } \begin{array}{l} \text{symmetrisch} \\ \text{antisymmetrisch} \end{array} \right\} ;$$

denn $\psi \in \mathcal{H} \Rightarrow \psi = \psi_+ + \psi_-$ mit

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} \pm \Pi_{12}) \psi \in \mathcal{H}_{\pm} \quad (12.36)$$

und $(\psi_+, \psi_-) = 0$. Der Zustand des Systems ist also durch einen Vektor aus \mathcal{H}_+ oder durch einen Vektor aus \mathcal{H}_- zu beschreiben.

Die **zeitliche Entwicklung** des Systems führt nicht aus \mathcal{H}_+ bzw. \mathcal{H}_- heraus; der Symmetriotyp der Wellenfunktion bleibt unter der Dynamik erhalten.

Beweis: Die Symmetrie des Hamilton-Operators:

$$[\Pi_{12}, H] = 0 , \quad (12.37)$$

überträgt sich auf den Zeitentwicklungsoperator:

$$[\Pi_{12}, U(t)] = 0 . \quad (12.38)$$

Das wird in Jelitto 5, S. 99 für den allgemeinen Fall bewiesen; für den Spezialfall $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ ist es ohnehin klar. Damit folgt:

$$\Pi_{12} \psi(1, 2; 0) = \pm \psi(1, 2; 0) \quad (12.39)$$

und daraus weiter mit (12.38, 39):

$$\begin{aligned} \Pi_{12} \psi(1, 2; t) &= \Pi_{12} U(t) \psi(1, 2; 0) \\ &= U(t) \Pi_{12} \psi(1, 2; 0) \\ &= \pm U(t) \psi(1, 2; 0) \\ &= \pm \psi(1, 2; t) . \end{aligned} \quad (12.40)$$

Das ist die *Behauptung*.

Sei nun N beliebig:

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots, \vec{x}^{(N)}, m^{(N)}) =: \psi(1, 2, \dots, N) . \quad (12.41)$$

Betrachte die Gruppe der **Permutationsoperatoren**

$$\Pi \psi(1, 2, \dots, N) = \psi(i_1, i_2, \dots, i_N) , \quad (12.42)$$

dabei ist i_1, i_2, \dots, i_N eine *Permutation* (der Koordinatensätze) der Teilchen $1, 2, \dots, N$. In Verallgemeinerung von (12.24, 28) erhebt man an die Observablen des Systems die *Invarianzforderung*:

$$\Pi A(1, 2, \dots, N) = A(1, 2, \dots, N) \Leftrightarrow [\Pi, A(1, 2, \dots, N)] = 0. \quad (12.43)$$

Bedeutung: Keine Reihenfolge der N identischen Teilchen ist in irgendeiner physikalisch feststellbaren Weise ausgezeichnet.

Analog zu (12.30) folgt aus (12.43) die Proportionalität

$$\begin{aligned} \Pi \psi(1, 2, \dots, N) &= p(\Pi) \psi(1, 2, \dots, N), \\ p(\Pi) &= \text{konstant}. \end{aligned} \quad (12.44)$$

Jede Permutation Π ist darstellbar als Produkt von Transpositionen Π_{jk} :

$$\Pi = \Pi_{jk} \Pi_{j'k'} \Pi_{j''k''} \dots \quad (12.45)$$

Diese Darstellung ist zwar nicht eindeutig, aber: Die Anzahl der Transpositionen ist entweder gerade oder ungerade. Man spricht von *geraden* bzw. *ungeraden* Permutationen.

Aus (12.45) folgt:

$$p(\Pi) = p(\Pi_{jk}) p(\Pi_{j'k'}) p(\Pi_{j''k''}) \dots \quad (12.46)$$

Die Faktoren $p(\Pi_{jk})$ haben nach (12.32) sämtlich den Wert $+1$ oder -1 . Es gilt sogar: $\psi(1, 2, \dots, N)$ ist entweder symmetrisch gegen *alle* Transpositionen: *total symmetrische* Wellenfunktion oder antisymmetrisch gegen *alle* Transpositionen: *total antisymmetrische* Wellenfunktion, sodass in (12.46) entweder *alle* Faktoren $+1$ oder *alle* Faktoren -1 sind. Zum Beweis zeige man: $\Pi_{jk} \psi = +\psi$, $\Pi_{j'k'} \psi = -\psi \Rightarrow \psi = 0$; siehe Grawert S. 180.

Damit folgt:

$$p(\Pi) = 1 \quad \Rightarrow \quad \Pi \psi(1, 2, \dots, N) = \psi(1, 2, \dots, N) \quad (12.47 \text{ a})$$

für **total symmetrische Wellenfunktionen**,

$$p(\Pi) = \text{sign}(\Pi) \quad \Rightarrow \quad \Pi \psi(1, 2, \dots, N) = \text{sign}(\Pi) \psi(1, 2, \dots, N) \quad (12.47 \text{ b})$$

für **total antisymmetrische Wellenfunktionen** mit $\text{sign}(\Pi) = \pm 1$ für gerade/ungerade Permutationen.

Der **Hilbert-Raum** der normierbaren Wellenfunktionen $\psi(1, 2, \dots, N)$ enthält die Hilbert-Räume \mathcal{H}_+ der total symmetrischen und \mathcal{H}_- der total antisymmetrischen ψ -Funktion als (orthogonale) Unterräume:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_- \oplus \dots \quad (12.48)$$

Für $N > 2$ wird jedoch – im Unterschied zu (12.35) – \mathcal{H} nicht von \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- allein aufgespannt. Vielmehr treten noch weitere Unterräume komplizierterer Permutationssymmetrie hinzu (höherdimensionale irreduzible Darstellungen der Permutationsgruppe), die jedoch hier ohne physikalische Bedeutung sind. Der Zustandsvektor eines Systems identischer Teilchen ist entweder aus \mathcal{H}_+ oder aus \mathcal{H}_- . Wie im Falle $N = 2$ verbleibt er dort im Laufe der zeitlichen Entwicklung. Es sind keine Wechselwirkungen bekannt, die den Symmetrietyp von ψ verändern.

Welchen der beiden Räume, d. h. welche Symmetrie der Wellenfunktion man zu wählen hat, hängt von der Teilchensorte ab gemäß dem **Postulat**

VII. $\left\| \begin{array}{l} \text{Der Hilbert-Raum der Zustände eines Systems identischer} \\ \text{Teilchen ist der Raum } \begin{array}{l} \mathcal{H}_+ \\ \mathcal{H}_- \end{array} \text{ für Teilchen mit } \begin{array}{l} \text{ganz} \\ \text{halb} \end{array} \text{ zahligem Spin.} \end{array} \right\|$

Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s = 0, 1, \dots$) bezeichnet man als **Bosonen**, Teilchen mit halbzahligen Spin ($s = 1/2, 3/2, \dots$) als **Fermionen**. Da die Symmetrie der Wellenfunktion das statistische Verhalten eines Vielteilchensystems bestimmt: *Bose-Einsten-* bzw. *Fermi-Dirac-Statistik*, bezeichnet man Postulat VII auch als *Spin-Statistik-Zusammenhang*.

Symmetrisierung für Bosonen. Sei $\psi(1, 2, \dots, N)$ irgendeine N -Teilchen-Wellenfunktion, dann ist

$$\psi_S(1, 2, \dots, N) = C_S \sum_{\Pi} \Pi \psi(1, 2, \dots, N) \quad (12.49)$$

($C_S =$ Normierungskonstante) eine total symmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion: $\psi_S \in \mathcal{H}_+$. Der Operator

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\Pi} \Pi \quad (12.50)$$

wirkt in \mathcal{H} als Projektor auf den Teilraum \mathcal{H}_+ .

Antisymmetrisierung für Fermionen. Sei $\psi(1, 2, \dots, N)$ irgendeine N -Teilchen-Wellenfunktion, dann ist

$$\psi_A(1, 2, \dots, N) = C_A \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \Pi \psi(1, 2, \dots, N) \quad (12.51)$$

($C_A =$ Normierungskonstante) eine total antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion: $\psi_A \in \mathcal{H}_-$. Der Operator

$$A = \frac{1}{N!} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \Pi \quad (12.52)$$

wirkt in \mathcal{H} als Projektor auf den Teilraum \mathcal{H}_- .

Betrachte ein **System identischer Teilchen ohne gegenseitige Wechselwirkung**. Hamilton-Operator:

$$H = \sum_{i=1}^N h(i) , \quad (12.53)$$

$h(i)$ = Hamiltonian des i -ten Teilchens, für alle i gleich. *Energieeigenwertproblem*:

$$(H - E) \psi = 0 . \quad (12.54)$$

Der Produktansatz

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \phi_1(1) \phi_2(2) \dots \phi_N(N) \quad (12.55)$$

führt auf N entkoppelte (identische) Einteilchen-Schrödinger-Gleichungen:

$$(h - \varepsilon_\nu) \phi_\nu = 0 . \quad (12.56)$$

Achtung: Der Index der ϕ -Funktionen in (12.55) zählt die (N unbekannt) Faktoren des Produktansatzes ab; der Index ν der ϕ -Funktion in (12.56) kennzeichnet die (i. a. unendlich vielen) Energieeigenfunktionen des Einteilchen-Problems.

Auswahl von N – nicht notwendig verschiedenen – Einteilchen-Energieeigenfunktionen ϕ_{ν_i} zu Einteilchen-Energieeigenwerten ε_{ν_i} , $i = 1, 2, \dots, N$, liefert die N -Teilchen-*Energieeigenfunktion*

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \phi_{\nu_1}(1) \phi_{\nu_2}(2) \dots \phi_{\nu_N}(N) \quad (12.57)$$

zum N -Teilchen-*Energieeigenwert* (Gesamtenergie)

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{\nu_i} . \quad (12.58)$$

Die Wellenfunktion (12.57) ist i. a. weder symmetrisch noch antisymmetrisch, also zur Zustandsbeschreibung nicht erlaubt.

Falls es sich um *Bosonen* handelt, ist die Wellenfunktion durch (12.49, 57) gegeben:

$$\psi_S(1, 2, \dots, N) = C_S \sum_{\Pi} \Pi \phi_{\nu_1}(1) \phi_{\nu_2}(2) \dots \phi_{\nu_N}(N) . \quad (12.59)$$

Die ϕ_{ν} seien orthonormiert und n_{ν} -fach „besetzt“:

$$\sum_{\nu} n_{\nu} = N ; \quad (12.60)$$

dann folgt aus $\|\psi_S\| = 1$ für die Normierungskonstante:

$$C_S = \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} . \quad (12.61)$$

Beweis in den Übungen!

Falls es sich um *Fermionen* handelt, ist die Wellenfunktion durch (12.51, 57) gegeben:

$$\begin{aligned} \psi_A(1, 2, \dots, N) &= C_A \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \Pi \phi_{\nu_1}(1) \phi_{\nu_2}(2) \dots \phi_{\nu_N}(N) \\ &= C_A \begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(1) & \phi_{\nu_2}(1) & \dots & \phi_{\nu_N}(1) \\ \phi_{\nu_1}(2) & \phi_{\nu_2}(2) & \dots & \phi_{\nu_N}(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_{\nu_1}(N) & \phi_{\nu_2}(N) & \dots & \phi_{\nu_N}(N) \end{vmatrix} . \end{aligned} \quad (12.62)$$

Bezeichnung dieses Ausdrucks als *Slater-Determinante*. Es folgt: $\psi_A = 0$, falls irgendzwei der Einteilchen-Zustände ϕ_{ν} übereinstimmen (zwei gleiche Spalten bringen die Determinante zum Verschwinden), d. h. falls für irgendeine der Besetzungszahlen $n_i \geq 2$ gilt.

Somit gilt das **Pauli-Prinzip**: Jeder Einteilchen-Zustand ϕ_{ν} kann *höchstens von einem* Fermion besetzt sein ($n_{\nu} = 0, 1$)!

Für Bosonen gilt das Pauli-Prinzip nicht, z. B. können sich alle N Bosonen in demselben Einteilchen-Zustand befinden (beispielsweise im Grundzustand).

Falls die ϕ_{ν} in (12.62) orthonormiert sind (und nur einmal vorkommen), berechnet man die Normierungskonstante zu

$$C_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} . \quad (12.63)$$

Beweis in den Übungen!

Die Energieeigenfunktion (12.57) ist also im Falle von Bosonen der S -Prozedur (12.50), im Falle von Fermionen der A -Prozedur (12.52) zu unterwerfen. Da S und A mit H vertauschen, sind ψ_S bzw. ψ_A Energieeigenfunktionen zum selben Energieeigenwert E wie ψ .

Zentralfeldmodell der Atome. Hamilton-Operator eines Atoms der Ordnungszahl Z (ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung):

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(i)} - \frac{Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 |\vec{x}^{(i)}|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^Z \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 |\vec{x}^{(i)} - \vec{x}^{(j)}|} \quad (12.64)$$

approximiert durch

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(i)} + V(r^{(i)}) \right) . \quad (12.65)$$

Dabei ist $V(r)$ ein „mittleres“ Potential, das für alle Z Elektronen gleichermaßen die Wechselwirkung mit dem Kern und mit den $Z - 1$ anderen Elektronen berücksichtigt.

Die *Einelektronen-Zustände* genügen der stationären Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) - \varepsilon_\nu \right) \phi_\nu = 0 \quad (12.66)$$

mit der Lösung

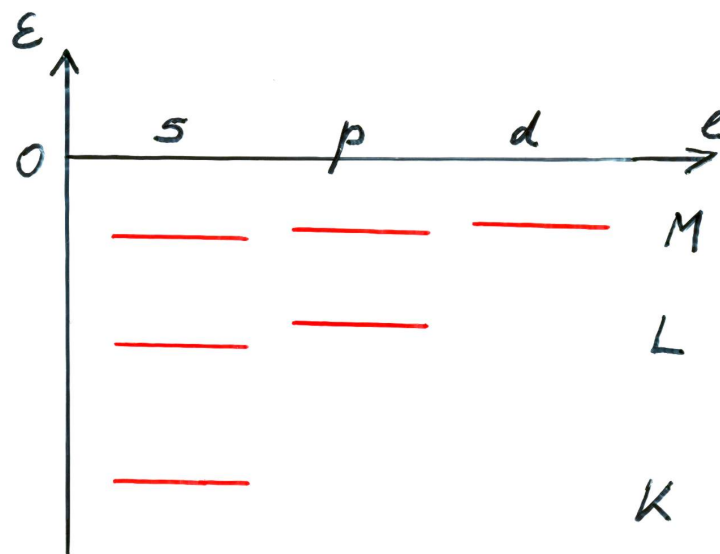
$$\phi_\nu = \phi_{nlm_l m_s}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \chi_{m_s} ; \quad (12.67)$$

dabei ist χ_{m_s} der Eigenvektor von S_3 zum Eigenwert $\hbar m_s$. Die *Einelektronen-Energien*

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_{nl} \quad (12.68)$$

hängen nicht von m_l, m_s ab: $(2l + 1)$ -fache Entartung bzgl. m_l , 2-fache Entartung bzgl. m_s , also insgesamt $2(2l + 1)$ -fache Entartung der ε_{nl} -Niveaus.

Atom im Grundzustand. „Auffüllung“ der Zustände $|n l m_l m_s\rangle$ mit je *einem* Elektron – angefangen beim niedrigsten ε , fortschreitend zu höheren ε -Werten. Zusammenfassung der Terme zur K -, L -, M -, ... Schale:



• Abbildung 12.1 •

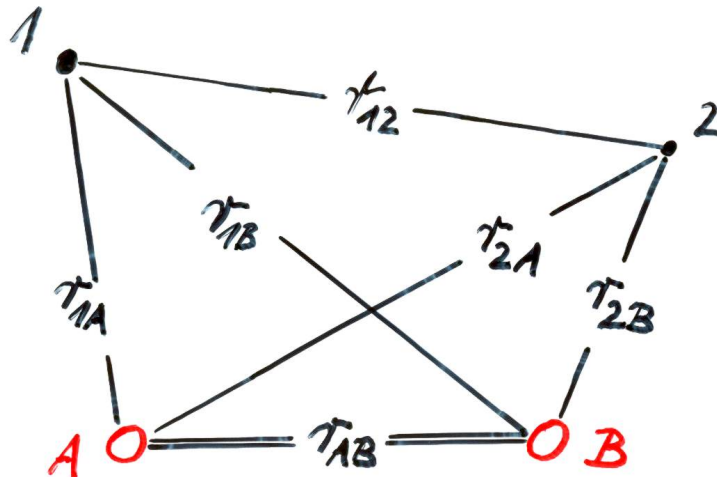
Periodisches System der Elemente:

Schale	Z	Element	Elektronenkonfiguration
K	1	H	$1s$
	2	He	$(1s)^2$
L	3	Li	$(1s)^2 2s$
	4	Be	$(1s)^2 (2s)^2$
	5	B	$(1s)^2 (2s)^2 2p$
	6	C	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$
	7	N	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$
	8	O	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4$
	9	F	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^5$
	10	Ne	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$
M	11	Na	$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 3s$
	\vdots	\vdots	\vdots

Später komplizierter, z. B. $4s$ (K, Ca) energetisch unter $3d$ (Sc, Ti, ...). Näherungscharakter des Zentralfeldmodells.

Wasserstoffmolekül. Aus der Antisymmetrie der Wellenfunktion der beiden Elektronen soll die homöopolare Bindung zweier H-Atome im H_2 -Molekül erklärt wer-

den. *Vierkörper-System*: Zwei Kerne (A, B) und zwei Elektronen ($1, 2$). *Born-Oppenheimer-Näherung*: Vernachlässigung der „langsamen“ Kernbewegung gegen die „schnelle“ Elektronenbewegung \Rightarrow *Zweikörper-Problem* der beiden Elektronen unter Coulomb-Attraktion durch die beiden ruhenden Kerne und unter gegenseitiger Coulomb-Repulsion:



• Abbildung 12.2 •

Hamilton-Operator (ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta^{(1)} + \Delta^{(2)}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{1A}} + \frac{1}{r_{1B}} + \frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{r_{2B}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{AB}} \right). \quad (12.69)$$

Stationäre Schrödinger-Gleichung:

$$(H - E) \psi = 0. \quad (12.70)$$

E und ψ parametrisch abhängig vom Kernabstand r_{AB} . Für die Wellenfunktion ist *Antisymmetrie* zu fordern, da System zweier identischer Fermionen:

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}; \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}) = -\psi(\vec{x}^{(2)}, m^{(2)}; \vec{x}^{(1)}, m^{(1)}) \quad (12.71)$$

Der Ansatz

$$\psi = \phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \chi(m^{(1)}, m^{(2)}) \quad (12.72)$$

führt nach Einsetzen in (12.70) mit (12.69) für den *Ortsanteil* ϕ auf die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$(H - E)\phi = 0 . \quad (12.73)$$

Für die Antisymmetrie von ψ gibt es *zwei Möglichkeiten*:

- ϕ symmetrisch und χ antisymmetrisch
 - ϕ antisymmetrisch und χ symmetrisch.
- (*)

Spinzustand χ . $\chi_{\pm}^{(\nu)}$ sei Eigenvektor von $S_3^{(\nu)}$ zum Eigenwert $\pm \hbar/2$ – sowie von $\vec{S}^{(\nu)2}$ zum Eigenwert $3\hbar^2/4$. χ_{sm} sei Eigenvektor von \vec{S}^2 und S_3 , wo $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ der Gesamtspin ist, zu den Eigenwerten $\hbar^2 s(s+1)$ bzw. $\hbar m$:

$$\begin{aligned} (\vec{S}^2 - \hbar^2 s(s+1))\chi_{sm} &= 0 \\ (S_3 - \hbar m)\chi_{sm} &= 0 \end{aligned} \quad (12.74)$$

mit $s = 1, 0$ und $m = -s, \dots, +s$. Konstruktion (Kopplung) von χ_{sm} aus den $\chi_{\pm}^{(\nu)}$ gemäß (11.103):

- $s = 1$: Triplett-Zustände, Elektronenspin „parallel“:

$$\begin{aligned} \chi_{1,+1} &= \chi_+^{(1)} \chi_+^{(2)} \\ \chi_{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) \\ \chi_{1,-1} &= \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \end{aligned} \quad (12.75 \text{ a})$$

sämtlich *symmetrisch*; jedoch *antisymmetrisch* im Falle

- $s = 0$: Singulett-Zustand, Elektronenspins „antiparallel“:

$$\chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)}) . \quad (12.75 \text{ b})$$

Zur Erfüllung von (*) hat man also die beiden Möglichkeiten:

$$\psi = \phi_- (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \chi_{1,m} , \quad m = +1, 0, -1$$

mit

$$\phi_- (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = -\phi_- (\vec{x}^{(2)}, \vec{x}^{(1)}) \quad (12.76)$$

oder

$$\psi = \phi_+ (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \chi_{0,0}$$

mit

$$\phi_+ (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \phi_+ (\vec{x}^{(2)}, \vec{x}^{(1)}) . \quad (12.77)$$

Dabei sind $\phi_{\pm} (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ symmetrische/antisymmetrische Eigenfunktionen von H zu Eigenwerten E_{\pm} gemäß (12.73).

Grundzustand. Näherung nach Heitler und London: H-Atom-Wellenfunktion $\phi_A (\vec{x}^{(\nu)})$, $\phi_B (\vec{x}^{(\nu)})$ bei A bzw. B zentriert, jeweils atomarer Grundzustand (reell). Kerne in großem Abstand:

$$\phi_{\pm} (\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \phi_A (\vec{x}^{(1)}) \phi_B (\vec{x}^{(2)}) \pm \phi_A (\vec{x}^{(2)}) \phi_B (\vec{x}^{(1)}) . \quad (12.78)$$

Erwartungswert der Energie in den Zuständen (12.76, 77):

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{(\phi_{\pm}, H \phi_{\pm})}{(\phi_{\pm}, \phi_{\pm})} \\ &= 2 E_0 + \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_{AB}} + \frac{C \pm A}{1 \pm S^2} ; \end{aligned} \quad (12.79)$$

dabei ist $E_0 = -13.6$ eV die Grundzustandsenergie des H-Atoms; der zweite Term ist die potentielle Energie der Coulomb-Repulsion der „nackten“ Kerne; ferner hat man das *Überlappintegral*

$$S = \int d^3 x \phi_A (\vec{x}) \phi_B (\vec{x}) \quad (12.80)$$

zwischen den zwar normierten, aber nicht orthogonalen Funktionen $\phi_A (\vec{x})$, $\phi_B (\vec{x})$; es ist

$$S \xrightarrow{r_{AB} \rightarrow \infty} 0 ; \quad (12.81)$$

weiterhin das *Coulomb-Integral*

$$\begin{aligned} C &= \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \left(\int d^3 x^{(1)} \int d^3 x^{(2)} \frac{\phi_A^2 (\vec{x}^{(1)}) \phi_B^2 (\vec{x}^{(2)})}{r_{12}} \right. \\ &\quad \left. - \int d^3 x^{(1)} \frac{\phi_A^2 (\vec{x}^{(1)})}{r_{1B}} - \int d^3 x^{(2)} \frac{\phi_B^2 (\vec{x}^{(2)})}{r_{2A}} \right) \end{aligned} \quad (12.82)$$

für die Wechselwirkung zwischen den „Ladungswolken“ $-e \phi_A^2 (\vec{x}^{(1)})$ und $-e \phi_B^2 (\vec{x}^{(2)})$ der beiden atomaren Elektronenhüllen untereinander sowie mit dem jeweils anderen Atomkern; es ist

$$C \xrightarrow{r_{AB} \rightarrow \infty} 0 ; \quad (12.83)$$

schließlich das *Austauschintegral*

$$A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x^{(1)} \int d^3x^{(2)} \phi_A(\vec{x}^{(1)}) \phi_B(\vec{x}^{(2)}) \times \\ \times \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} \right) \phi_B(\vec{x}^{(1)}) \phi_A(\vec{x}^{(2)}) \quad (12.84)$$

ohne „anschauliche“ Erklärung als reine Konsequenz der Antisymmetrie; es ist

$$A \xrightarrow{r_{AB} \rightarrow \infty} 0. \quad (12.85)$$

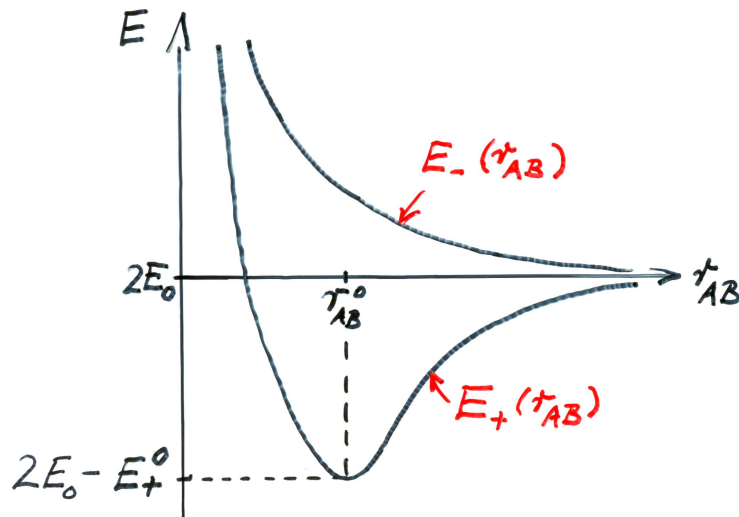
Leite (12.79 - 85) her!

Für *große* r_{AB} überwiegt der Einfluss von A gegenüber dem Einfluss von S und C . (12.79) geht in diesem Limes über in:

$$E_{\pm} \xrightarrow{r_{AB} \rightarrow \infty} 2E_0 \pm A. \quad (12.86)$$

Das (Grundzustands-) Energieniveau $2E_0$ zweier separater H -Atome spaltet unter dem Einfluss der **Austauschwechselwirkung** in zwei Energieniveaus $2E_0 + A$ und $2E_0 - A$ auf, wobei ersteres nach (12.77) zum Gesamtspin $s = 0$ und letzteres nach (12.76) zum Gesamtspin $s = 1$ gehört. Wegen $A < 0$ ist $E_+ < E_-$, die antiparallele Spinstellung liegt also energetisch unterhalb der parallelen Spinstellung. Als Konsequenz des Pauli-Prinzips (wie?) verhalten sich parallele Spins repulsiv, antiparallele Spins attraktiv zueinander.

Verfolgt man den E_{\pm} -Ausdruck (12.79) zu *kleineren* r_{AB} -Werten hin, so erhält man das folgende Resultat:



• Abbildung 12.3 •

$s = 0$: Minimum der Funktion $E_+(r_{AB})$ bei r_{AB}^0 . Bindung der H-Atome in antiparalleler Spinstellung im Gleichgewichtsabstand r_{AB}^0 (Heitler & London: 0.87 \AA , Experiment: 0.74 \AA) bei der Bindungsenergie E_+^0 (Heitler & London: 3.14 eV , Experiment: 4.73 eV).

$s = 1$: Parallele Spinstellung; kein Minimum der Funktion $E_-(r_{AB})$, da rein repulsive Wechselwirkung \Rightarrow keine Bindung in der Triplettkonfiguration!

Streuung zweier identischer Teilchen der Massen $m_1 = m_2 = m$ infolge der Wechselwirkung $V(|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|)$. Der Hamiltonian ist durch (12.25) gegeben. Durch Transformation auf Schwerpunkt- und Relativkoordinaten \vec{X} , \vec{x} nimmt er gemäß (12.12, 13) die folgende Gestalt an (Gesamtmasse = $2m$, reduzierte Masse = $m/2$):

$$H = -\frac{\hbar^2}{4m} \Delta(\vec{X}) - \frac{\hbar^2}{m} \Delta(\vec{x}) + V(|\vec{x}|). \quad (12.87)$$

Die stationären Streuzustände sind durch (12.20) gegeben:

$$\psi(\vec{X}, \vec{x}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{X}} \phi(\vec{x}), \quad (12.88)$$

zur Energie (12.21) ($M = 2m$):

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \varepsilon. \quad (12.89)$$

Der Faktor $e^{i\vec{K} \cdot \vec{X}}$ beschreibt die geradlinig-gleichförmige *Schwerpunktbewegung* in Richtung \hat{K} der Energie $\hbar^2 K^2 / 4m$; für den Streuprozess uninteressant. Die Wellenfunktion $\phi(\vec{x})$ zur (vorgegebenen, positiven) Energie ε der *Relativbewegung* ist aus der stationären Schrödinger-Gleichung

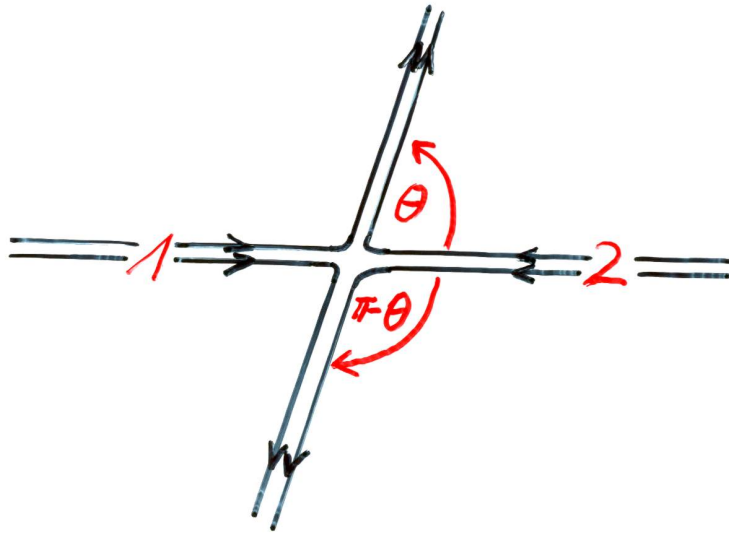
$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \Delta(\vec{x}) + V(r) - \varepsilon \right) \phi(\vec{x}) = 0, \quad (12.90)$$

$r = |\vec{x}|$, zu berechnen unter der *Randbedingung*

$$\phi(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (12.91)$$

Dabei sind $k = \sqrt{m\varepsilon}/\hbar$ die Wellenzahl der Relativbewegung, θ der Streuwinkel im Schwerpunktsystem sowie $f(\theta)$ die Streuamplitude im Schwerpunktsystem. Der *differenzielle Wirkungsquerschnitt*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (12.92)$$



• Abbildung 12.4 •

bezieht sich auf das Schwerpunktsystem. Er kann mit Hilfe einfacher kinematischer Überlegungen in Laborsystem umgerechnet werden.

Bei identischen Teilchen sind die (Anti)symmetrieforderungen für ψ zu berücksichtigen:

Bosonen, z. B. zwei α -Teilchen. Statt (12.88) hat man die symmetrische Wellenfunktion

$$\psi_S = e^{i\vec{K}\cdot\vec{X}} (\phi(\vec{x}) + \phi(-\vec{x})) \quad (12.93)$$

und statt (12.91) die Randbedingung

$$\phi(\vec{x}) + \phi(-\vec{x}) \xrightarrow{r\rightarrow\infty} e^{ikz} + e^{-ikz} + (f(\theta) + f(\pi - \theta)) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (12.94)$$

woraus für den differentiellen WQ resultiert:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2 \operatorname{Re} f^*(\theta) f(\pi - \theta). \end{aligned} \quad (12.95)$$

Das ist die Summe der WQs der beiden nichtunterscheidbaren Teilchen plus ein Interferenzterm.

Fermionen, z. B. zwei Protonen. Statt (12.88) hat man die antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi_A = e^{i\vec{K}\cdot\vec{X}} \begin{cases} (\phi(\vec{x}) - \phi(-\vec{x})) \chi_{1,m} \\ (\phi(\vec{x}) + \phi(-\vec{x})) \chi_{0,0} \end{cases}, \quad (12.96)$$

d. h. Streuung in Triplett- oder Singulett-Konfiguration. Entsprechend ist die Randbedingung zu formulieren. Differentieller WQ:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) \mp f(\pi - \theta)|^2, \quad s = 1, 0. \quad (12.97)$$

Die einlaufenden Teilchenpaare mögen sich zu je 25 % in den Zuständen $\chi_{1,+1}$, $\chi_{1,0}$, $\chi_{1,-1}$ sowie $\chi_{0,0}$ befinden. (Über „Zustandsgemische“ wird später ausführlich und systematisch zu reden sein.) Dann hat man:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re} f^*(\theta) f(\pi - \theta). \end{aligned} \quad (12.98)$$

Dieser Ausdruck unterscheidet sich deutlich von (12.95). Zwar hat man auch hier die Summe der WQs der beiden Teilchen, aber der Interferenzterm $\operatorname{Re} f^*(\theta) f(\pi - \theta)$ tritt mit ganz anderem Gewicht auf: -1 statt $+2$. Bei gleichem (spinunabhängigem) $V(|\vec{x}|)$ erhält man für Bosonen und Fermionen ganz verschiedene WQs – als Konsequenz des Symmetriepostulats VII.

Beispiel: Streuung zweier harter Kugeln vom Radius $r_1 = r_2 = a/2$. In diesem Fall ist $V(r)$ das *Harte-Kugel-Potential* vom Radius a . Für den niederenergetischen Grenzfall (Limes verschwindender Stoßenergie) gilt

$$f(\theta) \xrightarrow{k \rightarrow 0} -a. \quad (12.99)$$

Eingesetzt in (12.95, 98) ergibt das:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Bosonen}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4a^2 \quad (12.100)$$

bzw.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Fermionen}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} a^2$$

– zwei signifikant verschiedene Resultate!

13 Störungsrechnung

Nur wenige Modellsysteme der QUM, wie freies Teilchen, harmonischer Oszillator oder Wasserstoffatom, sind exakt berechenbar. Für die meisten Systeme (insbesondere für $N > 2$) lässt sich die (stationäre) Schrödinger-Gleichung nur näherungsweise lösen. Es gibt viele qum. Näherungsverfahren, die hier nicht alle behandelt werden können. Eine besonders wichtige Methode ist die *Störungsrechnung*; nur darauf können wir in dieser Vorlesung (kurz) eingehen!

Zeitunabhängige Störungsrechnung zur näherungsweisen Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (13.1)$$

mit

$$H = H_0 + \lambda H_1 . \quad (13.2)$$

H_0 beschreibe das *ungestörte System*, z. B. ein Atom; seine Eigenvektoren und Eigenwerte seien bekannt:

$$H_0 |n, k\rangle = \varepsilon_n |n, k\rangle ; \quad (13.3)$$

k nummeriere miteinander entartete $|n, k\rangle$ zu ε_n . H_1 beschreibe die *Störung*, z. B. ein elektrisches oder magnetisches Feld; λ sei ein Kopplungsparameter.

Potenzreihenentwicklung von $E, |\psi\rangle$ nach λ :

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \quad (13.4)$$

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots$$

Einsetzen in (13.1) und Koeffizientenvergleich führt auf:

$$H_0 |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(0)}\rangle$$

$$H_0 |\psi^{(1)}\rangle + H_1 |\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(0)}\rangle \quad (13.5)$$

$$H_0 |\psi^{(2)}\rangle + H_1 |\psi^{(1)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)} |\psi^{(0)}\rangle$$

usw.; sukzessive Auflösung nach $E^{(0)}, E^{(1)}, \dots$ bzw. nach $|\psi^{(0)}\rangle, |\psi^{(1)}\rangle, \dots$

Die **nullte Näherung** entspricht dem ungestörten Problem:

$$(H_0 - E^{(0)}) |\psi^{(0)}\rangle = 0 . \quad (13.6)$$

Nach (13.3) ist

$$E^{(0)} = \varepsilon_n, \quad |\psi^{(0)}\rangle = \sum_k |n, k\rangle c_k \quad (13.7)$$

mit unbestimmten Koeffizienten c_k . Basis $|n, k\rangle$ orthonormiert.

Erste Näherung entsprechend der zweiten Gleichung in (13.5):

$$(H_1 - E^{(1)}) |\psi^{(0)}\rangle = (E^{(0)} - H_0) |\psi^{(1)}\rangle. \quad (13.8)$$

Projektion dieser Gleichung auf die $|n, k'\rangle$ -Basis ergibt wegen (13.6, 7):

$$\sum_k \left(\langle n, k' | H_1 | n, k \rangle - E^{(1)} \delta_{k'k} \right) c_k = 0. \quad (13.9)$$

Das ist ein homogenes lineares Gleichungssystem zur c_k -Bestimmung, d. h. derjenigen Linearkombinationen der $|n, k\rangle$, in die $|\psi\rangle$ beim „Abschalten“ der Störung ($\lambda \rightarrow 0$) übergeht. Unter der *Säkulargleichung* versteht man die Bedingung für die Existenz nicht-trivialer Lösungen von (13.9):

$$\det \left(\langle n, k' | H_1 | n, k \rangle - E^{(1)} \delta_{k'k} \right) = 0. \quad (13.10)$$

Der Grad der Determinante ist gleich dem Entartungsgrad g_n von ε_n ($k = 1, 2, \dots, g_n$). Zwei Fälle sind denkbar:

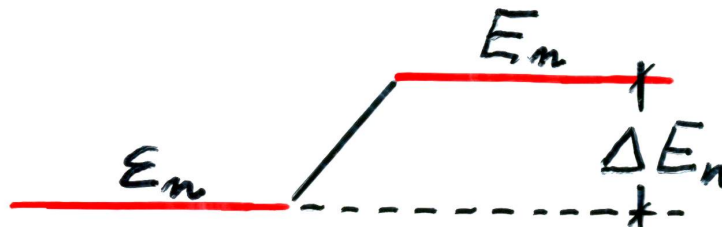
1. *Fall*: $g_n = 1$, keine Entartung. Dann ist

$$E^{(1)} = \langle n | H_1 | n \rangle \quad (13.11)$$

$$E_n \simeq \varepsilon_n + \lambda \langle n | H_1 | n \rangle.$$

Die Störung bewirkt – in erster Ordnung – eine Verschiebung des n . Energieniveaus um

$$\Delta E_n = \lambda \langle n | H_1 | n \rangle. \quad (13.12)$$



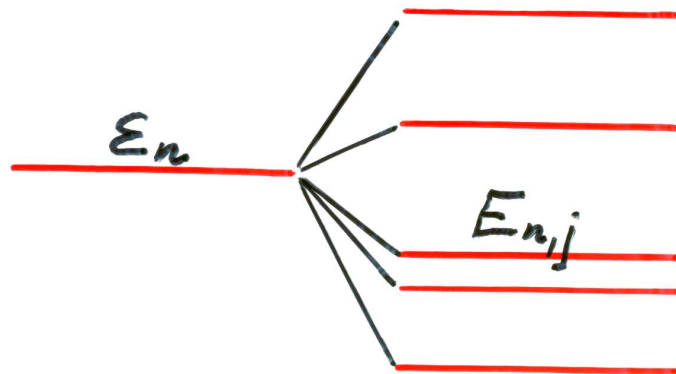
• Abbildung 13.1 •

2. Fall: $g_n > 1$, Entartung. Wegen der Hermitizität der Matrix $\langle n, k' | H_1 | n, k \rangle$ besitzt die Säkulargleichung g_n reelle Wurzeln (teilweise oder gänzlich zusammenfallend):

$$E^{(1)} = \varepsilon_{n,j}^{(1)} \tag{13.13}$$

$$E_{n,j} \simeq \varepsilon_n + \lambda \varepsilon_{n,j}^{(1)}, \quad j = 1, 2, \dots$$

Die Störung bewirkt – in erster Ordnung – eine Aufspaltung des n . Energieniveaus in (maximal) g_n Energieniveaus, d. h. Aufhebung der Entartung.



• Abbildung 13.2 •

Die Symmetriegruppe von H ist Untergruppe der Symmetriegruppe von H_0 ; Jelitto 5., S. 147.

Die „richtigen“ *Linearkombinationen der nullten Näherung* berechnet man mit (13.9, 13) wie folgt:

$$\sum_k \left(\langle n, k' | H_1 | n, k \rangle - \varepsilon_{n,j}^{(1)} \delta_{k'k} \right) c_k^{(j)} = 0$$

$$\Rightarrow c_k^{(j)} \quad \text{mit} \quad \sum_k c_k^{(j)*} c_k^{(j')} = \delta_{jj'} \tag{13.14}$$

$$\Rightarrow |\psi_{n,j}^{(0)}\rangle = \sum_k |n, k\rangle c_k^{(j)} =: |n, j\rangle .$$

Die $|n, j\rangle$ -Basis ist wie die $|n, k\rangle$ -Basis orthonormiert.

Eigenvektoren in erster Näherung. Aus (13.8) folgt:

$$(H_1 - E^{(1)}) |n, j\rangle = (\varepsilon_n - H_0) |\psi_{n,j}^{(1)}\rangle \tag{13.15}$$

Projektion auf $|n', j'\rangle$ mit $n' \neq n$ führt auf:

$$(n', j' | H_1 | n, j) = (\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}) (n', j' | \psi_{n,j}^{(1)}) . \quad (13.16)$$

Daraus folgt für die Entwicklung von $|\psi_{n,j}^{(1)}\rangle$ nach den $|n, j\rangle$:

$$|\psi_{n,j}^{(1)}\rangle = \sum_{\substack{n', j' \\ (n' \neq n)}} |n', j'\rangle \frac{(n', j' | H_1 | n, j)}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} + \sum_{\substack{j' \\ (j' \neq j)}} |n, j'\rangle b_{j'}^{(j)} \quad (13.17)$$

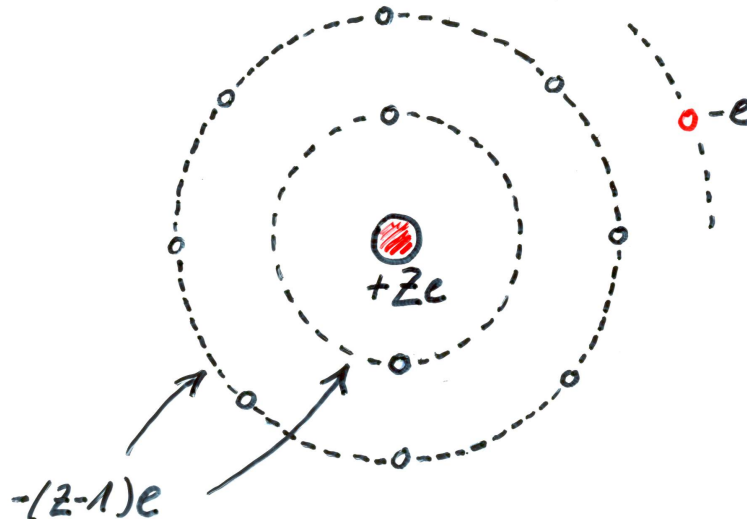
mit unbestimmten Koeffizienten $b_{j'}^{(j)}$, die erst in zweiter Näherung festlegbar sind. Der $|n, j\rangle$ -Term fehlt in (13.17), weil er die nullte Näherung ausmacht. Insgesamt hat man also in erster Näherung (im Allgemeinen nicht normiert):

$$|\psi_{n,j}\rangle \simeq |n, j\rangle + \lambda |\psi_{n,j}^{(1)}\rangle , \quad (13.18)$$

wo $|\psi_{n,j}^{(1)}\rangle$ gemäß (13.17) einzusetzen ist.

Zur **zweiten Näherung** siehe Grawert, S. 302; Jelitto 5, S. 163.

Beispiel: Termschema der Alkali-Atome Li, Na, K, ... Modellvorstellung: Atomrumpf aus abgeschlossenen Elektronenschalen und Leuchtelektron.



• Abbildung 13.3 •

Hamilton-Operator (ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_1(r) . \quad (13.19)$$

Das Elektron „sieht“ außerhalb der abgeschlossenen Schalen effektiv eine positive Elementarladung; dafür steht der *Wasserstoff-Hamiltonian*:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} . \quad (13.20)$$

Weiter innen ist die Abschirmung von $(Z - 1)$ positiven Elementarladungen durch die Hülle nicht mehr vollständig; dort tritt ein negatives *Störpotential*

$$H_1 = V_1(r) \quad (13.21)$$

hinzu; dieses ist umso negativer, je mehr man sich dem Kern nähert, weil die Abschirmung dann immer mehr zusammenbricht. Mit (13.20, 21) ist (13.19) von der Gestalt (13.2) ($\lambda = 1$):

$$H = H_0 + H_1 . \quad (13.22)$$

Das *ungestörte Problem* hat die aus Kap. 9 bekannte Lösung (ohne Spin):

$$\varepsilon_n = -\frac{R}{n^2} , \quad |n, k\rangle = |\psi_{nlm}\rangle . \quad (13.23)$$

Der Index k entspricht den Quantenzahlen l, m . Die *Säkularmatrix* für festes n ist *diagonal* in l, m :

$$\langle \psi_{n'l'm'} | V_1 | \psi_{nlm} \rangle = (V_1)_{nl} \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (13.24)$$

mit

$$(V_1)_{nl} = \int_0^\infty dr r^2 |R_{nl}(r)|^2 V_1(r) < 0 .$$

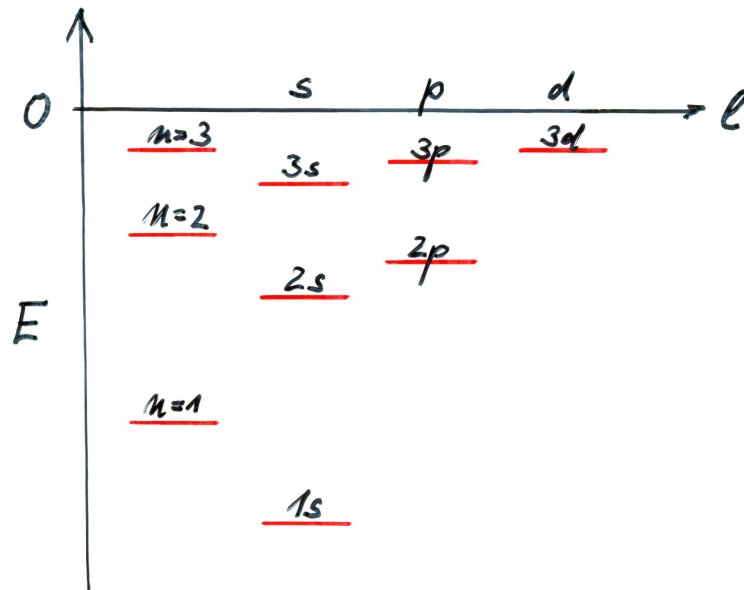
Daher sind die $|\psi_{nlm}\rangle$ bereits die „richtigen“ Linearkombinationen für die Störungsrechnung: $c_k^{(j)} = \delta_{jk}$. Die Säkulargleichung

$$\det \left(((V_1)_{nl} - \varepsilon_{n,l}^{(1)}) \delta_{l'l} \delta_{m'm} \right) = 0 \quad (13.25)$$

liefert zu ε_n in erster Näherung die Korrekturen

$$\varepsilon_{nl}^{(1)} = (V_1)_{nl} < 0 . \quad (13.26)$$

Damit ist die Entartung bzgl. l aufgehoben, nicht jedoch bzgl. m .



• Abbildung 13.4 •

Da $V_1(r)$ zum Kern hin immer negativer wird, folgt:

$$|\varepsilon_{n,l}^{(1)}| > |\varepsilon_{n,l'}^{(1)}| \quad \text{für } l < l'. \quad (13.27)$$

Der 2s-Term wird durch die Störung stärker abgesenkt als das 2p-Niveau usw.

Beispiel: Helium-Atom. Der Hamilton-Operator (ohne Spineffekte) ist

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu=1,2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(\nu)} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r_\nu} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \\ &= H_0 + H_1. \end{aligned} \quad (13.28)$$

H_0 beschreibt zwei unabhängige Elektronen im Coulomb-Feld des zweifach positiv geladenen Kerns (α -Teilchen); H_1 steht für die Coulomb-Repulsion der beiden Elektronen.

Die *Energieniveaus* des *ungestörten Problems* unterhalb des Kontinuums ($E < -4R$, R = Rydberg-Konstante) sind:

$$\varepsilon_n = -4R \left(1 + \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (13.29)$$

Antisymmetrische Wellenfunktionen des ungestörten Problems:

- $n = 1$ (Grundzustand):

$$\psi_1 = \varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)}) \chi_{0,0} . \quad (13.30 \text{ a})$$

Singulett-Konfiguration; der Index 100 bedeutet $n = 1, l = m_l = 0$.

- $n > 1$ (angeregte Zustände):

$$\psi_{nlm_l 0}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{nlm_l}(\vec{x}^{(2)}) + \varphi_{nlm_l}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)})) \chi_{0,0} \quad (13.30 \text{ b})$$

$$\psi_{nlm_l m_s}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{nlm_l}(\vec{x}^{(2)}) - \varphi_{nlm_l}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)})) \chi_{1, m_s} .$$

Singulett- bzw. Triplettkonfiguration; $m_s = +1, 0, -1$ gemäß (12.75).

Die ungestörten Wellenfunktionen (13.30) sind simultane Eigenfunktionen der Observablen $H_0, \vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2, S_3$, wobei $\vec{L} = \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)}$ der Gesamtbahndrehimpuls und $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ der Gesamtspin des Zweielektronensystems ist. Die entsprechenden Quantenzahlen sind n, l, m_l, s (für $s = 0, 1$ wurde \pm gesetzt), m_s ; der Entartungsindex k steht hier für das Quadrupel l, m_l, s, m_s .

Den Gl. (13.30) entnimmt man den *Entartungsgrad* der Energieniveaus (13.29):

$$g_n = \begin{cases} 1 & n = 1 \\ \text{für} & \\ 4n^2 & n > 1 \end{cases} . \quad (13.31)$$

Erste Näherung: Da $\vec{L}^2, L_3, \vec{S}^2, S_3$ mit der Störung H_1 vertauschen (wieso?), ist die Säkularmatrix für festes n in l, m_l, s, m_s *diagonal* (wieso?), und die Säkulargleichung liefert zu ε_n in erster Ordnung die Korrekturen

$$\varepsilon_1^{(1)} = \langle \psi_1 | H_1 | \psi_1 \rangle = C_{10} \quad \text{für } n = 1 \quad (13.32 \text{ a})$$

$$\varepsilon_{nl, \pm}^{(1)} = \langle \psi_{nlm_l m_s}^{(\pm)} | H_1 | \psi_{nlm_l m_s}^{(\pm)} \rangle = C_{nl} \pm A_{nl} \quad \text{für } n > 1 \quad (13.32 \text{ b})$$

mit dem *Coulomb-Integral*

$$C_{nl} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3 x^{(1)} \int d^3 x^{(2)} \frac{|\varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{nlm_l}(\vec{x}^{(2)})|^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} , \quad (13.33)$$

„ungestörten“ Hamiltonian H_0 gemäß (12.64) gekennzeichnet sei. Diverse Störungen H_1 dieses Systems haben wichtige Effekte zur Folge:

- *Feinstruktur* durch Spin-Bahn-Wechselwirkung:

$$H_1 = \sum_{\nu=1}^Z W(r^{(\nu)}) \vec{L}^{(\nu)} \cdot \vec{S}^{(\nu)}, \quad (13.35)$$

vgl. (11.104). \Rightarrow Aufspaltung der Terme $2^{S+1}L$, sofern $L \neq 0, S \neq 0$.

- *Zeeman-Effekt* im äußeren Magnetfeld \vec{B} :

$$H_1 = \frac{e}{2m} \sum_{\nu=1}^Z \left(\vec{L}^{(\nu)} + 2\vec{S}^{(\nu)} \right) \cdot \vec{B}, \quad (13.36)$$

vgl. (11.74). \Rightarrow Aufhebung der m -Entartung, $m =$ Richtungsquantenzahl des Gesamtdrehimpulses.

- *Stark-Effekt* im äußeren elektrischen Feld \vec{E} :

$$H_1 = e \sum_{\nu=1}^Z \vec{x}^{(\nu)} \cdot \vec{E}. \quad (13.37)$$

\Rightarrow Verschiebung der H_0 -Niveaus (zumeist in zweiter Ordnung, da die erste Ordnung verschwindet; nicht so beim H-Atom).

Zeitabhängige Störungsrechnung. Der Hamilton-Operator sei von der Gestalt

$$H = H_0 + H_1(t). \quad (13.38)$$

H_0 beschreibe wiederum das ungestörte System; die Lösung des entsprechenden Eigenwertproblems

$$H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (13.39)$$

sei bekannt. $H_1(t)$ kennzeichne eine zeitabhängige Störung.

Das System (13.38) befinde sich zur Zeit $t = 0$ im Zustand φ_i ; mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet es sich zur Zeit $t > 0$ im Zustand φ_n ? Gefragt ist also nach der *Übergangswahrscheinlichkeit* für $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$ im Zeitintervall $[0, t]$. Dazu hat man die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t) \quad (13.40)$$

zu lösen unter der Anfangsbedingung

$$\psi(0) = \varphi_i . \quad (13.41)$$

Lösungsansatz:

$$\psi(t) = \sum_n \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(t) . \quad (13.42)$$

Der Faktor $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ trägt der zeitlichen Entwicklung des n . ungestörten Zustandes φ_n gemäß H_0 Rechnung; der unbestimmte Koeffizient $c_n(t)$ beschreibt die zeitliche Entwicklung dieses Zustandes unter dem Einfluss von $H_1(t)$. Die (vorausgesetzte) Orthogonalität der φ_n impliziert:

$$\begin{aligned} c_n(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle \varphi_n | \psi(t) \rangle \\ \Rightarrow |c_n(t)|^2 &= |\langle \varphi_n | \psi(t) \rangle|^2 . \end{aligned} \quad (13.43)$$

Das ist die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit! Die $c_n(t)$ sind die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsamplituden.

Einsetzen des Ansatzes (13.42) in die Schrödinger-Gleichung (13.40) mit (13.38):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \sum_n \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left(-\frac{i}{\hbar} E_n c_n(t) + \dot{c}_n(t) \right) &= \sum_n (H_0 + H_1(t)) \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar}{i} \sum_n \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \dot{c}_n(t) &= \sum_n H_1(t) \varphi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(t) \end{aligned} \quad (13.44)$$

wegen (13.39). Projektion auf die φ_n -Basis führt auf das lineare **gekoppelte Differentialgleichungssystem** (mit zeitunabhängigen Koeffizienten):

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \langle \varphi_m | H_1(t) | \varphi_n \rangle e^{i\omega_{mn} t} c_n(t) \quad (13.45)$$

mit

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) ;$$

dieses ist zu lösen unter der *Anfangsbedingung*:

$$c_n(0) = \delta_{ni} . \quad (13.46)$$

Umwandlung des Problems (13.45, 46) in ein äquivalentes Problem: Durch t -Integration von (13.45) erhält man unter Berücksichtigung von (13.46) das **System gekoppelter Integralgleichungen**:

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t \langle \varphi_m | H_1(t') | \varphi_n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} c_n(t') dt' . \quad (13.47)$$

Lösung des Systems (13.47) durch *Iteration*:

0.

$$c_n^{(0)}(t) = c_n(0) = \delta_{ni} \quad (13.48 \text{ a})$$

1.

$$\begin{aligned} c_m^{(1)}(t) &= \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t \langle \varphi_m | H_1(t') | \varphi_n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} c_n^{(0)}(t') dt' \\ \Rightarrow c_n^{(1)}(t) &= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \varphi_n | H_1(t') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ni}t'} dt' \end{aligned} \quad (13.48 \text{ b})$$

2.

$$\begin{aligned} c_m^{(2)}(t) &= \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t \langle \varphi_m | H_1(t') | \varphi_n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} c_n^{(1)}(t') dt' \\ \Rightarrow c_n^{(2)}(t) &= c_n^{(1)}(t) - \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \int_0^t \langle \varphi_n | H_1(t') | \varphi_r \rangle e^{i\omega_{nr}t'} \times \\ &\quad \times \int_0^{t'} \langle \varphi_r | H_1(t'') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t''} dt'' dt' \end{aligned} \quad (13.48 \text{ c})$$

usw. Bezeichnung von $c_n^{(0)}(t)$, $c_n^{(1)}(t)$, $c_n^{(2)}(t)$, ... als 0., 1., 2., ... Näherung.

Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung. Für $n \neq i$ gilt:

$$w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \varphi_n | H_1(t') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ni}t'} dt' \right|^2 ; \quad (13.49)$$

für $n = i$ erhält man (Verweilwahrscheinlichkeit):

$$w_{i \leftarrow i}^{(1)}(t) = \left| 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_i \rangle dt' \right. \\ \left. - \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_r \rangle e^{i\omega_{ir}t'} \int_0^{t'} \langle \varphi_r | H_1(t'') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t''} dt'' dt' \right|^2 ;$$

Terme zweiter Ordnung in H_1 mitnehmen:

$$w_{i \leftarrow i}^{(1)}(t) = 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_i \rangle dt' \right|^2 \\ - \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \left(\int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_r \rangle e^{i\omega_{ir}t'} \int_0^{t'} \langle \varphi_r | H_1(t'') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t''} dt'' dt' \right. \\ \left. + \int_0^t \langle \varphi_r | H_1(t') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t'} \int_0^{t'} \langle \varphi_i | H_1(t'') | \varphi_r \rangle e^{i\omega_{ir}t''} dt'' dt' \right) ;$$

im letzten Summanden t', t'' vertauschen:

$$w_{i \leftarrow i}^{(1)}(t) = 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_i \rangle dt' \right|^2 \\ - \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_r \rangle e^{i\omega_{ir}t'} dt' \int_0^t \langle \varphi_r | H_1(t'') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t''} dt'' \\ = 1 + \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \varphi_i | H_1(t') | \varphi_i \rangle dt' \right|^2 \\ - \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \left| \int_0^t \langle \varphi_r | H_1(t') | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{ri}t'} dt' \right|^2 \\ = 1 - \sum_{n \neq i} w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) . \quad (13.50)$$

Die Summe aller Übergangswahrscheinlichkeiten $n \neq i$ und der Verweilwahrscheinlichkeit $n = i$ ist gleich eins!

Gültigkeitskriterien für Störungsrechnung erster Ordnung (ohne nähere Begründung):

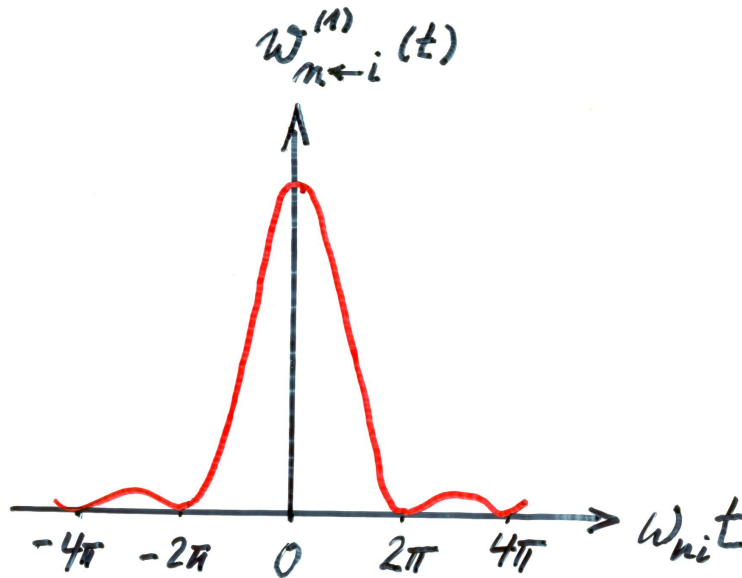
- H_1 klein,
- $w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) \ll 1$, $w_{i \leftarrow i}^{(1)}(t) \simeq 1$,
- $t \ll \tau_i$, wo τ_i die Lebensdauer des Anfangszustandes φ_i ist.

Zeitlich konstante Störung: $\partial H_1 / \partial t = 0$. Aus (13.48) folgt:

$$c_n(t) = \delta_{ni} - \frac{1}{\hbar} \langle \varphi_n | H_1 | \varphi_i \rangle \frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{\omega_{ni}} + \frac{1}{\hbar^2} \sum_r \langle \varphi_n | H_1 | \varphi_r \rangle \langle \varphi_r | H_1 | \varphi_i \rangle \frac{1}{\omega_{ri}} \left(\frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{\omega_{ni}} - \frac{e^{i\omega_{nr}t} - 1}{\omega_{nr}} \right) - \dots \quad (13.52)$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit $n \neq i$ in erster Ordnung folgt:

$$w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) = \frac{|\langle \varphi_n | H_1 | \varphi_i \rangle|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin \omega_{ni} t / 2}{\omega_{ni} / 2} \right)^2 \quad (13.53)$$



• Abbildung 13.6 •

Betrachte $w_{n \leftarrow i}^{(1)}$ für festes t als Funktion von ω_{ni} : Maximum bei $\omega_{ni} = 0 \Leftrightarrow E_n = E_i$, d. h. Übergänge in Zustände φ_n , die mit φ_i bei der Energie E_i entartet sind, sind besonders wahrscheinlich. Übergänge mit $E_n \neq E_i$ sind nur für *kleine Zeiten* wahrscheinlich:

$$t < \frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_i|}. \quad (13.54 \text{ a})$$

Für *große Zeiten*:

$$t > \frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_i|}, \quad (13.54 \text{ b})$$

jedoch $t \ll \tau_i$, folgt wegen

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin \omega_{ni} t / 2}{\omega_{ni} / 2} \right)^2 = 2\pi t \delta(\omega_{ni}) \quad (13.55)$$

aus (13.53) der asymptotische Ausdruck:

$$w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_n | H_1 | \varphi_i \rangle|^2 t \delta(E_n - E_i). \quad (13.56)$$

Asymptotisch sind also nur noch Übergänge „in Resonanz“, d. h. mit $E_n = E_i$ möglich, und zwar mit *konstanter Übergangsrate*

$$\dot{w}_{n \leftarrow i}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_n | H_1 | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i), \quad (13.57)$$

d. i. konstanter Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit. (13.57) ist physikalisch nur sinnvoll, wenn man darüber integriert, d. h. bei Betrachtung des Überganges vom Zustand φ_i in ein (Quasi-)Kontinuum von Endzuständen φ_n der Dichte $\rho(E_n)$. Die *gesamte Übergangsrate* ist in diesem Falle:

$$\begin{aligned} \dot{W}_{n \leftarrow i}^{(1)} &= \int dE_n \rho(E_n) \dot{w}_{n \leftarrow i}^{(1)} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_n | H_1 | \varphi_i \rangle|^2 \rho(E_i). \end{aligned} \quad (13.58)$$

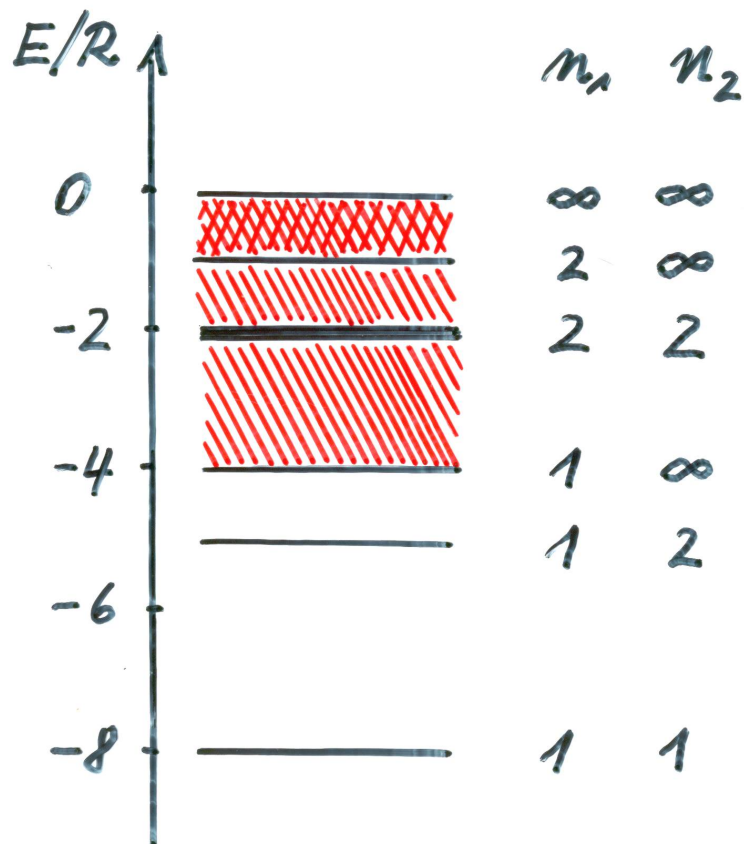
Bezeichnung dieser Formel als *Fermis Goldene Regel*.

Beispiel: Autoionisation von Helium: Das ungestörte Problem ist

$$H_0 = \sum_{\nu=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(\nu)} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r_\nu} \right) \quad (13.59)$$

mit den Energieniveaus

$$E_n = E_{n_1 n_2} = -4R \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (13.60)$$



• Abbildung 13.7 •

Störung (siehe (13.28)):

$$H_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (13.61)$$

Anwendung von (13.58) auf den strahlungslosen Übergang vom gebundenen Zustand ($2s, 2s$) in den Kontinuumszustand ($1s, k$) – hier nicht!

Atom im elektromagnetischen Strahlungsfeld. Das \vec{E}, \vec{B} -Feld ist in *Coulomb-Eichung* allein durch das Vektorpotential \vec{A} gegeben als Lösung der homogenen Wellengleichung

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A} = \vec{0} \quad (13.62)$$

unter der Nebenbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0; \quad (13.63)$$

ferner wird in dieser Eichung das skalare Potential

$$\phi = 0 \quad (13.64)$$

gesetzt. Das \vec{E} , \vec{B} -Feld berechnet man aus \vec{A} gemäß

$$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (13.65)$$

Der *Hamiltonian* eines Atoms der Ordnungszahl Z in diesem Feld ist

$$H = \sum_{\nu=1}^Z \frac{1}{2m} (\vec{p}^{(\nu)} + e\vec{A}(\vec{x}^{(\nu)}, t))^2 + V + \sum_{\nu=1}^Z \frac{e}{m} \vec{S}^{(\nu)} \cdot \vec{B}(\vec{x}^{(\nu)}, t); \quad (13.66)$$

hierbei steht V für die gesamte Coulomb-Wechselwirkung der Z Elektronen mit dem Kern und untereinander. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung bleibt unberücksichtigt.

Zerlegung von (13.66) gemäß (13.38): $H = H_0 + H_1(t)$, mit

$$H_0 = \sum_{\nu} \frac{1}{2m} \vec{p}^{(\nu)2} + V, \quad (13.67)$$

d. i. der Hamilton-Operator des freien Atoms, und

$$H_1(t) = \sum_{\nu} \left(\frac{e}{2m} (\vec{p}^{(\nu)} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}^{(\nu)}) + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 + \frac{e}{m} \vec{S}^{(\nu)} \cdot \vec{B} \right) \quad (13.68)$$

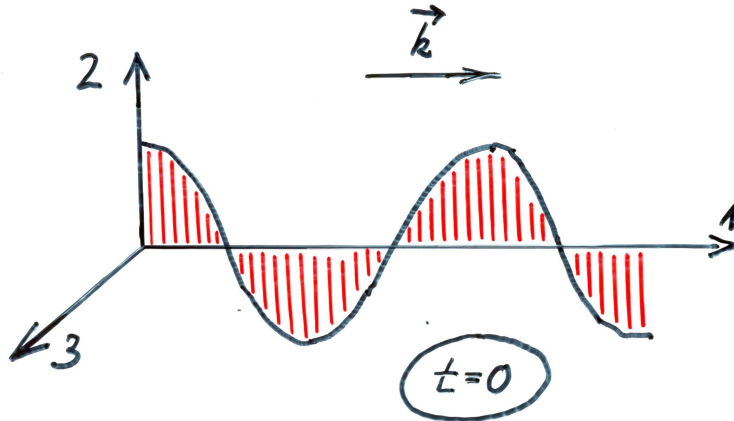
d. i. der Operator der Wechselwirkung mit dem Feld. Bei hinreichend *schwachen Feldern* Vernachlässigung des \vec{A}^2 -Terms. Wegen $\vec{p}^{(\nu)} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}^{(\nu)}$ (in Coulomb-Eichung) und (13.65) hat man schließlich:

$$H_1(t) = \frac{e}{m} \sum_{\nu} \left(\vec{A}(\vec{x}^{(\nu)}, t) \cdot \vec{p}^{(\nu)} + \vec{S}^{(\nu)} \cdot \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{x}^{(\nu)}, t) \right). \quad (13.69)$$

Das Atom werde einer **ebenen, monochromatischen, linear polarisierten elektromagnetischen Welle** ausgesetzt:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \hat{e}_2 a \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \quad (13.70)$$

mit $\omega = ck$ und $\hat{k} = \hat{e}_1$.



• Abbildung 13.8 •

Man verifiziert leicht, dass die Eichbedingung (13.63) erfüllt ist:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = a \hat{e}_2 \cdot \vec{\nabla} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) = -a \hat{e}_2 \cdot \vec{k} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) = 0 \quad (13.71)$$

wegen $\hat{e}_2 \cdot \vec{k} = 0$. Für das \vec{E} , \vec{B} -Feld von (13.70) folgt mit (13.65):

$$\vec{E} = -\hat{e}_2 a \omega \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \quad (13.72)$$

$$\vec{B} = -\hat{e}_3 a k \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t);$$

für den Störoperator (13.69) folgt mit (13.70):

$$\begin{aligned} H_1(t) &= \frac{e a}{m} \sum_{\nu} \left(\hat{e}_2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} - \omega t) \cdot \vec{p}^{(\nu)} + \vec{S}^{(\nu)} \cdot \hat{e}_2 \wedge \vec{k} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} - \omega t) \right) \\ &= \frac{e a}{2m} \hat{e}_2 \cdot \sum_{\nu} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)}} \left(\vec{p}^{(\nu)} + \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}^{(\nu)} \right) e^{-i\omega t} \right. \\ &\quad \left. + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)}} \left(\vec{p}^{(\nu)} - \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}^{(\nu)} \right) e^{i\omega t} \right). \end{aligned} \quad (13.73)$$

Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung für den Übergang vom atomaren

Zustand φ_i (zur Zeit $t = 0$) zum atomaren Zustand φ_n (zur Zeit $t > 0$) nach (13.49):

$$w_{n \leftarrow i}^{(1)}(t) = \frac{e^2 a^2}{4 m^2 \hbar^2} \left| \hat{e}_2 \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}(\nu)} \left(\vec{p}(\nu) + \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}(\nu) \right) | \varphi_i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ni} - \omega) t'} dt' \right. \\ \left. + \hat{e}_2 \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}(\nu)} \left(\vec{p}(\nu) - \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}(\nu) \right) | \varphi_i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ni} + \omega) t'} dt' \right|^2 \quad (13.74)$$

Die Zeitintegrale in (13.74) berechnen sich zu:

$$\int_0^t e^{i(\omega_{ni} \mp \omega) t'} dt' = \frac{e^{i(\omega_{ni} \mp \omega) t} - 1}{i(\omega_{ni} \mp \omega)}. \quad (13.75)$$

Im Falle der **Absorption**:

$$\hbar \omega \simeq E_n - E_i > 0, \quad (13.76 \text{ a})$$

dominiert in $|\dots|^2$ der erste Term, d. h. in (13.75) das obere Vorzeichen; im Falle der **induzierten Emission**:

$$\hbar \omega \simeq E_i - E_n > 0, \quad (13.76 \text{ b})$$

der zweite Term bzw. das untere Vorzeichen.

Im ersten Fall hat man

$$w_{n \leftarrow i}^{(1) \text{ abs}}(t) = \left(\frac{e a}{2 m \hbar} \right)^2 \left| \hat{e}_2 \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}(\nu)} \left(\vec{p}(\nu) + \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}(\nu) \right) | \varphi_i \rangle \right|^2 \\ \times \left(\frac{\sin(\omega_{ni} - \omega) t / 2}{(\omega_{ni} - \omega) / 2} \right)^2. \quad (13.77)$$

Wartet man hinreichend lange:

$$t > \frac{2 \pi \hbar}{E_n - E_i}, \quad (13.78)$$

jedoch $t \ll \tau_i$, so ergibt sich aus (13.77) die folgende *Absorptionsrate*:

$$\dot{w}_{n \leftarrow i}^{(1) \text{ abs}} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{e a}{m \hbar} \right)^2 \left| \hat{e}_2 \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}(\nu)} \left(\vec{p}(\nu) + \frac{1}{i} \vec{k} \cdot \vec{S}(\nu) \right) | \varphi_i \rangle \right|^2 \\ \times \delta(\omega_{ni} - \omega), \quad (13.79)$$

d. h. die Absorption erfolgt genau bei der Frequenz $\omega = \omega_{ni} = (E_n - E_i) / \hbar$.

Verallgemeinerungen:

- Monochromatische Welle \rightarrow spektrale Verteilung:

$$a \rightarrow \int_0^{\infty} d\omega a(\omega) \dots \quad (13.80)$$

- Linear polarisierte Welle \rightarrow Mittelung über Polarisationsrichtungen \hat{e}_2, \hat{e}_3 .
- Welle in \hat{e}_1 -Richtung \rightarrow Mittelung über alle räumlichen Richtungen.

Anmerkungen:

1. Die Übergangswahrscheinlichkeit für *induzierte Emission* ist gleich der Übergangswahrscheinlichkeit für *Absorption*.
2. Die Berechnung der *spontanen Emission* erfordert die Quantisierung des Strahlungsfeldes (Photonen).

Physikalische Interpretation des Übergangsmatrixelementes

$$\vec{\xi}_{ni} = -\frac{e}{m} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)}} \left(\vec{p}^{(\nu)} + \frac{1}{i} \vec{k} \wedge \vec{S}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle \quad (13.81)$$

Unter der Voraussetzung *großer Wellenlängen* beschränken wir uns auf die *lineare Approximation* in \vec{k} :

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)}} = 1 + i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} ; \quad (13.82)$$

damit folgt aus (13.81):

$$\vec{\xi}_{ni} = -\frac{e}{m} \langle \varphi_n | \sum_n \left(\vec{p}^{(\nu)} + i\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} - i\vec{k} \wedge \vec{S}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle \quad (13.83)$$

Dieser Ausdruck zerfällt in drei „anschauliche“ Terme:

1. Term: **elektrischer Dipolübergang (ED)**:

$$\vec{\xi}_{ni}^{(ED)} = -\frac{e}{m} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} \vec{p}^{(\nu)} | \varphi_i \rangle \quad (13.84)$$

Zur Begründung des Ehrenfest-Theorems (12.9) wurde (in den Übungen) gezeigt, dass gilt:

$$\sum_{\nu} \vec{p}^{(\nu)} = \frac{i m}{\hbar} \left[H_0, \sum_{\nu} \vec{x}^{(\nu)} \right]. \quad (13.85)$$

Aus (13.84, 85) folgt (zeigen!):

$$\vec{\xi}^{(ED)} = i \omega_{ni} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} -e \vec{x}^{(\nu)} | \varphi_i \rangle. \quad (13.86)$$

$\sum_{\nu} -e \vec{x}^{(\nu)}$ ist das elektrische Dipolmoment des Atoms; $\vec{\xi}_{ni}^{(ED)}$ beschreibt den Übergang $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$ infolge Wechselwirkung der elektromagnetischen Welle mit diesem Moment.

2., 3. Term: **elektrischer Quadrupol-, magnetischer Dipolübergang (EQ, MD):**

$$\vec{\xi}_{ni}^{(EQ,MD)} = -\frac{i e}{m} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} \left(\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} - \vec{k} \wedge \vec{S}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle. \quad (13.87)$$

Mit der Identität (Entwicklungssatz für zweifaches Kreuzprodukt)

$$(\vec{k} \cdot \vec{x}) \vec{p} = \frac{1}{2} ((\vec{k} \cdot \vec{x}) \vec{p} + \vec{x} (\vec{k} \cdot \vec{p})) - \frac{1}{2} \vec{k} \wedge (\vec{x} \wedge \vec{p}) \quad (13.88)$$

folgt aus (13.87) die Zerlegung:

$$\vec{\xi}_{ni}^{(EQ,MD)} = \vec{\xi}_{ni}^{(EQ)} + \vec{\xi}_{ni}^{(MD)} \quad (13.89)$$

mit

$$\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)} = -\frac{i e}{2 m} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} \left(\vec{k} \cdot \vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} + \vec{x}^{(\nu)} \vec{k} \cdot \vec{p}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle \quad (13.90)$$

$$\vec{\xi}_{ni}^{(MD)} = \frac{i e}{2 m} \langle \varphi_n | \sum_{\nu} \vec{k} \wedge \left(\vec{x}^{(\nu)} \wedge \vec{p}^{(\nu)} + 2 \vec{S}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle. \quad (13.91)$$

EQ. Mit $\vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} = \vec{p}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} - \frac{\hbar}{i} \mathbb{1}$ und $\langle \varphi_n | \varphi_i \rangle = 0$ schreibt man (13.90) wie folgt:

$$\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)} = -\frac{i e}{2 m} \vec{k} \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} \left(\vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} + \vec{p}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} \right) | \varphi_i \rangle. \quad (13.92)$$

Ähnlich wie in (13.85) leitet man her (zeigen!):

$$\sum_{\nu} \left(\vec{x}^{(\nu)} \vec{p}^{(\nu)} + \vec{p}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} \right) = \frac{i m}{\hbar} \left[H_0, \sum_{\nu} \vec{x}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} \right]. \quad (13.93)$$

Damit folgt:

$$\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)} = -\frac{\omega_{ni}}{2} \vec{k} \cdot \langle \varphi_n | \sum_{\nu} -e \vec{x}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} | \varphi_i \rangle . \quad (13.94)$$

Da $\sum_{\nu} -e (3 \vec{x}^{(\nu)} \vec{x}^{(\nu)} - \vec{x}^{(\nu)} \cdot \vec{x}^{(\nu)} \mathbb{1})$ das *elektrische Quadrupolmoment* des Atoms ist, beschreibt $\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)}$ den Übergang $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$ infolge Wechselwirkung der elektromagnetischen Welle mit diesem Moment. Das Fehlen des $\vec{x}^{(\nu)} \cdot \vec{x}^{(\nu)} \mathbb{1}$ -Terms in (13.94) ist ohne Bedeutung wegen $\vec{k} \cdot \mathbb{1} \cdot \hat{e}_2 = 0$ in (13.79).

MD. Mit $\vec{L}^{(\nu)} = \vec{x}^{(\nu)} \wedge \vec{p}^{(\nu)}$ sowie $\sum_{\nu} \vec{L}^{(\nu)} = \vec{L}$, $\sum_{\nu} \vec{S}^{(\nu)} = \vec{S}$ geht (13.91) über in

$$\vec{\xi}_{ni}^{(MD)} = -i \vec{k} \wedge \langle \varphi_n | -\frac{e}{2m} (\vec{L} + 2\vec{S}) | \varphi_i \rangle . \quad (13.95)$$

Da $-\frac{e}{2m} (\vec{L} + 2\vec{S})$ das magnetische Dipolmoment des Atoms ist, beschreibt $\vec{\xi}_{ni}^{(MD)}$ den Übergang $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$ infolge Wechselwirkung der elektromagnetischen Welle mit diesem Moment.

Falls das Matrixelement $\vec{\xi}_{ni}^{(ED)}$ *nicht* verschwindet, liefert es im Limes $\vec{k} \rightarrow \vec{0}$ den dominierenden Beitrag zum Übergang $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$; die Beiträge von $\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)}$, $\vec{\xi}_{ni}^{(MD)}$ sind dagegen zu vernachlässigen. Falls $\vec{\xi}_{ni}^{(ED)} = \vec{0}$ ist, wird der Übergang $\varphi_i \rightarrow \varphi_n$ (im langwelligen Grenzfall) von $\vec{\xi}_{ni}^{(EQ)}$, $\vec{\xi}_{ni}^{(MD)}$ dominiert – sofern diese beiden Matrixelemente nicht auch verschwinden. Wenn das der Fall ist, hat man die Wechselwirkung der elektromagnetischen Welle mit höheren Multipolen des Atoms zu diskutieren.

Übergänge $\vec{\xi}_{ni}^{(\dots)} = \vec{0}$ bezeichnet man als *verboten*; die Voraussetzungen, unter denen $\vec{\xi}_{ni}^{(\dots)} \neq \vec{0}$ gilt; nennt man **Auswahlregeln**. Siehe Grawert, Kap. 15.6.

14 Feldquantisierung

Betrachte zunächst ein **klassisches Feld** $\chi(\vec{x}, t)$, z. B. den Druck $p(\vec{x}, t)$, die elektrische Feldstärke $\vec{E}(\vec{x}, t)$, ... als Funktionen von Ort und Zeit; ein weiteres Beispiel ist das klassisch interpretierte „Materiefeld“ $\psi(\vec{x}, t)$; siehe die Grawertsche Einführung in die QUM. Auffassung des Feldes als mechanisches System mit überabzählbar unendlich vielen Freiheitsgraden.

Bei *diskreten Systemen* betrachtet man die generalisierten Koordinaten $q_1(t), q_2(t), \dots, q_i(t), \dots$ als Funktionen der Zeit. Dem i -ten Freiheitsgrad ist $q_i(t)$ zugeordnet. Bei *Feldern* ist jeder Stelle \vec{x} ein $\chi(\vec{x}, t)$ zugeordnet, das sich im Laufe der Zeit t verändert; dem diskreten Index i entspricht der kontinuierliche „Index“ \vec{x} , was man durch die Schreibweise $\chi_{\vec{x}}(t)$ verdeutlichen könnte. (Wir verzichten hier darauf.) Analog zum diskreten Fall, wo man die kanonisch konjugierten Impulse $p_1(t), p_2(t), \dots, p_i(t), \dots$ betrachtet, führt man in der Feldtheorie, das zu $\chi(\vec{x}, t)$ *kanonisch konjugierte Feld* $\pi(\vec{x}, t)$ ein.

Die *Bewegungsgleichungen* sowohl diskreter, als auch kontinuierlicher Systeme folgen aus dem *Hamiltonschen Prinzip*:

1. Diskretes System. Sei $L(q_i, \dot{q}_i)$ die *Lagrange-Funktion*, dann gilt für die „richtigen“ $q_i(t)$ das Variationsprinzip

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_i, \dot{q}_i) = 0 \quad (14.1)$$

unter der Nebenbedingung $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$. Als Bewegungsgleichungen ergeben sich die zu (14.1) äquivalenten *Euler-Lagrange-Gleichungen*:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (14.2)$$

die der Bestimmung der $q_i(t)$ dienen.

Die zu den q_i kanonisch konjugierten Impulse p_i führt man durch

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (14.3)$$

ein. Mit deren Hilfe kann man zur *Hamilton-Funktion* übergehen (Legendre-Transformation):

$$H(q_i, p_i) = \sum_i \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i). \quad (14.4)$$

Diese steuert die Dynamik des Systems gemäß (2.4):

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}, \quad (14.5)$$

wo $\{ \dots \}$ die Poisson-Klammer und $A(q_i, p_i)$ eine beliebige dynamische Variable des Systems ist. Für $A = q_i, p_i$ erhält man aus (14.5) die *kanonischen Bewegungsgleichungen*:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (14.6)$$

2. Feld. Sei $\mathcal{L}(\chi, \chi_k, \dot{\chi})$ die *Lagrange-Dichte* mit

$$\chi_k = \frac{\partial}{\partial x_k} \chi, \quad k = 1, 2, 3, ; \quad \dot{\chi} = \frac{\partial}{\partial t} \chi; \quad (14.7)$$

dann genügt das Feld $\chi(\vec{x}, t)$ dem Variationsprinzip

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \mathcal{L}(\chi, \chi_k, \dot{\chi}) = 0 \quad (14.8)$$

unter der Randbedingung $\delta \chi(\vec{x}, t_1) = \delta \chi(\vec{x}, t_2) = 0$; zusätzlich ist zu fordern: $\delta \chi(\vec{x}, t) \xrightarrow{|\vec{x}| \rightarrow \infty} 0$ für alle t . Äquivalent hierzu ist die *Feldgleichung*

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi_k} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\chi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi} = 0, \quad (14.9)$$

aus der man $\chi(\vec{x}, t)$ berechnet.

Das kanonisch konjugierte Feld $\pi(\vec{x}, t)$ ist definiert durch

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\chi}}. \quad (14.10)$$

Daraus gewinnt man die *Hamilton-Dichte* wie folgt:

$$\mathcal{H}(\chi, \chi_k, \pi) = \dot{\chi} \pi - \mathcal{L}(\chi, \chi_k, \dot{\chi}), \quad (14.11)$$

und daraus durch Integration die Hamilton-Funktion:

$$H = \int d^3x \mathcal{H}(\chi, \chi_k, \pi); \quad (14.12)$$

das ist ein Funktional der Feldfunktionen $\chi(\vec{x}, t)$, $\chi_k(\vec{x}, t)$ und $\pi(\vec{x}, t)$. Der Formalismus lässt sich leicht auf Systeme von Feldern $\chi^{(\nu)}(\vec{x}, t)$ verallgemeinern. Siehe Grawert, Kap. 11.3.

Beispiel: Klassisches Materiefeld in Wechselwirkung mit der Umgebung – repräsentiert durch ein Potential $V(\vec{x})$; zunächst *ohne Selbstwechselwirkung*:

$$\mathcal{L}_0 = \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 \psi_k^* \psi_k - V(\vec{x}) \psi^* \psi, \quad (14.13)$$

abhängig von den beiden (!) Feldern ψ , ψ^* und deren Ableitungen ψ_k , $\dot{\psi}$ bzw. ψ_k^* , $\dot{\psi}^*$. Statt mit den unabhängigen reellen Feldern $Re \psi(\vec{x}, t)$ und $Im \psi(\vec{x}, t)$ arbeitet man mit $\psi(\vec{x}, t)$ und $\psi^*(\vec{x}, t)$ als unabhängigen Feldern.

Mit (14.13) erhält man aus (14.9) als Feldgleichung für ψ die *Schrödinger-Gleichung*:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = h \psi(\vec{x}, t) \quad (14.14)$$

mit

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}). \quad (14.15)$$

Als Feldgleichung für ψ^* erhält man die zu (14.14, 15) konjugiert-komplexe Schrödinger-Gleichung.

Die zu ψ , ψ^* kanonisch konjugierten Felder sind

$$\begin{aligned} \pi(\vec{x}, t) &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\psi}} = \frac{i\hbar}{2} \psi^*(\vec{x}, t) \\ \pi^*(\vec{x}, t) &= \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\psi}^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi(\vec{x}, t). \end{aligned} \quad (14.16)$$

Für die Hamilton-Dichte folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \dot{\psi} \pi + \dot{\psi}^* \pi^* - \mathcal{L}_0 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 \psi_k^* \psi_k + V \psi^* \psi \end{aligned} \quad (14.17)$$

und für die Hamilton-Funktion

$$H_0 = \int d^3 x \mathcal{H}_0 = \int d^3 x \psi^* h \psi \quad (14.18)$$

– als Funktional der Felder ψ und π auffassbar.

Es werde nun die *Selbstwechselwirkung* des Materiefeldes *berücksichtigt*:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 - \frac{1}{2} \int d^3 x' \psi^*(\vec{x}', t) \psi^*(\vec{x}, t) V(\vec{x}', \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}', t), \quad (14.19)$$

d. h. die Wechselwirkung des Materiefeldes mit sich selbst vermöge eines nichtlokalen Potentials $V(\vec{x}', \vec{x})$. Daraus resultiert statt (14.14) die *nichtlineare Feldgleichung*

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \hbar \psi(\vec{x}, t) + \int d^3 x' \psi^*(\vec{x}', t) V(\vec{x}', \vec{x}) \psi(\vec{x}', t) \cdot \psi(\vec{x}, t) \quad (14.20)$$

für das Feld $\psi(\vec{x}, t)$. Das kanonisch konjugierte Feld $\pi(\vec{x}, t)$ ist unverändert durch (14.16) gegeben.

Die Hamilton-Dichte \mathcal{H} unterscheidet sich von \mathcal{H}_0 durch den Selbstwechselwirkungsterm aus (14.19), und für die *Hamilton-Funktion* erhält man schließlich den Ausdruck:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \int d^3 x' \int d^3 x \psi^*(\vec{x}', t) \psi^*(\vec{x}, t) V(\vec{x}', \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}', t). \quad (14.21)$$

Zu H_0 tritt also bei Selbstwechselwirkung die *Selbstenergie* des Feldes hinzu. •

Quantisierung:

1. Diskretes System. Auffassung der $q_i(t)$, $p_i(t)$ als hermitesche Operatoren in einem Hilbert-Raum mit den Vertauschungsrelationen

$$[q_k(t), q_l(t)] = [p_k(t), p_l(t)] = 0, \quad [q_k(t), p_l(t)] = i \hbar \delta_{kl}. \quad (14.22)$$

Dynamik durch Hamilton-Operator gegeben; im Heisenberg-Bild:

$$\frac{d}{dt} A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)]. \quad (14.23)$$

Speziell für $A(t) = q_k(t)$, $p_l(t)$ erhält man die kanonischen Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{q}_k(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_k}(q_j(t), p_j(t)) \\ \dot{p}_l(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q_l}(q_j(t), p_j(t)). \end{aligned} \quad (14.24)$$

2. Feld. Auffassung der $\chi(\vec{x}, t)$, $\pi(\vec{x}, t)$ als (i. a. nichthermitesche) *Feldoperatoren* in einem Hilbert-Raum. Was für Kommutatoren

$$\begin{aligned} [\chi(\vec{x}', t), \chi(\vec{x}, t)] &= \dots \\ [\pi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)] &= \dots \\ [\chi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)] &= \dots \end{aligned} \quad (14.25)$$

soll man postulieren? Dynamik durch Hamilton-Operator:

$$\frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{x}, t) = \frac{i}{\hbar} [H, \chi(\vec{x}, t)] \quad (14.26 \text{ a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \pi(\vec{x}, t) = \frac{i}{\hbar} [H, \pi(\vec{x}, t)]. \quad (14.26 \text{ b})$$

Welches Feld soll quantisiert werden?

Die Bedeutung der Feldquantisierung liegt in der Betonung korpuskularer Aspekte des Feldes: **Teilchen als Quanten eines Feldes**, z. B. Photonen als Quanten des Maxwell-Feldes, Elektronen/Positronen als Quanten des Dirac-Feldes, ... *Hier* geht es im folgenden darum, ein System identischer Teilchen (Bosonen, Fermionen) durch **Quantisierung des klassischen Materiefeldes** $\psi(\vec{x}, t)$ ohne/mit Selbstwechselwirkung bei fehlender/vorhandener (spinunabhängiger) Wechselwirkung der Teilchen untereinander zu beschreiben.

Sinn und Zweck dieser sog. *Zweiten Quantisierung*: keine physikalisch neuen Resultate, Äquivalenz zu „normaler“ QUM:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots) \right) \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots; t) = 0, \quad (14.27)$$

dazu Symmetrie- bzw. Antisymmetrieforderung (ψ in Orts-Spin-Darstellung: \vec{x}_i steht für die Ortskoordinaten *und* die Spinvariable); aber

- neue allgemeingültige Modellvorstellung: Teilchen als Feldquanten
- vorteilhafter Ausgangspunkt zur näherungsweisen Behandlung von Vielteilchenproblemen.

Die Frage (14.25) ist nun bezüglich der Feldoperatoren $\psi(\vec{x}, t)$, $\psi^+(\vec{x}, t)$ zu stellen:

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{x}', t), \psi(\vec{x}, t)] &= ? \\ [\psi^+(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)] &= ? \\ [\psi(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)] &= ? \end{aligned} \tag{14.28}$$

Oder andere algebraische Beziehungen? Antikommutatoren?

Entwicklung von $\psi(\vec{x}, t)$, $\psi^+(\vec{x}, t)$ nach einem VONS, z. B. nach den Energieeigenfunktionen $u_1(\vec{x})$, $u_2(\vec{x})$, ... zu den Energieeigenwerten $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$ des Einteilchen-Hamiltonians h :

$$h u_k(\vec{x}) = \varepsilon_k u_k(\vec{x}), \quad k = 1, 2, 3, \dots; \tag{14.29}$$

also:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_k a_k(t) u_k(\vec{x}) \\ \psi^+(\vec{x}, t) &= \sum_k a_k^+(t) u_k^*(\vec{x}). \end{aligned} \tag{14.30}$$

Da ψ , $\psi^+(\vec{x}, t)$ Operatoren sind und u_k , $u_k^*(\vec{x})$ **C**-Funktionen, sind die Entwicklungskoeffizienten a_k , a_k^+ Operatoren. (\vec{x} steht i. a. für die Ortskoordinaten und die Spinvariable.) Damit ist die Frage (14.28) verschoben: Welche Vertauschungsrelationen oder sonstigen algebraischen Verknüpfungen gelten für die a_k , $a_k^+(t)$? Die Antwort fällt für Bosonen und Fermionen verschieden aus.

Für **Bosonen** gilt:

$$[a_k, a_l] = [a_k^+, a_l^+] = 0, \quad [a_k, a_l^+] = \delta_{kl}, \quad k, l = 1, 2, 3, \dots \tag{14.31}$$

Bezeichnung der a_k als *Vernichtungsoperatoren*, der a_k^+ als *Erzeugungsoperatoren* und der hermiteschen Operatoren

$$N_k = a_k^+ a_k \tag{14.32}$$

als *Teilchenzahloperatoren*. Diese Namen werden durch die nachfolgenden Betrachtungen verständlich.

Betrachte das *Eigenwertproblem* von N_k :

$$N_k \phi = n_k \phi. \tag{14.33}$$

Aus den Vertauschungsrelationen (14.31) folgt das Spektrum:

$$n_k = 0, 1, 2, \dots \quad \text{für alle } k, \tag{14.34}$$

d. h. jeder Operator N_k hat als Eigenwert sämtliche nichtnegativen ganzen Zahlen.

Beweis – vgl. die algebraische Behandlung des harmonischen Oszillators in Kap. 7:

1.

$$N_k \phi = n_k \phi \quad \Rightarrow \quad n_k = \frac{(\phi, a_k^+ a_k \phi)}{(\phi, \phi)} = \frac{\|a_k \phi\|^2}{\|\phi\|^2} \geq 0 \quad (14.35 \text{ a})$$

2.

$$\begin{aligned} N_k \phi = n_k \phi \quad \Rightarrow \quad a_k^+ a_k^+ a_k \phi &= a_k^+ (a_k a_k^+ - 1) \phi = n_k a_k^+ \phi \\ \Rightarrow N_k (a_k^+ \phi) &= (n_k + 1) (a_k^+ \phi) . \end{aligned} \quad (14.35 \text{ b})$$

3. Analog erhält man:

$$N_k (a_k \phi) = (n_k - 1) (a_k \phi) ; \quad (14.35 \text{ c})$$

a_k^+ erhöht, a_k erniedrigt also den Eigenwert um 1.

4.

$$a_k \phi_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad N_k \phi_0 = 0$$

$$\phi_r = \underbrace{a_k^+ a_k^+ \dots a_k^+}_{r\text{-mal}} \phi_0 \quad \Rightarrow \quad N_k \phi_r = r \phi_r , \quad r = 1, 2, \dots \quad (14.35 \text{ d})$$

– bis auf Normierung; das ist die *Behauptung*.

Fock-Raum. Wegen (14.31, 32) kommutieren die Teilchenzahloperatoren $N_1, N_2, \dots, N_k, \dots, N_l, \dots$ sämtlich miteinander:

$$[N_k, N_l] = 0 , \quad k, l = 1, 2, 3, \dots \quad (14.36)$$

Zu zeigen! Sie besitzen daher ein System von simultanen Eigenvektoren

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle \quad (14.37)$$

zu den Eigenwerte $n_1, n_2, \dots, n_k, \dots$ Bezeichnung der Zustände (14.37) als *Fock-Zustände*; sie bilden eine Orthonormal-Basis in einem Hilbert-Raum, den man *Fock-Raum* nennt.

Interpretation: Die Fock-Zustände sind Zustände scharfer Teilchenzahlen, und zwar n_1 Teilchen im Zustand $u_1(\vec{x})$, n_2 Teilchen im Zustand $u_2(\vec{x})$, ... n_k Teilchen im Zustand $u_k(\vec{x})$, ...

Der *Grundzustand* – das *Vakuum* –

$$\Phi_0 = \Phi_{00\dots 0\dots} = |0, 0, \dots 0, \dots\rangle \quad (14.38)$$

ist dadurch gekennzeichnet, dass überhaupt kein Teilchen vorhanden ist:

$$N_k \Phi_0 = 0 \quad \text{für alle } k . \quad (14.39)$$

Φ_0 sei auf 1 normiert:

$$\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1 ; \quad (14.40)$$

das bedeutet: Mit Sicherheit (Wahrscheinlichkeit 1) findet man im Vakuum kein einziges Teilchen!

Anwendung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf die Fock-Zustände:

$$a_k^+ \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = \sqrt{n_k + 1} \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k + 1 \dots} \quad (14.41 \text{ a})$$

$$a_k \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = \sqrt{n_k} \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k - 1 \dots} , \quad (14.41 \text{ b})$$

vgl. Gln. (7.43). Durch Anwendung von a_k^+ wird ein Boson im Zustand $u_k(\vec{x})$ erzeugt, durch Anwendung von a_k wird davon eines vernichtet. Speziell gilt:

$$a_k \Phi_0 = 0 \quad \text{für alle } k , \quad (14.42)$$

d. h. weniger als kein Teilchen in den Zuständen $u_k(\vec{x})$ gibt es nicht. Ferner folgt aus (14.41 a):

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = C (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots (a_k^+)^{n_k} \dots \Phi_0 \quad (14.43)$$

mit der Normierungskonstanten

$$C = (n_1! n_2! \dots n_k! \dots)^{-\frac{1}{2}} , \quad (14.44)$$

vgl. (7.44).

Konstruktion beliebiger Zustandsvektoren $|\rangle$ aus dem Fock-Raum durch Superposition der Fock-Zustände $|n_1, n_2, \dots n_k, \dots\rangle$. Entwicklungskoeffizienten $\langle n_1, n_2, \dots n_k, \dots | \rangle$ bilden die *Fock-* oder *Teilchenzahl-Darstellung* von $|\rangle$.

Energieeigenzustände des Materiefeldes. Der Hamilton-Operator des Bosonenfeldes ist bei fehlender Selbstwechselwirkung durch (14.18) gegeben, wobei dort die klassischen Felder ψ, ψ^* durch die Feldoperatoren ψ, ψ^+ zu ersetzen sind:

$$H_0 = \int d^3 x \psi^+(\vec{x}, t) h \psi(\vec{x}, t)$$

$$= \sum_{k,l} h_{kl} a_k^+ a_l \quad (14.45)$$

– gemäß (14.30) – mit

$$h_{kl} = \int d^3 x u_k^*(\vec{x}) h u_l(\vec{x}) . \quad (14.46)$$

Wegen der speziellen (!) Voraussetzung (14.29) ist

$$h_{kl} = \varepsilon_k \delta_{kl} . \quad (14.47)$$

Damit folgt aus (14.45) für den Hamilton-Operator der Ausdruck:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k N_k . \quad (14.48)$$

Folglich vertauscht der Hamiltonian mit sämtlichen Teilchenzahloperatoren, und die Fock-Zustände sind simultan Energieeigenzustände des Bosonenfeldes:

$$(H_0 - E_0) |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = 0 \quad (14.49)$$

mit

$$E_0 = \sum_k n_k \varepsilon_k . \quad (14.50)$$

Interpretation: Feld als System individueller Teilchen (Quanten), von denen jedes einen der Energiewerte ε_k annehmen kann. Die gesamte Feldenergie ist gleich der Summe der Energien der Teilchen (Quanten). $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$ ist ein Zustand, in dem n_1 Teilchen die Energie ε_1 , n_2 Teilchen die Energie ε_2 , ... n_k Teilchen die Energie ε_k , ... besitzen.

Wegen

$$[H_0, N_k] = 0 \quad \text{für alle } k \quad (14.51)$$

bleiben sämtliche *Teilchenzahlen* $n_k \geq 0$ unter der H_0 -Dynamik *erhalten*. Das ist bei fehlender Wechselwirkung zwischen den Bosonen sehr plausibel!

Mit (14.31) kann man auch die Frage (14.28) nach den **Kommutatoren der Bosonen-Feldoperatoren** $\psi, \psi^+(\vec{x}, t)$ beantworten. Mit (14.30) gilt nämlich z. B.:

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)] &= \sum_{k,l} \underbrace{[a_k, a_l^+]}_{=\delta_{kl}} u_k(\vec{x}') u_l^*(\vec{x}) \\ &= \sum_k u_k(\vec{x}') u_k^*(\vec{x}') \\ &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}) ; \end{aligned} \quad (14.52 \text{ a})$$

analog:

$$[\psi(\vec{x}', t), \psi(\vec{x}, t)] = [\psi^+(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)] = 0. \quad (14.52 \text{ b})$$

Bei Einführung des zu $\psi(\vec{x}, t)$ *kanonisch konjugierten Feldes* $\pi(\vec{x}, t) = i\hbar\psi^+(\vec{x}, t)$ – vgl. (14.16) – gehen die Beziehungen (14.52) über in:

$$[\psi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)] = i\hbar\delta(\vec{x}' - \vec{x}) \quad (14.53)$$

$$[\psi(\vec{x}', t), \psi(\vec{x}, t)] = [\pi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)] = 0$$

– in offensichtlicher Verallgemeinerung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen!

Der **gesamten Teilchenzahl** ist der Operator

$$N = \sum_k N_k = \sum_k a_k^+ a_k \quad (14.54)$$

zugeordnet. Wegen (14.51) ist diese Observable in einem Feld mit dem Hamiltonian H_0 ebenfalls *Erhaltungsgröße*:

$$[H_0, N] = 0. \quad (14.55)$$

Die Fock-Zustände

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_k! \dots}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots (a_k^+)^{n_k} \dots \Phi_0 \quad (14.56)$$

sind nicht nur Zustände mit scharfen N_k -Werten:

$$N_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle, \quad (14.57)$$

d. h. n_k Teilchen im Zustand $u_k(\vec{x})$, sondern auch *Zustände mit scharfem N -Wert*:

$$N |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = f |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle, \quad (14.58)$$

wo

$$f = \sum_k n_k \quad (14.59)$$

die gesamte (unter der H_0 -Dynamik unveränderliche) Teilchenzahl ist.

Lokalisierte Bosonenzustände. Betrachte den Zustand

$$\begin{aligned} |\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{f!}} \psi^+(\vec{x}_1) \psi^+(\vec{x}_2) \dots \psi^+(\vec{x}_f) \Phi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{f!}} \sum_{k_1, k_2, \dots, k_f} u_{k_1}^*(\vec{x}_1) u_{k_2}^*(\vec{x}_2) \dots u_{k_f}^*(\vec{x}_f) a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_f}^+ \Phi_0 \end{aligned} \quad (14.60)$$

– gemäß (14.30) – zu beliebigem, aber festem Zeitpunkt t (t -Argument einfachheitshalber weggelassen). Dieser hat die folgenden *Eigenschaften*:

1. Der Zustand (14.60) ist ein f -Bosonen-Zustand:

$$N |\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle = f |\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle ; \quad (14.61)$$

denn da jeder Summand $a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_f}^+ \Phi_0$ ein f -Bosonen-Zustand ist, gilt das auch für die Überlagerung (14.60). Dagegen ist (14.60) kein Eigenzustand der N_k : keine Zuordnung der f Teilchen zu den Einteilchen-Zuständen $u_k(\vec{x})$ möglich.

2. Der Zustand (14.60) besitzt die *Orthonormierung* (14.62)

$$\langle \vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \dots, \vec{x}'_{f'} | \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f \rangle = \frac{1}{f'!} \delta_{f'f} \sum_{\Pi} \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1) \delta(\vec{x}'_2 - \vec{x}_2) \dots \delta(\vec{x}'_{f'} - \vec{x}_f) ,$$

damit ist die Summe über alle Permutationen der (un-) gestrichenen Koordinaten gemeint. *Beweis*:

• $f' \neq f$: Wegen „unkompensierter“ Vernichtungsoperatoren und $a_k \Phi_0 = 0$ (14.42) folgt

$$\langle \vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \dots, \vec{x}'_{f'} | \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f \rangle = 0$$

• $f' = f$:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \dots, \vec{x}'_f | \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f \rangle \\ &= \frac{1}{f!} \langle \Phi_0 | \psi(\vec{x}'_f) \dots \psi(\vec{x}'_2) \underbrace{\psi(\vec{x}'_1) \psi^+(\vec{x}_1)}_{\stackrel{(14.52)}{=} \psi^+(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}'_1) + \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1)} \psi^+(\vec{x}_2) \dots \psi^+(\vec{x}_f) | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

Weitere Anwendung von (14.52, 42) liefert die *Behauptung*.

Die Zustandsvektoren $|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle$ bilden – statt der $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$ – eine alternative Basis im Fock-Raum; allerdings handelt es sich – wie man an (14.62) sieht – um *uneigentliche* Vektoren. Die Wahrscheinlichkeitsamplituden (Entwicklungskoeffizienten) $\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f | \rangle$ bilden die *Ortsdarstellung* des Bosonen-Zustandes $|\rangle$ (im Allgemeinen die *Orts-Spin-Darstellung*).

3. Wegen $[\psi^+(\vec{x}_j), \psi^+(\vec{x}_k)] = 0$ ist der Zustand (14.60) total *symmetrisch* gegenüber beliebigen Permutationen der Positionen $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f$ der f Bosonen.

Interpretation. Der Zustand $|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle$ ist durch scharfe räumliche *Lokalisierung* der f Bosonen gekennzeichnet: ein Boson bei \vec{x}_1 , ein anderes bei \vec{x}_2 , ... ein letztes bei \vec{x}_f .

Die Bosonen können „aufeinandersitzen“: $\vec{x}_j = \vec{x}_k$ für $j \neq k$ ist nicht verboten. (Falls die \vec{x}_i die Spinvariablen der Bosonen enthalten, ist der Zustand auch in diesen Größen scharf.)

Für festes f beziehen sich die vorstehenden Aussagen nur auf den zur Gesamtteilchenzahl gehörigen Unterraum \mathcal{H}_f des Fock-Raumes \mathcal{H} . Wenn f alle erlaubten Werte $0, 1, 2, \dots$ durchläuft, gelten sie für alle \mathcal{H}_f somit für ganz \mathcal{H} .

Der **Fock-Raum** \mathcal{H} ist darstellbar als direkte Summe orthogonaler Unterräume \mathcal{H}_f :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_f \oplus \dots, \quad (14.63)$$

die zu den verschiedenen Gesamtteilchenzahlen $f = 0, 1, 2, \dots$ gehören:

\mathcal{H}_0 mit der Basis Φ_0 (Grundzustand, Vakuum): *kein* Teilchen ($f = 0$);

\mathcal{H}_1 mit der Basis $a_k^+ \Phi_0, a_{k'}^+ \Phi_0, \dots$ oder $\psi^+(\vec{x}) \Phi_0, \psi^+(\vec{x}') \Phi_0, \dots$: *ein* Teilchen ($f = 1$);

\mathcal{H}_2 mit der Basis $a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \Phi_0, a_{k'_1}^+ a_{k'_2}^+ \Phi_0, \dots$ oder $\psi^+(\vec{x}_1) \psi^+(\vec{x}_2) \Phi_0, \psi^+(\vec{x}'_1) \psi^+(\vec{x}'_2) \Phi_0, \dots$: *zwei* Teilchen ($f = 2$) usw.

Orts-(Spin-)Darstellung der Bosonen-Fock-Zustände:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots \rangle & (14.64) \\ & = \underbrace{\sqrt{\frac{1}{f! n_1! n_2! \dots n_k! \dots}}}_{= C_S} \left(\psi^+(\vec{x}_1) \psi^+(\vec{x}_2) \dots \psi^+(\vec{x}_f) \Phi_0, \underbrace{(a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots (a_k^+)^{n_k} \dots \Phi_0}_{= \frac{1}{f!} \sum_{\Pi} \prod a_{\nu_1}^+ a_{\nu_2}^+ \dots a_{\nu_f}^+ \Phi_0} \right) \end{aligned}$$

Aus (14.30) folgt

$$a_{\nu_i}^+ = \int d^3 x'_i u_{\nu_i}(\vec{x}'_i) \psi^+(\vec{x}'_i); \quad (14.65)$$

damit geht (14.64) über in:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots \rangle \\ & = C_S \sum_{\Pi} \prod \int d^3 x'_1 \dots \int d^3 x'_f \frac{1}{f!} \left(\underbrace{\psi^+(\vec{x}_1) \dots \psi^+(\vec{x}_f) \Phi_0, \psi^+(\vec{x}'_1) \dots \psi^+(\vec{x}'_f) \Phi_0}_{\stackrel{(14.60,62)}{=} \sum_{\Pi'} \prod \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}'_1) \dots \delta(\vec{x}_f - \vec{x}'_f)} \right) u_{\nu_1}(\vec{x}'_1) \dots u_{\nu_f}(\vec{x}'_f) \\ & = C_S \frac{1}{f!} \sum_{\Pi} \prod \sum_{\Pi'} \prod u_{\nu_1}(\vec{x}_1) u_{\nu_2}(\vec{x}_2) \dots u_{\nu_f}(\vec{x}_f); \end{aligned} \quad (14.66)$$

dabei bedeutet \sum_{Π} : Summation über alle Permutationen von $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_f$ und $\sum_{\Pi'}$: Summation über alle Permutationen von $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f$. Mit

$$\sum_{\Pi} \Pi \sum_{\Pi'} \Pi' = f! \sum_{\Pi} \quad (14.67)$$

folgt schließlich aus (14.66):

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots \rangle = C_S \sum_{\Pi} \Pi u_{\nu_1}(\vec{x}_1) u_{\nu_2}(\vec{x}_2) \dots u_{\nu_f}(\vec{x}_f) = \psi_S, \quad (14.68)$$

$$C_S = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_k! \dots f!}}.$$

Das ist genau die normierte, symmetrisierte Wellenfunktion für f wechselwirkungsfreie Bosonen gemäß (12.59, 61).

Auch hier ist ψ_S Eigenfunktion des Hamiltonians

$$H_0 = \sum_{i=1}^f h(i) \quad (14.69)$$

(vgl. (12.53)) zum Eigenwert

$$E_0 = \sum_k n_k \varepsilon_k \quad (14.70)$$

(vgl. (12.58)). Zum Beweis betrachte die Orts-(Spin-)Darstellung von (14.49).

Für **Fermionen** gilt:

$$\{a_k, a_l\} = \{a_k^+, a_l^+\} = 0, \quad \{a_k, a_l^+\} = \delta_{kl}, \quad k, l = 1, 2, 3, \dots \quad (14.71)$$

mit dem *Antikommutator*

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (14.72)$$

Die Operatoren a_k, a_k^+ werden – wie im Falle der Bosonen – als *Vernichtungs-* bzw. *Erzeugungsoperatoren* bezeichnet. Aus (14.71, 72) folgt:

$$a_k^2 = (a_k^+)^2 = 0 \quad (14.73)$$

$$a_k a_k^+ = 1 - a_k^+ a_k.$$

Der *Teilchenzahloperator* für Fermionen ist wie für Bosonen definiert: $N_k = a_k^\dagger a_k$. Er ist wiederum hermitesch, besitzt aber im Unterschied zu (14.34) nur die folgenden Eigenwerte:

$$n_k = 0, 1 . \quad (14.74)$$

Das liegt daran, dass N_k für Fermionen wegen (14.73) idempotent, somit ein *Projektor* ist:

$$N_k^2 = a_k^\dagger a_k a_k^\dagger a_k = a_k^\dagger (1 - a_k^\dagger a_k) a_k = a_k^\dagger a_k = N_k , \quad (14.75)$$

woraus die Behauptung (14.74) folgt.

Wie im Falle der Bosonen – vgl. (14.37) – hat man auch im Falle der Fermionen Zustände mit scharfen Besetzungszahlen n_k für die Einteilchen-Zustände $u_k(\vec{x})$:

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$$

als simultane Eigenvektoren der kommutierenden Observablen $N_1, N_2, \dots, N_k, \dots, N_l, \dots$ (14.36). *Fock-Zustände* als Basis im *Fock-Raum*. Jedoch sind hier die n_k gemäß (14.74) eingeschränkt: Jeder Einteilchen-Zustand $u_k(\vec{x})$ kann höchstens mit einem Fermion besetzt werden – **Pauli-Prinzip**.

Analog zu (14.38 - 40) gibt es das *Vakuum* Φ_0 als Grundzustand des Fermionenfeldes. Daraus konstruiert man – wie in (14.43, 44) – mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren a_k^\dagger alle möglichen Fermionen-Fock-Zustände (Anregungen des Fermionen-Vakuums):

$$\begin{aligned} \Phi_{n_1, n_2 \dots n_k \dots} &= (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_k^\dagger)^{n_k} \dots \Phi_0 \\ &= a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \dots a_{i_f}^\dagger \Phi_0 , \end{aligned} \quad (14.76)$$

$i_1 < i_2 < \dots < i_f$ – gemäß (14.74). Diese Zustände sind bereits auf 1 normiert (ohne Beweis).

Anwendung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

- *Erzeugung eines Fermions* im Zustand $u_k(\vec{x})$:

$$a_k^\dagger \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = (-1)^{s_k} (1 - n_k) \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k + 1 \dots} , \quad (14.77)$$

nur möglich, falls $n_k = 0$; für $n_k = 1$ resultiert $a_k^\dagger \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = 0$.

- *Vernichtung eines Fermions* im Zustand $u_k(\vec{x})$:

$$a_k \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = (-1)^{s_k} n_k \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k - 1 \dots} , \quad (14.78)$$

nur möglich, falls $n_k = 1$; für $n_k = 0$ resultiert $a_k \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} = 0$.

In (14.77, 78) bedeutet

$$s_k = \sum_{i=1}^{k-1} n_i, \quad (14.79)$$

was aus (14.71) folgt.

Die *Fock-* oder *Teilchenzahldarstellung* eines Fermionen-Systems ist wie bei Bosonen-Systemen definiert (nach (14.44)).

Die Fermionen-Fock-Zustände sind wie die Bosonen-Fock-Zustände *Energieeigenzustände* des selbstwechselwirkungsfreien Hamiltonians $H_0 = \sum_k \varepsilon_k N_k$ zu den *Energieeigenwerten* $E_0 = \sum_k n_k \varepsilon_k$. Wegen $[H_0, N_k] = [N_k, N] = [N, H_0] = 0$, wobei $N = \sum_k N_k$ ist, sind sie simultan Zustände scharfer Besetzungszahlen $n_1, n_2, \dots, n_k, \dots$ und scharfer Gesamtteilchenzahl $f = \sum_k n_k$ – alles wie bei Bosonen, mit dem Unterschied: bei Fermionen können die n_k nur die Werte 0 oder 1 annehmen!

Antikommutatoren für Fermionen-Feldoperatoren. Mit (14.30) folgt

$$\begin{aligned} \{\psi(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)\} &= \sum_{k,l} \underbrace{\{a_k, a_l^+\}}_{=\delta_{kl}} u_k(\vec{x}') u_l^*(\vec{x}) \\ &= \sum_k u_k(\vec{x}') u_k^*(\vec{x}) \\ &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}); \end{aligned} \quad (14.80 \text{ a})$$

analog:

$$\{\psi(\vec{x}', t), \psi(\vec{x}, t)\} = \{\psi^+(\vec{x}', t), \psi^+(\vec{x}, t)\} = 0. \quad (14.80 \text{ b})$$

Bei Einführung des zu $\psi(\vec{x}, t)$ kanonisch konjugierten Feldes $\pi(\vec{x}, t) = i\hbar \psi^+(\vec{x}, t)$ gehen die Beziehungen (14.80) über in:

$$\begin{aligned} \{\psi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)\} &= i\hbar \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \\ \{\psi(\vec{x}', t), \psi(\vec{x}, t)\} &= \{\pi(\vec{x}', t), \pi(\vec{x}, t)\} = 0 \end{aligned} \quad (14.81)$$

– ohne Bezug zu den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen.

Wie in (14.60) führt man Zustände scharfer räumlicher *Lokalisierung* $|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle$ für insgesamt f Fermionen ein (14.61): je ein Fermion bei $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f$. (Falls die \vec{x}_i die

Spinvariablen der Fermionen enthalten, ist der Zustand auch in diesen Größen scharf.)
Abweichend von (14.62) sind diese jedoch wie folgt *orthonormiert* (ohne Beweis):

$$\langle \vec{x}'_1, \vec{x}'_2, \dots, \vec{x}'_{f'} | \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f \rangle = \frac{1}{f!} \delta_{f'f} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \Pi \delta(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1) \dots \delta(\vec{x}'_{f'} - \vec{x}_f) . \quad (14.82)$$

Im Unterschied zu den Bosonen ist hier $\vec{x}_j \neq \vec{x}_k$ für $j \neq k$ zu fordern, weil sonst die vorstehende „Determinante“ verschwindet; d. h. die Fermionen können *nicht* „aufeinander-sitzen“.

Orts-(Spin-)Darstellung der Fermionen-Fock-Zustände:

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{f!}} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \Pi u_{\nu_1}(\vec{x}_1) u_{\nu_2}(\vec{x}_2) \dots u_{\nu_f}(\vec{x}_f) = \psi_A \quad (14.83)$$

– vgl. (14.68). Das ist genau die normierte antisymmetrisierte Wellenfunktion gemäß (12.62, 63) für f wechselwirkungsfreie Fermionen (Slater-Determinante).

Die **zeitliche Entwicklung** des quantisierten Materiefeldes ist – für Bosonen und Fermionen gleichermaßen – im *Heisenberg-Bild* durch die Zeitabhängigkeit der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gegeben. *Heisenberg-Gleichung*:

$$\frac{d}{dt} a_k = \frac{i}{\hbar} [H_0, a_k(t)] , \quad (14.84)$$

zur Bestimmung von $a_k(t) \Rightarrow a_k^+(t)$. Mit $H_0 = \sum_{l,m} a_l^+ a_m h_{lm}$ gemäß (14.45) geht (14.84) über in:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a_k &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{l,m} [a_k, a_l^+ a_m] h_{lm} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{l,m} \underbrace{(a_k a_l^+ \mp a_l^+ a_k)}_{= \delta_{kl}} a_m h_{lm} \quad \text{für} \quad \begin{array}{l} \text{Bosonen} \\ \text{Fermionen} \end{array} \\ \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} a_k &= -\frac{i}{\hbar} \sum_m h_{km} a_m(t) \end{aligned} \quad (14.85)$$

sowohl für Bosonen – als auch für Fermionensysteme.

In dem *Spezialfall* (14.47), d. h. $h_{km} = \varepsilon_k \delta_{km}$, hat (14.85) die Lösung

$$a_k(t) = a_k(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_k t} . \quad (14.86)$$

Aus der zeitlichen Entwicklung der $a_k(t)$ leitet man eine – für Bosonen und Fermionen gleiche – Bewegungsgleichung für den Feldoperator $\psi(\vec{x}, t)$, d. h. eine **Feldgleichung** des quantisierten Materiefeldes her. Differenziere $\psi(\vec{x}, t) = \sum_k u_k(\vec{x}) a_k(t)$ (14.30) nach der Zeit, und benutze (14.85, 46); das ergibt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_k u_k(\vec{x}) \frac{d}{dt} a_k \\
&= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k,m} u_k(\vec{x}) h_{km} a_m(t) \\
&= -\frac{i}{\hbar} \int \sum_k u_k(\vec{x}) u_k^*(\vec{x}') h \sum_m u_m(\vec{x}') a_m(t) d^3 x' \\
&= -\frac{i}{\hbar} \int \delta(\vec{x} - \vec{x}') h \psi(\vec{x}', t) d^3 x' \\
\Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) &= -\frac{i}{\hbar} h \psi(\vec{x}, t), \tag{14.87}
\end{aligned}$$

wo der Hamilton-Operator h durch (14.15) gegeben ist. (14.87) sieht formal aus wie die Schrödinger-Gleichung (14.14), sie hat aber eine andere Bedeutung: Es handelt sich um die Heisenberg-Gleichung für den Feldoperator $\psi(\vec{x}, t)$ im selbstwechselwirkungsfreien Fall. Vgl. mit der allgemeinen Feld-Bewegungsgleichung (14.26 a).

Die Zustandsvektoren $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$, $|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_f\rangle$ sind im Heisenberg-Bild zeitlich konstant!

Vom Heisenberg-Bild zum *Schrödinger-Bild* geht man mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$ über; und zwar gilt nach (10.150) mit (14.30):

$$\begin{aligned}
a_k &= U(t) a_k(t) U^\dagger(t) = a_k(0) \\
\Rightarrow \quad \psi(\vec{x}) &= \psi(\vec{x}, 0), \tag{14.88}
\end{aligned}$$

d. h. zeitlich konstanter Feldoperator. Dagegen hängen die Fock-Zustände von der Zeit ab; und zwar ist nach (10.140):

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots}(t) &= U(t) |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle \\
\Rightarrow \quad \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + H_0 \right) \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots}(t) &= 0. \tag{14.89}
\end{aligned}$$

Diese Bewegungsgleichung – die Schrödinger-Gleichung – gilt auch für beliebige Überlagerungen von Fock-Zuständen, d. h. für alle Zustände des Fock-Raumes. Damit ist – wenigstens für den Fall ohne Selbstwechselwirkung – die Äquivalenz von Zweiter Quantisierung und normaler QUM bewiesen.

Bei vorhandener **Selbstwechselwirkung** des Materiefeldes ist der Hamilton-Operator durch (14.21) gegeben, wobei dort ψ, ψ^* durch die Feldoperatoren ψ, ψ^+ zu ersetzen sind:

$$\begin{aligned} H &= \int d^3 x \psi^+(\vec{x}, t) h \psi(\vec{x}, t) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3 x' \int d^3 x \psi^+(\vec{x}', t) \psi^+(\vec{x}, t) V(\vec{x}', \vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}', t) \\ &= H_0 + H_1 . \end{aligned} \quad (14.90)$$

Gegeben sei ein VONS $u_1(\vec{x}), u_2(\vec{x}), \dots, u_k(\vec{x}), \dots$ – nicht notwendig Eigenfunktionen von h – nach dem $\psi, \psi^+(\vec{x}, t)$ gemäß (14.30) entwickelt werden. Einsetzen in (14.90) führt auf:

$$H = \sum_{k,l} a_k^+ a_l h_{kl} + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} a_k^+ a_l^+ a_m a_n V_{klmn} \quad (14.91)$$

mit

$$h_{kl} = \int d^3 x u_k^*(\vec{x}) h u_l(\vec{x}) \quad (14.92)$$

$$V_{klmn} = \int d^3 x' \int d^3 x u_k^*(\vec{x}') u_l^*(\vec{x}) V(\vec{x}', \vec{x}) u_m(\vec{x}) u_n(\vec{x}') .$$

Interpretation: H_0 besteht aus Termen mit Vernichtung *eines* Teilchens im Zustand l , Erzeugung *eines* Teilchens im Zustand k ; H_1 besteht aus Termen mit Vernichtung *zweier* Teilchen in den Zuständen m, n , Erzeugung *zweier* Teilchen in den Zuständen k, l .

Im Unterschied zum selbstwechselwirkungsfreien Fall kommutieren die Teilchenzahloperatoren $N_k = a_k^+ a_k$ *nicht* mit H ; sie sind also *keine* Erhaltungsgrößen: die Besetzungszahlen n_k ändern sich unter der H -Dynamik. Dagegen kommutiert wie im selbstwechselwirkungsfreien Fall der Operator der gesamten Teilchenzahl $N = \sum_k N_k$ mit H (ohne

Beweis):

$$[H, N] = 0 ; \quad (14.93)$$

die gesamte Teilchenzahl f bleibt also unter der H -Dynamik erhalten.

Berechnung der **der Energieeigenwerte in stationärer Störungsrechnung**. Sei H_0 das ungestörte Problem und H_1 die Störung. Unter der Voraussetzung $h u_k(\vec{x}) =$

$\varepsilon_k u_k(\vec{x})$ ist $H_0 = \sum_k N_k \varepsilon_k$ (14.29, 48). Die *nullte Näherung* ist durch (14.49, 50) gegeben:

$$E^{(0)} = \sum_k n_k \varepsilon_k \quad (14.94)$$

$$\Phi^{(0)} = \Phi_{n_1 n_2 \dots n_k \dots} \quad (14.95)$$

In *erster Näherung* tritt zur selbstwechselwirkungsfreien Energie (14.94) der Erwartungswert der Störung H_1 mit den Fock-Zuständen (14.95) hinzu (gemäß (13.11), sofern keine Entartung der $E^{(0)}$ -Niveaus vorliegt):

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= (\Phi^{(0)}, H_1 \Phi^{(0)}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\Phi_{n_1 n_2 \dots}, \sum_{k,l,m,n} a_k^+ a_l^+ a_m a_n V_{klmn} \Phi_{n_1 n_2 \dots} \right). \end{aligned} \quad (14.96)$$

Wegen der Orthogonalität der Fock-Zustände liefern nur Summanden mit $k = m, l = n$ oder $k = n, l = m$ einen Beitrag:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\Phi_{n_1 n_2 \dots}, \sum_{k,l} (a_k^+ a_l^+ a_k a_l V_{klkl} + a_k^+ a_l^+ a_l a_k V_{kllk}) \Phi_{n_1 n_2 \dots} \right). \quad (14.97)$$

Für *Bosonen/Fermionen* ist wegen $a_l a_k = \pm a_k a_l$:

$$\sum_{k,l} (\dots) = \sum_{k,l} a_k^+ a_l^+ a_k a_l (V_{klkl} \pm V_{kllk});$$

mit $a_l^+ a_k = \pm a_k a_l^+ \mp \delta_{kl}$ folgt:

$$\begin{aligned} \sum_{k,l} (\dots) &= \sum_{k,l} N_k N_l (V_{kllk} \pm V_{klkl}) \mp \sum_k N_k (V_{kkkk} \pm V_{kkkk}) \\ &= \sum_{\substack{k,l \\ (k \neq l)}} N_k N_l (V_{kllk} \pm V_{klkl}) + \begin{cases} 2 \sum_k N_k (N_k - 1) V_{kkkk} \\ 0 \end{cases}. \end{aligned} \quad (14.98)$$

Dieser Ausdruck ist in (14.97) einzusetzen. Insgesamt erhält man damit für die Energie des Bosonen- bzw. Fermionenfeldes bei vorhandener Selbstwechselwirkung in erster

störungstheoretischer Näherung:

$$\begin{aligned}
 E \simeq E^{(0)} + E^{(1)} &= \sum_k n_k \varepsilon_k \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ (k \neq l)}} n_k n_l (V_{kllk} \pm V_{klkl}) + \begin{cases} \sum_k n_k (n_k - 1) V_{kkkk} \\ 0 \end{cases} . \quad (14.99)
 \end{aligned}$$

1. *Term*: Energie der nichtwechselwirkenden Teilchen in den Zuständen k .

2. *Term*: Wechselwirkung zwischen Teilchen in *verschiedenen* Zuständen $k \neq l$:

• *Direkte Wechselwirkung*:

$$V_{kllk} = \int d^3 x' \int d^3 x |u_k(\vec{x}')|^2 V(\vec{x}', \vec{x}) |u_l(\vec{x})|^2 , \quad (14.100)$$

• *Austauschwechselwirkung*:

$$V_{klkl} = \int d^3 x' \int d^3 x u_k^*(\vec{x}') u_l^*(\vec{x}) V(\vec{x}', \vec{x}) u_k(\vec{x}) u_l(\vec{x}') . \quad (14.101)$$

Diese beiden Typen von Integralen traten bei der Diskussion der Zweifermionensysteme H_2 -Molekül und He-Atom auf.

3. *Term*: Wechselwirkung zwischen Teilchen in *gleichen* Zuständen $k = l$; tritt nur bei Bosonen, nicht bei Fermionen auf (Pauli-Prinzip).

15 Symmetrien und Invarianzen

Wenn das betrachtete System *Symmetrien* besitzt, d. h. wenn sein Hamilton-Operator unter gewissen Transformationen ein bestimmtes Verhalten aufweist, wobei *Invarianzen* von H von besonderer Bedeutung sind, dann lassen sich allgemeine (qualitative) Aussagen über das System machen, z. B.

- über das Energiespektrum und über die stationären Zustände (Entartungsgrad, Symmetrien, ...)
- über die zeitliche Konstanz gewisser Observablen (Erhaltungssätze) usw.

Umgekehrt: Die Kenntnis derartiger Konsequenzen ist für die *Modellierung* bedeutsam, d. h. für die Konstruktion eines Hamilton-Operators mit bestimmten erwünschten Eigenschaften. Für das Thema sind Methoden der *Gruppentheorie*, insbesondere der Darstellung von Gruppen, bedeutsam; siehe z. B. W. Ludwig & C. Falter, *Symmetries in Physics (Group Theory Applied to Physical Problems)*, Springer, Berlin ... (1988).

Symmetrietransformationen. Abbildungen $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ des ganzen Hilbert-Raumes auf den ganzen Hilbert-Raum mit

$$|(\varphi, \psi)|^2 = |(V\varphi, V\psi)|^2 \quad (15.1)$$

für beliebige Paare $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$, d. h. Erhaltung der Messwahrscheinlichkeiten. **Satz von Wigner:** V ist

- entweder unitär
- oder antiunitär.

Exakte mathematische Formulierung und Beweis z. B. bei S. Großmann, *Funktionalanalysis*, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt (1970), Kap. 10.9.

Unitäre Operatoren: siehe Kap. 10; insbesondere gilt

$$V^+ = V^{-1} . \quad (15.2)$$

Ein wichtiges Beispiel ist der Zeitentwicklungsoperator $V = U(t)$; andere (ebenfalls wichtige) Beispiele werden nachfolgend behandelt.

Antiunitäre Operatoren: weitgehend wie unitäre Operatoren; insbesondere gilt ebenfalls (15.2), jedoch ist V in diesem Falle *antilinear* – statt linear –

$$V(\alpha\varphi + \beta\psi) = \alpha^*(V\varphi) + \beta^*(V\psi), \quad (15.3)$$

mit der Konsequenz – statt (10.132) –

$$(V\varphi, V\psi) = (\varphi, \psi)^*. \quad (15.4)$$

Mehr und Genaueres hierzu bei Großmann (siehe unten).

Wichtig ist noch: Das Produkt zweier antiunitärer Operatoren ist ein unitärer Operator, das Produkt eines unitären mit einem antiunitären Operator ist ein antiunitärer Operator. Folglich lässt sich die ganze Klasse der antiunitären Operatoren durch Produktbildung eines speziellen antiunitären Operators mit allen unitären Operatoren erzeugen.

Ein wichtiges Beispiel für einen antiunitären Operator ist der *Operator der komplexen Konjugation*: $V = \Theta$ mit

$$\Theta\psi(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x}). \quad (15.5)$$

Die physikalische Bedeutung von Θ als Operator der „Bewegungsumkehr“ wird weiter unten diskutiert.

Betrachte ein System mit dem Hamilton-Operator H und eine (unitäre oder antiunitäre) Symmetrietransformation V . H sei unter V *invariant*:

$$VHV^+ = H \quad \Leftrightarrow \quad [H, V] = 0; \quad (15.6)$$

dann ist auch der zu H gehörige Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ unter V invariant:

$$[U(t), V] = 0 \quad (15.7)$$

für alle t . Folglich ist

$$|(\varphi, U(t)\psi)|^2 = |(V\varphi, U(t)V\psi)|^2, \quad (15.8)$$

d. h. die Dynamik (zeitliche Entwicklung) der Messwahrscheinlichkeiten ist für die transformierten Zustände dieselbe wie für die nichttransformierten Zustände.

In den folgenden Anwendungen ist V zunächst durchweg unitär.

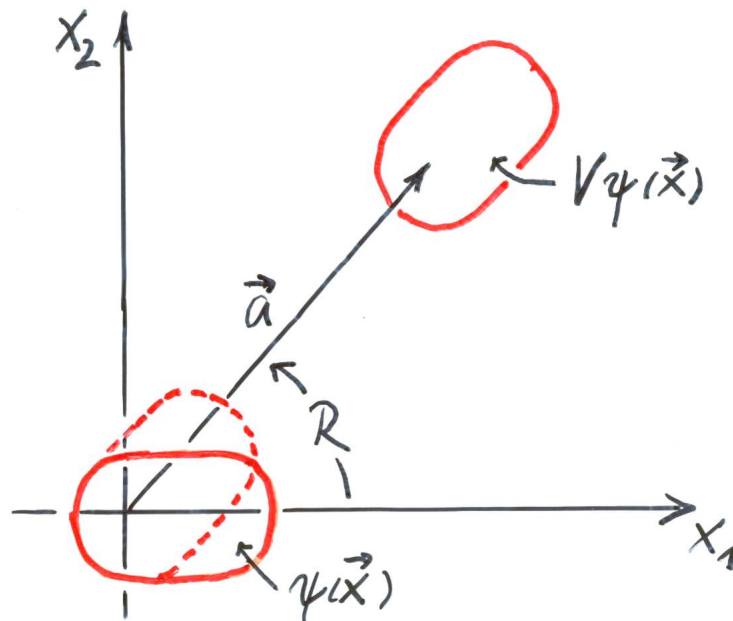
Translationen und Drehungen. Betrachte die (Gruppe der) Euklidischen Transformationen (\vec{a}, \vec{R}) des dreidimensionalen Raumes:

$$\vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a}, \quad (15.9)$$

wo R eine orthogonale Matrix mit Determinante $+1$ (Drehung) und \vec{a} ein fester Vektor (Translation) ist. Jeder derartigen Transformation ist im Hilbert-Raum der quadrat-integrierbaren Wellenfunktionen ein unitärer Operator $V(\vec{a}, R)$ zugeordnet gemäß der Definition

$$V(\vec{a}, R)\psi(\vec{x}) = \psi(R^{-1}(\vec{x} - \vec{a})); \quad (15.10)$$

hier zunächst für *ein spinloses Teilchen*. Veranschaulichung:



• Abbildung 15.1 •

In der Skizze wird der *aktive* Standpunkt eingenommen: Das physikalische System (das ψ -Feld), nicht das Bezugssystem, wird gedreht und verschoben.

Verallgemeinerung auf *Systeme spinloser Teilchen*:

$$V(\vec{a}, R)\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) = \psi(R^{-1}(\vec{x}^{(1)} - \vec{a}), R^{-1}(\vec{x}^{(2)} - \vec{a}), \dots) \quad (15.11)$$

Teilchen mit Spin: siehe unten!

Für das *Produkt* zweier Euklidischer Transformationen gilt:

$$\vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a}$$

$$\vec{x}'' = R'\vec{x}' + \vec{a}'$$

$$\Rightarrow \quad \vec{x}'' = R' R \vec{x} + R' \vec{a} + \vec{a}' , \quad (15.12)$$

d. h.

$$(\vec{a}', R') (\vec{a}, R) = (\vec{a}' + R' \vec{a}, R' R) ; \quad (15.13)$$

für die zugeordneten unitären Operatoren folgt:

$$V(\vec{a}', R') V(\vec{a}, R) = V(\vec{a}' + R' \vec{a}, R' R) , \quad (15.14)$$

d. h. dem Produkt der beiden Transformationen ist derjenige Operator zugeordnet, der dem Produkt derjenigen beiden Operatoren entspricht, die den beiden Transformationen zugeordnet sind. Eine derartige *homomorphe Abbildung* einer Gruppe von Transformationen auf eine Gruppe von linearen Operatoren in einem Vektorraum wird als *Darstellung* bezeichnet. Falls H unter den V invariant ist, bezeichnet man die Menge der V als *Symmetrie-* oder *Invarianzgruppe* von H .

Wir betrachten zunächst **reine Translationen**:

$$T(\vec{a}) = V(\vec{a}, \mathbb{1}) ; \quad (15.15)$$

für diese gilt:

$$T(\vec{a}) \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) = \psi(\vec{x}^{(1)} - \vec{a}, \vec{x}^{(2)} - \vec{a}, \dots)$$

Taylor:

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{P} \right)^n \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{P}} \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) \end{aligned} \quad (15.16)$$

mit dem Gesamtimpuls

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(1)}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(2)}} + \dots \right) , \quad (15.17)$$

d. h. der Translationsoperator ist durch

$$T(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{P}} \quad (15.18)$$

gegeben. \vec{P} wird als *Erzeugende* der Translationen bezeichnet.

Genau dann ist H *translationsinvariant*:

$$[H, T(\vec{a})] = 0 \quad (15.19)$$

für alle \vec{a} , wenn gilt (siehe (15.18)):

$$[H, \vec{P}] = \vec{0}, \quad (15.20)$$

wenn also der Gesamtimpuls eine Erhaltungsgröße ist.

Beispiel:

$$H = - \sum_{\nu} \frac{\hbar^2}{2m_{\nu}} \Delta^{(\nu)} + V(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) \quad (15.21)$$

translationsinvariant, wenn gilt:

$$V(\vec{x}^{(1)} - \vec{a}, \vec{x}^{(2)} - \vec{a}, \dots) = V(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots). \quad (15.22)$$

Diese Voraussetzung ist erfüllt, wenn das Potential nur von den Abstandsvektoren $\vec{x}^{(\nu)} - \vec{x}^{(\mu)}$ für $\nu \neq \mu$ abhängt, was nur dann möglich ist, wenn das System *abgeschlossen* ist.

Die Menge der reinen Translationen wird als *Translationsgruppe* bezeichnet. Es handelt sich um eine *Abelsche Gruppe*, weil je zwei beliebige Translationen kommutieren.

Sodann diskutieren wir **reine Drehungen**:

$$D(R) = V(\vec{0}, R) \quad (15.23)$$

– zunächst weiterhin für ein System von spinlosen Teilchen; später wird dann auch der Spin berücksichtigt. Kennzeichnung von R durch eine Drehachse, d. h. einen entsprechenden Einheitsvektor \hat{u} , und einen Drehwinkel α mit

$$\hat{u} = \frac{\vec{\rho}}{|\vec{\rho}|}, \quad \rho_j = \sum_{k,l} \varepsilon_{jkl} R_{lk} \quad (15.24 \text{ a})$$

bzw.

$$1 + 2 \cos \alpha = \text{Spur } R; \quad (15.24 \text{ b})$$

zum Beweis betrachte man das Eigenwertproblem von R .

Der Zusammenhang zwischen \vec{x}' und \vec{x} lässt sich durch \hat{u} und α wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} \vec{x}' &= R(\hat{u}, \alpha) \vec{x} \\ &= \vec{x} \cos \alpha + (\hat{u} \wedge \vec{x}) \sin \alpha + \hat{u} (\hat{u} \cdot \vec{x}) (1 - \cos \alpha); \end{aligned} \quad (15.25)$$

Der Beweis erfolgt mit Hilfe der zweidimensionalen Drehmatrix bzgl. der u -Richtung.

Die zu R *inverse Drehung* ist gegeben durch

$$R^{-1}(\hat{u}, \alpha) = R(-\hat{u}, \alpha) = R(\hat{u}, 2\pi - \alpha). \quad (15.26)$$

Für eine *infinitesimale Drehung* folgt aus (15.25, 26):

$$\begin{aligned} R(\hat{u}, \varepsilon) \vec{x} &= \vec{x} + \varepsilon(\hat{u} \wedge \vec{x}) \\ R^{-1}(\hat{u}, \varepsilon) \vec{x} &= \vec{x} - \varepsilon(\hat{u} \wedge \vec{x}) ; \end{aligned} \quad (15.27)$$

somit hat man in diesem Falle ($\varepsilon \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} D(\hat{u}, \varepsilon) \psi(\vec{x}) &= \psi(\vec{x} - \varepsilon(\hat{u} \wedge \vec{x})) \\ &= \psi(\vec{x}) - \varepsilon(\hat{u} \wedge \vec{x}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}) \\ &= (\mathbb{1} - i\varepsilon \hat{u} \cdot \vec{L}) \psi(\vec{x}) , \end{aligned} \quad (15.28)$$

wobei

$$\vec{L} = \frac{1}{i} \vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (15.29)$$

der Bahndrehimpuls (in Einheiten von \hbar) ist. Bei beliebigen *endlichen Drehungen* gilt:

$$D(\hat{u}, \alpha) = e^{-i\alpha \hat{u} \cdot \vec{L}} . \quad (15.30)$$

Für eine N -Teilchen-Wellenfunktion sind die vorstehenden Gleichungen sinngemäß zu verallgemeinern:

$$D(R) \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) = e^{-i\alpha \hat{u} \cdot \vec{L}} \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) \quad (15.31)$$

mit

$$\vec{L} = \frac{1}{i} \left(\vec{x}^{(1)} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(1)}} + \vec{x}^{(2)} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}^{(2)}} + \dots \right) , \quad (15.32)$$

d. i. der Gesamtbahndrehimpuls. Bezeichnung von \vec{L} als *Erzeugende* der Drehungen.

Genau dann ist H *rotationsinvariant*:

$$[H, D(R)] = 0 \quad (15.33)$$

für alle R , wenn gilt:

$$[H, \vec{L}] = \vec{0} , \quad (15.34)$$

wenn also der Gesamtbahndrehimpuls eine Erhaltungsgröße ist. Für den Hamilton-Operator (15.21) bedeutet das: Das Potential darf nur von den Abständen $|\vec{x}^{(\nu)}|$ und $|\vec{x}^{(\nu)} - \vec{x}^{(\mu)}|$ abhängen.

Die Menge der reinen Drehungen wird als *Drehgruppe* bezeichnet; keine Abelsche Gruppe, da irgendzwei Drehungen im Allgemeinen nicht kommutieren.

Herleitung der **Kommutatoren**

$$[L_1, L_2] = i L_3 \quad (15.35)$$

und zyklischen Vertauschungen aus (15.29); siehe Beweis von (8.20). Es ist aber auch eine Herleitung über die Darstellung (15.30) möglich. Betrachte dazu die Transformation

$$S = R(\hat{e}_1, \beta) R(\hat{e}_2, \alpha) R(\hat{e}_1, -\beta); \quad (15.36)$$

das ist eine Drehung um die Achse (um den Winkel α)

$$\hat{e}'_2 = R(\hat{e}_1, \beta) \hat{e}_2; \quad (15.37)$$

denn $S^T S = \mathbb{1}$, $\det S = 1$, $S \hat{e}'_2 = \hat{e}_2$ und $\text{Spur } S = 1 + 2 \cos \alpha$; also ist

$$S = R(\hat{e}'_2, \alpha). \quad (15.38)$$

Aus (15.36, 38) folgt mit (15.30) (Homomorphie der Darstellung!)

$$e^{-i\beta L_1} e^{-i\alpha L_2} e^{+i\beta L_1} = e^{-i\alpha \hat{e}'_2 \cdot \vec{L}}. \quad (15.39)$$

Sei α infinitesimal; mit (15.28) erhält man

$$e^{-i\beta L_1} L_2 e^{+i\beta L_1} = \hat{e}'_2 \cdot \vec{L}; \quad (15.40)$$

für β infinitesimal folgt mit (15.27, 37) die Behauptung:

$$L_2 - i\beta(L_1 L_2 - L_2 L_1) = (\hat{e}_2 + \beta(\hat{e}_1 \wedge \hat{e}_2)) \cdot \vec{L} = L_2 + \beta L_3,$$

woraus sich (15.35) ergibt. Die Argumentation macht den engen Zusammenhang des Drehimpulses mit den (infinitesimalen) Drehungen deutlich.

Symmetrietransformationen von **Observablen**:

$$A' = V A V^+; \quad (15.41)$$

speziell für *Drehungen* R gilt

$$A' = D(R) A D^+(R). \quad (15.42)$$

R habe die Matrixdarstellung R_{jk} . Betrachte z. B. den *Ortsoperator* q_j (um Verwechslungen mit der Variable x_j zu vermeiden); es gilt:

$$q'_j = \sum_k R_{jk}^{-1} q_k . \quad (15.43)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} D(R)(q_j \psi(\vec{x})) &= D(R)(x_j \psi(\vec{x})) \\ &= \sum_k R_{jk}^{-1} x_k \psi(R^{-1}\vec{x}) \\ &= \sum_k R_{jk}^{-1} q_k D(R)\psi(\vec{x}) ; \end{aligned}$$

also gilt wegen der Beliebigkeit von $\psi(\vec{x})$:

$$D(R)q_j = \sum_k R_{jk}^{-1} q_k D(R) ,$$

woraus mit (15.42) die *Behauptung* folgt.

Skalare, Vektoren, Tensoren definiert durch Transformationsverhalten, und zwar

• *Skalar* A :

$$D(R)AD^+(R) = A , \quad (15.44)$$

d. h. Invarianz, z. B. H in (15.33);

• *Vektor* B_j :

$$D(R)B_jD^+(R) = \sum_k R_{jk}^{-1} B_k , \quad (15.45)$$

z. B. der dreikomponentige Ortsoperator, siehe oben;

• *Tensor* C_{jk} :

$$D(R)C_{jk}D^+(R) = \sum_{l,m} R_{jl}^{-1} R_{km}^{-1} C_{lm} , \quad (15.46)$$

hier 2. Stufe, siehe unten.

Wir betrachten nun **Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$** , vorerst nur *ein* Teilchen. Wie transformiert sich die Orts-Spin-Darstellung $\psi(\vec{x}, m)$ unter Drehungen? Ansatz:

$$D(R)\psi(\vec{x}, m) = \sum_{m'} d_{mm'}(R)\psi(R^{-1}\vec{x}, m') \quad (15.47)$$

mit einer zunächst noch unbekanntem komplexen 2×2 -Matrix $d(R)$. Die Unitarität von $D(R)$ impliziert die *Unitarität* von $d(R)$:

$$d d^+ = \mathbb{1} . \quad (15.48)$$

Hieraus folgt $|\det d| = 1$; wegen der Beliebigkeit eines Phasenfaktors kann man die *Unimodularität* von $d(R)$ fordern:

$$\det d = 1 . \quad (15.49)$$

Die allgemeinste unitäre und unimodulare 2×2 -Matrix lässt sich in der Form

$$d = \cos \frac{\alpha}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\alpha}{2} \sum_k u_k \sigma_k \quad (15.50)$$

schreiben mit vier reellen Parametern α , u_1 , u_2 und u_3 , für die

$$\sum_k u_k^2 = 1 \quad (15.51)$$

gelten muss. Entwicklung von d nach den Paulischen Spin-Matrizen gemäß (11.20, 21) und (Zusatz-) Bedingungen (15.48, 49). α , \hat{u} haben einstweilen noch nichts mit einem Drehwinkel und einer Drehachse zu tun. Es soll jetzt aber gezeigt werden, dass es sich um genau diese zur Kennzeichnung von R eingeführten Größen handelt.

Da die drei Spinkomponenten $S_j = \sigma_j / 2$ einen Vektor bilden, transformieren sich die Pauli-Matrizen gemäß (15.45):

$$d(R) \sigma_j d^+(R) = \sum_k R_{jk}^{-1} \sigma_k . \quad (15.52)$$

Sei z. B. $j = 3$. Mit Hilfe von (11.15 - 18) berechnet man aus (15.50, 51) für die linke Seite von (15.52) (unschwierig, aber länglich; (15.25, 26) zu benutzen):

$$\begin{aligned} d \sigma_3 d^+ &= \sigma_3 \cos \alpha - (u_1 \sigma_2 - u_2 \sigma_1) \sin \alpha + u_3 \sum_l u_l \sigma_l (1 - \cos \alpha) \\ &= (\vec{\sigma} \cos \alpha - (\hat{u} \wedge \vec{\sigma}) \sin \alpha + \hat{u} (\hat{u} \cdot \vec{\sigma}) (1 - \cos \alpha))_3 \\ &= (R^{-1} (\hat{u}, \alpha) \vec{\sigma})_3 . \end{aligned} \quad (15.53)$$

Das ist aber gerade die geforderte rechte Seite von (15.52). Also entsprechen die in (15.50, 51) eingeführten Parameter α , \hat{u} dem Drehwinkel bzw. der Drehachse von R .

Die durch (15.50, 51) definierten unitären, unimodularen 2×2 -Matrizen $d(\hat{u}, \alpha)$ bilden eine Darstellung der Drehgruppe, allerdings eine *zweideutige* Darstellung, weil zu

$R(\hat{u}, \alpha)$ sowohl $d(\hat{u}, \alpha)$ als auch $d(\hat{u}, \alpha + 2\pi) = -d(\hat{u}, \alpha)$ gehört. Die Gruppe der d -Matrizen wird als SU_2 bezeichnet (special unitary group).

Für eine *infinitesimale Drehung* gilt – siehe (15.50) –

$$d(\hat{u}, \varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon \hat{u} \cdot \vec{\sigma} / 2 \quad (15.54)$$

und folglich – siehe (15.28, 47) –

$$\begin{aligned} D(\hat{u}, \varepsilon) &= (\mathbb{1} - i\varepsilon \hat{u} \cdot \vec{L})(\mathbb{1} - i\varepsilon \hat{u} \cdot \vec{\sigma} / 2) \\ &= \mathbb{1} - i\varepsilon \hat{u} \cdot \vec{J} \end{aligned} \quad (15.55)$$

mit

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \frac{1}{i} \left(\vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) + \frac{1}{2} \vec{\sigma}, \quad (15.56)$$

d. i. der Gesamtdrehimpuls (in Einheiten \hbar). Dieser *erzeugt* beliebige (endliche) Drehungen – vgl. (15.30) – gemäß

$$D(\hat{u}, \alpha) = e^{-i\alpha \hat{u} \cdot \vec{J}}. \quad (15.57)$$

Die vorstehenden Ausführungen lassen sich problemlos auf *Systeme* von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen verallgemeinern:

$$\begin{aligned} D(R)\psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) \\ &= \sum_{m^{(1)'}, m^{(2)'}, \dots} d_{m^{(1)} m^{(1)'}}(R) d_{m^{(2)} m^{(2)'}}(R) \dots \psi(R^{-1}\vec{x}^{(1)}, m^{(1)'}, R^{-1}\vec{x}^{(2)}, m^{(2)'}, \dots) \\ &= e^{-i\alpha \hat{u} \cdot \vec{J}} \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) \end{aligned} \quad (15.58)$$

mit nunmehr

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \dots \quad (15.59)$$

Ein Hamilton-Operator ist folglich in Orts-Spin-Darstellung genau dann *rotationsinvariant*, wenn er mit dem Gesamtdrehimpuls vertauscht:

$$[H, D(R)] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [H, \vec{J}] = \vec{0}, \quad (15.60)$$

wenn also der Gesamtdrehimpuls eine Erhaltungsgröße ist. Vgl. (15.33, 34) für Systeme spinloser Teilchen. Zum Hamilton-Operator (15.21) mit rotationsinvariantem Potential dürfen zur Wahrung der Rotationsinvarianz nur skalare Spinterme der Gestalt $\vec{L} \cdot \vec{S}$

(multipliziert mit einer rotationsinvarianten Funktion der Ortskoordinaten) hinzutreten – siehe auch z. B. *Spin-Bahn-Wechselwirkung* der Atomphysik.

Reduzible und irreduzible Darstellungen. Eine Gruppe \mathcal{G} von Symmetrietransformationen g sei im Hilbert-Raum \mathcal{H} durch die unitären Operatoren $V(g)$ dargestellt. Siehe obige Definition (nach (15.14)); z. B. handele es sich um die Darstellungen $T(\vec{a})$ oder $D(R)$ der Translations- bzw. der Drehgruppe. Man nennt einen Teilraum \mathcal{R} von \mathcal{H} *invarianten Raum*, wenn die Operatoren $V(g)$ für alle $g \in \mathcal{G}$ den Raum \mathcal{R} in sich abbilden. Falls eine echter (!) derartiger Teilraum existiert, heißt die Darstellung *reduzibel*. In diesem Falle ist auch das Orthogonalkomplement \mathcal{R}' von \mathcal{R} ein invarianter Teilraum; denn für alle $\psi \in \mathcal{R}$, $\psi' \in \mathcal{R}'$ und $g \in \mathcal{G}$ gilt

$$(\psi, V(g)\psi') = (V^+(g)\psi, \psi') = 0, \quad (15.61)$$

da nach Voraussetzung $V^+(g)\psi \in \mathcal{R}$ ist; folglich ist $V(g)\psi' \in \mathcal{R}'$. Wenn also eine unitäre Darstellung der Gruppe \mathcal{G} reduzibel ist, muss sich der Darstellungsraum \mathcal{H} in zwei orthogonale invariante Teilräume \mathcal{R} und \mathcal{R}' zerlegen lassen:

$$\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{R}', \quad (15.62)$$

die ihrerseits Darstellungsräume und im Allgemeinen reduzibel sind. Wenn ein Raum \mathcal{H} , \mathcal{R} , \mathcal{R}' , ... nicht auf die vorstehend beschriebene Weise zerlegbar ist, heißt die Darstellung auf diesem Raum *irreduzibel*.

Für das wichtige Beispiel der **Drehgruppe** wird in der einschlägigen Literatur gezeigt: Die bezüglich der Darstellung $D(R)$ irreduziblen Teilräume sind gleich den $(2j + 1)$ -dimensionalen J^2 , J_3 -Eigenräumen, die gemäß Kap. 8 von den Basisvektoren $|j m\rangle$ aufgespannt werden; siehe z. B. Edmonds, *Drehimpulse in der Quantenmechanik*, BI Mannheim (1964), Kap. IV. Dort werden die sog. *Rotationsmatrizen* $\langle j m' | D(R) | j m \rangle$ explizit angegeben; Parametrisierung der Drehungen durch die drei Eulerschen Winkel.

In Kap. 8 wurde gezeigt, dass für j die Werte $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ in Frage kommen. Welche dieser j -Werte tatsächlich realisiert sind, hängt von dem betrachteten physikalischen Problem ab. Die wichtigsten Fälle sind

- ein Teilchen ohne Spin: $j = l = 0, 1, 2, \dots$; die $(2l + 1)$ -dimensionalen irreduziblen Darstellungsräume werden in der Ortsdarstellung von Funktionen der Gestalt $f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ aufgespannt;
- ein Teilchen mit Spin: $j = l \pm 1/2, l = 0, 1, 2, \dots$; der zu gegebenem l gehörige Darstellungsraum der Dimension $2(2l + 1)$ mit Basisvektoren $|l, m_l; 1/2, m_s\rangle$ zerfällt

in zwei irreduzible Teilräume der Dimensionen $2l + 2$ und $2l$ mit den Basisvektoren $|l, 1/2; l + 1/2, m\rangle$ bzw. $|l, 1/2; l - 1/2, m\rangle$ – siehe (11.102);

- zwei Teilchen ohne Spin:

$$j = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, l_1 - l_2 \quad (15.63)$$

$$l_1 = 0, 1, 2, \dots \geq l_2 = 0, 1, 2, \dots;$$

die Ausreduktion des zu l_1, l_2 gehörigen Darstellungsraumes der Dimension $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ in $2l_2 + 1$ invariante Teilräume der Dimensionen $2(l_1 + l_2) + 1, \dots, 2(l_1 - l_2) + 1$ wurde in Kap. 11 ausführlich beschrieben.

Kompliziertere Fälle sind zunehmend aufwendig behandelbar; siehe Spezialliteratur über Atomphysik.

Eine besonders wichtige Situation liegt vor, wenn die unitäre Gruppe der $V(g)$ eine **Symmetrie-** oder **Invarianzgruppe** des Hamilton-Operators H ist, wenn also gilt:

$$[H, V(g)] = 0 \quad (15.64)$$

für alle $g \in \mathcal{G}$. *Konsequenzen:*

- Die Dynamik ist unter den Symmetrietransformationen invariant, denn

$$H U = i \hbar \dot{U} \quad (15.65)$$

impliziert

$$H (V U V^+) = i \hbar \frac{d}{dt} (V U V^+), \quad (15.66)$$

d. h. der transformierte ist gleich dem nichttransformierten Zeitentwicklungsoperator. Beachte $U(t_0, t_0) = V U(t_0, t_0) V^+ = \mathbb{1}$. Vgl. (15.6, 7).

- Das Energiespektrum lässt sich nach den irreduziblen Darstellungen klassifizieren. Sei E ein Eigenwert zum Eigenvektor ψ :

$$H \psi = E \psi; \quad (15.67)$$

dann gilt wegen (15.64):

$$H (V(g) \psi) = E (V(g) \psi) \quad (15.68)$$

für alle $g \in \mathcal{G}$; d. h. auch $V(g) \psi$ ist Eigenvektor zum Eigenwert E . Folglich ist der zu E gehörige Eigenraum ein invarianter Teilraum. Die Darstellung von \mathcal{G} durch die Gruppe

der $V(g)$ auf diesem Unterraum ist im generischen Fall irreduzibel; den nichtgenerischen Fall bezeichnet man als *zufällige Entartung*.

Im Falle der *Rotationssymmetrie (Drehinvarianz)*:

$$[H, D(R)] = 0, \quad (15.69)$$

lassen sich die Energieniveaus E nach den Drehimpulsquantenzahlen j klassifizieren; frühere Begründung: $[H, J^2] = 0$. Nur „ausnahmsweise“ fallen die E_j für verschiedene j -Werte zusammen, ist ein Eigenraum von H in verschiedene orthogonale Teilräume zerlegbar; siehe z. B. die l -Entartung im attraktiven Coulomb-Potential: zu E_n gehört $l = 0, 1, \dots, n - 1$.

Zur quantenmechanischen Beschreibung von Systemen mit Rotationsinvarianz – wie sie für die Atom- und Kernphysik typisch sind – sind die *kartesischen Tensoroperatoren* in (15.44 - 46) weniger gut geeignet als die sog. **sphärischen**, auch **irreduziblen Tensoroperatoren**: Satz von $2k + 1$ Operatoren T_{kq} zu festem $k = 0, 1, 2, \dots$ (Rang) mit variablem $q = k, k - 1, \dots, -k$ (Komponenten), der sich bei Drehungen nach der irreduziblen Darstellung der Drehgruppe zum Index k transformiert:

$$D(R) T_{kq} D^+(R) = \sum_{q'} T_{kq'} \langle k q' | D(R) | k q \rangle. \quad (15.70)$$

Beispiele:

1. Die zu einem k gehörigen, als Operatoren aufgefassten *Kugelfunktionen* $Y_{kq}(\hat{x})$ bilden die Komponenten eines irreduziblen Tensoroperators vom Range k ; denn

$$\begin{aligned} D(R) Y_{kq}(\hat{x}) D^+(R) &= Y_{kq}(R^{-1} \hat{x}) \\ &= \langle R^{-1} \hat{x} | k q \rangle \\ &= \sum_{q'} \langle \hat{x} | k q' \rangle \langle k q' | D(R) | k q \rangle \\ &= \sum_{q'} Y_{kq'}(\hat{x}) \langle k q' | D(R) | k q \rangle. \end{aligned} \quad (15.71)$$

2. Aus den kartesischen Tensoroperatoren lassen sich irreduzible (sphärische) Tensoroperatoren konstruieren:

- Ein *Skalar*, der p. def. rotationsinvariant ist, transformiert sich wie der sphärische Tensor T_{00} (wegen $\langle 00 | D(R) | 00 \rangle = 1$).

-
- Aus einem *Vektor* B_j bildet man wie folgt einen sphärischen Tensor vom Range 1:

$$\begin{aligned}
 T_{1,+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(B_1 + i B_2) \\
 T_{1,0} &= B_3 \\
 T_{1,-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(B_1 - i B_2) .
 \end{aligned}
 \tag{15.72}$$

Dass diese Operatoren sich gemäß (15.70) transformieren, beweist man wie folgt: B_j transformiert sich wie der Ortsoperator x_j . Nun zeigt man aber leicht, dass gilt – siehe (8.83) –

$$\begin{aligned}
 \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 \pm i x_2) &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,\pm 1}(\hat{x}) \\
 x_3 &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,0}(\hat{x}) ,
 \end{aligned}
 \tag{15.73}$$

woraus wegen (15.71) für $k = 1$ die Behauptung folgt.

- Einen *Tensor* C_{jk} zerlegt man zunächst in einen (spurfreien) symmetrischen, einen antisymmetrischen und in einen (zum Einheitsensor proportionalen) diagonalen Tensor:

$$C_{jk} = S_{jk} + A_{jk} + D_{jk}
 \tag{15.74}$$

mit

$$\begin{aligned}
 S_{jk} &= \frac{1}{2}(C_{jk} + C_{kj}) - \frac{1}{3}\delta_{jk} \sum_l C_{ll} \\
 A_{jk} &= \frac{1}{2}(C_{jk} - C_{kj}) \\
 D_{jk} &= \frac{1}{3}\delta_{jk} \sum_l C_{ll} .
 \end{aligned}
 \tag{15.75}$$

Aus den fünf unabhängigen Komponenten von S_{jk} lässt sich dann ein sphärischer Tensor vom Rang 2 konstruieren:

$$\begin{aligned} T_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{1}{6}} (S_{11} - S_{22} \pm 2i S_{12}) \\ T_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{2}{3}} (S_{13} \pm i S_{23}) \\ T_{2,0} &= S_{33} = -S_{11} - S_{22} ; \end{aligned} \quad (15.76)$$

aus den drei unabhängigen Komponenten von A_{jk} konstruiert man folgendermaßen einen sphärischen Tensor vom Range 1:

$$\begin{aligned} T_{1,\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (A_{23} \pm i A_{31}) \\ T_{1,0} &= A_{12} . \end{aligned} \quad (15.77)$$

Schließlich liefert die Spur von D_{jk} , die gleich der Spur von C_{jk} ist, einen sphärischen Tensor vom Range 0:

$$T_{00} = \sum_j D_{jj} = \sum_l C_{ll} . \quad (15.78)$$

Beweis: S_{jk} transformiert sich wie $(x_j x_k + x_k x_j) / 2 - r^2 \delta_{jk} / 3$; A_{jk} transformiert sich wie $\sum_l \varepsilon_{jkl} x_l$; die Spur von D_{jk} bzw. C_{jk} ist ein Skalar.

Aus der Transformationsformel (15.70) ergeben sich Vertauschungsrelationen der T_{kq} mit den Komponenten J_j des Drehimpulses. Für infinitesimales R folgt nämlich aus (15.55):

$$[J_j, T_{kq}] = \sum_{q'} T_{kq'} \langle kq' | J_j | kq \rangle , \quad j = 1, 2, 3 ,$$

somit

$$\begin{aligned} [J_3, T_{kq}] &= q T_{kq} \\ [J_{\pm}, T_{kq}] &= \sqrt{(k \pm q + 1)(k \mp q)} T_{k, q \pm 1} \end{aligned} \quad (15.79)$$

mit Hilfe von diversen Formeln des 8. Kapitels. Die Kommutatoren (15.79) sind umgekehrt hinreichend zur Begründung der Beziehung (15.70); somit liefern sie eine zu (15.70) äquivalente Definition eines irreduziblen Tensoroperators.

Für die Matrixelemente sphärischer Tensoroperatoren zwischen Drehimpulszuständen $|\alpha, j, m\rangle$ (α fasst alle Quantenzahlen zusammen, die außer j, m zur Zustandsspezifikation erforderlich sind) gilt das **Wigner-Eckhart-Theorem**:

$$\langle \alpha', j', m' | T_{kq} | \alpha, j, m \rangle = \langle j m; k q | j' m' \rangle \langle \alpha', j' || \mathcal{T}_k || \alpha, j \rangle. \quad (15.80)$$

Das bedeutet: Das Matrixelement faktorisiert in einen Kopplungskoeffizienten (11.100) und in ein – durch (15.80) definiertes – *reduziertes Matrixelement*. Wesentlich dabei ist, dass die gesamte Abhängigkeit von den Projektionsquantenzahlen m', q, m (d. h. die Richtungsabhängigkeit) im ersten Faktor enthalten ist, während der zweite Faktor nicht von der Orientierung des Bezugssystems abhängt (unabhängig von m', q, m ist). Er wird nur durch die physikalischen Eigenschaften des Operators und des Systems bestimmt. Die geometrische oder Drehabhängigkeit des Matrixelements ist allein in den Kopplungskoeffizienten enthalten.

Beweis: α', α weggelassen. Letzte der Gln. (15.79) in $|j m\rangle$ -Darstellung mit (8.118):

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j', m' \mp 1 | T_{kq} | j m \rangle \\ & - \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j' m' | T_{kq} | j, m \pm 1 \rangle \\ & = \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j' m' | T_{k, q \pm 1} | j m \rangle. \end{aligned} \quad (15.81)$$

Betrachte andererseits die folgende Rekursionsformel für die Kopplungskoeffizienten:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m)(j' \mp m' + 1)} \langle j m; k q | j', m' \mp 1 \rangle \\ & = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j, m \pm 1; k q | j' m' \rangle \\ & + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j m; k, q \pm 1 | j' m' \rangle; \end{aligned} \quad (15.82)$$

diese erhält man durch „Sandwichen“ der Operatorgleichung $J_{\mp} = J_{1\mp} + J_{2\mp}$ mit $\langle j m; k q |$ und $| j m \rangle$. Der Vergleich von (15.81) mit (15.82) zeigt, dass die Matrixelemente $\langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle$ dieselbe m', q, m -Abhängigkeit besitzen wie die Kopplungskoeffizienten $\langle j m; k q | j' m' \rangle$:

$$\langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle \sim \langle j m; k q | j' m' \rangle. \quad (15.83)$$

Der Proportionalitätsfaktor ist das reduzierte Matrixelement. \Rightarrow *Behauptung*.

Die Auswahlregeln für den Kopplungskoeffizienten liefern *Auswahlregeln* für das Matrixelement $\langle \alpha', j', m' | T_{kq} | \alpha, j, m \rangle$:

$$\begin{aligned} |j' - j| &\leq k \leq j' + j \\ m' - m &= q . \end{aligned} \quad (15.84)$$

Ein wichtiger *Spezialfall* ist der sphärische Tensor vom Range 0. Hier lauten die Auswahlregeln: $j' = j, m' = m$. Wegen $\langle j m; 00 | j m \rangle = 1$ hat man

$$\langle \alpha', j', m' | T_{00} | \alpha, j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \langle \alpha', j' | T_0 | \alpha, j \rangle \quad (15.85)$$

unabhängig von der Quantenzahl m . Anschaulich verständlich, da durch einen skalaren Operator keine Richtung des willkürlich wählbaren Koordinatensystems bevorzugt wird.

Beispiel: Inneres Produkt zweier Vektoren, z. B. $\vec{L} \cdot \vec{S}$.

Eine weitere wichtige Symmetrietransformation ist – neben Translationen und Rotationen – die **Raumspiegelung**:

$$P \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) = \psi(-\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, -\vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) \quad (15.86)$$

mit den Eigenschaften

$$P^2 = \mathbb{1} \quad (15.87)$$

sowie

$$P = P^{-1} = P^+ \quad (15.88)$$

d. h. P ist nicht nur unitär, sondern auch selbstadjungiert. Die Eigenwerte $+1$ und -1 werden als gerade bzw. ungerade *Parität* bezeichnet.

Transformation wichtiger Observablen:

$$P \vec{x}^{(\nu)} P^+ = -\vec{x}^{(\nu)} \quad (15.89)$$

$$P \vec{p}^{(\nu)} P^+ = -\vec{p}^{(\nu)} ,$$

hingegen

$$P \vec{L}^{(\nu)} P^+ = +\vec{L}^{(\nu)} \quad (15.90)$$

$$P \vec{S}^{(\nu)} P^+ = +\vec{S}^{(\nu)}$$

d. h. Orte und Impulse gehen unter Raumspiegelung in ihr Negatives über, Bahndrehimpulse und Spins bleiben erhalten.

Observablen A , n -fach indiziert, die sich unter Drehungen gemäß (15.44 - 46) transformieren, werden als *Tensoren* n . Stufe bezeichnet. Hinsichtlich des Transformationsverhaltens unter Raumspiegelung unterscheidet man

- (echte) Tensoren:

$$P A P^+ = (-1)^n A , \quad (15.91)$$

- Pseudotensoren:

$$P A P^+ = (-1)^{n+1} A ; \quad (15.92)$$

demnach sind Orte und Impulse Vektoren, Drehimpulse hingegen sind Pseudovektoren.

Der Hamilton-Operator des betrachteten Systems sei **paritätsinvariant**:

$$[H, P] = 0 ; \quad (15.93)$$

z. B. für ein Teilchen mit Spin sei H von der Gestalt

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_0(r) + V_1(r) \vec{L} \cdot \vec{S} . \quad (15.94)$$

Der Spin-Bahn-Term ist ein echter Skalar, Spinterme der Gestalt $V_2(r) \vec{x} \cdot \vec{S}$ oder $V_3(r) \vec{p} \cdot \vec{S}$ wären als Pseudoskalare nicht zulässig. Die Invarianzgruppe besteht im Falle (15.93) aus den Operatoren P und $\mathbb{1}$ sowie evtl. weiteren Operatoren des Typs $T(\vec{a})$, $D(R)$, ...; im Falle (15.94) handelt es sich um die Drehungen $D(R)$.

Konsequenzen – vgl. die Ausführungen im Anschluss an (15.64):

- Erhaltung der Parität, d. h. ein Zustand gerader/ungerader Parität zur Zeit t_1 geht in einen Zustand gerader/ungerader Parität zur Zeit t_2 über. Die elektromagnetische und die starke Wechselwirkung sind paritätserhaltend, die schwache Wechselwirkung im Allgemeinen nicht.
- Die Energieeigenfunktionen sind von gerader oder ungerader Parität, z. B. gilt für ein (spinloses) Teilchen im Zentralpotenzial – bei Beachtung von (8.86):

$$\begin{aligned} P f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= f(r) Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \\ &= (-1)^l f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) , \end{aligned} \quad (15.95)$$

d. h. gerade Parität für $l = 0, 2, 4, \dots$, ungerade Parität für $l = 1, 3, 5, \dots$ N -Teilchen-zustände

$$f_{\nu_1}(r_1) \dots f_{\nu_N}(r_N) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1, \varphi_1) \dots Y_{l_N m_N}(\vartheta_N, \varphi_N)$$

besitzen – auch nach Symmetrisierung oder Antisymmetrisierung – die Parität $(-1)^l$ mit

$$l = \sum_{j=1}^N l_j . \quad (15.96)$$

Die bisherigen Symmetrietransformationen der Translation, der Rotation und der Raumspiegelung waren unitär. Wir betrachten nun die antiunitäre Symmetrietransformation der **Bewegungsumkehr**. In Verallgemeinerung von (15.5) wird für ein System *spinloser* Teilchen definiert:

$$\Theta \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) = \psi^*(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots) . \quad (15.97)$$

Der Name der Transformation beruht auf dem Transformationsverhalten für Orte und Impulse:

$$\Theta \vec{x}^{(\nu)} \Theta^+ = \vec{x}^{(\nu)} \quad (15.98)$$

$$\Theta \vec{p}^{(\nu)} \Theta^+ = -\vec{p}^{(\nu)} ,$$

d. h. Θ kehrt die Bewegungsrichtung der Teilchen um.

Wir gehen nun zu Teilchen *mit Spin* über. Für die Spins fordert man dasselbe Transformationsverhalten, das sich nach (15.98) für die Bahndrehimpulse ergibt:

$$\Theta \vec{S}^{(\nu)} \Theta^+ = -\vec{S}^{(\nu)} . \quad (15.99)$$

Wie transformiert sich die Wellenfunktion?

Für ein Teilchen mit dem *Spin* $\frac{1}{2}$ macht man den Ansatz:

$$\Theta \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} \psi_+^*(\vec{x}) \\ \psi_-^*(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (15.100)$$

mit einer zunächst noch unbekanntem komplexen 2×2 -Matrix a . Damit Θ antiunitär ist, muss a unitär sein:

$$a a^+ = \mathbb{1} ; \quad (15.101)$$

zur Erfüllung von (15.99) muss gelten:

$$a \sigma_j^* a^+ = -\sigma_j \quad (15.102)$$

für $j = 1, 2, 3$. Aus den beiden Bedingungen (15.101, 102) ergibt sich a eindeutig bis auf einen Phasenfaktor zu $a \sim \sigma_2$; konventionell setzt man:

$$\Theta \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix} = -i \sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_+^*(\vec{x}) \\ \psi_-^*(\vec{x}) \end{pmatrix} . \quad (15.103)$$

Beachte, dass nach (11.14) gilt :

$$-i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15.104)$$

Für Systeme von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen hat man verallgemeinernd:

$$\begin{aligned} & \Theta \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) \\ &= (-i\sigma_2^{(1)})(-i\sigma_2^{(2)}) \dots \psi^*(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots). \end{aligned} \quad (15.105)$$

Es folgt:

$$\Theta^2 = (-1)^N, \quad (15.106)$$

wo N die Anzahl der Teilchen ist.

Sei H **zeitumkehrinvariant** (zur Bezeichnung siehe unten):

$$[H, \Theta] = 0; \quad (15.107)$$

dann folgt für die Zeitentwicklung (eines konservativen Systems):

$$\Theta e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Theta^+ = e^{+\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (15.108)$$

Das bedeutet:

$$\begin{aligned} \chi &= e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi \\ \Rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Theta \chi &= \Theta \psi. \end{aligned} \quad (15.109)$$

Wenn also der Zustand ψ (Zeit 0) unter der H-Dynamik in den Zustand χ (Zeit t) übergeht, dann geht der bewegungsumgekehrte Zustand $\Theta \chi$ im Zeitintervall von 0 bis t in den bewegungsumgekehrten Zustand $\Theta \psi$ über. Bezeichnung von Θ als Operator der *Zeitumkehr* oder *Zeitspiegelung*.

Beispiel für ein zeitumkehrinvariantes System:

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{x}), \quad (15.110 \text{ a})$$

d. i. ein Teilchen im zeitunabhängigen Potenzial; für ein *nicht* zeitumkehrinvariantes System:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q \vec{A}(\vec{x}) \right)^2, \quad (15.110 \text{ b})$$

d. i. ein geladenes Teilchen im stationären Magnetfeld. Vgl. KLM!

Für die Lösung des *Eigenwertproblems*

$$H \psi = E \psi \quad (15.111)$$

ergeben sich aus der Zeitumkehrinvarianz die folgenden beiden *Konsequenzen*:

1. Für Systeme spinloser Teilchen können o. B. d. A. die *Eigenfunktionen reell* gewählt werden.

Beweis: Sei ψ_1 Lösung von (15.111), dann ist – wegen (15.107) –

$$\varphi_1 = \psi_1 + \Theta \psi_1 \quad (15.112 \text{ a})$$

reelle Eigenfunktion zum Eigenwert E . Falls E entartet ist, gibt es eine zu φ_1 orthogonale Lösung ψ_2 ; dann ist

$$\varphi_2 = \psi_2 + \Theta \psi_2 \quad (15.112 \text{ b})$$

eine *reelle*, zu φ_1 orthogonale Eigenfunktion zum Eigenwert E usw.

2. Für Systeme, die aus einer ungeraden Anzahl von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen bestehen, gilt: Der Entartungsgrad ist eine gerade Zahl, also mindestens gleich zwei: *Kramers-Entartung*.

Beweis: Sei ψ_1 Lösung von (15.111), dann ist $\Theta \psi_1$ wegen (15.107) eine zweite zu ψ_1 orthogonale Lösung. Mit (15.4, 106) folgt nämlich:

$$(\psi_1, \Theta \psi_1) = (\Theta \Theta \psi_1, \Theta \psi_1) = -(\psi_1, \Theta \psi_1)$$

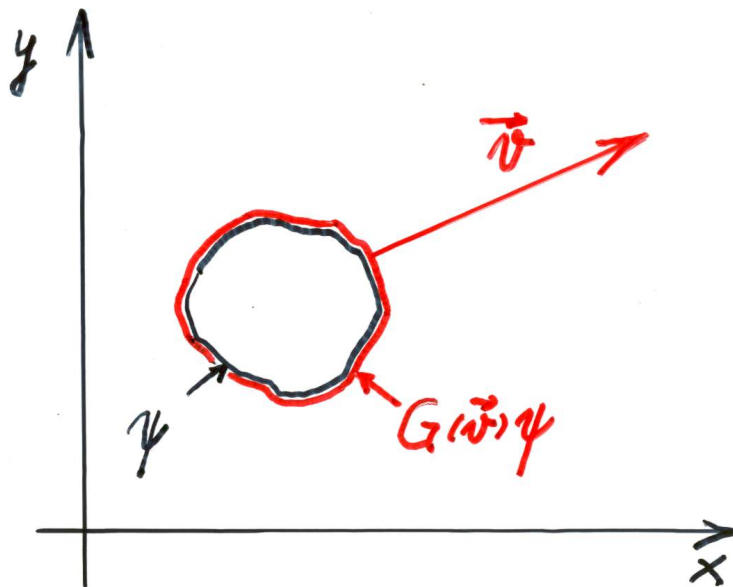
$$\Rightarrow (\psi_1, \Theta \psi_1) = 0. \quad (15.113)$$

Falls der Entartungsgrad von E größer als zwei ist, gibt es eine dritte zu ψ_1 und $\Theta \psi_1$ orthogonale Lösung ψ_3 ; dann ist $\Theta \psi_3$ eine vierte orthogonale Lösung usw.

Abschließend behandeln wir kurz die **Galilei-Transformation**:

$$\vec{x}' = \vec{x} + \vec{v} t \quad (15.114)$$

Wir nehmen wieder den aktiven Standpunkt ein; vgl. Abb. 15.1: Das physikalische System (nicht das Bezugssystem) wird transformiert; das gestrichene System bewegt sich mit der Geschwindigkeit \vec{v} gegenüber dem ungestrichenen System:



• Abbildung 15.2 •

Welche Symmetrietransformation, d. h. welcher unitäre Operator $G(\vec{v})$ ist der Transformation (15.114) zugeordnet?

Plausiblerweise fordert man für Ort, Impuls und Spin das folgende Transformationsverhalten:

$$G(\vec{v}) \vec{x}^{(\nu)} G^+(\vec{v}) = \vec{x}^{(\nu)}$$

$$G(\vec{v}) \vec{p}^{(\nu)} G^+(\vec{v}) = \vec{p}^{(\nu)} - m_\nu \vec{v} \quad (15.115)$$

$$G(\vec{v}) \vec{S}^{(\nu)} G^+(\vec{v}) = \vec{S}^{(\nu)} .$$

Achtung: $\vec{S}^{(\nu)}$ transformiert sich anders als $\vec{L}^{(\nu)}$; $\vec{L}^{(\nu)}$ reagiert auf eine Geschwindigkeitsänderung, $\vec{S}^{(\nu)}$ nicht.

Ein unitärer Operator $G(\vec{v})$ mit den Eigenschaften (15.115) lässt sich leicht angeben:

$$G(\vec{v}) \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) = \psi(\vec{x}^{(1)}, m^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, m^{(2)}, \dots) e^{\frac{i}{\hbar} M \vec{v} \cdot \vec{X}} \quad (15.116)$$

mit dem Schwerpunkt

$$\vec{X} = \frac{1}{M} (m_1 \vec{x}^{(1)} + m_2 \vec{x}^{(2)} + \dots) \quad (15.117)$$

und der Gesamtmasse

$$M = m_1 + m_2 + \dots, \quad (15.118)$$

d. h. ψ wird unter $G(\vec{v})$ mit einem ortsabhängigen Phasenfaktor multipliziert.

Wie transformiert sich der Hamilton-Operator? Für die kinetische Energie gilt:

$$G(\vec{v}) \sum_{\nu} \frac{\vec{p}^{(\nu)2}}{2m_{\nu}} G^+(\vec{v}) = \sum_{\nu} \frac{\vec{p}^{(\nu)2}}{2m_{\nu}} - \vec{v} \cdot \vec{P} + \frac{M}{2} \vec{v}^2, \quad (15.119)$$

wo \vec{P} der in (15.17) definierte Gesamtimpuls ist. Wenn alle Wechselwirkungsterme mit $G(\vec{v})$ vertauschen, hat man

$$G(\vec{v}) H G^+(\vec{v}) = H - \vec{v} \cdot \vec{P} + \frac{M}{2} \vec{v}^2 \quad (15.120)$$

– als Ausdruck der **Galilei-Invarianz** des Systems. Die Vertauschbarkeit von $G(\vec{v})$ mit der Wechselwirkung ist gewährleistet, wenn letztere *nicht* von den Impulsen abhängt; sie ist also höchstens bei geschwindigkeitsabhängigen Kräften nicht gegeben.

Was bedeutet Galilei-Invarianz für die Dynamik? Nach (15.120) transformiert sich der Zeitentwicklungsoperator wie folgt:

$$G(\vec{v}) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} G^+(\vec{v}) = \dots e^{-\frac{i}{\hbar} (H - \vec{v} \cdot \vec{P}) t}, \quad (15.121)$$

wo ... für den physikalisch bedeutungslosen Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2} \vec{v}^2 t}$ steht. In dem wichtigen Spezialfall eines translationsinvarianten Hamilton-Operators – siehe (15.20) – folgt:

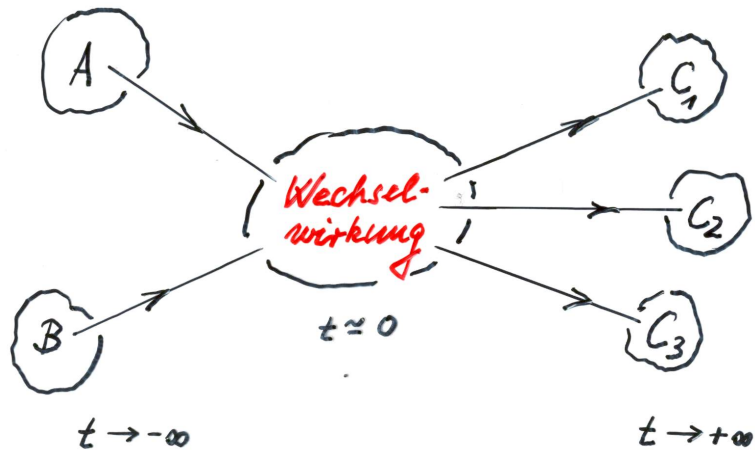
$$e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{v} t} G(\vec{v}) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \dots e^{-\frac{i}{\hbar} H t} G(\vec{v}). \quad (15.122)$$

Das bedeutet: Ein mit \vec{v} bewegtes System entwickelt sich unter der H -Dynamik in der Zeit von 0 bis t in denselben Zustand (rechte Seite), den man erhält, wenn man das nichtbewegte System sich unter der H -Dynamik in demselben Zeitintervall entwickeln lässt, dann in Bewegung versetzt und schließlich mit $\vec{v}t$ verschiebt (linke Seite). Die interne H -Dynamik abgeschlossener Systeme hängt nicht vom externen Bewegungszustand ab.

Die in diesem Kapitel betrachteten Transformationen sind eng mit der Geometrie des Raum-Zeit-Kontinuums verknüpft. Neben diesen sog. *geometrischen Symmetrien* sind in der Quantentheorie der Elementarteilchen weitere, als *innere Symmetrien*, auch *Eichsymmetrien* bezeichnete Transformationsgruppen von großer Bedeutung, die in dieser Vorlesung jedoch nicht behandelt werden können.

16 Formale Streutheorie

In diesem Kapitel behandeln wir – weitgehend darstellungsfrei – die quantenmechanische Theorie beliebiger Stoßprozesse:



• Abbildung 16.1 •

Verschiedene Stoßprozesse:

- *elastische Streuung*: $A + B \rightarrow A + B$; nur Ablenkung, keine Änderung des inneren Zustands;
- *inelastische Streuung*: $A + B \rightarrow A^* + B, A + B^*, A^* + B^*$; der eine oder der andere oder beide Stoßpartner werden intern angeregt;
- *reaktive Streuung*: $A + B \rightarrow C + D, C_1 + C_2 + C_3 + \dots$; Rearrangement oder/und Aufbruch, i. A. verknüpft mit Inelastizität.

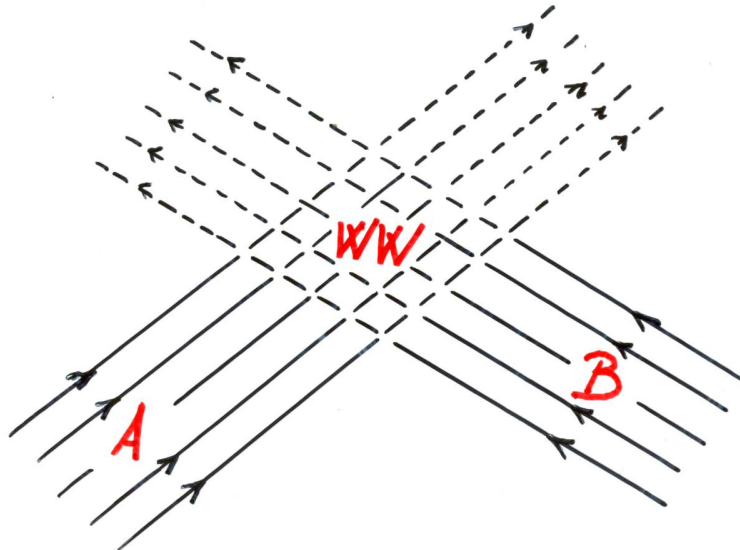
Streukanäle: Asymptotische Zustände – entsprechend den verschiedenen Anregungsstufen und Arrangements/Fragmentierungen. $t \rightarrow -\infty$: *Eingangskanal*; $t \rightarrow +\infty$: *Ausgangskanäle*. Ein Streukanal kann *offen* oder *geschlossen* sein, je nachdem er durch Erhaltungssätze (Energie, Drehimpuls, ...) erlaubt oder verboten ist.

Beispiel: atomare und molekulare Stoßprozesse

- *Elektron-Atom-Stöße*. A sei ein neutrales oder ionisiertes Atom: $e + A \rightarrow e + A, e + A^*$. * bedeutet Anregung der Elektronenhülle; auch *Ionisation* ist möglich: $e + A \rightarrow e + e + A^+$.

- *Atom-Atom-Stöße.* A, B wie oben: $A + B \rightarrow A + B, A^* + B, A + B^*, A^* + B^*$; auch *Ladungsaustausch* kann geschehen: $A^+ + B \rightarrow A + B^+$.
- *Atom-Molekül-Stöße.* A, B, C wie oben; einfachheitshalber sei nur ein zweiatomiges Molekül beteiligt: $A + BC \rightarrow A + (BC)^*$. * bedeutet hier Rotations- und Vibrationsanregung (elektronische Anregung auch möglich); ferner *Reaktionen*: $A + BC \rightarrow AB + C, CA + B$, die i. A. mit Rotations-, Vibrationsanregung verknüpft sind, sowie *Dissoziation*: $A + BC \rightarrow A + B + C$.
- *Elektron-Molekül-Stöße.* Siehe oben.

Die experimentelle Situation ist im Eingangskanal wie folgt zu charakterisieren:



• Abbildung 16.2 •

Stoßpartner A und B mit den Dichten n_A bzw. n_B und der Relativgeschwindigkeit v ; z. B. Projektilen der Geschwindigkeit v , stationären Targets oder Crossed Beam-Experimente.

Totaler Wirkungsquerschnitt für einen bestimmten Stoßprozess:

$$\sigma = \frac{\dot{n}}{n_A n_B v}, \quad (16.1)$$

wo \dot{n} die Anzahl der Streueignisse (des betrachteten Typus) pro Volumen und Zeit ist.
 $\Rightarrow [\sigma] = \text{Fläche}$.

Differentieller Wirkungsquerschnitt bei $N \geq 2$ Fragmenten im Ausgangskanal:

$$\frac{d^{N-1} \sigma}{d\Omega_1 \dots d\Omega_{N-1}} = \frac{d^{N-1} \dot{n}}{n_A n_B v d\Omega_1 \dots d\Omega_{N-1}} ; \quad (16.2)$$

raumwinkeldifferentiell bezüglich $N - 1$ unabhängiger Auslaufrichtungen. Durch Integration über diese Richtungen gelangt man von (16.2) nach (16.1) zurück. Das Ziel der *Streutheorie* besteht in der Berechnung des differentiellen bzw. des totalen Wirkungsquerschnitts für einen bestimmten Stoßprozess.

Literatur: G. Grawert, Kap. 13

C. J. Joachin, Quantum Collision Theory,
North-Holland, Amsterdam (1975)

A. Messiah, Chap. XIX

R. G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles,
McGrw-Hill Book Co., New York (1982)

J. R. Taylor, Scattering Theory: The Quantum Theory of
Nonrelativistic Collisions, Wiley, New York (1972)

Sei H der (zeitunabhängige) *Hamilton-Operator* des gesamten Systems (im Schwerpunktsystem). Ein Stoßprozess zwischen bestimmten Fragmenten dieses Systems ist dadurch gekennzeichnet, dass lange vor dem Stoß, also im *Limes* $t \rightarrow -\infty$, bestimmte Anteile $V^{(i)}$ ($i = \text{initial}$) der in H insgesamt enthaltenen Wechselwirkung (noch) nicht wirksam sind: nämlich die Wechselwirkung zwischen den räumlich getrennten Fragmenten des *Eingangskanals*. Setzt man

$$H = H_0^{(i)} + V^{(i)} , \quad (16.3)$$

so hat man im Eingangskanal den Kanal-Hamilton-Operator $H_0^{(i)}$ zur Kennzeichnung des Gesamtsystems.

Entsprechendes gilt für den Ausgangskanal: Lange nach dem Stoß, also im *Limes* $t \rightarrow +\infty$, sind die Anteile $V^{(f)}$ ($f = \text{final}$) der Gesamtwechselwirkung in H nicht (mehr) wirksam, nämlich die Wechselwirkung zwischen den räumlich getrennten Fragmenten

des Ausgangskanals. Durch

$$H = H_0^{(f)} + V^{(f)} \quad (16.4)$$

wird der Kanal-Hamilton-Operator $H_0^{(f)}$ des Ausgangskanals definiert.

Beispiel: Dreiteilchen-Reaktion $A + BC \rightarrow AB + C$:

$$\begin{aligned} H &= \underbrace{K_A + K_B + K_C}_{= K, \text{ gesamte kinet. Energie}} + \underbrace{V_{AB} + V_{BC} + V_{CA}}_{\text{gesamte Wechselwirkung als Summe von PaarWW}} \end{aligned}$$

somit ist

$$H_0^{(i)} = K + V_{BC} \quad , \quad V^{(i)} = V_{CA} + V_{AB}$$

$$H_0^{(f)} = K + V_{AB} \quad , \quad V^{(f)} = V_{BC} + V_{CA} .$$

Bei **nichtreaktiver Streuung** ist

$$V^{(f)} = V^{(i)} = V \quad \Rightarrow \quad H_0^{(f)} = H_0^{(i)} = H_0 \quad , \quad (16.5)$$

also gilt sowohl für den Eingangskanal als auch für den Ausgangskanal die Zerlegung

$$H = H_0 + V . \quad (16.6)$$

Wir beschränken uns vorerst auf diesen Spezialfall, unter den auch die Potenzialstreuung in Kap. 9 fällt. Die Verallgemeinerung auf **reaktive Streuung** mit $f \neq i$ ist später durch Anbringen der Indizes f und i an geeigneter Stelle möglich. – Man verliere nicht aus den Augen, dass H_0 i. a. nicht nur die kinetische Relativenergie der Stoßpartner repräsentiert, sondern auch die evtl. vorhandene innere kinetische und potenzielle Energie der Fragmente.

Weiterhin beschränken wir uns auf *zwei* Fragmente (dieselben im Eingangs- wie im Ausgangskanal). Das hat den Vorteil, dass man zur Kennzeichnung der Relativbewegung nur mit *einem* Relativimpuls $\hbar \vec{k}$ auskommt. Bei N Fragmenten braucht man $N - 1$ Relativimpulse (z. B. zwei sog. *Jacobi-Impulse* bei drei Fragmenten). Die reduzierte Masse der beiden Fragmente werde mit m bezeichnet.

Der *Hilbert-Raum* \mathcal{H} der Zustände des Gesamtsystems kann sowohl durch das vollständige ON-System der Eigenzustände des Kanal-Hamilton-Operators H_0 als auch durch das vollständige ON-System der Eigenzustände des kompletten Hamilton-Operators H aufgespannt werden.

Für H_0 gilt:

$$H_0 \varphi_{\vec{k}, \alpha} = E_{\vec{k}, \alpha} \varphi_{\vec{k}, \alpha} \quad (16.7)$$

mit

$$E_{\vec{k}, \alpha} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \varepsilon_\alpha \geq \varepsilon_0 . \quad (16.8)$$

α bezeichnet die Quantenzahlen der inneren Fragmentzustände (sofern innere Freiheitsgrade vorhanden, was bei der reinen Potenzialstreuung *nicht* der Fall war, dann entfällt α): Spin, innere Anregungsstufen, z. B. elektronische Anregung von Atomen, zusätzliche Rotations- und Vibrationsanregung von Molekülen usw. Das Spektrum von H_0 ist eine Überlagerung von rein kontinuierlichen Spektren zu den verschiedenen α :



• Abbildung 16.3 a •

Darstellung eines beliebigen normierbaren Zustandes $\varphi \in \mathcal{H}$ durch Superposition der (uneigentlichen) Eigenzustände $\varphi_{\vec{k}, \alpha}$:

$$\varphi = \sum_{\alpha} \int d^3 k a(\vec{k}, \alpha) \varphi_{\vec{k}, \alpha} . \quad (16.9)$$

Durch \vec{k} -Superposition Lokalisierung im Ortsraum: Wellenpaket.

Für H gilt:

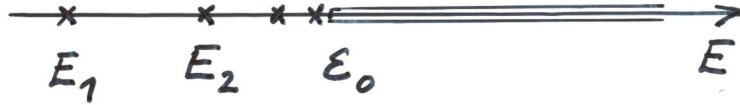
- gebundene Zustände (eigentlich):

$$H \psi_\nu = E_\nu \psi_\nu , \quad E_\nu < \varepsilon_0 ; \quad (16.10)$$

- Streuzustände (uneigentlich):

$$H \psi_{\vec{k}, \gamma} = E_{\vec{k}, \gamma} \psi_{\vec{k}, \gamma} , \quad E_{\vec{k}, \gamma} \geq \varepsilon_0 . \quad (16.11)$$

Die Eigenzustände $\psi_{\vec{k}, \gamma}$ „spüren“ die Wechselwirkung V – im Unterschied zu den $\varphi_{\vec{k}, \alpha}$, die V nicht „spüren“. \vec{k} asymptotischer Relativimpuls, γ weitere Quantenzahlen des Gesamtsystems. Spektrum von H teils diskret, teils kontinuierlich:



• Abbildung 16.3 b •

Darstellung eines beliebigen normierbaren Zustandes $\psi \in \mathcal{H}$ durch Superposition der Eigenzustände ψ_ν und $\psi_{\vec{k},\gamma}$:

$$\psi = \sum_{\nu} a_{\nu} \psi_{\nu} + \sum_{\gamma} \int d^3 k \tilde{a}(\vec{k}, \gamma) \psi_{\vec{k},\gamma}. \quad (16.12)$$

Auch hier ist Lokalisierung im Ortsraum durch geeignete \vec{k} -Superposition möglich.

Auf Grund von (16.12) zerfällt der Zustandsraum \mathcal{H} in zwei orthogonale Teilräume.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \oplus \mathcal{H}_S, \quad (16.13)$$

wo \mathcal{H}_B der Raum der *gebundenen Zustände* und \mathcal{H}_S der Raum der *Streuzustände* ist. Im Folgenden werden die Elemente von \mathcal{H}_S mit ψ , diejenigen von \mathcal{H} mit φ bezeichnet (zumeist).

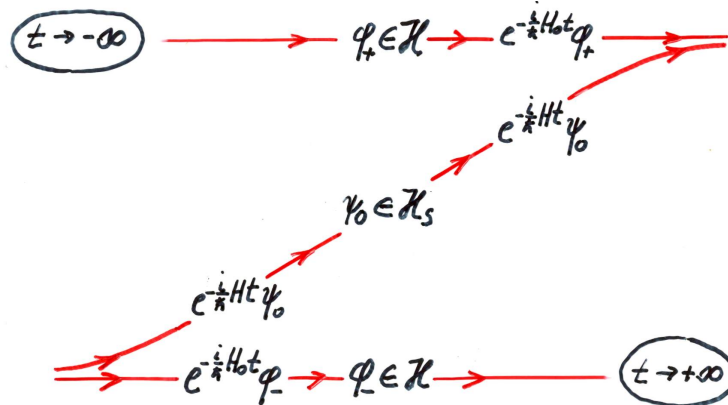
16.1 Møller-Operatoren und Lippmann-Schwinger-Gleichungen

Betrachte – zur Zeit $t = 0$ – einen (im Bereich $V \neq 0$ lokalisierten, ansonsten) beliebigen Streuzustand $\psi_0 \in \mathcal{H}_S$. Die zeitliche Entwicklung erfolgt – im Schrödinger-Bild – gemäß

$$\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_0. \quad (16.14)$$

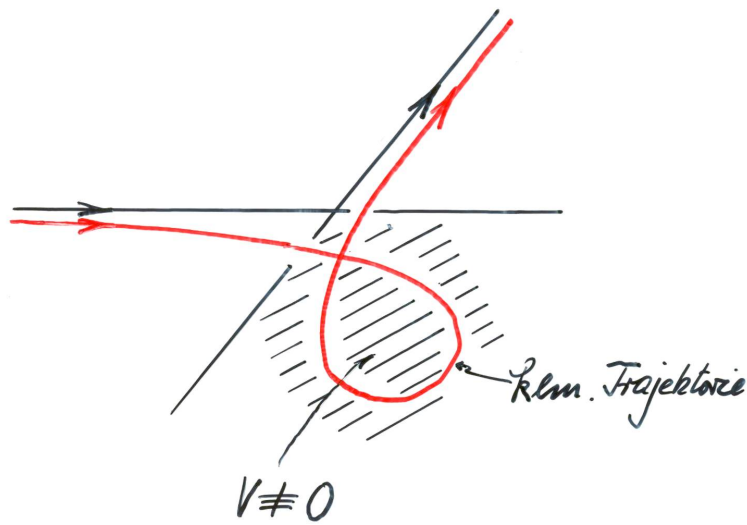
Es entspricht der anschaulichen Vorstellung vom Ablauf eines Stoßprozesses und kann für physikalisch „vernünftige“ Wechselwirkungen V bewiesen werden, dass im *Limes* $t \rightarrow \pm\infty$ die Zeitentwicklung durch den Kanal-Hamilton-Operator H_0 gegeben ist. Genauer: Es existieren zwei Zustände $\varphi_{\pm} \in \mathcal{H}$, so dass gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_0 - e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi_{\pm} \right\| = 0. \quad (16.15)$$



• Abbildung 16.4 •

Bezeichnung von φ_{\pm} als aus- (ein-) laufende *Asymptoten* von ψ_0 – wegen der *KLM-Analogie*: Streubahnen asymptotisch frei: geradlinig-gleichförmige Bewegungen; vgl. Taylor, Kap. 2:



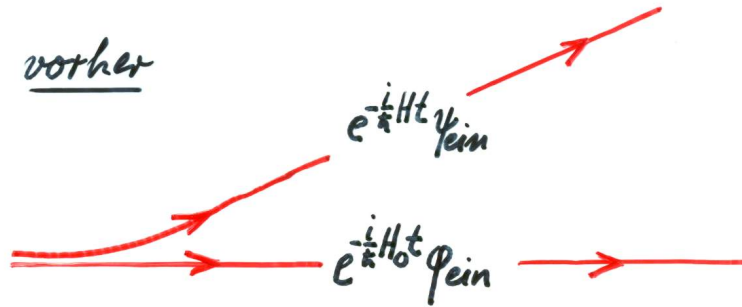
• Abbildung 16.5 •

Wir gehen nun umgekehrt von gewissen asymptotischen Zustände $\varphi \in \mathcal{H}$ aus und fragen nach den dazugehörigen Streuzuständen $\psi \in \mathcal{H}_S$.

Das Stoßsystem werde *lange vor dem Stoß* im Zustand $\varphi_{\text{ein}} \in \mathcal{H}$ *präpariert*: Superposition von H_0 -Eigenzuständen gemäß (16.9); im Idealfall ist $\varphi_{\text{ein}} = \varphi_{\vec{k}, \alpha}$. Man kann

beweisen (z.B. Taylor, Kap. 2): Zu dem asymptotischen Zustand φ_{ein} gibt es einen Streuzustand $\psi_{ein} \in \mathcal{H}_S$ mit

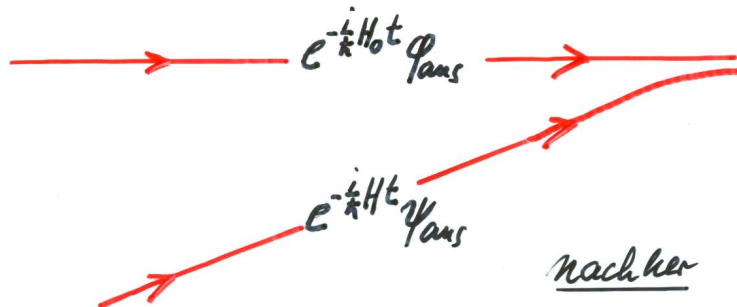
$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_{ein} - e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi_{ein} \right\| = 0 . \quad (16.16)$$



• Abbildung 16.6 a •

Lange nach dem Stoß werde – im Detektor – ein Zustand $\varphi_{aus} \in \mathcal{H}$ selektiert. Im Idealfall ist $\varphi_{aus} = \varphi_{\vec{k}', \alpha'}$, im Allgemeinen jedoch eine Superposition von H_0 -Eigenzuständen. Entsprechend gibt es einen Streuzustand $\psi_{aus} \in \mathcal{H}_S$ mit

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_{aus} - e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi_{aus} \right\| = 0 . \quad (16.17)$$



• Abbildung 16.6 b •

Aus (16.16, 17) folgt die Existenz der **Møller-Operatoren**

$$\Omega_{ein} = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (16.18)$$

mit

$$\psi_{ein} = \Omega_{ein} \varphi_{ein} \quad (16.19)$$

sowie

$$\Omega_{aus} = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (16.20)$$

mit

$$\psi_{aus} = \Omega_{aus} \varphi_{aus} . \quad (16.21)$$

In der Literatur verbreitete Bezeichnungen: $\Omega_{ein} = \Omega_+ = \Omega^{(+)}$, $\Omega_{aus} = \Omega_- = \Omega^{(-)}$.

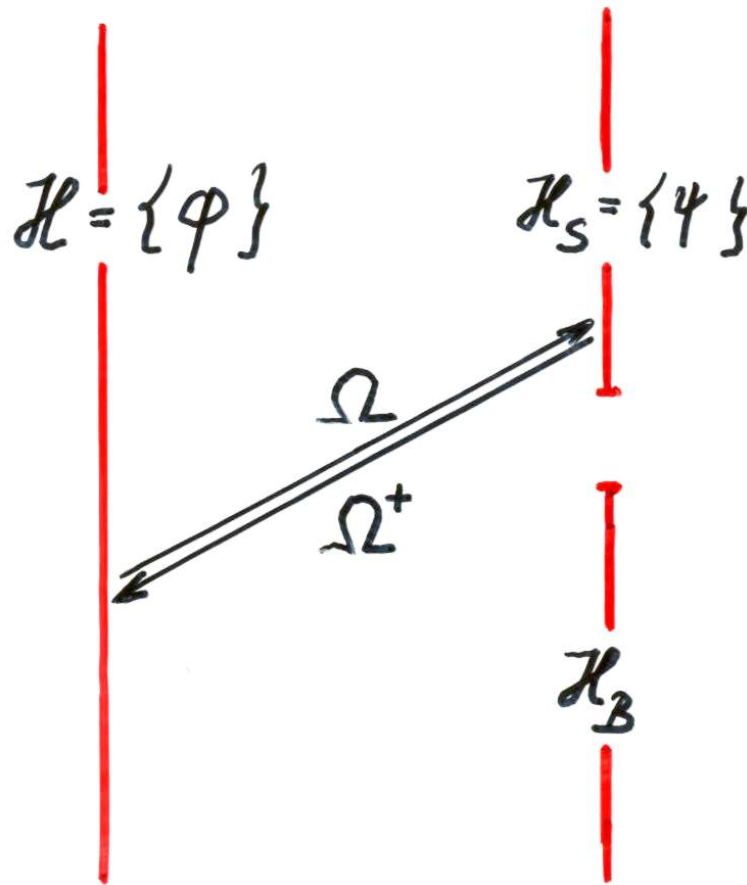
Eigenschaften (ohne Beweise; siehe Taylor, Newton, Grawert, Joachin, ...):

1. Ω_{ein} und Ω_{aus} sind beide auf dem ganzen Hilbert-Raum \mathcal{H} definiert; sie bilden auf den Unterraum \mathcal{H}_S der Streuzustände ab. Also gilt allgemein für beliebige $\varphi \in \mathcal{H}$:

$$\psi = \Omega_{ein,aus} \varphi \in \mathcal{H}_S . \quad (16.22)$$

Umgekehrt gilt für beliebiges $\psi \in \mathcal{H}_S$:

$$\varphi = \Omega_{ein,aus}^+ \psi \in \mathcal{H} . \quad (16.23)$$



• Abbildung 16.7 •

2. Die zu $\Omega_{ein,aus}$ adjungierten Operatoren sind durch

$$\Omega_{ein,aus}^+ = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} P_S \quad (16.24)$$

gegeben, wo P_S der Projektor auf den Unterraum \mathcal{H}_S ist. Es folgt:

$$\Omega_{ein}^+ \Omega_{ein} = \Omega_{aus}^+ \Omega_{aus} = \mathbb{1} \quad (16.25)$$

$$\Omega_{ein} \Omega_{ein}^+ = \Omega_{aus} \Omega_{aus}^+ = P_S .$$

Die Møller-Operatoren sind also *isometrisch* – obwohl die Zeitentwicklungsoperatoren $e^{\pm \frac{i}{\hbar} H_0 t}$ und $e^{\pm \frac{i}{\hbar} H t}$, aus denen sie sich zusammensetzen, unitär sind. Falls $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S$ (keine gebundenen Zustände), somit $P_S = \mathbb{1}$ ist, sind die Møller-Operatoren selbst *unitär*.

3. Aus (16.18, 20) folgt:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} H \tau} \Omega_{ein, aus} &= \lim_{t \rightarrow \mp \infty} e^{\frac{i}{\hbar} H (t-\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 (t-\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} \\ &= \Omega_{ein, aus} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} \end{aligned} \quad (16.26)$$

$$\Rightarrow \quad H \Omega_{ein, aus} = \Omega_{ein, aus} H_0 \quad (16.27)$$

$$\Omega_{ein, aus}^+ H = H_0 \Omega_{ein, aus}^+ .$$

Konsequenz: Sei $\psi_\nu \in \mathcal{H}_B$ ein gebundener Zustand des Gesamtsystems; dafür gilt:

$$\Omega_{ein, aus}^+ \psi_\nu = 0 . \quad (16.28)$$

Beweis: Wegen (16.27) gilt

$$H_0 (\Omega^+ \psi_\nu) = \Omega^+ (H \psi_\nu) = \Omega^+ (E_\nu \psi_\nu) = E_\nu (\Omega^+ \psi_\nu) ,$$

woraus die *Behauptung* folgt, da E_ν nicht im Spektrum von H_0 liegt. Der Faktor P_S in (16.24) kann also weggelassen werden.

4. Betrachte die Identität

$$e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H t'} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} . \quad (16.29)$$

Beweis: Wegen $V = H - H_0$ wird aus dem Integral auf der rechten Seite:

$$\begin{aligned} &\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H t'} (H - H_0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \\ &= \int_0^t dt' \left\{ \left(\frac{d}{dt'} e^{\frac{i}{\hbar} H t'} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} + e^{\frac{i}{\hbar} H t'} \left(\frac{d}{dt'} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \right) \right\} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H t'} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \Big|_0^t = e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} - \mathbb{1} , \end{aligned} \quad (16.30)$$

das ist die *Behauptung*.

Mit (16.29) lassen sich die Møller-Operatoren (16.18, 20) wie folgt darstellen:

$$\Omega_{aus, ein} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm \infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} H t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} . \quad (16.31)$$

Interpretation:

$$\begin{aligned}\psi_{ein} &= \Omega_{ein} \varphi_{ein} \\ &= \varphi_{ein} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i}{\hbar} H t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi_{ein} ;\end{aligned}\quad (16.32)$$

d. i. die Überlagerung der einlaufenden Asymptote und einer Streuwelle; letztere ist das Resultat der Wechselwirkung im Zeitintervall $-\infty < t \leq 0$. Entsprechendes gilt für Ω_{aus} .

Eine zu (16.31) analoge Darstellung der adjungierten Møller-Operatoren $\Omega_{aus, ein}^+$ gewinnt man durch Vertauschen von H_0 und H sowie durch die Ersetzung $V \rightarrow -V$.

5. *Abelscher Grenzwertsatz:* χ_t sei ein von einem Parameter t abhängiger Vektor des Hilbert-Raumes, und es sei $\|\chi_t\| \leq C$ für alle t . Wenn der Grenzwert

$$\chi_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_t \quad (16.33 \text{ a})$$

existiert, so existiert auch der Abelsche Grenzwert

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t} \chi_t \quad (16.33 \text{ b})$$

($\varepsilon > 0$), und die beiden Limites sind gleich (Grawert, Kap. 13.2) •

Darstellung der Møller-Operatoren als Abelsche Limites:

$$\begin{aligned}
\Omega_{aus, ein} &= \mathbb{1} + \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H t'} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \\
&= \mathbb{1} \pm \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\varepsilon}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\varepsilon t} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H t'} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \\
&= \mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt \left(\frac{d}{dt} e^{\mp\varepsilon t} \right) \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H t'} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \\
&= \mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \left\{ \underbrace{e^{\mp\varepsilon t} \int_0^t dt' \dots \Big|_0^{\pm\infty}}_{=0} - \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\varepsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \right\} \\
\Rightarrow \Omega_{aus, ein} &= \mathbb{1} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\varepsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} . \tag{16.34}
\end{aligned}$$

Für die adjungierten Operatoren gilt

$$\Omega_{aus, ein}^+ = \mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\varepsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H t} . \tag{16.35}$$

Die Darstellungen (16.34, 35) erweisen sich als vorteilhaft für die nachfolgende zeitunabhängige Formulierung der Streutheorie.

Stationäre Streutheorie. Anwendung der Møller-Operatoren auf die (uneigentlichen) Eigenzustände $\varphi_{\vec{k}, \alpha}$ von H_0 :

$$\Omega_{ein, aus} \varphi_{\vec{k}, \alpha} = \psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} . \tag{16.36}$$

Die Streuzustände $\psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)}$ sind (uneigentliche) Eigenzustände von H zu derselben Energie $E = E_{\vec{k}, \alpha}$. Das folgt aus (16.27):

$$H \psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} = E \psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} \iff H_0 \varphi_{\vec{k}, \alpha} = E \varphi_{\vec{k}, \alpha} . \tag{16.37}$$

Auch die Normierung bleibt bei Anwendung von $\Omega_{ein, aus}$ wegen (16.25) erhalten:

$$\langle \psi_{\vec{k}', \alpha'}^{(\pm)} | \psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} \rangle = \langle \varphi_{\vec{k}', \alpha'} | \varphi_{\vec{k}, \alpha} \rangle = \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \delta_{\alpha' \alpha} . \tag{16.38}$$

Fasst man $\varphi_{\vec{k},\alpha}$ als *Eingang asymptote* auf, so ist $\psi_{\vec{k},\alpha}^{(+)}$ derjenige Streuzustand, der sich *daher* entwickelt; fasst man dagegen $\varphi_{\vec{k},\alpha}$ als *Ausgang asymptote* auf, so ist $\psi_{\vec{k},\alpha}^{(-)}$ derjenige Streuzustand, der sich *dahin* entwickelt.

Mit (16.35) folgt aus (16.36):

$$\begin{aligned}
\varphi_{\vec{k},\alpha} &= \Omega_{\text{ein, aus}}^+ \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} \\
&= \left(\mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp\infty} dt e^{\pm \varepsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right) \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} \\
&= \left(\mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp\infty} dt e^{-\frac{i}{\hbar} (E \pm i\varepsilon - H_0) t} V \right) \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} \\
&= \left(\mathbb{1} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} (E \pm i\varepsilon - H_0) t} \Big|_0^{\mp\infty} V \right) \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} \\
&= \left(\mathbb{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E \pm i\varepsilon - H_0} V \right) \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} \tag{16.39}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} = \varphi_{\vec{k},\alpha} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E \pm i\varepsilon - H_0} V \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} . \tag{16.40}$$

Das ist die **Lippmann-Schwinger-Gleichung** für den allgemeinen Fall. Sie dient der Berechnung der stationären Streuzustände $\psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)}$ aus dem (bezüglich V) freien asymptotischen Zustand $\varphi_{\vec{k},\alpha}$. Vgl. (9.190) für den Spezialfall der Potenzialstreuung, wo H_0 einfach die kinetische Energie der Relativbewegung repräsentiert und der Index α entfällt.

Achtung: Keine Eindeutigkeit der Lösung bei mehreren Arrangement-Kanälen. Ausweg: *Faddeev-Gleichungen* und verwandte Gleichungssysteme. Darauf gehen wir hier nicht ein.

Bei Einführung des (bezüglich V) *freien Greenschen Operators*

$$G_0^{(\pm)} = G_0(E \pm i\varepsilon) , \tag{16.41}$$

wo

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H_0} = \sum_{\alpha} \int d^3 k \frac{|\varphi_{\vec{k},\alpha}\rangle \langle \varphi_{\vec{k},\alpha}|}{z - E_{\vec{k},\alpha}} \tag{16.42}$$

die *Resolvente* des Kanal-Hamilton-Operators H_0 ist, schreibt man auch

$$\psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} = \varphi_{\vec{k},\alpha} + G_0^{(\pm)} V \psi_{\vec{k},\alpha}^{(\pm)} . \tag{16.43}$$

Das Symbol $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$ wird meistens weggelassen. Jedenfalls ist *so* vorzugehen: Berechnung von $\psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)}$ für $\varepsilon > 0$; anschließend Limes $\varepsilon \rightarrow 0$.

Mit (16.34) folgt aus (16.36) – als Resultat einer zu (16.39) analogen Rechnung – die *formale Lösung* der Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$\psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} = \left(\mathbb{1} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E \pm i\varepsilon - H} V \right) \varphi_{\vec{k}, \alpha} . \quad (16.44)$$

Führt man den *Greenschen Operator mit Wechselwirkung* ein:

$$G^{(\pm)} = G(E \pm i\varepsilon) , \quad (16.45)$$

wo

$$G(z) = \frac{1}{z - H} = \sum_{\nu} \frac{|\psi_{\nu}\rangle \langle \psi_{\nu}|}{z - E_{\nu}} + \sum_{\gamma} \int d^3 k \frac{|\psi_{\vec{k}, \gamma}\rangle \langle \psi_{\vec{k}, \gamma}|}{z - E_{\vec{k}, \gamma}} \quad (16.46)$$

die *Resolvente* des kompletten Hamilton-Operators H ist, so hat man – wenn man wiederum $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$ weglässt:

$$\psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)} = (\mathbb{1} + G^{(\pm)} V) \varphi_{\vec{k}, \alpha} . \quad (16.47)$$

Achtung: Die „formale“ Lösung impliziert noch keine „faktische“ Lösung des Streuproblems, da sie ja nach (16.46) die Lösung des Eigenwertproblems von H (statt nur von H_0) voraussetzt; sie ist aber für allgemeine streutheoretische Überlegungen von großem Nutzen.

Zwischen den Resolventen $G(z)$ und $G_0(z)$ und – als Konsequenz davon – zwischen den Greenschen Operatoren $G^{(\pm)}$ und $G_0^{(\pm)}$ gelten die Beziehungen

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z) \quad (16.48)$$

bzw.

$$G^{(\pm)} = G_0^{(\pm)} + G_0^{(\pm)} V G^{(\pm)} . \quad (16.49)$$

Anmerkung: Auf die mathematischen Probleme, die sich daraus ergeben, dass die (uneigentlichen) Zustände $\varphi_{\vec{k}, \alpha}$ und $\psi_{\vec{k}, \alpha}^{(\pm)}$ nicht in \mathcal{H} bzw. nicht in \mathcal{H}_S liegen (weil sie nicht normierbar sind), gehen wir hier nicht ein. Vgl. die ausführliche Diskussion dieser Thematik in Kap. 10.

16.2 S-Matrix, T-Matrix und Wirkungsquerschnitte

Mit Hilfe der Møller-Operatoren definiert man die zentrale Größe der Streutheorie, den **Streuoperator**, abgekürzt **S-Operator**:

$$S = \Omega_{aus}^+ \Omega_{ein} . \quad (16.50)$$

Eigenschaften:

1. Der S -Operator ist *unitär*, denn aus (16.25) folgt:

$$S^+ S = S S^+ = \mathbb{1} . \quad (16.51)$$

2. S vertauscht mit H_0 , was aus (16.27) folgt:

$$[S, H_0] = 0 . \quad (16.52)$$

Betrachte das Matrixelement von S zwischen zwei asymptotischen Zuständen φ_{ein} und φ_{aus} ; mit (16.19, 21) und (16.50) folgt

$$\langle \varphi_{aus} | S | \varphi_{ein} \rangle = \langle \varphi_{aus} | \Omega_{aus}^+ \Omega_{ein} | \varphi_{ein} \rangle = \langle \psi_{aus} | \psi_{ein} \rangle . \quad (16.53)$$

Das ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass der Streuzustand ψ_{aus} im Streuzustand ψ_{ein} enthalten ist (gemessen wird). Da ψ_{ein} in der fernen Vergangenheit mit φ_{ein} übereingestimmt hat und ψ_{aus} in der fernen Zukunft mit φ_{aus} übereinstimmen wird (richtige Zeitentwicklung gemäß H bzw. H_0 unterstellt), kann man auch sagen: (16.53) ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang des Stoßsystems vom Eingangszustand φ_{ein} in den Ausgangszustand φ_{aus} . Also gilt für die *Übergangswahrscheinlichkeit*:

$$W(\varphi_{ein} \rightarrow \varphi_{aus}) = |\langle \varphi_{aus} | S | \varphi_{ein} \rangle|^2 . \quad (16.54)$$

Da sich die Zustände φ_{ein} , φ_{aus} gemäß (16.9) als Superposition der Eigenzustände $\varphi_{\vec{k}, \alpha}$ des Kanal-Hamilton-Operators H_0 darstellen lassen, genügt zur Auswertung von (16.53, 54) die Kenntnis von S zwischen diesen Zuständen. **S-Matrix**:

$$S_{\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha} = \langle \varphi_{\vec{k}', \alpha'} | S | \varphi_{\vec{k}, \alpha} \rangle = \langle \psi_{\vec{k}', \alpha'}^{(-)} | \psi_{\vec{k}, \alpha}^{(+)} \rangle . \quad (16.55)$$

Wegen (16.51) ist diese Matrix *unitär*. Fasst man \vec{k}, α zu einem Index zusammen, so gilt

$$\sum_c S_{cb}^* S_{ca} = \sum_c S_{bc} S_{ac}^* = \delta_{ba} . \quad (16.56)$$

Die S -Matrix (16.55) lässt sich mit (16.37, 38, 44) auch folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned}
S_{ba} &= \langle \psi_b^{(-)} | \psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \langle \psi_b^{(+)} | \psi_a^{(+)} \rangle + \langle \psi_b^{(-)} - \psi_b^{(+)} | \psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \delta_{ba} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \varphi_b | V \left(\frac{1}{E_b + i\varepsilon - H} - \frac{1}{E_b - i\varepsilon - H} \right) | \psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \delta_{ba} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{E_b + i\varepsilon - E_a} - \frac{1}{E_b - i\varepsilon - E_a} \right) \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle . \tag{16.57}
\end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned}
&\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{E_b + i\varepsilon - E_a} - \frac{1}{E_b - i\varepsilon - E_a} \right) \\
&= -2i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(E_b - E_a)^2 + \varepsilon^2} = -2\pi i \delta(E_b - E_a)
\end{aligned} \tag{16.58}$$

erhält man schließlich

$$S_{ba} = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle . \tag{16.59}$$

Interpretation: Der erste Term δ_{ba} steht für diejenigen Systeme der zu Grunde liegenden statistischen Gesamtheit, deren Fragmente bei dem betrachteten Stoßprozess weder abgelenkt noch an- (ab-) geregt werden: $\vec{k}' = \vec{k}$, $\alpha' = \alpha$. Der zweite Term beschreibt die eigentlichen Streusysteme mit $\vec{k}' \neq \vec{k}$ und/oder $\alpha' \neq \alpha$; dabei bringt $\delta(E_b - E_a)$ die Energieerhaltung zum Ausdruck:

$$\frac{\hbar^2}{2m} k'^2 + \varepsilon_{\alpha'} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \varepsilon_{\alpha} . \tag{16.60}$$

Eine zu (16.57) analoge Rechnung führt auf die alternative Darstellung:

$$\begin{aligned}
S_{ba} &= \langle \psi_b^{(-)} | \psi_a^{(-)} \rangle + \langle \psi_b^{(-)} | \psi_a^{(+)} - \psi_a^{(-)} \rangle \\
&= \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle
\end{aligned} \tag{16.61}$$

mit der gleichen Interpretation wie der Ausdruck (16.59).

Die Matrixelemente in (16.59, 61) sind *auf der Energieschale* (on-shell) einander gleich:

$$\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = \langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle , \quad E_b = E_a ; \tag{16.62}$$

sie bilden den „nichttrivialen“ Anteil der S -Matrix.

Eine weitere wichtige Größe der Streutheorie ist der **Übergangoperator**, auch **T-Operator**:

$$\begin{aligned} T &= V + V G^{(+)} V \\ &= V + V \frac{1}{E + i\varepsilon - H} V = T(E) \end{aligned} \quad (16.63)$$

mit der der **T-Matrix**:

$$T_{ba} = \langle \varphi_b | T(E) | \varphi_a \rangle . \quad (16.64)$$

Von Bedeutung sind hier zunächst nur die *on-shell-Elemente* mit $E_b = E = E_a$. Diese sind wegen (16.47) und wegen

$$G^{(-)+} = G^{(+)} \quad (16.65)$$

gleich den Matrixelementen (16.62):

$$T_{ba} = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = \langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle . \quad (16.66)$$

Daher hat man wegen (16.59, 61) den folgenden Zusammenhang zwischen *S*- und *T*-Matrix:

$$S_{ba} = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) T_{ba} . \quad (16.67)$$

In dem weiter unten zu besprechenden Integralgleichungssystem zur Berechnung der *T*-Matrix sind auch die *off-shell-Elemente* mit $E_b \neq E \neq E_a$ bedeutsam (unumgänglich).

Im Folgenden wird gezeigt, dass T_{ba} on-shell die Bedeutung einer **Streuamplitude** für den Stoßprozess $a \rightarrow b$ hat – bis auf einen konstanten Faktor. Einen ersten Hinweis darauf liefert der Vergleich von (16.66) mit (9.195). Danach vermutet man:

$$f_{a \rightarrow b} = - \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 m T_{ba} ; \quad (16.68)$$

weiterhin vermutet man für den **differentiellen Wirkungsquerschnitt**:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{a \rightarrow b} = \frac{k'}{k} |f_{a \rightarrow b}|^2 . \quad (16.69)$$

Der Vorfaktor ergibt sich aus der Definition $d\sigma =$ Streustrom nach $d\Omega$ / einfallende Stromdichte $\sim k'/k$; er ist nur bei inelastischer Streuung ungleich eins und fehlt daher bei elastischer Streuung, vgl. (9.148). Die Vermutung (16.68, 69) ist richtig, was nachfolgend bewiesen wird.

Das im Zustand φ_{ein} einlaufende Stoßsystem befindet sich zur Zeit t im Streuzustand $e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_{ein}$. Dem vom Detektor selektierten Ausgangszustand φ_{aus} kommt zur Zeit t der

Zustandsvektor $e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi_{aus}$ zu. Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang $\varphi_{ein} \rightarrow \varphi_{aus}$ zur Zeit t ist demnach

$$W_{aus, ein}(t) = |\langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle|^2. \quad (16.70)$$

Für das Folgende interessiert die *Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit*:

$$\begin{aligned} w_{aus, ein} &= \frac{d}{dt} W_{aus, ein} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle \langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle^* \right) \\ &= \langle \varphi_{aus} | \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right) | \psi_{ein} \rangle \langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle^* + \text{k. k.} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle \langle \varphi_{aus} | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi_{ein} \rangle^* + \text{k. k.} \end{aligned} \quad (16.71 \text{ a})$$

Wählt man nun für $\varphi_{ein, aus}$ die H_0 -Eigenzustände $\varphi_{a, b}$ zu den Energien $E_{a, b}$, so erhält man:

$$w_{ba} = -\frac{i}{\hbar} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \langle \varphi_b | \psi_a^{(+)} \rangle^* + \text{konj. komplex.} \quad (16.71 \text{ b})$$

Nun gilt aber wegen (16.38, 47, 65):

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | \psi_a^{(+)} \rangle &= \langle \psi_b^{(+)} | \psi_a^{(+)} \rangle + \langle \varphi_b - \psi_b^{(+)} | \psi_a^{(+)} \rangle \\ &= \delta_{ba} - \langle \varphi_b | V \frac{1}{E_b - i\varepsilon - H} | \psi_a^{(+)} \rangle \\ &= \delta_{ba} - \frac{1}{E_b - E_a - i\varepsilon} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (16.72)$$

folglich

$$\begin{aligned} w_{ba} &= -\frac{i}{\hbar} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \left(\delta_{ba} - \frac{1}{E_b - E_a + i\varepsilon} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle^* \right) + \text{konj. komplex} \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \delta_{ba} \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} |\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_b - E_a + i\varepsilon} - \frac{1}{E_b - E_a - i\varepsilon} \right) \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im} T_{ba} \delta_{ba} + \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a); \end{aligned} \quad (16.73)$$

der letzte Schritt beruht auf (16.58).

Streustrom nach $d\Omega = d\hat{k}'$ – wozu der erste Term in (16.73) keinen Beitrag leistet:

$$\begin{aligned} dI &= \int_0^\infty \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}', \alpha' | T | \vec{k}, \alpha \rangle|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m} k'^2 + \varepsilon_{\alpha'} - \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \varepsilon_\alpha \right) k'^2 dk' d\hat{k}' \\ &= \frac{2\pi m k'}{\hbar^3} |\langle \vec{k}', \alpha' | T | \vec{k}, \alpha \rangle|^2 d\hat{k}; \end{aligned} \quad (16.74)$$

hierbei ist k' durch den *Energiesatz* (16.60), d. h. durch k , α' und α festgelegt.

Einfallende Stromdichte:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m}. \quad (16.75)$$

Der gegenüber (9.146) auftretende Faktor $\frac{1}{(2\pi)^3}$ stammt aus der δ -Normierung (16.38) des Eingangszustandes φ_α .

Differentieller Wirkungsquerschnitt:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ba} = \frac{dI}{j_0 d\hat{k}'} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^4 m^2 \frac{k'}{k} |T_{ba}|^2. \quad (16.76)$$

Damit ist Gleichung (16.69) bewiesen, sowie der Ausdruck (16.68) für f_{ba} – bis auf einen Phasenfaktor. Dieser – das Minuszeichen – wird durch Anpassung an den Spezialfall der Potenzialstreuung (9.195) festgelegt.

Dimensionsbetrachtung:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} \right] &= \frac{[m]^2}{[\hbar]^4} [T]^2, \quad [T] = [V] [d^3 x] \\ \Rightarrow \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} \right] &= \frac{\text{Masse}^2 \times \text{Energie}^2 \times \text{Länge}^6}{\text{Impuls}^4 \times \text{Länge}^4} = \text{Länge}^2. \end{aligned} \quad (16.77)$$

Welche *Konsequenzen* ergeben sich aus der Unitarität der S -Matrix für die T -Matrix? Einsetzen von (16.67) in die erste Gleichung von (16.56) führt auf

$$\begin{aligned} \sum_c S_{cb}^* S_{ca} &= \sum_c \left(\delta_{cb} + 2\pi i \delta(E_c - E_b) T_{cb}^* \right) \left(\delta_{ca} - 2\pi i \delta(E_c - E_a) T_{ca} \right) \\ &= \delta_{ba} + 2\pi i \left(\delta(E_a - E_b) T_{ab}^* - \delta(E_b - E_a) T_{ba} \right) \\ &\quad + 4\pi^2 \sum_c \delta(E_c - E_b) \delta(E_c - E_a) T_{cb}^* T_{ca} \\ &\stackrel{!}{=} \delta_{ba}; \end{aligned} \quad (16.78)$$

daraus folgt:

$$\delta(E_b - E_a) (T_{ab}^* - T_{ba}) = 2\pi i \sum_c \underbrace{\delta(E_b - E_c) \delta(E_c - E_a)}_{= \delta(E_b - E_a) \delta(E_{b,a} - E_c)} T_{cb}^* T_{ca} \quad (16.79)$$

$$\Rightarrow i (T_{ba} - T_{ab}^*) = 2\pi \sum_c \delta(E - E_c) T_{cb}^* T_{ca}, \quad E = E_b = E_a. \quad (16.80)$$

Geht man von der zweiten der Gleichungen (16.56) aus, so folgt analog:

$$i (T_{ba} - T_{ab}^*) = 2\pi \sum_c \delta(E - E_c) T_{bc} T_{ac}^*, \quad E = E_b = E_a. \quad (16.81)$$

Die Beziehungen (16.80, 81) werden als **on-shell-Unitaritätsrelationen** bezeichnet.

Geht man von der Spezifikation $a \dots$ wieder zur Spezifikation $\vec{k}, \alpha \dots$ zurück, so lautet (16.80):

$$\begin{aligned} & i (T(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) - T^*(\vec{k}, \alpha; \vec{k}', \alpha')) \\ &= 2\pi \sum_{\alpha''} \int d^3 k'' \delta\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} k''^2 - \varepsilon_{\alpha''}\right) T^*(\vec{k}'', \alpha''; \vec{k}', \alpha') T(\vec{k}'', \alpha''; \vec{k}, \alpha) \\ &= \frac{2\pi m}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} k'' \int d\Omega'' T^*(\vec{k}'', \alpha''; \vec{k}', \alpha') T(\vec{k}'', \alpha''; \vec{k}, \alpha) \end{aligned} \quad (16.82)$$

mit

$$k'' = \frac{\sqrt{2m(E - \varepsilon_{\alpha''})}}{\hbar}, \quad (16.83)$$

wobei E durch (16.60) gegeben ist.

Für den Spezialfall der **Potenzialstreuung** folgt (α -Quantenzahlen entfallen; $k'' = k' = k$):

$$i (T(\vec{k}', \vec{k}) - T^*(\vec{k}, \vec{k}')) = \frac{2\pi m k}{\hbar^2} \int d\Omega'' T^*(\vec{k}'', \vec{k}') T(\vec{k}'', \vec{k}) \quad (16.84)$$

Speziell für $\vec{k}' = \vec{k}$ ergibt sich daraus – zusammen mit (16.68, 69) – das optische Streutheorem (9.150). Gleichung (16.84) wird daher als **verallgemeinertes optisches Theorem** bezeichnet.

Ausgehend von Gleichung (16.81) erhält man die zu (16.82) analoge Gleichung mit entsprechend modifizierter rechter Seite.

Die Unitaritätsrelationen (16.80, 81), denen die T -Matrix zu genügen hat, sind eine Konsequenz der Forderung nach *Erhaltung der gesamten Wahrscheinlichkeit*: keine Erzeugung und Vernichtung von Teilchen (evtl. jedoch Rearrangement bei mehr als nur einem Arrangementkanal). Diese Forderung impliziert Selbstadjungiertheit der Hamilton-Operatoren H, H_0 , was äquivalent zur Forderung nach Unitarität der S -Matrix ist.

Zur Berechnung der T -Matrix benötigt man nach (16.66) die Streuzustände $\psi_a^{(+)}$ oder $\psi_b^{(-)}$. Man kann aber die Matrix T_{ba} auch direkt aus einem **Integralgleichungssystem** berechnen.

Aus (16.63, 49) gewinnt man zunächst für den T -Operator die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} T &= V + V G^{(+)} V \\ &= V + V \left(G_0^{(+)} + G_0^{(+)} V G^{(+)} \right) V \\ &= V + V G_0^{(+)} \left(V + V G^{(+)} V \right) \\ \Rightarrow \quad T(E) &= V + V G_0^{(+)}(E) T(E) . \end{aligned} \quad (16.85)$$

In der H_0 -Darstellung, d. h. in der Basis der Eigenzustände $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, \dots$ von H_0 , wird daraus die gesuchte Gleichung für die T -Matrix:

$$\langle b|T(E)|a\rangle = \langle b|V|a\rangle + \sum_c \langle b|V|c\rangle \frac{1}{E + i\varepsilon - E_c} \langle c|T(E)|a\rangle , \quad (16.86)$$

abgekürzt

$$T_{ba} = V_{ba} + \sum_c V_{bc} \frac{1}{E + i\varepsilon - E_c} T_{ca} . \quad (16.87)$$

Die Lösung umfasst außer den gesuchten *on-shell*-Elementen mit $E_b = E = E_a$ auch alle *off-shell*-Elemente, wo die Gleichheit von E_b, E, E_a nicht gilt. Physikalisch bedeutsam sind nur die ersteren, weil daraus die differentiellen WQs folgen.

(16.87) ist tatsächlich ein Integralgleichungssystem, was man beim Übergang $a \rightarrow \vec{k}, \alpha$ usw. erkennt.

$$\begin{aligned} T(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) &= V(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) \\ &+ \sum_{\alpha''} \int d^3k'' V(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}'', \alpha'') \frac{1}{E + i0 - \frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - \varepsilon_{\alpha''}} T(\vec{k}'', \alpha''; \vec{k}, \alpha) . \end{aligned} \quad (16.88)$$

Bornsche Reihe für den T -Operator durch Iteration von Gleichung (16.85):

$$T(E) = V + V G_0^{(+)}(E) V + V G_0^{(+)}(E) V G_0^{(+)}(E) V + \dots \quad (16.89)$$

Bei Beschränkung auf den ersten Summanden von (16.89) erhält man die *erste Bornsche Näherung*:

$$\begin{aligned} T^{(B)}(E) &= V \\ \Rightarrow T_{ba}^{(B)} &= V_{ba} = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle ; \end{aligned}$$

mit (16.68) folgt

$$f_{a \rightarrow b}^{(B)} = - \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 m V_{ba} . \quad (16.90)$$

Dieses Resultat stimmt für den Fall der Potenzialstreuung mit (9.196) überein.

Zur *n. Bornschen Näherung* gelangt man, wenn man in (16.89) die ersten n Terme berücksichtigt. Für kein n jedoch erfüllt die Bornsche Approximation die Unitaritätsrelationen (16.80, 81); denn auf der linken Seite hat man Terme bis zur Ordnung V^n , auf der rechten dagegen bis zur Ordnung V^{2n} . Erst im Limes $n \rightarrow \infty$ sind – bei Konvergenz der Bornschen Reihe – die Beziehungen (16.80, 81) erfüllt.

Das vorstehend beschriebene Verfahren zur Berechnung der Streuamplitude (16.68) durch Lösen der Gleichung (16.87) für die T -Matrix ist *im Prinzip korrekt*. Es hat jedoch zwei *praktische Nachteile*:

- T_{ba} ist komplett off-shell zu berechnen, wird aber nur on-shell benötigt. Man rechnet also mehr aus, als man braucht.
- (Iterative) Näherungslösungen von (16.87) verletzen im Allgemeinen die Unitaritätsrelationen (16.80, 81).

Im Folgenden wird ein Verfahren beschrieben, mit dem diese Probleme – im Prinzip – umgangen werden können. In der Praxis eröffnen sich dabei neue Probleme.

Betrachte den *Greenschen Operator*

$$\begin{aligned} G_0^{(P)} &= \frac{P}{E - H_0} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E + i\varepsilon - H_0} + \frac{1}{E - i\varepsilon - H_0} \right) \\ &= \frac{1}{2} (G_0^{(+)} + G_0^{(-)}) . \end{aligned} \quad (16.91)$$

P steht für ‘‘Principal Value‘‘, das meint den *Cauchyschen Hauptwert*. Die zu $G_0^{(P)}$ gehörigen Streuzustände $\psi^{(P)}$ verhalten sich asymptotisch weder wie auslaufende ($\psi^{(+)}$) noch wie einlaufende ($\psi^{(-)}$) Kugelwellen, sondern wie *stehende Kugelwellen*.

In Analogie zu (16.85) definiert man den **K-Operator** durch die Gleichung:

$$K(E) = V + V G_0^{(P)}(E) K(E) . \quad (16.92)$$

Entsprechend (16.87) hat man für die **K-Matrix** die Gleichung:

$$K_{ba} = V_{ba} + \sum_c V_{bc} \frac{P}{E - E_c} K_{ca} . \quad (16.93)$$

Die Lösung umfasst auch hier neben den on-shell-Elementen alle off-shell-Elemente.

Im Unterschied zum T -Operator ist der K -Operator *selbstadjungiert*:

$$K^+ = K . \quad (16.94)$$

Das folgt aus einer zu (16.92) äquivalenten, zu (16.63) analogen Definition:

$$K = V + V G^{(P)} V , \quad (16.95)$$

und daraus, dass $G^{(P)}$ selbstadjungiert ist. Aus (16.94) folgt die Selbstadjungiertheit der K -Matrix:

$$K_{ab}^* = K_{ba} . \quad (16.96)$$

In vielen Fällen – z. B. in der Potenzialstreuung – ist die K -Matrix *symmetrisch*, dann ist sie wegen (16.96) auch *reell*.

Was kann man mit der K -Matrix anfangen? Antwort: Sie liefert einen günstigen Ausgangspunkt zur Berechnung der on-shell-Elemente der T -Matrix.

Zwischen den Operatoren T und K gilt nämlich die Beziehung:

$$T = K - i\pi K \delta(E - H_0) T . \quad (16.97)$$

Beweis: Wegen (16.58, 91) gilt

$$G_0^{(P)} = G_0^{(+)} + i\pi \delta(E - H_0) ; \quad (16.98)$$

damit folgt aus der zu (16.92) äquivalenten Beziehung $K(E) = V + K(E) G^{(P)}(E) V$ in wenigen Rechenschritten die *Behauptung*.

Die Matrixdarstellung von (16.97):

$$T_{ba} = K_{ba} - i\pi \sum_c K_{bc} \delta(E - E_c) T_{ca} \quad (16.99)$$

wird als **Heitlersche Integralgleichung** bezeichnet. Sie enthält nur on-shell-Elemente!

Bisher haben wir uns für die *eine* Gleichung (16.87) deren *zwei* eingehandelt:

- Gleichung (16.93) zur Berechnung der K -Matrix und
- Gleichung (16.99) zur Berechnung der on-shell- T -Matrix aus der on-shell- K -Matrix. Dies sieht wie ein Nachteil aus. Der entscheidende Vorteil unseres Vorgehens liegt aber in Folgendem: Jede beliebige selbstadjungierte K -Matrix führt – in die Heitler-Gleichung eingesetzt – auf eine T -Matrix, welche die Unitarität der S -Matrix gemäß (16.80, 81) gewährleistet. Man kann sich also auf eine Näherungslösung von (16.93) beschränken, sofern diese nur selbstadjungiert ist. Über (16.99) erhält man daraus eine approximative T -Matrix, die – in dem Maße, in dem man (16.99) exakt löst – die Unitaritätsrelationen (16.80, 81) befriedigt.

Beweis: \tilde{K} sei eine selbstadjungierte Approximation für den K -Operator:

$$\tilde{K}^+ = \tilde{K} . \quad (16.100)$$

Die daraus resultierende Approximation des T -Operators werde mit \tilde{T} bezeichnet. Nach (16.97) gilt

$$\tilde{T} = \tilde{K} - i\pi \tilde{K} \delta(E - H_0) \tilde{T} \quad (16.101)$$

und

$$\tilde{T}^+ = \tilde{K} + i\pi \tilde{T}^+ \delta(E - H_0) \tilde{K} . \quad (16.102)$$

Setzt man \tilde{K} aus (16.102) in (16.101) und umgekehrt \tilde{K} aus (16.101) in (16.102) ein, so folgt

$$\tilde{T} = \tilde{K} - i\pi \left(\tilde{T}^+ - i\pi \tilde{T}^+ \delta(E - H_0) \tilde{K} \right) \delta(E - H_0) \tilde{T} \quad (16.103)$$

bzw.

$$\tilde{T}^+ = \tilde{K} + i\pi \tilde{T}^+ \delta(E - H_0) \left(\tilde{T} + i\pi \tilde{K} \delta(E - H_0) \tilde{T} \right) . \quad (16.104)$$

Durch Subtraktion dieser beiden Gleichungen erhält man

$$\tilde{T} - \tilde{T}^+ = -2\pi i \tilde{T}^+ \delta(E - H_0) \tilde{T} . \quad (16.105)$$

Das ist die *Behauptung* (16.80) in Operatorschreibweise; (16.81) analog.

16.3 Invarianzen (Symmetrien) und Erhaltungssätze

Sowohl in der KLM als auch in der QUM haben Symmetrien des betrachteten physikalischen Systems Erhaltungssätze zur Folge; z. B. Translationsinvarianz \Rightarrow Impulserhaltung, ... Dieser Zusammenhang hat Konsequenzen für die Gestalt der S -Matrix sowie der T -, K -, ... Matrix. Bei bestimmten Symmetrien sind z. B. bestimmte Übergänge beim Stoßprozess verboten. Im folgenden Abschnitt wird besprochen, welche Aussagen über S , T , K usw. man *vor* aller Rechnung (z. B. Lösung von Integralgleichungssystemen) allein auf Grund der Invarianzen des Systems machen kann. Siehe auch Kap. 15.

Aus der Vertauschbarkeit des Streuoperators S mit dem Kanal-Hamilton-Operator H_0 gemäß (16.52) folgt die Existenz eines gemeinsamen Systems von Eigenvektoren dieser beiden Operatoren:

$$H_0 \varphi_{E,\lambda} = E \varphi_{E,\lambda} \quad (16.106)$$

$$S \varphi_{E,\lambda} = s_\lambda(E) \varphi_{E,\lambda} . \quad (16.107)$$

Der Index λ (diskret und/oder kontinuierlich) trägt der Entartung der zu festem E gehörigen Zustände Rechnung. Die $\varphi_{E,\lambda}$ können orthonormiert gewählt werden:

$$\langle \varphi_{E',\lambda'} | \varphi_{E,\lambda} \rangle = \delta(E' - E) \delta_{\lambda'\lambda} . \quad (16.108)$$

Die **S-Matrix** nimmt in der $\varphi_{E,\lambda}$ -Basis *Diagonalgestalt* an:

$$\langle \varphi_{E',\lambda'} | S | \varphi_{E,\lambda} \rangle = \delta(E' - E) \delta_{\lambda'\lambda} s_\lambda(E) . \quad (16.109)$$

Auf Grund der physikalischen Situation des Streuexperimentes benötigt man die S -Matrix oft in einer anderen Basis von H_0 -Eigenzuständen:

$$H_0 \varphi_a = E_a \varphi_a , \quad (16.110)$$

$a = \{\vec{k}, \alpha\}$ – siehe oben. Mit

$$\sum_\lambda \int dE |\varphi_{E,\lambda}\rangle \langle \varphi_{E,\lambda}| = \mathbb{1} \quad (16.111)$$

und

$$\langle \varphi_{E,\lambda} | \varphi_a \rangle = \delta(E - E_a) c_{\lambda,a}(E) \quad (16.112)$$

erhält man

$$\begin{aligned}
S_{ba} &= \langle \varphi_b | S | \varphi_a \rangle \\
&= \sum_{\lambda} \int dE \langle \varphi_b | \varphi_{E,\lambda} \rangle s_{\lambda}(E) \langle \varphi_{E,\lambda} | \varphi_a \rangle \\
&= \delta(E_b - E_a) \sum_{\lambda} c_{\lambda,b}^*(E_b) s_{\lambda}(E) c_{\lambda,a}(E_a) ; \quad (16.113)
\end{aligned}$$

hierbei ist $E_b = E = E_a$.

Die Energie- δ -Funktionen in (16.109, 113) sind Ausdruck der *Energieerhaltung* beim Stoßprozess. Dieser Erhaltungssatz ist eine Konsequenz der Invarianz von S gegenüber *zeitlicher Translation*; diese ergibt sich aus (16.52) zu

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} S e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} = S \quad (16.114)$$

für beliebiges Zeitintervall τ . Es folgt

$$\begin{aligned}
S_{ba} &= \langle \varphi_b | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} S e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau} | \varphi_a \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} (E_b - E_a) \tau} S_{ba} . \quad (16.115)
\end{aligned}$$

Diese Gleichung impliziert aber $E_b = E_a$ für $S_{ba} \neq 0$, d. h. für *erlaubte Prozesse*.

T-Matrix. Analog zu (16.67) gilt

$$\langle \varphi_{E',\lambda'} | S | \varphi_{E,\lambda} \rangle = \delta(E' - E) \left(\delta_{\lambda'\lambda} - 2\pi i \langle \varphi_{E,\lambda'} | T(E) | \varphi_{E,\lambda} \rangle \right) . \quad (16.116)$$

Der Vergleich mit (16.109) ergibt

$$\delta_{\lambda'\lambda} s_{\lambda}(E) = \delta_{\lambda'\lambda} - 2\pi i \langle \varphi_{E,\lambda'} | T(E) | \varphi_{E,\lambda} \rangle . \quad (16.117)$$

Daraus folgt *Diagonalität* der *on-shell-T-Matrix* in der $\varphi_{E,\lambda}$ -Basis:

$$\langle \varphi_{E,\lambda'} | T(E) | \varphi_{E,\lambda} \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} t_{\lambda}(E) \quad (16.118)$$

mit

$$s_{\lambda}(E) = 1 - 2\pi i t_{\lambda}(E) . \quad (16.119)$$

In der „physikalischen“ φ_a -Basis geht die Diagonalität verloren:

$$T_{ba} = \langle \varphi_b | T(E) | \varphi_a \rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda,b}^*(E_b) t_{\lambda}(E) c_{\lambda,a}(E_a) , \quad (16.120)$$

wobei wieder $E_b = E = E_a$ gilt.

Aus der *Unitarität des S -Operators* folgt: Die Eigenwerte $s_\lambda(E)$ haben den Betrag 1; sie sind also von der Gestalt

$$s_\lambda(E) = e^{2i\delta_\lambda(E)} \quad (16.121)$$

mit reellem $\delta_\lambda(E)$. Der Faktor 2 erleichtert den Anschluss an entsprechende Formeln der Potenzialstreuung; vgl. (9.162), und siehe unten. Für die $t_\lambda(E)$ folgt aus (16.119, 121):

$$-\pi t_\lambda(E) = \frac{e^{2i\delta_\lambda(E)} - 1}{2i} = e^{i\delta_\lambda(E)} \sin \delta_\lambda(E) ; \quad (16.122)$$

vgl. (9.165), und siehe unten.

Der Index λ wurde bisher nur dazu benutzt, die zu festem E entarteten Zustände $\varphi_{E,\lambda}$ abzuzählen. Die physikalische Bedeutung von λ blieb offen. Im Folgenden dient λ zur Klassifizierung der Symmetrien des betrachteten Systems.

Invarianz (Symmetrie): Unitärer (oder antiunitärer, s. u.) Operator Λ mit

$$\Lambda H_0 \Lambda^+ = H_0 , \quad \Lambda V \Lambda^+ = V \quad \Rightarrow \quad \Lambda H \Lambda^+ = H , \quad (16.123)$$

d. h.

$$[\Lambda, H_0] = 0 , \quad [\Lambda, V] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\Lambda, H] = 0 . \quad (16.124)$$

Abweichend von Kap. 15 werden die Symmetrietransformationen hier mit Λ bezeichnet, um Verwechslungen mit der Wechselwirkung V zu vermeiden.

Ein *Erhaltungssatz* ergibt sich wie folgt:

$$\Lambda = e^{-\frac{i}{\hbar} A \xi} ; \quad (16.125)$$

A selbstadjungierter Operator, ξ reeller Parameter, $A\xi$ von der Dimension „Wirkung“ (d. h. A und ξ zueinander konjugiert im Sinne der KLM). Für A folgt wegen (16.124) Vertauschbarkeit mit H :

$$[A, H] = 0 . \quad (16.126)$$

Das ist die Definition einer *Konstanten der Bewegung* in der QUM. A wird als die *Erzeugende* der Operation Λ bezeichnet. Siehe Kapitel 15.

Λ sei Symmetrieoperator gemäß (16.123, 124). Dann gilt – siehe die Definition von S –

$$[H_0, S] = 0 , \quad [S, \Lambda] = 0 , \quad [\Lambda, H_0] = 0 . \quad (16.127)$$

Die $\varphi_{E,\lambda}$ können also so gewählt werden, dass sie außer den Eigenwertgleichungen (16.106, 107) für H_0 bzw. S auch noch die Eigenwertgleichung für Λ befriedigen:

$$\Lambda \varphi_{E,\lambda} = \lambda \varphi_{E,\lambda} . \quad (16.128)$$

Zur Vereinfachung der Nomenklatur wird für den Eigenwert λ dasselbe Symbol gewählt wie für den dazugehörigen Index (Quantenzahl). Für die Eigenzustände $\varphi_{E,\lambda}$ gilt Orthogonalität gemäß (16.108). Die daraus resultierende Diagonalität von S - und T -Matrix gemäß (16.109) bzw. (16.118) bedeutet also: Diagonalität in den zur Symmetrieoperation Λ gehörenden Quantenzahlen λ', λ ; der λ -Wert kann sich beim Stoßprozess nicht ändern.

Wegen (16.125) sind die $\varphi_{E,\lambda}$ simultan Eigenvektoren der Erzeugenden A :

$$A \varphi_{E,\lambda} = a \varphi_{E,\lambda} ; \quad (16.129)$$

für den reellen Eigenwert a gilt

$$\lambda = e^{-\frac{i}{\hbar} a \xi} . \quad (16.130)$$

Folglich: Invarianz unter Λ impliziert Konstanz von A beim Stoßprozess. Die Observable A erweist sich somit als *Erhaltungsgröße*.

Translationsinvarianz. Wir betrachten den Stoßprozess in einem beliebigen Inertialsystem (z. B. Laborsystem); wir geben also im Moment die Voraussetzung des Schwerpunktsystems als Bezugssystem auf. Bei äußerer Abgeschlossenheit ist das physikalische System – infolge Homogenität des Raumes – invariant gegen beliebige Translationen \vec{a} . Der entsprechende Symmetrieoperator ist ($t = \text{translation}$)

$$\Lambda_t = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}} \quad (16.131)$$

mit dem *Gesamtimpuls*

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (16.132)$$

als Erzeugender. \vec{p}_1, \vec{p}_2 sind die Impulse der Fragmente 1 bzw. 2. Vgl. (15.18).

Die $\varphi_{E,\lambda}$ werden damit zu Zuständen scharfen Gesamtimpulses:

$$|\vec{P}; \vec{p}, \alpha\rangle . \quad (16.133)$$

λ fasst die drei \vec{P} -Komponenten zusammen. Weitere Spezifikation durch Angabe des *Relativimpulses*

$$\vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (16.134)$$

sowie der inneren Quantenzahlen α der Fragmente. Die Energie E ergibt sich aus den anderen Spezifikationen:

$$\begin{aligned} E &= \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \varepsilon_\alpha \\ &= \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha , \end{aligned} \quad (16.135)$$

wo

$$M = m_1 + m_2 , \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (16.136)$$

die Gesamtmasse bzw. die reduzierte Masse sind, und braucht daher in (16.133) nicht eigens aufgeführt zu werden.

Wegen $[P_x, P_y] = [P_y, P_z] = [P_z, P_x] = 0$ ist Λ_t als Produkt dreier kommutierender Symmetrieoperationen darstellbar:

$$\Lambda_t = \Lambda_x \Lambda_y \Lambda_z \quad (16.137)$$

mit

$$\Lambda_x = e^{-\frac{i}{\hbar} P_x a_x} , \quad \Lambda_y = e^{-\frac{i}{\hbar} P_y a_y} , \quad \Lambda_z = e^{-\frac{i}{\hbar} P_z a_z} ; \quad (16.138)$$

das sind die Translationen bezüglich der drei kartesischen Achsen. Als Konsequenz ergeben sich die simultanen Eigenvektoren $|\vec{P}\rangle = |P_x, P_y, P_z\rangle$ von $\Lambda_x, \Lambda_y, \Lambda_z$ bzw. P_x, P_y, P_z .

Im Allgemeinen vertauschen zwei Symmetrieoperationen Λ und Λ' jedoch nicht. Dann gibt es kein gemeinsames System von Eigenvektoren.

Für die *T-Matrix* folgt nach (16.118):

$$\langle \vec{P}' ; \vec{p}', \alpha' | T | \vec{P} ; \vec{p}, \alpha \rangle = \delta(\vec{P}' - \vec{P}) t(\vec{p}', \alpha' ; \vec{p}, \alpha) . \quad (16.139)$$

Die δ -Funktion bringt die *Erhaltung des Gesamtimpulses* zum Ausdruck.

Als Konsequenz der *Galilei-Invarianz* der nichtrelativistischen QUM (siehe z. B. Grawert, Kap. 12.8) hängt $t(\vec{p}', \alpha' ; \vec{p}, \alpha)$ nicht von \vec{P} , also nicht von der Wahl des (inertialen) Bezugssystems ab. Für die folgenden Betrachtungen begeben wir uns daher wieder in das durch

$$\vec{P} = \vec{0} \quad (16.140)$$

definierte *Schwerpunktsystem*. Dort gilt für die Energie:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha . \quad (16.141)$$

Rotationsinvarianz. Bei äußerer Abgeschlossenheit ist das physikalische System – infolge Isotropie des Raumes – invariant gegen beliebige Rotationen $\vec{\alpha} = \alpha \hat{u}$, wo α der Drehwinkel ist und \hat{u} die Richtung der Drehachse kennzeichnet. Der dazugehörige Symmetrieoperator ist ($r = \text{rotation}$)

$$\Lambda_r = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\alpha}} . \quad (16.142)$$

Die Erzeugende \vec{J} hat hier die Bedeutung des *Gesamtdrehimpulses*:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \vec{x}_1 \wedge \vec{p}_1 + \vec{x}_2 \wedge \vec{p}_2 + \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \\ &= \vec{X} \wedge \vec{P} + \vec{x} \wedge \vec{p} + \vec{s}_1 + \vec{s}_2 . \end{aligned} \quad (16.143)$$

Hierbei ist $\vec{X} \wedge \vec{P}$ der mit der Schwerpunktbewegung verknüpfte Bahndrehimpuls des Gesamtsystems, auch *äußerer Drehimpuls* des Systems. Die Summe der weiteren Terme ist gleich dem *inneren Drehimpuls* des Systems. Er setzt sich zusammen aus dem Bahndrehimpuls $\vec{x} \wedge \vec{p}$ der Relativbewegung sowie aus den Spins \vec{s}_1 und \vec{s}_2 der beiden Fragmenten. Letztere setzen sich ihrerseits i. a. wieder aus Bahndrehimpuls- und Spinanteilen zusammen. Vgl. (15.57).

Im *Schwerpunktsystem* reduziert sich wegen (16.140) der Gesamtdrehimpuls \vec{J} zum inneren Drehimpuls

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} , \quad (16.144)$$

wo zur Abkürzung gesetzt wurde:

$$\vec{l} = \vec{x} \wedge \vec{p} \quad (16.145)$$

und

$$\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 . \quad (16.146)$$

Für den Rotationsoperator ergibt sich im Schwerpunktsystem:

$$\Lambda_r = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\alpha}} . \quad (16.147)$$

Im Unterschied zu den Komponenten von \vec{P} vertauschen die Komponenten von \vec{J} bzw. \vec{j} untereinander *nicht*. Vielmehr gilt:

$$[j_x, j_y] = i \hbar j_z , \quad [j_y, j_z] = i \hbar j_x , \quad [j_z, j_x] = i \hbar j_y . \quad (16.148)$$

Folglich kommutieren die Rotationen Λ_r und Λ'_r bezüglich zweier verschiedener Raumrichtungen *nicht* miteinander; es gibt somit kein System simultaner Eigenvektoren von

Λ_r und Λ'_r . Anders ausgedrückt: Es gibt kein System simultaner Eigenvektoren der entsprechenden Drehimpulskomponenten j_α und $j'_{\alpha'}$. Man muss sich bei der Spezifizierung der $\varphi_{E,\lambda}$ mit *einer* Raumrichtung bzw. *einer* \vec{j} -Komponente begnügen. Üblicherweise wählt man die z -Richtung bzw. die Komponente j_z . Die $\varphi_{E,\lambda}$ sind also im Falle der Rotationsinvarianz Zustände mit scharfem j_z -Wert; dieser ändert sich beim Stoßprozess nicht.

Spezifikation der $\varphi_{E,\lambda}$: Nach dem Vorhergehenden vertauscht j_z mit H_0 und S und ist somit Erhaltungsgröße. Ferner kann man zeigen (qum. Drehimpulstheorie): Die Observablen \vec{j}^2 , \vec{l}^2 , \vec{s}^2 kommutieren untereinander und mit j_z , H_0 . \vec{j}^2 vertauscht ferner mit S und ist somit ebenfalls Erhaltungsgröße. Letzteres gilt i. a. nicht für \vec{l}^2 , \vec{s}^2 , diese Observablen sind also i. a. keine Erhaltungsgrößen. Damit ergibt sich für die $\varphi_{E,\lambda}$ folgende Spezifikation (gekoppelte Zustände gemäß Kap. 11):

$$|j, m; k, l, s, \beta\rangle \quad (16.149)$$

mit

$$\begin{aligned} (\vec{j}^2 - \hbar^2 j(j+1)) |j, m; k, l, s, \beta\rangle &= 0 \\ (j_z - \hbar m) |j, m; k, l, s, \beta\rangle &= 0 \\ (\vec{l}^2 - \hbar^2 l(l+1)) |j, m; k, l, s, \beta\rangle &= 0 \\ (\vec{s}^2 - \hbar^2 s(s+1)) |j, m; k, l, s, \beta\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (16.150)$$

Ferner ist die H_0 -Eigenwertgleichung (16.106) erfüllt, wo E durch (16.141) gegeben ist mit $p = \hbar k$ und $\alpha = \{s, \beta\}$. λ steht für die Quantenzahlen j und m .

Für die T -Matrix folgt nach (16.118):

$$(j', m'; k', l', s', \beta' | T | j, m; k, l, s, \beta) = \delta_{j'j} \delta_{m'm} t_j(k', l', s', \beta'; k, l, s, \beta) \quad (16.151)$$

Die beiden Kronecker-Symbole bringen die Erhaltung von \vec{j} bzw. j_z zum Ausdruck.

Die T -Matrixelemente (16.151) hängen nicht von m ab. Das ist plausibel, weil keine Raumrichtung ausgezeichnet ist; es lässt sich aber auch formal beweisen. Wir führen den *Beweis* für die S -Matrix:

$$[S, \Lambda] = 0 \quad \Rightarrow \quad [S, \vec{j}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [S, j_\pm] = 0 \quad (16.152)$$

mit $j_\pm = j_x \pm i j_y$ und

$$\begin{aligned} j_\pm |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ \Rightarrow \quad j_\mp j_\pm |j, m\rangle &= \hbar^2 (j(j+1) - m(m \pm 1)) |j, m\rangle; \end{aligned} \quad (16.153)$$

es folgt

$$\begin{aligned} (j, m|S|j, m) &= \frac{1}{\hbar^2 (j(j+1) - m(m \pm 1))} (j, m|j_{\mp} S j_{\pm}|j, m) \\ &= (j, m \pm 1|S|j, m \pm 1) \end{aligned} \quad (16.154)$$

wegen $j_{\mp}^{\pm} = j_{\pm}$, woraus die Unabhängigkeit der S -Matrix und damit der T -Matrix von m folgt, das ist die *Behauptung*.

Beim Übergang von der $|j, m; k, l, s, \beta\rangle$ -Basis zur „physikalischen“ $|\vec{k}, \alpha\rangle$ -Basis geht die Diagonalität bzgl. der Drehimpulsquantenzahlen j, m verloren. Vgl. (16.120). Mit

$$\begin{aligned} |\vec{k}, \alpha\rangle &= |\hat{k}, k, s, m_s, \beta\rangle \\ &= \sum_{l, m_l} |k, l, m_l, s, m_s, \beta\rangle \langle l, m_l|\hat{k}\rangle \\ &= \sum_{l, m_l, j, m} i^l |j, m; k, l, s, \beta\rangle (j, m|l, m_l, s, m_s) Y_{l m_l}^*(\hat{k}) \end{aligned} \quad (16.155)$$

folgt

$$\begin{aligned} T(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) &= \sum_{j, m} \sum_{l', m'_l, s', m'_s} \sum_{l, m_l} i^{-l'+l} \langle l', m'_l, s', m'_s|j, m\rangle (j, m|l, m_l, s, m_s) \\ &\quad \times t_j(k', l', s', \beta'; k, l, s, \beta) Y_{l' m'_l}(\hat{k}') Y_{l m_l}^*(\hat{k}). \end{aligned} \quad (16.156)$$

Einsetzen der Entwicklung (16.156) in Gleichung (16.88) führt – zusammen mit einer entsprechenden Zerlegung von $V(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha)$ – auf ein Integralgleichungssystem zur Bestimmung der $t_j(k', l', s', \beta'; k, l, s, \beta)$. Dieses geben wir hier nicht allgemein an, sondern nur für den Spezialfall der

Potenzialstreuung: $s = 0 \Rightarrow j = l, m = m_l; \beta$ entfällt. (16.151) reduziert sich zu

$$\langle k', l', m'|T|k, l, m\rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} t_l(k', k); \quad (16.157)$$

(16.155) vereinfacht sich zu

$$|\vec{k}\rangle = \sum_{l, m} i^l |k, l, m\rangle Y_{l m}^*(\hat{k}) \quad (16.158)$$

und (16.156) zu

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_{l, m} t_l(k', k) Y_{l m}(\hat{k}') Y_{l m}^*(\hat{k}). \quad (16.159)$$

Zusammen mit

$$V(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_{l,m} v_l(k', k) Y_{lm}(\hat{k}') Y_{lm}^*(\hat{k}) \quad (16.160)$$

folgt aus (16.88) für die *Partialwellen-T-Matrizen* $t_l(k', k)$ die *Integralgleichung*:

$$t_l(k', k) = v_l(k', k) + \int_0^\infty dk'' k''^2 v_l(k', k'') \frac{1}{E + i0 - \hbar^2 k''^2 / 2m} t_l(k'', k) . \quad (16.161)$$

Die Winkelintegration über \hat{k}'' wurde mit Hilfe der Orthogonalität der Kugelfunktionen erledigt. Siehe die Anmerkung am Ende von Kap. 9.

Die Rotationsinvarianz ermöglicht die Partialwellenentwicklung (16.159). Daraus folgt mit (8.87):

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{1}{4\pi} \sum_l (2l+1) t_l(k', k) P_l(\hat{k}', \hat{k}) . \quad (16.162)$$

T hängt also – statt von den *sechs* Variablen \vec{k}', \vec{k} – nur von den *drei* Variablen k', k und $\hat{k}' \cdot \hat{k}$ ab. Gleichung (16.162) ist die off-shell-Verallgemeinerung der Partialwellenentwicklung (9.155). Beachte, dass $T(\vec{k}', \vec{k})$ bzw. $t_l(k', k)$ parametrisch von E abhängt und dass im Allgemeinen gilt:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \neq \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \neq E . \quad (16.163)$$

Die Entwicklung (16.159) ermöglicht die Reduktion der *dreidimensionalen* Integralgleichung (16.88) für $T(k', \vec{k})$ auf die *eindimensionale* Integralgleichung (16.161) für $t_l(k', k)$. Darin liegt eine beträchtliche mathematische Vereinfachung.

Inversionsinvarianz. Betrachte den Operator der Raumspiegelung am Koordinatenursprung (Inversion):

$$\Lambda = P$$

mit – siehe (15.87, 88) –

$$P^2 = \mathbb{1}, \quad P = P^{-1} = P^+ . \quad (16.164)$$

P ist sowohl unitär als auch selbstadjungiert. Eigenwerte ± 1 ; die entsprechenden Eigenvektoren werden als Zustände gerader bzw. ungerader *Parität* bezeichnet.

Bei Inversion ändern polare Vektoren (Ort, Impuls) gemäß (15.89) das Vorzeichen:

$$\begin{aligned} P \vec{x} P^+ &= -\vec{x} \\ P \vec{p} P^+ &= -\vec{p} \end{aligned} \quad (16.165)$$

während axiale Vektoren (Drehimpuls, Spin) gemäß (15.90) unverändert bleiben:

$$\begin{aligned} P \vec{l} P^+ &= \vec{l} \\ P \vec{s} P^+ &= \vec{s} \end{aligned} \quad (16.166)$$

Die Inversion ist eine Symmetrieoperation im Sinne von (16.123, 124):

$$P H_0 P^+ = H_0, \quad P V P^+ = V \quad \Rightarrow \quad P H P^+ = H, \quad (16.167)$$

d. h.

$$[P, H_0] = 0, \quad [P, V] = 0 \quad \Rightarrow \quad [P, H] = 0. \quad (16.168)$$

P ist also Konstante der Bewegung. Das gilt generell für die elektromagnetische und die starke Wechselwirkung (also für die Atomphysik bzw. den größten Teil der Kernphysik); es gilt i. a. *nicht* für die schwache Wechselwirkung. Keine Darstellung von P gemäß (16.125), da *diskrete* Symmetrie (keine Erzeugende).

P vertauscht mit dem S -Operator:

$$[P, S] = 0. \quad (16.169)$$

Beim Stoßprozess bleibt die Parität erhalten. Seien φ_a, φ_b Zustände definierter Parität (+1 oder -1):

$$P \varphi_a = p_a \varphi_a, \quad P \varphi_b = p_b \varphi_b. \quad (16.170)$$

Dann gilt für die S -Matrix:

$$\langle \varphi_b | S | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | P^+ S P | \varphi_a \rangle = p_b p_a \langle \varphi_b | S | \varphi_a \rangle. \quad (16.171)$$

Wenn also $S_{ba} \neq 0$ ist (erlaubter Prozess), muss gelten:

$$p_b p_a = 1 \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} p_b = p_a = +1 \\ \text{oder} \\ p_b = p_a = -1, \end{aligned} \quad (16.172)$$

also jedenfalls $p_b = p_a$. Das gleiche gilt für die T -Matrix. Paritätserhaltung!

Beispiel für Zustände definierter Parität – vgl. (15.95) –

$$P Y_{lm}(\hat{k}) = Y_{lm}(-\hat{k}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{k}) \quad (16.173)$$

$$\Rightarrow P |klm\rangle = (-1)^l |klm\rangle, \quad (16.174)$$

d. i. gerade Parität für gerades l , ungerade Parität für ungerades l .

Die „physikalischen“ Basiszustände $|\vec{k}, \alpha\rangle$ besitzen *keine* definierte Parität; hier gilt

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}', \alpha' | S | \vec{k}, \alpha \rangle &= \langle \vec{k}', \alpha' | P^+ S P | \vec{k}, \alpha \rangle \\ &= p_{\alpha'} p_{\alpha} \langle -\vec{k}', \alpha' | S | -\vec{k}, \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (16.175)$$

p_{α} ist die innere Parität der Fragmente vor dem Stoß, $p_{\alpha'}$ entsprechend nach dem Stoß. Für die T -Matrix folgt

$$T(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) = p_{\alpha'} p_{\alpha} T(-\vec{k}', \alpha'; -\vec{k}, \alpha). \quad (16.176)$$

Potenzialstreuung: α entfällt, und es gilt

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = T(-\vec{k}', -\vec{k}), \quad (16.177)$$

d. h. die Streuamplitude für den Prozess $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ ist gleich der Streuamplitude für den Prozess $-\vec{k} \rightarrow -\vec{k}'$.

Zeitumkehrinvarianz. Betrachte den Operator der *Bewegungsumkehr*:

$$\Lambda = \Theta$$

mit – siehe (15.98) –

$$\begin{aligned} \Theta \vec{x} \Theta^+ &= \vec{x} \\ \Theta \vec{p} \Theta^+ &= -\vec{p}, \end{aligned} \quad (16.178)$$

entsprechend der klm. Vorstellung von Bewegungsumkehr: $\vec{x} \rightarrow \vec{x}$, $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$; d. h. Erhaltung der Ortskoordinaten, Vorzeichenwechsel der Impulskoordinaten.

Für den Bahndrehimpuls $\vec{l} = \vec{x} \wedge \vec{p}$ folgt

$$\Theta \vec{l} \Theta^+ = -\vec{l}; \quad (16.179)$$

analog fordert man gemäß (15.99) für den Spin das Transformationsverhalten

$$\Theta \vec{s} \Theta^+ = -\vec{s} . \quad (16.180)$$

Der Operator Θ ist *antiunitär*:

- Θ ist gemäß (15.3) *antilinear* (unitäre Operatoren sind linear):

$$\Theta (\alpha \varphi + \beta \psi) = \alpha^* \Theta \varphi + \beta^* \Theta \psi . \quad (16.181)$$

- Θ bildet \mathcal{H} eindeutig auf \mathcal{H} ab und erhält dabei die Norm (wie bei unitären Operatoren):

$$\Theta^+ \Theta = \Theta \Theta^+ = \mathbb{1} . \quad (16.182)$$

Die Antilinearität erzwingt für den adjungierten Operator Θ^+ die Definition

$$(\varphi, \Theta \psi) = (\Theta^+ \varphi, \psi)^* , \quad (16.183)$$

statt der bei Linearität üblichen Definition ohne den Übergang zum Konjugiert-Komplexen.

Die Antilinearität von Θ kann auf verschiedene Weisen begründet werden. Zum Beispiel durch die Forderung nach Invarianz der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (damit Unschärfebeziehungen) gegenüber Bewegungsumkehr. Eindimensional gilt

$$x p - p x = i \hbar ; \quad (16.184)$$

mit (16.178, 182) folgt

$$-x p + p x = \Theta i \hbar \Theta^+ . \quad (16.185)$$

(16.185) geht nur dann in (16.184) über, wenn Θ antilinear ist. Zusammen mit der Forderung nach Erhaltung der Norm (Erhaltung der Messwahrscheinlichkeiten) und nach Eindeutigkeit der Abbildung $\mathcal{H} \xrightarrow{\Theta} \mathcal{H}$ folgt die Antiunitarität von Θ .

Das Streusystem sei invariant gegen Bewegungsumkehr:

$$\Theta H_0 \Theta^+ = H_0 , \quad \Theta V \Theta^+ = V \quad \Rightarrow \quad \Theta H \Theta^+ = H , \quad (16.186)$$

d. h.

$$[\Theta, H_0] = 0 , \quad [\Theta, V] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\Theta, H] = 0 ; \quad (16.187)$$

dann folgt:

$$\Theta e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Theta^+ = e^{+\frac{i}{\hbar} H t} \quad (16.188)$$

mit der im Anschluss an (15.108) diskutierten Konsequenz (15.109):

Wenn ein Zustand ψ zur Zeit $t = 0$ infolge der zeitlichen Entwicklung nach einer Zeit t in den Zustand χ übergeht, also

$$\chi = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi \quad (16.189)$$

gilt, dann läuft die zeitliche Entwicklung für die bewegungsumgekehrten Zustände invers vom Zustand $\Theta \chi$ zum Zustand $\Theta \psi$, denn es ist

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Theta \chi = \Theta \psi . \quad (16.190)$$

Dem entspricht in der KLM, dass ein Massenpunkt (bei geschwindigkeitsunabhängigen Kräften) alle möglichen Bahnen in beiden Richtungen durchlaufen kann.

Formal bedeutet nach (16.188) die Bewegungsumkehr einen Übergang von t nach $-t$, d. h. eine „Umkehr der Zeitrichtung“. Deshalb wird Θ auch als Operator der *Zeitumkehr* oder *Zeitspiegelung* bezeichnet, und der diskutierte physikalische Sachverhalt wird durch die Formulierung, dass in der Physik keine Zeitrichtung ausgezeichnet ist, zum Ausdruck gebracht.

Die Wirkungsweise von Θ hängt von der gewählten *Darstellung* ab:

- Für die Ortsdarstellung folgt aus (16.178):

$$\begin{aligned} \Theta |\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle \quad \Rightarrow \quad \Theta |\psi\rangle &= \Theta \int d^3 x \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \\ &= \int d^3 x \psi^*(\vec{x}) \Theta |\vec{x}\rangle \\ &= \int d^3 x \psi^*(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \end{aligned} \quad (16.191)$$

$$\Rightarrow \quad \Theta \psi(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x}) . \quad (16.192)$$

Die Anwendung von Θ bewirkt hier also einfach den Übergang zum Konjugiert-Komplexen; siehe (15.5).

- Für die Impulsdarstellung ergibt sich aus (16.178): entsprechend:

$$\Theta |\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle \quad \Rightarrow \quad \Theta \psi(\vec{p}) = \psi^*(-\vec{p}) . \quad (16.193)$$

- Ferner hat man wegen (16.179):

$$\Theta |k, l, m\rangle = (-1)^{l+m} |k, l, -m\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \Theta \psi(k, l, m) = (-1)^{l+m} \psi^*(k, l, -m) . \quad (16.194)$$

Zur Begründung des Phasenfaktors $(-1)^{l+m}$ siehe die empfohlene Literatur. Für Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustände ($l = s = 1/2$, $m = m_s = \pm 1/2$) folgt

$$\Theta |m_s\rangle = i \sigma_y |m_s\rangle \quad \Rightarrow \quad \Theta \psi(m_s) = -i \sigma_y \psi^*(m_s) . \quad (16.195)$$

Diese Darstellung von Θ ergibt sich auch direkt aus (16.180). σ_y ist die zur y -Komponente gehörige Paulische Spinmatrix. Siehe (15.103).

Wir erörtern im Folgenden die Auswirkungen der Zeitumkehrvarianz auf S - und T -Matrix. Mit (16.188) folgt für die Møller-Operatoren (16.18, 20):

$$\begin{aligned} \Theta \Omega_{ein, aus} \Theta^+ &= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \Theta e^{\frac{i}{\hbar} H t} \Theta^+ \Theta e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Theta^+ \\ &= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ &= \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ &= \Omega_{aus, ein} . \end{aligned} \quad (16.196)$$

Ω_{ein} geht also in Ω_{aus} über und Ω_{aus} in Ω_{ein} . Für den S -Operator folgt daraus wegen (16.50):

$$\begin{aligned} \Theta S \Theta^+ &= (\Theta \Omega_{aus} \Theta^+)^+ \Theta \Omega_{ein} \Theta^+ \\ &= \Omega_{ein}^+ \Omega_{aus} \\ &= S^+ . \end{aligned} \quad (16.197)$$

Θ transformiert S in den inversen Operator S^+ ; also $[\Theta, S] \neq 0!$

Für die S -Matrix folgt:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | S | \varphi_a \rangle &= \langle \varphi_b, \Theta^+ S^+ \Theta \varphi_a \rangle \\ &= \langle \Theta \varphi_b, S^+ \Theta \varphi_a \rangle^* \\ &= \langle \Theta \varphi_a | S | \Theta \varphi_b \rangle ; \end{aligned} \quad (16.198)$$

eine entsprechende Gleichung gilt für die T -Matrix:

$$T_{ba} = T_{\Theta a, \Theta b} . \quad (16.199)$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Stoßprozess $\varphi_a \rightarrow \varphi_b$ ist also gleich der Wahrscheinlichkeitsamplitude für die umgekehrte Bewegung $\Theta \varphi_b \rightarrow \Theta \varphi_a$.

Die $\varphi_{b,a}$ sind die simultanen Eigenvektoren eines Satzes verträglicher Observablen A_1, A_2, \dots (z. B. H_0, \vec{J}^2, \dots):

$$A_i \varphi_a = a_i \varphi_a , \quad i = 1, 2, \dots \quad (16.200)$$

Für diese Observablen gilt in der Regel:

$$\Theta A_i \Theta^+ = \pm A_i , \quad i = 1, 2, \dots , \quad (16.201)$$

d. h. gerades oder ungerades Verhalten bei Bewegungsumkehr; folglich

$$A_i (\Theta \varphi_a) = \pm a_i (\Theta \varphi_a) , \quad i = 1, 2, \dots \quad (16.202)$$

Die bewegungsumgekehrten Zustände $\Theta \varphi_a$ sind demnach ebenfalls simultane Eigenvektoren der A_i , jedoch – statt zu den Eigenwerten $a = \{a_1, a_2, \dots\}$ – zu den Eigenwerten $\bar{a} = \{\pm a_1, \pm a_2, \dots\}$ gehörig:

$$\Theta \varphi_a = \eta_a \varphi_{\bar{a}} . \quad (16.203)$$

η_a ist ein Faktor vom Betrage 1 (Phasenfaktor).

Damit folgt für die S -Matrix:

$$S_{ba} = \eta_a^* \eta_b S_{\bar{a}\bar{b}} ; \quad (16.204)$$

Entsprechendes gilt für die T -Matrix. Die Phasenfaktoren verschwinden bei der Betragsquadratbildung, d. h. im differentiellen Wirkungsquerschnitt.

In der $|\vec{k}, \alpha\rangle$ -Basis hat man

$$\langle \vec{k}', \alpha' | S | \vec{k}, \alpha \rangle = \eta_\alpha^* \eta_{\alpha'} \langle -\vec{k}, \bar{\alpha} | S | -\vec{k}', \bar{\alpha}' \rangle \quad (16.205)$$

bzw.

$$T(\vec{k}', \alpha'; \vec{k}, \alpha) = \eta_\alpha^* \eta_{\alpha'} T(-\vec{k}, \bar{\alpha}; -\vec{k}', \bar{\alpha}') . \quad (16.206)$$

Die Gln. (16.198, 204, 205) bezeichnet man als **Reziprozitätstheorem**. Man spricht auch von *mikroskopischer Reversibilität*.

Bei reiner *Potenzialstreuung* ist

$$T(\vec{k}', \vec{k}) = T(-\vec{k}, -\vec{k}') , \quad (16.207)$$

d. h. die Streuamplitude für den Prozess $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ ist gleich der Streuamplitude für den Prozess $-\vec{k}' \rightarrow -\vec{k}$. In diesem Falle sind Inversionsinvarianz (gemäß (16.177)) und Zeitumkehrinvarianz (gemäß (16.206)) Konsequenzen der Rotationsinvarianz, wonach $T(\vec{k}, \vec{k}')$ nur vom Winkel zwischen \vec{k}' und \vec{k} abhängt. In komplizierteren Streusituationen sind diese drei Symmetrien unabhängig voneinander.

Permutationsinvarianz bei Systemen identischer Teilchen; bedeutsam z. B. bei Elektron-Atom-Stößen.

17 Dirac-Theorie: Relativistisches Elektron

In Kap. 9 wurde – als Grundaufgabe der Atom- und Kernphysik – die nichtrelativistische Quantenmechanik eines Teilchens im Zentralpotenzial erörtert. Für den Spezialfall des *Elektrons* im Zentralpotenzial – Grundaufgabe des Zentralfeldmodells der Atome – sind die Ausführungen von Kap. 9 in zweifacher Hinsicht zu korrigieren und zu erweitern:

- Zum einen ist die Bewegung des atomaren Elektrons im Rahmen einer *relativistischen Theorie* zu beschreiben.
- Zum anderen ist zu berücksichtigen, dass das Elektron einen *Spin* mit $s = 1/2$ besitzt.

Beide Anforderungen erfüllt die „Diracsche Theorie des Elektrons“.

Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im elektromagnetischen Feld:

$$H \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \quad (17.1)$$

mit dem Hamilton-Operator (siehe (2.14))

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 - e \phi(\vec{x}, t), \quad (17.2)$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}; \quad (17.3)$$

nicht *kovariant*, d. h. nicht *Lorentz-invariant*.

Dirac-Gleichung von gleicher Gestalt:

$$H_D \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \quad (17.4)$$

mit geeignetem Hamilton-Operator H_D und geeigneter Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$. Die Gestalt (17.1, 4) der Wellengleichung liefert – zusammen mit der Selbstdjungiertheit von H bzw. H_D – eine Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Daran soll beim Übergang von der nichtrelativistischen zur relativistischen Theorie nicht gerüttelt werden.

Wie ist H_D zu wählen? Wir betrachten zunächst den **Spezialfall des freien Elektrons**:

-
1. Die Wellengleichung (17.4) soll dem speziellen Relativitätsprinzip genügen (Kovarianz).
 2. Energie und Impuls sollen in der Beziehung stehen:

$$E = \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4} . \quad (17.5)$$

Später ist die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld – unter Wahrung der Kovarianz der Wellengleichung (17.4) – zu berücksichtigen.

Zu 1. Kovarianz erfordert gleiche Behandlung der drei Ortskoordinaten mit der Zeitkoordinate. Wegen $\partial / \partial t$ ist Linearität in $\partial / \partial x$, $\partial / \partial y$, $\partial / \partial z$ zu fordern, d. h. Linearität im Impuls (wegen $\vec{p} \sim \partial / \partial \vec{x}$). Daher der *Ansatz*:

$$H_D = c \sum_{k=1}^3 \alpha_k p_k + \beta m c^2 \quad (17.6)$$

mit (nicht notwendig vertauschbaren) dimensionslosen selbstadjungierten Operatoren α_1 , α_2 , α_3 und β ; c = Lichtgeschwindigkeit, m = Ruhemasse des Elektrons.

Zu 2. Gleichung (17.5) impliziert die Forderung

$$H_D^2 = c^2 \sum_k p_k^2 + m^2 c^4 . \quad (17.7)$$

Zusammen mit (17.6) legt diese Forderung die algebraischen Eigenschaften der Operatoren α_k und β fest:

$$H_D^2 = c^2 \sum_{k,l} \alpha_k \alpha_l p_k p_l + m c^3 \sum_k (\alpha_k \beta + \beta \alpha_k) p_k + m^2 c^4 \beta^2 \quad (17.8)$$

$$\Rightarrow \quad \alpha_k^2 = 1$$

$$\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 0 \quad (k \neq l) \quad (17.9)$$

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0$$

$$\beta^2 = 1 .$$

Mit $\alpha_4 = \beta$ lassen sich die Gleichungen (17.9) wie folgt zusammenfassen:

$$\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 2 \delta_{\mu\nu} , \quad \mu, \nu = 1, 2, 3, 4 . \quad (17.10)$$

Darstellung der Operatoren α_μ durch 4×4 -Matrizen mit

$$\text{Spur } \alpha_\mu = 0. \quad (17.11)$$

Eindeutigkeit bis auf unitäre Transformation:

$$\alpha'_\mu = U \alpha_\mu U^{-1}. \quad (17.12)$$

Dirac-Pauli-Darstellung mit Hilfe der Paulischen 2×2 -Matrizen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ sowie der zweidimensionalen Einheitsmatrix σ_0 :

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (17.13 \text{ a})$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad (17.13 \text{ b})$$

also – siehe (11.14, 20) –

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (17.14)$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Diese Matrizen erfüllen die Forderung (17.10). Die physikalische Bedeutung der Pauli-Dirac-Darstellung ergibt sich aus einer Betrachtung über den Spin des Elektrons:

Mit $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ lässt sich der Spinoperator \vec{S} wie folgt definieren ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} \vec{S} &= \frac{1}{4i} \vec{\alpha} \wedge \vec{\alpha} \\ &= \frac{1}{4i} (\alpha_2 \alpha_3 - \alpha_3 \alpha_2, \alpha_3 \alpha_1 - \alpha_1 \alpha_3, \alpha_1 \alpha_2 - \alpha_2 \alpha_1) \\ &= \frac{1}{2i} (\alpha_2 \alpha_3, \alpha_3 \alpha_1, \alpha_1 \alpha_2) \end{aligned} \quad (17.15)$$

wegen (17.10); es folgt

$$\begin{aligned}\vec{S} \wedge \vec{S} &= -\frac{1}{4}(\alpha_3 \alpha_1 \alpha_1 \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1, \dots) \\ &= -\frac{1}{4}(\alpha_3 \alpha_2 - \alpha_2 \alpha_3, \dots) \\ \Rightarrow \quad \vec{S} \wedge \vec{S} &= i \vec{S}.\end{aligned}\tag{17.16}$$

Das sind die Vertauschungsrelationen für die Komponenten von Drehimpulsoperatoren – siehe (8.22) und (11.1). Betragsquadrat:

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 &= -\frac{1}{4}(\alpha_2 \alpha_3 \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_1 \alpha_2) \\ &= \frac{1}{4}(\mathbb{1} + \mathbb{1} + \mathbb{1}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \mathbb{1}.\end{aligned}\tag{17.17}$$

\vec{S} kann somit als Spinoperator des Elektrons mit der Spinquantenzahl $s = 1/2$ interpretiert werden.

Die bisherige Argumentation war unabhängig von der Darstellung der Dirac-Operatoren $\vec{\alpha}$, β . In der Dirac-Pauli-Darstellung ist

$$\vec{S} = \frac{1}{4i} \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4i} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \wedge \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \wedge \vec{\sigma} \end{pmatrix};\tag{17.18 a}$$

mit $\vec{\sigma} \wedge \vec{\sigma} = 2i \vec{\sigma}$ gemäß (11.18) folgt

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix};\tag{17.18 b}$$

speziell gilt

$$S_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{17.19}$$

mit den Eigenwerten $\pm 1/2$. Die Dirac-Pauli-Darstellung kann definiert werden als diejenige Darstellung, in der β und S_3 diagonal sind.

Die **Dirac-Gleichung des freien Elektrons** ist also durch die Wellengleichung (17.4) gegeben mit einem Hamilton-Operator H_D gemäß (17.6). Die darin auftretenden Operatoren $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ und β haben in der Dirac-Pauli-Darstellung die Gestalt (17.14). Die Vierdimensionalität der entsprechenden Matrizen hat zur Folge, dass die Wellenfunktion in der Dirac-Theorie vier Komponenten hat: *Dirac-Spinor*, *Bispinor*; zur Abkürzung einfach *Spinor* (obwohl damit sonst die zweikomponentigen Wellenfunktionen der nicht-relativistischen Theorie gemeint sind):

$$\psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}, t) \\ \psi_2(\vec{x}, t) \\ \psi_3(\vec{x}, t) \\ \psi_4(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \sum_{\mu=1}^4 \chi_\mu \psi_\mu(\vec{x}, t) \quad (17.20)$$

mit den Basisspinoren

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots; \quad (17.21)$$

diese sind Eigenspinoren von S_3 :

$$\begin{aligned} S_3 \chi_\mu &= +\frac{1}{2} \chi_\mu, & \mu &= 1, 3 \\ S_3 \chi_\mu &= -\frac{1}{2} \chi_\mu, & \mu &= 2, 4. \end{aligned} \quad (17.22)$$

ψ_1 und ψ_3 sind also Wahrscheinlichkeitsamplituden dafür, dass das Elektron die S_3 -Komponente $+1/2$ hat, während ψ_2 und ψ_4 Wahrscheinlichkeitsamplituden dafür sind, dass das Elektron die S_3 -Komponente $-1/2$ hat. Diese Beziehung zwischen Spinorkomponente und Spinstellung ist typisch für die Dirac-Pauli-Darstellung; sie gilt nicht allgemein. Die Unterscheidung zwischen ψ_1 und ψ_3 sowie zwischen ψ_2 und ψ_4 hängt von weiteren Zustandsspezifikationen ab (siehe z. B. unten: Elektron im Zentralpotenzial).

Kovarianz der freien Dirac-Gleichung:

$$\left(\frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \beta m c^2 \right) \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t). \quad (17.23)$$

Multiplikation von links mit $\beta / \hbar c$ ergibt

$$\left(-i \beta \vec{\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \beta \frac{\partial}{\partial i c t} + \frac{m c}{\hbar} \right) \psi(\vec{x}, t) = 0. \quad (17.24)$$

Mit den Abkürzungen

$$\gamma_k = -i\beta\alpha_k = i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3$$

$$\gamma_4 = \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}$$
(17.25)

sowie bei Einführung der Minkowskischen Raumzeit-Koordinaten

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z, \quad x_4 = ict$$
(17.26)

erhält man die freie Dirac-Gleichung in der Gestalt

$$\left(\sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x_\nu) = 0.$$
(17.27)

Die Kovarianz dieser Gleichung ergibt sich aus ihrem Vierertensorcharakter (o. Bew.). Die γ -Matrizen sind durch die Beziehung

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}$$
(17.28)

$\mu, \nu = 1, \dots, 4$, untereinander verknüpft; vgl. (11.19).

Zum freien Dirac-Teilchen werden am Ende dieses Kapitels weitere Ausführungen gemacht.

Die **Wechselwirkung** des Elektrons **mit dem elektromagnetischen Feld** ist durch das Viererpotenzial

$$A_\mu = \left(\vec{A}, \frac{i}{c} \phi \right)$$
(17.29 a)

charakterisiert; sie ist durch die Ersetzung

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + e A_\mu$$
(17.29 b)

zu berücksichtigen; vgl. nichtrelativistische QUM. Daraus resultiert die – weiterhin kovariante – **Dirac-Gleichung**:

$$\sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + e A_\mu \right) \psi(x_\nu) = imc\psi(x_\nu).$$
(17.30)

Diese Gleichung lässt sich auf die Gestalt (17.4) umschreiben mit dem Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H_D &= c \sum_{k=1}^3 \alpha_k (p_k + e A_k) - e \phi + \beta m c^2 \\ &= c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}(\vec{x}, t)) - e \phi(\vec{x}, t) + \beta m c^2, \end{aligned} \quad (17.31)$$

wobei im Auge zu behalten ist, dass $\psi(\vec{x}, t)$ gemäß (17.20) ein vierkomponentiger Dirac-Spinor ist.

Die **stationären Zustände** des Systems ergeben sich – sofern \vec{A} und ϕ nicht von der Zeit abhängen – wie im nichtrelativistischen Fall durch den Separationsansatz

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (17.32)$$

$$\Rightarrow \quad H_D \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}). \quad (17.33)$$

Das ist die **stationäre Dirac-Gleichung**.

Wir betrachten nun den **Spezialfall** – entsprechend der Situation eines atomaren Elektrons – eines rein elektrischen, zeitunabhängigen Zentralkraftfeldes:

$$\vec{A} = \vec{0}, \quad -e \phi = V(r) \quad (17.34)$$

$$\Rightarrow \quad H_D = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + V(r) + \beta m c^2. \quad (17.35)$$

Dieser Hamilton-Operator erweist sich als invariant gegenüber Drehungen des Koordinatensystems.

Wir betrachten eine infinitesimale Drehung um den Winkel ε bezüglich einer durch den Einheitsvektor \hat{u} gekennzeichneten Achse. Nach (15.55) ist der unitäre Operator, der diese Drehung kennzeichnet, gegeben durch

$$U = \mathbb{1} - i \varepsilon \hat{u} \cdot \vec{J}. \quad (17.36)$$

Als Erzeugende der Drehung ist der Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (17.37)$$

zu wählen, wo \vec{L} der Bahndrehimpuls und \vec{S} der Spin gemäß (17.15) ist; siehe auch (15.56).

Für den transformierten Hamilton-Operator erhält man

$$\begin{aligned} U H_D U^{-1} &= (\mathbb{1} - i \varepsilon \hat{u} \cdot (\vec{L} + \vec{S})) (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + V(r) + \beta m c^2) (\mathbb{1} + i \varepsilon \hat{u} \cdot (\vec{L} + \vec{S})) \\ &= H_D - i \varepsilon c [\hat{u} \cdot (\vec{L} + \vec{S}), \vec{\alpha} \cdot \vec{p}], \end{aligned} \quad (17.38)$$

da $\vec{L} + \vec{S}$ mit $V + \beta m c^2$ kommutiert. Nun gilt mit (8.26):

$$\begin{aligned} [L_j, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] &= \sum_k \alpha_k [L_j, p_k] = i \sum_{k,l} \varepsilon_{jkl} \alpha_k p_l = i (\vec{\alpha} \wedge \vec{p})_j \\ \Rightarrow [\vec{L}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] &= i \vec{\alpha} \wedge \vec{p}; \end{aligned} \quad (17.39)$$

entsprechend:

$$\begin{aligned} [S_j, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] &= \sum_k [S_j, \alpha_k] p_k = i \sum_{k,l} \varepsilon_{jkl} \alpha_l p_k = -i (\vec{\alpha} \wedge \vec{p})_j \\ \Rightarrow [\vec{S}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] &= -i \vec{\alpha} \wedge \vec{p}. \end{aligned} \quad (17.40)$$

Wegen (17.39) und (17.40) verschwindet der Zusatzterm auf der rechten Seite von (17.38), und der Beweis für die Invarianz von H_D ist erbracht:

$$U H_D U^{-1} = H_D. \quad (17.41)$$

Die vorstehenden Betrachtungen liefern – zusätzlich zu den Vertauschungsrelationen (17.16) – ein weiteres Argument für die Interpretation des durch (17.15) definierten Operators \vec{S} als Spinoperator. Man kann umgekehrt \vec{S} als denjenigen Operator einführen, der zusammen mit \vec{L} für Rotationsinvarianz von H_D sorgt.

Aus (17.41) folgt zusammen mit (17.36), dass H_D mit \vec{J} vertauscht:

$$[H_D, \vec{J}] = \vec{0}. \quad (17.42)$$

Folglich können die stationären Dirac-Zustände im Zentralpotenzial nach den Quantenzahlen j und m des Gesamtdrehimpulses klassifiziert werden. Dagegen vertauscht H_D weder mit \vec{L} noch mit \vec{S} – wie aus der Herleitung von (17.41) deutlich wird:

$$[H_D, \vec{L}] = -i c \vec{\alpha} \wedge \vec{p} \quad (17.43)$$

bzw.

$$[H_D, \vec{S}] = i c \vec{\alpha} \wedge \vec{p}. \quad (17.44)$$

Ferner folgt mit (17.43):

$$\begin{aligned}
 [H_D, \vec{L}^2] &= i c (\vec{L} \cdot \vec{p} \wedge \vec{\alpha} - \vec{\alpha} \wedge \vec{p} \cdot \vec{L}) \\
 &= i c \sum_{j,k,l} \varepsilon_{jkl} \underbrace{(L_j p_k + p_k L_j)}_{\neq 0} \alpha_l \\
 &\neq 0 ;
 \end{aligned} \tag{17.45}$$

mit (17.44) erhält man jedoch:

$$\begin{aligned}
 [H_D, \vec{S}^2] &= i c (\vec{S} \cdot \vec{\alpha} \wedge \vec{p} - \vec{p} \wedge \vec{\alpha} \cdot \vec{S}) \\
 &= i c \sum_{j,k,l} \varepsilon_{jkl} \underbrace{(S_j \alpha_k + \alpha_k S_j)}_{=0} p_l \\
 &= 0 .
 \end{aligned} \tag{17.46}$$

Daher können die stationären Dirac-Zustände im Zentralpotential *nicht* nach den Quantenzahlen l und m_l des Bahndrehimpulses klassifiziert werden. Was den Spin betrifft, so ist $s = 1/2$ eine gute Quantenzahl, $m_s = \pm 1/2$ dagegen nicht.

Parität. Eine weitere Konstante der Bewegung ist durch den relativistischen Paritätsoperator gegeben:

$$P = \beta P_0 , \tag{17.47}$$

wo P_0 der Operator der Raumkoordinateninversion $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ ($\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$) ist, d. i. der nichtrelativistische Paritätsoperator. Wegen

$$\beta \vec{\alpha} \beta^{-1} = -\vec{\alpha} \tag{17.48}$$

und

$$P_0 \vec{p} P_0^{-1} = -\vec{p} \tag{17.49}$$

kommutiert P mit H_D :

$$[H_D, P] = 0 . \tag{17.50}$$

Folglich lassen sich die stationären Dirac-Zustände im Zentralpotenzial – außer nach den Eigenwerten von \vec{J}^2 , J_z und \vec{S}^2 – auch noch nach den Eigenwerten von P klassifizieren. Wegen $P^2 = 1$ sind die Eigenwerte $+1$ und -1 möglich. Beachte, dass die vier Operatoren \vec{J}^2 , J_z , \vec{S}^2 und P paarweise kommutieren!

Ansatz:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_I \\ \psi_{II} \end{pmatrix} , \tag{17.51}$$

wo ψ_I und ψ_{II} zweikomponentige Spinoren mit den Bahndrehimpulsquantenzahlen l_1 bzw. l_2 sind. Mit (17.13 b) folgt:

$$\beta \psi = \begin{pmatrix} \psi_I \\ -\psi_{II} \end{pmatrix}, \quad (17.52)$$

somit

$$P \psi = \begin{pmatrix} P_0 \psi_I \\ -P_0 \psi_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-1)^{l_1} \psi_I \\ (-1)^{l_2+1} \psi_{II} \end{pmatrix}. \quad (17.53)$$

Damit ψ Eigenfunktion von P ist, müssen ψ_I und ψ_{II} entgegengesetzte Parität (bzgl. P_0) haben: l_1 gerade $\Rightarrow l_2$ ungerade, l_1 ungerade $\Rightarrow l_2$ gerade. Bei Vorgabe der halbzahligen Quantenzahl j des Gesamtdrehimpulses gibt es die beiden Möglichkeiten

$$l_1 = j + \frac{1}{2} \omega, \quad l_2 = j - \frac{1}{2} \omega, \quad \omega = \pm 1 \quad (17.54)$$

$$\Rightarrow P \psi = (-1)^{j+\frac{1}{2}\omega} \begin{pmatrix} \psi_I \\ (-1)^{1-\omega} \psi_{II} \end{pmatrix} = (-1)^{j+\frac{1}{2}\omega} \psi. \quad (17.55)$$

Die *Paritätsquantenzahl* ω legt zusammen mit j die *relativistische Parität* von ψ fest: $(-1)^{j+\frac{1}{2}\omega}$.

Die stationären Dirac-Zustände im Zentralpotenzial werden durch die Quantenzahlen j , m und ω (sowie $s = 1/2$) spezifiziert. Mit – vgl. (11.112) –

$$\mathcal{Y}_{l_j m}(\vartheta, \varphi) = \sum_{m_s} \langle l, m_l; \frac{1}{2}, m_s | l, \frac{1}{2}; j, m \rangle Y_{l m_l}(\vartheta, \varphi) \chi_{m_s}, \quad (17.56)$$

wobei $m_l = m - m_s$ zu beachten ist, schreibt man den *Zentralfeldspinor* in Kugelkoordinaten in der Gestalt

$$\psi_{j m \omega}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \mathcal{Y}_{l_1 j m}(\vartheta, \varphi) \\ i G(r) \mathcal{Y}_{l_2 j m}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (17.57)$$

wobei l_1 und l_2 durch (17.54) gegeben sind; der Faktor i dient der Vereinfachung späterer Formeln. $\psi_{j m \omega}$ erfüllt simultan die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 \psi_{j m \omega} &= j(j+1) \psi_{j m \omega} \\ J_z \psi_{j m \omega} &= m \psi_{j m \omega} \\ \vec{S}^2 \psi_{j m \omega} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \psi_{j m \omega} \end{aligned} \quad (17.58)$$

$$P \psi_{j m \omega} = (-1)^{j+\frac{1}{2}\omega} \psi_{j m \omega}$$

mit $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots, m = -j, -j + 1, \dots, +j$ und $\omega = \pm 1$.

Anmerkung: Wie im Zusammenhang mit den Gln. (17.20) ff diskutiert wurde, sind die Komponenten ψ_1, ψ_3 und ψ_2, ψ_4 des Dirac-Spinors in der Pauli-Dirac-Darstellung Wahrscheinlichkeitsamplituden für die Spinstellungen spin-up bzw. spin-down. Das ist beim Zentralfeldspinor (17.56, 57) der Fall. Der Unterschied zwischen ψ_1, ψ_2 und ψ_3, ψ_4 liegt im Bahndrehimpuls l_1 bzw. l_2 des Elektrons.

Die radialen Funktionen $F(r)$ und $G(r)$ sind aus der stationären Dirac-Gleichung (17.33) zu bestimmen:

$$H_D \psi_{j m \omega} = E \psi_{j m \omega} . \quad (17.59)$$

Einsetzen von (17.57) in (17.59) führt nach einiger Rechnung – die hier nicht dargelegt werden soll – auf das gekoppelte Differentialgleichungssystem:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{(j + 1/2)\omega}{r} \right) F(r) &= \frac{E + m c^2 - V(r)}{\hbar c} G(r) \\ \left(-\frac{d}{dr} + \frac{(j + 1/2)\omega}{r} \right) G(r) &= \frac{E - m c^2 - V(r)}{\hbar c} F(r) . \end{aligned} \quad (17.60)$$

Die Interpretation von $\psi^\dagger \psi = \sum_{\mu=1}^4 \psi_\mu^* \psi_\mu$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte – wie in der nichtrelativistischen Theorie – erfordert die *Normierung*

$$\int_0^\infty (|F(r)|^2 + |G(r)|^2) dr = 1 . \quad (17.61)$$

$|F(r)|^2$ ist die radiale Dichte für den Bahndrehimpuls l_1 , $|G(r)|^2$ ist die radiale Dichte für den Bahndrehimpuls l_2 .

Wir betrachten nun den Spezialfall des **Coulomb-Potenzials**:

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} . \quad (17.62)$$

Mit den Abkürzungen

$$\alpha = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137,0359\dots} \quad (17.63 \text{ a})$$

für die dimensionslose *Feinstrukturkonstante* sowie

$$\kappa_1 = \frac{m c^2 + E}{\hbar c} , \quad \kappa_2 = \frac{m c^2 - E}{\hbar c} \quad (17.63 \text{ b})$$

lauten die Gln. (17.60):

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{(j + 1/2)\omega}{r} \right) F(r) &= \left(\kappa_1 + \frac{Z\alpha}{r} \right) G(r) \\ \left(-\frac{d}{dr} + \frac{(j + 1/2)\omega}{r} \right) G(r) &= \left(-\kappa_2 + \frac{Z\alpha}{r} \right) F(r) \end{aligned} \quad (17.64)$$

mit $\kappa_1, \kappa_2 > 0$ für gebundene Zustände.

Für $r \rightarrow \infty$ hat man das asymptotische Verhalten $F(r), G(r) \rightarrow e^{-\kappa r}$ mit

$$\kappa = \sqrt{\kappa_1 \kappa_2} = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} \quad (17.65)$$

mit $\kappa > 0$ für gebundene Zustände. Also machen wir den Ansatz:

$$\begin{aligned} \rho &= \kappa r \\ F(\rho) &= f(\rho) e^{-\rho}, \quad G(\rho) = g(\rho) e^{-\rho}; \end{aligned} \quad (17.66)$$

damit erhält man für $f(\rho), g(\rho)$ die Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\rho} - 1 + \frac{(j + 1/2)\omega}{\rho} \right) f(\rho) &= \left(\frac{\kappa_1}{\kappa} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right) g(\rho) \\ \left(-\frac{d}{d\rho} + 1 + \frac{(j + 1/2)\omega}{\rho} \right) g(\rho) &= \left(-\frac{\kappa_2}{\kappa} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right) f(\rho). \end{aligned} \quad (17.67)$$

Reihenentwicklung für die Funktionen $f(\rho)$ und $g(\rho)$:

$$\begin{aligned} f(\rho) &= \rho^s \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{\nu} \\ g(\rho) &= \rho^s \sum_{\nu} b_{\nu} \rho^{\nu}. \end{aligned} \quad (17.68)$$

Substitution von (17.68) in (17.67) liefert gekoppelte Rekursionsformeln:

$$\begin{aligned} (s + \nu + (j + 1/2)\omega) a_{\nu} - a_{\nu-1} - \frac{\kappa_1}{\kappa} b_{\nu-1} - Z\alpha b_{\nu} &= 0 \\ (s + \nu - (j + 1/2)\omega) b_{\nu} - b_{\nu-1} - \frac{\kappa_2}{\kappa} a_{\nu-1} + Z\alpha a_{\nu} &= 0. \end{aligned} \quad (17.69)$$

Für $\nu = 0$ ist $a_{\nu-1} = b_{\nu-1} = 0$ und folglich

$$(s + (j + 1/2)\omega) a_0 - Z\alpha b_0 = 0 \quad (17.70)$$

$$(s - (j + 1/2)\omega) b_0 + Z\alpha a_0 = 0 ;$$

daraus ergibt sich

$$s = \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2\alpha^2} . \quad (17.71)$$

Man kann zeigen (mit (17.69)): Die Normierungsbedingung (17.61) ist nur dann erfüllbar, wenn die Reihen (17.68) nach endlich vielen Termen abbrechen. Das maximale ν werde mit n' bezeichnet. Dann folgt aus der ersten der Gln. (17.69), wenn man dort $\nu = n' + 1$ setzt:

$$\kappa a_{n'} = -\kappa_1 b_{n'} . \quad (17.72 \text{ a})$$

Aus der zweiten der Gln. (17.69) folgt äquivalent:

$$\kappa b_{n'} = -\kappa_2 a_{n'} . \quad (17.72 \text{ b})$$

Andererseits kann man aus (17.69) – durch Elimination von $a_{\nu-1}$ und $b_{\nu-1}$ – einen Zusammenhang zwischen a_ν und b_ν für beliebiges ν herleiten: Multiplikation der ersten Gleichung (17.69) mit κ , Multiplikation der zweiten Gleichung (17.69) mit κ_1 , Subtraktion sowie $\kappa = \sqrt{\kappa_1 \kappa_2}$ ergibt:

$$(\kappa(s + \nu + (j + 1/2)\omega) - \kappa_1 Z\alpha) a_\nu = (\kappa_1(s + \nu - (j + 1/2)\omega) + \kappa Z\alpha) b_\nu ; \quad (17.73)$$

für $\nu = n'$ erhält man

$$(\kappa(s + n' + (j + 1/2)\omega) - \kappa_1 Z\alpha) a_{n'} = (\kappa_1(s + n' - (j + 1/2)\omega) + \kappa Z\alpha) b_{n'} . \quad (17.74)$$

Aus (17.72 a, 74) folgt

$$(\kappa_1^2 - \kappa^2) Z\alpha = 2\kappa_1 \kappa (s + n') ;$$

mit (17.63 b, 65) wird daraus

$$E Z\alpha = \sqrt{m^2 c^4 - E^2} (s + n') ;$$

somit erhält man schließlich

$$E = \frac{m c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{s+n'}\right)^2}} , \quad n' = 0, 1, 2, \dots \quad (17.75)$$

Die Forderung nach Normierbarkeit des Dirac-Spinors impliziert also Quantisierung der Energie – wie im nichtrelativistischen Fall!

Führt man ein:

- die *Hauptquantenzahl*

$$n = n' + j + 1/2 , \quad (17.76)$$

- die Abkürzung

$$\varepsilon_j = j + 1/2 - \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2} , \quad (17.77)$$

so erhält man mit (17.71) aus (17.75) die folgende Formel für die *Energieniveaus*:

$$E_{nj} = \frac{m c^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - \varepsilon_j)^2}}} , \quad (17.78)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2 ;$$

bezüglich der Quantenzahlen m und ω liegt – als Konsequenz der Rotationsinvarianz – Entartung vor.

Die relativistischen *Energiezustände* des Elektrons im Coulombschen Zentralpotenzial sind wie folgt charakterisiert bzw. symbolisiert (ohne m):

n	j	ω	l_1	l_2	Parität: $(-1)^{l_1}$	Symbol
1	$\frac{1}{2}$	-1	0	1	+	$1 s_{1/2}$
2	$\frac{1}{2}$	-1	0	1	+	$2 s_{1/2}$
		+1	1	0	-	$2 p_{1/2}$
	$\frac{3}{2}$	-1	1	2	-	$2 p_{3/2}$
3	$\frac{1}{2}$	-1	0	1	+	$3 s_{1/2}$
		+1	1	0	-	$3 p_{1/2}$
	$\frac{3}{2}$	-1	1	2	-	$3 p_{3/2}$
		+1	2	1	+	$3 d_{3/2}$
	$\frac{5}{2}$	-1	2	3	+	$3 d_{5/2}$

Anmerkungen:

1. Zu jedem j gibt es

$$\omega = -1 \Rightarrow l_1 = j - 1/2, \quad l_2 = j + 1/2$$

$$\omega = +1 \Rightarrow l_1 = j + 1/2, \quad l_2 = j - 1/2.$$

Ausnahme: Zu $j = n - 1/2$ gibt es nur $\omega = -1$. In diesem Fall ist nämlich $n' = 0$, folglich wegen (17.70, 72 a):

$$\frac{a_0}{b_0} = \frac{Z \alpha}{s + (j + 1/2) \omega} = -\frac{\kappa_1}{\kappa}.$$

Mit $\alpha > 0$, $j + 1/2 > s > 0$, $\kappa_1 > 0$, $\kappa > 0$ folgt die Behauptung $\omega < 0$.

Maximaler l_1 -Wert: $l_1 = n - 1$ ($l_2 = n$).

2. Parität und Symbol richten sich nach der „nicht guten“ Quantenzahl l_1 ; diese geht im nichtrelativistischen Limes in die „gute“ Quantenzahl l über (siehe unten).

3. Vorstehende Theorie nur gültig, falls

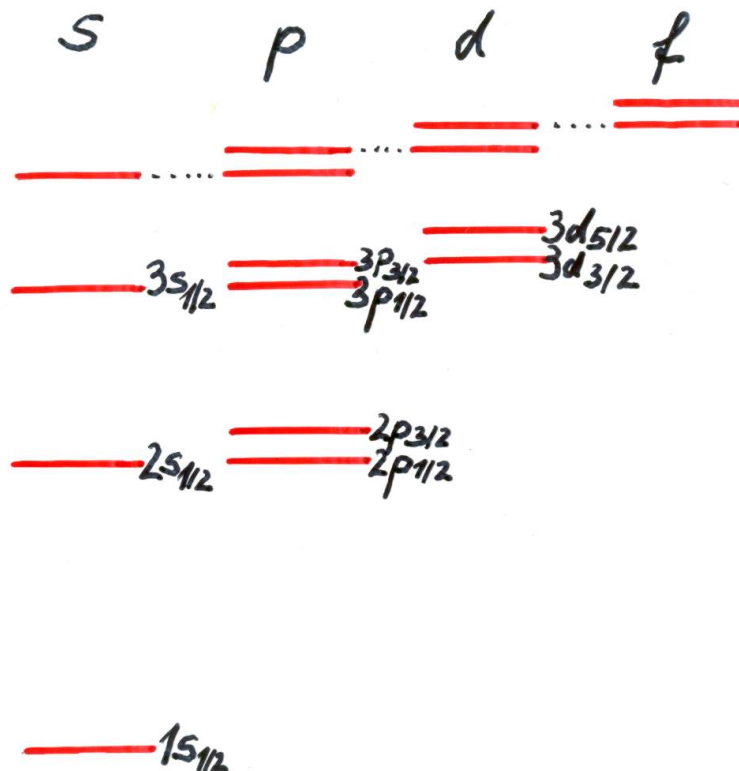
a) $E < m c^2$ (siehe (17.63 b)) ,

b) $Z < \frac{j+1/2}{\alpha}$ (siehe (17.71)) .

Die erste Bedingung bedeutet Beschränkung auf gebundene Zustände; bei Verletzung der zweiten Bedingung ist ein anderer Lösungsansatz erforderlich.

4. Die Entartung der Zustände $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ (und anderer vergleichbarer Zustands-paare) ist durch die sog. *Lamb-Shift* aufgehoben; siehe *Quantenelektrodynamik*.

Termschema – qualitativ:



• Abbildung 17.1 •

Die Zustände zu $l_1 > 0$ sind durch *Spin-Bahn-Wechselwirkung* aufgespalten, woraus die *Feinstruktur* des Spektrums resultiert (siehe Gln. (11.104) ff und (13.35)).

Nichtrelativistische Approximation der Energieniveaus durch Entwicklung nach der kleinen Größe $Z\alpha$ (die für $c \rightarrow \infty$ gegen null geht):

$$\varepsilon_j = \frac{Z^2 \alpha^2}{2(j + 1/2)} - \dots ; \quad (17.79)$$

damit folgt aus (17.78):

$$\begin{aligned} E_{nj} &= m c^2 \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2(n - \varepsilon_j)^2} + \frac{3 Z^4 \alpha^4}{8(n - \varepsilon_j)^4} - \dots \right) \\ &= m c^2 \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n(j + 1/2)} + \dots \right) + \frac{3 Z^4 \alpha^4}{8n^4} (1 + \dots) - \dots \right) \\ &= m c^2 \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) - \dots \right). \end{aligned} \quad (17.80)$$

Dieses Resultat ist korrekt bis zur Ordnung $(Z\alpha)^4$.

Vergleich mit der nichtrelativistischen Formel (9.71):

$$E_{nj} = m c^2 + E_n \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right). \quad (17.81)$$

Hierbei wurde die Beziehung $m c^2 \alpha^2 = \hbar^2 / m r_1^2$ benutzt. $m c^2 =$ Ruhenergie, $E_n =$ nichtrelativistische Energie. Der Bohrsche Radius r_1 wurde in (9.60) definiert.

Die radialen Funktionen $F(r)$ und $G(r)$ werden im Rahmen dieser Vorlesung nicht weiter berechnet.

Pauli-Gleichung

Abschließend soll eine nichtrelativistische Approximation der Dirac-Gleichung hergeleitet werden, oder umgekehrt: die Schrödinger-Gleichung mit relativistischen Korrekturen. Stationäre Gleichung (17.31,33):

$$\left(c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) + \beta m c^2 + V \right) \psi = E \psi \quad (17.82)$$

mit $\vec{A} = \vec{A}(\vec{x})$ und $V = V(\vec{x}) = -e \phi(\vec{x})$. In Dirac-Pauli-Darstellung hat man nach (17.13):

$$\left\{ c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) + m c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + V \right\} \begin{pmatrix} \psi_I \\ \psi_{II} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_I \\ \psi_{II} \end{pmatrix}. \quad (17.83)$$

Spaltet man gemäß

$$E = E' + m c^2 \quad (17.84)$$

die Ruhenergie von der Energie ab, so folgt:

$$c \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \psi_{II} + V \psi_I = E' \psi_I \quad (17.85)$$

$$c \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \psi_I + V \psi_{II} = (E' + 2 m c^2) \psi_{II} .$$

Betrachte die zweite der Gln. (17.85):

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= \frac{1}{2 m c^2 + E' - V} c \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \psi_I \\ &= \frac{1}{2 m c} f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \psi_I \end{aligned} \quad (17.86)$$

mit

$$f = \frac{1}{1 + \frac{E' - V}{2 m c^2}} = 1 - \frac{E' - V}{2 m c^2} + \dots \quad (17.87)$$

Im *nichtrelativistischen Grenzfall* (c sehr groß) wird aus (17.86):

$$\psi_{II} \simeq \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{p} + e \vec{A}}{2 m c} \psi_I , \quad (17.88)$$

d. h. ψ_{II} ist um einen Faktor der Größenordnung v/c kleiner als ψ_I . Daher die Bezeichnung von ψ_I als *große Komponente*, von ψ_{II} als *kleine Komponente* des Dirac-Spinors ψ . Wesentlicher Beitrag zu ψ durch ψ_I , relativistische Korrekturen durch ψ_{II} .

Durch Einsetzen von (17.86) in die erste der Gln. (17.85) erhält man für die *große Komponente* die Gleichung:

$$\left(\frac{1}{2 m} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) + V \right) \psi_I = E' \psi_I . \quad (17.89)$$

Hierfür ist eine nichtrelativistische Approximation zu entwickeln.

Mit $X f X = f X^2 + [X, f] X$ folgt:

$$\begin{aligned} &\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \\ &= f \left(\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \right)^2 + \left[\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}), f \right] \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \\ &= f \left(\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \right)^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{f'}{r} (\vec{\sigma} \cdot \vec{x}) \left(\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e \vec{A}) \right) , \end{aligned} \quad (17.90)$$

wobei von

$$V = V(r) \Rightarrow f = f(r) \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \frac{f'}{r} \vec{x} \quad (17.91 \text{ a})$$

Gebrauch gemacht wurde.

Zur weiteren Auswertung benutzen wir die für zwei beliebige Vektoren \vec{a} und \vec{b} gültige Identität (ohne Beweis)

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \vec{\sigma} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}) . \quad (17.91 \text{ b})$$

Damit wird aus (17.90):

$$\begin{aligned} & \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}) \\ &= f \left((\vec{p} + e\vec{A})^2 + i e \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{A} + \vec{A} \wedge \vec{p}) \right) \\ &+ \frac{\hbar}{i} \frac{f'}{r} \left(\vec{x} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) + i \vec{\sigma} \cdot \vec{x} \wedge (\vec{p} + e\vec{A}) \right) . \end{aligned} \quad (17.92)$$

Hier kann noch

$$\vec{p} \wedge \vec{A} + \vec{A} \wedge \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \text{rot } \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{B} \quad (17.93)$$

gesetzt werden; man erhält dann schließlich:

$$\begin{aligned} & \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) \\ &= f \left((\vec{p} + e\vec{A})^2 + e \hbar \vec{S} \cdot \vec{B} \right) \\ &+ \frac{\hbar}{i} \frac{f'}{r} \left(\vec{x} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) + i \vec{\sigma} \cdot \vec{x} \wedge (\vec{p} + e\vec{A}) \right) . \end{aligned} \quad (17.94)$$

Im *extrem nichtrelativistischen Grenzfall* ($c \rightarrow \infty$) ist $f = 1$ und $f' = 0$ zu setzen. Der Operator (17.94) reduziert sich dann auf den ersten Term (ohne den Faktor f), und (17.89) geht – bei Berücksichtigung von $\vec{\sigma} = 2\vec{S}$ – in die stationäre **Pauli-Gleichung** über (vgl. die zeitabhängige Pauli-Gleichung (11.72)):

$$\left(\frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{e\hbar}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} + V \right) \psi_I = E' \psi_I . \quad (17.95)$$

Die kleine Komponente verschwindet in diesem Limes: $\psi_{II} = 0$.

Der zu \vec{S} proportionale Term beschreibt die Wechselwirkung des mit dem Spin verknüpften magnetischen Momentes

$$\vec{\mu} = -g \mu_B \vec{S} \quad (17.96)$$

($\mu_B = e \hbar / 2 m =$ Bohrsches Magneton, $g = 2 = g$ -Faktor) mit dem äußeren Magnetfeld:

$$\frac{e \hbar}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (17.97)$$

Die Dirac-Theorie liefert also auch den richtigen g -Faktor des Elektronenspins – bis auf sog. *Strahlungskorrekturen*, die in der Quantenelektrodynamik diskutiert werden: $g = 2,002319 \dots$

Wir betrachten nun *relativistische Effekte der Ordnung* $(v/c)^2$. Zur Vereinfachung wird $\vec{A} = \vec{0}$ gesetzt. Mit (17.94) geht (17.89) dann über in

$$\left(f \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{2im} \frac{f'}{r} (\vec{x} \cdot \vec{p} + i \vec{\sigma} \cdot \vec{x} \wedge \vec{p}) + V \right) \psi_I = E' \psi_I. \quad (17.98)$$

Es genügt nun nicht, $f = 1$ und $f' = 0$ zu setzen, vielmehr hat man

$$f = 1 - \frac{E' - V}{2m c^2} \simeq 1 - \frac{\vec{p}^2}{4m^2 c^2} \quad (17.99)$$

bzw.

$$f' = \frac{V'}{2m c^2} \quad (17.100)$$

zu berücksichtigen. Damit erhält man aus (17.98):

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} V'(r) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2 r} V'(r) \vec{S} \cdot \vec{L} + V(r) \right) \psi_I = E' \psi_I, \quad (17.101)$$

wobei $\vec{S} = \vec{\sigma} / 2$ und $\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} / \hbar$ gesetzt wurden.

Zu den Termen im Hamilton-Operator von (17.101):

1. Term: nichtrelativistische kinetische Energie.
2. Term: relativistische Korrektur 1. Ordnung der kinetischen Energie:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - m c^2 \\ &= m c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} - 1 \right) \\ &= m c^2 \left(\frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} + \dots \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots, \end{aligned} \quad (17.102)$$

auch als „relativistischer Massenzuwachs“ deutbar.

3. Term: *Darwin-Term*, ohne klassisches Analogon.
4. Term: Spin-Bahn-Wechselwirkung, d. i. die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Elektrons mit dem inneren Magnetfeld, welches das Elektron in seinem Ruhesystem auf Grund der Kernbewegung „sieht“; siehe Gln. (11.104) ff. Der dort ad hoc eingeführte Thomas-Faktor 1/2 wird von der Dirac-Theorie richtig mitgeliefert.
5. Term: potenzielle Energie.

Die Approximation \simeq in (17.99) ist nicht zwingend. Die sog. *Foldy-Wouthuysen-Transformation* ermöglicht eine systematische, formal befriedigende Herleitung von Approximationen der Dirac-Gleichung bis zu beliebigen Ordnungen von v/c . Da diese Methode unverändert (17.95) bzw. (17.101) liefert, gehen wir darauf nicht weiter ein.

Wir wollen nun für den Fall des *Coulomb-Potenzials* (17.62) die Energiekorrekturen berechnen, welche durch die relativistischen Zusatzterme (2., 3. und 4. Term) in (17.101) gegenüber dem nichtrelativistischen Resultat (9.71) entstehen. Die Rechnung erfolgt mit Hilfe der Störungstheorie 1. Ordnung.

Wir schreiben (17.101) in der folgenden Gestalt (' an E , Index I an ψ weggelassen) mit:

$$(H_0 + H_1 + H_2 + H_3)\psi = E\psi \quad (17.103)$$

mit

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (17.104)$$

sowie

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2} \\ &= -\frac{1}{2m c^2} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m}\right)^2 \\ &= -\frac{1}{2m c^2} \left(H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)^2 \end{aligned} \quad (17.105)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \frac{\partial}{\partial r} \quad (17.106)$$

$$H_3 = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (17.107)$$

Das ungestörte Problem (siehe Kap. 13)

$$H_0 \psi_0 = E_0 \psi_0 \quad (17.108)$$

hat nach (9.71) und (17.56) die Lösung:

$$E_0 = E_n = -\frac{\hbar^2}{2m r_1^2} \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}, \quad (17.109)$$

$$\begin{aligned} \psi_0 &= R_{nl}(r) \mathcal{Y}_{ljm}(\vartheta, \varphi) \\ &= R_{nl}(r) \begin{pmatrix} Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi) \langle m-1/2, 1/2 | j, m \rangle \\ Y_{l, m+1/2}(\vartheta, \varphi) \langle m+1/2, 1/2 | j, m \rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (17.110)$$

wobei j die Werte $l + 1/2$ und $l - 1/2$ annehmen kann. Die obere Komponente in (17.110) ist die spinup-Amplitude, die untere Komponente ist die spindown-Amplitude. Die auftretenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten können (11.102) entnommen werden.

Berechnung der Energiekorrekturen: In Störungstheorie 1. Ordnung ist

$$\Delta E_i = \langle n l j m | H_i | n l j m \rangle, \quad i = 1, 2, 3. \quad (17.111)$$

1. Relativistischer Massenzuwachs:

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= -\frac{1}{2m c^2} \int_0^\infty R_{nl}(r) \left(E_n + \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right)^2 R_{nl}(r) r^2 dr \\ &= -\frac{1}{2m c^2} \left(E_n^2 + 2 E_n \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + \left(\frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right). \end{aligned} \quad (17.112)$$

Mit (ohne Beweis, vgl. (9.80))

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{Z}{r_1} \frac{1}{n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} = \left(\frac{Z}{r_1} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l + 1/2)} \quad (17.113)$$

und (wegen (9.60) und (17.63 a))

$$\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_1} = \frac{\hbar^2}{2m r_1^2} = m c^2 \alpha^2 \quad (17.114)$$

erhält man (wegen (17.109)):

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= -\frac{1}{2m c^2} \left(E_n^2 + 2 m c^2 E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} + (m c^2)^2 \frac{Z^4 \alpha^4}{n^3 (l + 1/2)} \right) \\ &= -|E_n| \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{l + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) < 0. \end{aligned} \quad (17.115)$$

Durch den relativistischen Massenzuwachs wird die l -Entartung in (17.109) aufgehoben. Bei gegebener Hauptquantenzahl n sind die Zustände mit kleinerem Bahndrehimpuls l stärker gebunden. Keine j -Abhängigkeit des Effekts.

2. *Darwin-Term:*

$$\begin{aligned}\Delta E_2 &= -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{16 \pi \varepsilon_0 m^2 c^2} \int_0^\infty R_{nl}(r) \frac{\partial}{\partial r} R_{nl}(r) dr \\ &= -\frac{\hbar^2 e^2 Z}{32 \pi \varepsilon_0 m^2 c^2} R_{nl}^2(r) \Big|_0^\infty \\ &= \frac{\hbar^2 e^2 Z}{32 \pi \varepsilon_0 m^2 c^2} R_{n0}^2(0) \delta_{l0} .\end{aligned}\quad (17.116)$$

Mit (siehe (9.76) für $Z = 1$ und $n = 1, 2$, allgemein (9.73))

$$R_{n0}^2(0) = \frac{4 Z^3}{r_1^3 n^3} \quad (17.117)$$

folgt (wiederum mit (17.109, 114)):

$$\Delta E_2 = |E_n| \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \delta_{l0} \geq 0 . \quad (17.118)$$

Diese Korrektur wird also nur für s -Elektronen wirksam.

3. *Spin-Bahn-Wechselwirkung:*

$$\Delta E_3 = \frac{\hbar^2 Z e^2}{8 \pi \varepsilon_0 m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} (l j m | \vec{L} \cdot \vec{S} | l j m) . \quad (17.119)$$

Mit (ohne Beweis, vgl. (17.113))

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \left(\frac{Z}{r_1} \right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad (17.120)$$

sowie (siehe (11.109))

$$\begin{aligned}(l j m | \vec{L} \cdot \vec{S} | l j m) &= \frac{1}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} (l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}\end{aligned}\quad (17.121)$$

folgt schließlich:

$$\Delta E_3 = |E_n| \frac{Z^2 \alpha^2}{n} (1 - \delta_{l0}) \frac{1}{2l+1} \begin{cases} \frac{1}{l+1} & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l} & \text{für } j = l - \frac{1}{2} . \end{cases} \quad (17.122)$$

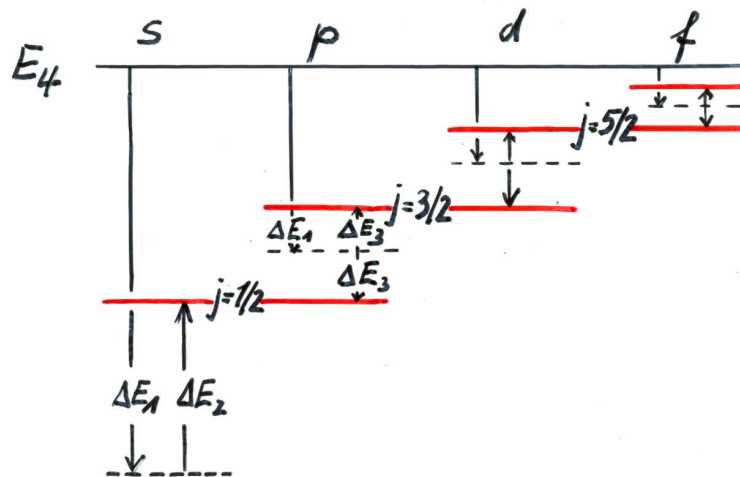
Die Spin-Bahn-Wechselwirkung führt zu einer Aufspaltung der nl -Niveaus (außer im Falle der s -Niveaus): *Feinstruktur*.

Anmerkung: Für $l = 0$ ist $\langle 1/r^3 \rangle_{nl} = \infty$ und $\langle ljm | \vec{L} \cdot \vec{S} | ljm \rangle = 0$, der Ausdruck für ΔE_3 also unbestimmt. Eine genauere Analyse zeigt, dass in diesem Fall $\Delta E_3 = 0$ ist. Dem trägt der Faktor $1 - \delta_{l0}$ in (17.122) Rechnung.

Die drei Korrekturterme ΔE_1 , ΔE_2 und ΔE_3 sind alle von der gleichen Größenordnung: $|E_n| Z^2 \alpha^2 n^{-1}$. Ihre Summe ergibt

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3 \\ &= -|E_n| \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) < 0. \end{aligned} \quad (17.123)$$

Erläuterung für $n = 4$:



• Abbildung 17.2 •

Das Resultat (17.123) entspricht genau der Approximation der exakten Energieniveaus bis zur Ordnung $(Z\alpha)^4$ gemäß (17.81). Die relativistische Korrektur (17.123) ist für alle Quantenzahlen n und j negativ.

Freies Dirac-Teilchen

Abschließend sollen noch einige Aspekte der Dynamik des freien Dirac-Teilchens (hier: des Elektrons) behandelt werden. Die stationäre Dirac-Gleichung dieses Systems ergibt

sich aus (17.82), indem man dort

$$\vec{A}(\vec{x}) = \vec{0}, \quad \phi(\vec{x}) = 0 \quad (17.124)$$

setzt; also erhält man mit (17.3):

$$\left(\frac{\hbar}{i} c \vec{\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \beta m c^2 \right) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}). \quad (17.125)$$

Der von der nichtrelativistischen Theorie her geläufige *Ansatz*

$$\psi(\vec{x}) = u(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (417.126)$$

für ein Teilchen mit dem Impuls \vec{p} führt für den konstanten Dirac-Spinor $u(\vec{p})$ auf die Gleichung

$$(c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2) u(\vec{p}) = E u(\vec{p}); \quad (4.127)$$

in Pauli-Dirac-Darstellung folgt:

$$\left\{ c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \vec{p} + m c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} u_I(\vec{p}) \\ u_{II}(\vec{p}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_I(\vec{p}) \\ u_{II}(\vec{p}) \end{pmatrix}. \quad (17.128)$$

Im Unterschied zu (17.82, 83) hat \vec{p} in (17.127, 128) nicht die Bedeutung des Impulsoperators (17.3), sondern des Impulsvektors des freien Teilchens.

Für die zweikomponentigen Spinoren u_I und u_{II} ergeben sich aus (17.128) die gekoppelten Gleichungen

$$c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_{II} + m c^2 u_I = E u_I \quad (17.129)$$

$$c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_I - m c^2 u_{II} = E u_{II};$$

diese liefern für das Verhältnis von u_I zu u_{II} die beiden äquivalenten Beziehungen

$$u_I = \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E - m c^2} u_{II}, \quad u_{II} = \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + m c^2} u_I. \quad (17.130)$$

Für den Dirac-Spinor $u(\vec{p})$ ergeben sich daraus die beiden Darstellungen:

$$u(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} u_I \\ \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + m c^2} u_I \end{pmatrix}, \quad u(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E - m c^2} u_{II} \\ u_{II} \end{pmatrix} \quad (17.131)$$

mit jeweils beliebigem konstanten Spinor u_I bzw. u_{II} ; C sind Normierungskonstanten.

Setzt man die zweite/erste der Gln. (17.130) in die erste/zweite der Gln. (17.129) ein, so erhält man für u_I und u_{II} dieselbe Gleichung, nämlich

$$c^2 (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) u_{I,II} = (E^2 - m^2 c^4) u_{I,II} . \quad (17.132)$$

Mit Hilfe der Formel (17.91 b) folgt daraus

$$c^2 p^2 u_{I,II} = (E^2 - m^2 c^4) u_{I,II} \quad (17.133)$$

mit der Konsequenz – wegen der Beliebigkeit von $u_{I,II}$ –

$$c^2 p^2 = E^2 - m^2 c^4$$

$$\Rightarrow \quad E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} . \quad (17.134)$$

Das freie Teilchen kann also sowohl positive als auch negative Energiewerte annehmen!

Man kann zeigen, dass *beide* Bispinoren (17.131) für *beide* Energien (17.134), d. h.

$$E = \pm \varepsilon , \quad \varepsilon = + \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} , \quad (17.135)$$

die Gleichung (17.128) befriedigen. Konventionell stellt man aber die Lösung zu $E > 0$ durch den ersten Bispinor dar:

$$u^{(+)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} u_I \\ \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\varepsilon + m c^2} u_I \end{pmatrix} \quad (E = +\varepsilon) , \quad (17.136 \text{ a})$$

und die Lösung zu $E < 0$ durch den zweiten Bispinor:

$$u^{(-)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} -\frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\varepsilon + m c^2} u_{II} \\ u_{II} \end{pmatrix} \quad (E = -\varepsilon) . \quad (17.136 \text{ b})$$

Konsequenz dieser Konvention: Wegen

$$\frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\varepsilon + m c^2} \longrightarrow \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2 m c} \longrightarrow 0 \quad (17.137)$$

im nichtrelativistischen Grenzfall verschwindet in diesem Limes in (17.136 a) die Komponente u_{II} und in (17.136 b) die Komponente u_I .

Für die folgenden Überlegungen ist es sinnvoll, für u_I und u_{II} die beiden Spinoren

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (17.138)$$

zu wählen. Damit ergeben sich aus (17.136) die folgenden vier linear unabhängigen Lösungen von (17.127):

$$u^{(1)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c p_3}{\varepsilon + m c^2} \\ \frac{c(p_1 + i p_2)}{\varepsilon + m c^2} \end{pmatrix} \quad (E = +\varepsilon, u_I = \chi_+) \quad (17.139 \text{ a})$$

$$u^{(2)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_1 - i p_2)}{\varepsilon + m c^2} \\ -\frac{c p_3}{\varepsilon + m c^2} \end{pmatrix} \quad (E = +\varepsilon, u_I = \chi_-) \quad (17.139 \text{ b})$$

$$u^{(3)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} -\frac{c p_3}{\varepsilon + m c^2} \\ -\frac{c(p_1 + i p_2)}{\varepsilon + m c^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (E = -\varepsilon, u_{II} = \chi_+) \quad (17.139 \text{ c})$$

$$u^{(4)}(\vec{p}) = C \begin{pmatrix} -\frac{c(p_1 - ip_2)}{\varepsilon + mc^2} \\ \frac{cp_3}{\varepsilon + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (E = -\varepsilon, u_{II} = \chi_-) . \quad (17.139 \text{ d})$$

Da die $u^{(\mu)}(\vec{p})$ mit Hilfe der σ_3 -Eigenspinoren χ_+ und χ_- konstruiert wurden, erhebt sich die Frage, ob die Bispinoren (17.139) Eigenspinoren einer Komponente der Spinobservablen \vec{S} sind. Das ist für S_3 im Allgemeinen *nicht* der Fall, wie ein Blick auf (17.21, 22) zeigt, trifft jedoch auf die Komponente S_p in p -Richtung zu. Macht man diese zur 3-Richtung, so hat man $p_1 = p_2 = 0$ zu setzen; mit $p_3 = p$ und der Abkürzung

$$\delta = \frac{cp}{\varepsilon + mc^2}, \quad 0 \leq \delta \leq 1, \quad (17.140)$$

erhält man aus (17.139) die Bispinoren:

$$u^{(1)} = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \delta \\ 0 \end{pmatrix} \quad (+\varepsilon, \uparrow) \quad (17.141 \text{ a})$$

$$u^{(2)} = C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\delta \end{pmatrix} \quad (+\varepsilon, \downarrow) \quad (17.141 \text{ b})$$

$$u^{(3)} = C \begin{pmatrix} -\delta \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (-\varepsilon, \uparrow) \quad (17.141 \text{ c})$$

$$u^{(4)} = C \begin{pmatrix} 0 \\ \delta \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (-\varepsilon, \downarrow) . \quad (17.141 \text{ d})$$

Dass es sich hierbei um Eigenspinoren von $S_p = S_3$ handelt, erkennt man mit Hilfe von (17.21, 22). Die Existenz simultaner Eigenspinoren der Energie und der Spinkomponente in p -Richtung beruht auf der Vertauschbarkeit der entsprechenden Operatoren $c\vec{p} \cdot \vec{\alpha} + mc^2\beta$ und $\hat{p} \cdot \vec{S}$.

Gibt man der Normierungskonstanten den Wert

$$C = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta^2}}, \quad (17.142)$$

dann sind die Bispinoren (17.139) orthonormiert:

$$\left(u^{(\mu)}\right)^+ u^{(\nu)} = \delta_{\mu\nu}. \quad (17.143)$$

Die Größe δ nimmt im extrem relativistischen Grenzfall den Wert 1 an; die Spinoren u_I und u_{II} treten dann im Bispinor mit gleichem Gewicht auf. Im extrem nichtrelativistischen Grenzfall ist dagegen $\delta = 0$ (siehe (17.137)); dann gehen die Bispinoren (17.141, 142) in die Bispinoren (17.21, 22) über. Der dort ungeklärte physikalische Unterschied von χ_1 und χ_3 sowie von χ_2 und χ_4 entspricht nach den vorstehenden Überlegungen einem unterschiedlichen Vorzeichen der Energie: $E = +\varepsilon$ bzw. $E = -\varepsilon$.

Mit (17.141) erhält man aus (17.126) die folgenden *freien Dirac-Zustände*:

$$\psi^{(\mu)}(\vec{x}) = u^{(\mu)}(p) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}, \quad \mu = 1, 2, 3, 4. \quad (17.144)$$

Es handelt sich um Zustände scharfen Impulses \vec{p} , scharfer Energie: $E = \pm\varepsilon$ für $\mu = 1, 2$ bzw. $3, 4$ sowie scharfer Spinkomponente in Bewegungsrichtung: $S_p = \pm\hbar/2$ für $\mu = 1, 3$ bzw. $2, 4$. Daraus ergeben sich die *stationären Zustände* (ohne eigene Normierung)

$$\begin{aligned} \psi^{(\mu)}(\vec{x}, t) &= \psi^{(\mu)}(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_\mu t} \\ &= u^{(\mu)}(p) \begin{cases} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \varepsilon(p) t)}, & \mu = 1, 2 \\ e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} + \varepsilon(p) t)}, & \mu = 3, 4; \end{cases} \end{aligned} \quad (17.145)$$

das sind für $\mu = 1, 2$ ebene Wellen in p -Richtung und für $\mu = 3, 4$ ebene Wellen in die entgegengesetzte Richtung.

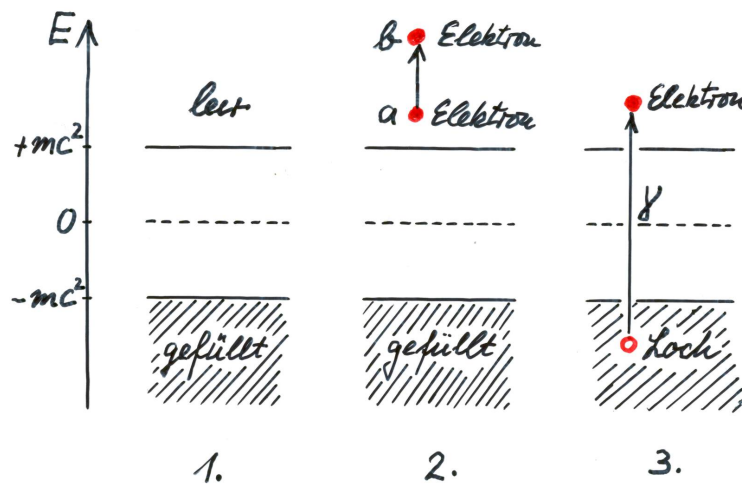
Die *allgemeine Lösung* des freien Dirac-Problems erhält man schließlich durch Superposition:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\mu=1,2} \int d^3 p \times \quad (17.146)$$

$$\times \left(a_{\mu}(\vec{p}) u^{(\mu)}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - \varepsilon(p)t)} + a_{\mu+2}(\vec{p}) u^{(\mu+2)}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} + \varepsilon(p)t)} \right).$$

Die Vierdimensionalität des Raumes der Dirac-Spinoren erfordert zu jedem Impuls \vec{p} vier Basisspinoren, d. h. zu jeder der beiden Spinstellungen werden *zwei* Energiewerte – von demselben Betrag, also positiv und negativ – benötigt.

Interpretation der Zustände positiver und negativer Energie (Dirac 1930):



• Abbildung 17.3 •

1. *Vakuum*: alle Zustände negativer Energie, d. h. $-\infty < E < -m c^2$ sind mit nicht beobachtbaren Elektronen besetzt; keine Elektronen positiver Energie vorhanden.
2. Der (beobachtbare) Einelektronenzustand entsteht dadurch, dass zum Vakuum ein Elektron positiver Energie, d. h. $+m c^2 < E < +\infty$ hinzugefügt wird, dieses Teilchen kann durch Wechselwirkung mit anderen Systemen seine Energie in dem obigen Intervall verändern: Zustand $a \rightarrow$ Zustand b . Übergang ins Vakuum wegen des Pauli-Prinzips nicht möglich.
3. Durch Absorption eines Photons hinreichend hoher Energie kann ein Elektron negativer Energie in einen Zustand positiver Energie angehoben und damit beobachtbar gemacht werden. Dadurch bleibt im Vakuum ein *Loch* zurück. Sind $-\vec{p}$,

$-\varepsilon$ und $-e$ der Impuls, die Energie bzw. die Ladung des Elektrons in seinem ursprünglichen Zustand, so wirkt das Loch wie Teilchen vom Impuls $+\vec{p}$, der Energie $+\varepsilon$ und der Ladung $+e$, d. i. ein *Positron*.

Der unter 3. beschriebene Prozess wird als *Paarerzeugung* bezeichnet; den umgekehrten Prozess – bei dem aus Gründen der Impulserhaltung *zwei* Photonen entstehen – nennt man *Elektron-Positron-Vernichtung*. Genaueres hierzu im Rahmen der Quantenelektrodynamik!

Danksagung

Ich danke Herrn Daniel Ebbeler für die sorgfältige und geduldige Erstellung der $L_A T_E X$ -Dateien nach meinen Wünschen sowie Herrn Dipl.-Phys. Achim Schulte für die engagierte Mitarbeit bei der Schlussredaktion dieses Buches.

P. Eckelt