

Quantenmechanik I & II
Scriptum zur Vorlesung
WS 2008/2009 & SS 2009

Prof. Dr. Nils Schopohl
Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik
Universität Tübingen
nils.schopohl@uni-tuebingen.de

28. August 2012

Lektorat: Simon Mayer

Inhaltsverzeichnis

1	Teilchen oder Welle?	7
2	Ort, Impuls und das Theorem von Ehrenfest	15
3	Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion für zeitunabh. Hamilton-Op.	21
4	Teilchen im Kasten	27
5	Freies Teilchen als Wellenpaket	33
6	Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)	41
7	Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)	61
8	Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip	85
9	Differentiation linearer Operatoren nach einem Parameter	95
10	Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren	103
11	Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators	135
12	Bemerkungen zur mathematischen Struktur der QM	163
13	Drehimpulsoperator in der QM	179
14	Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen	199
15	Das Wasserstoffatom	219
16	Variationsrechnung, die Feynman-Hellmann-Regel und der Virialsatz in der QM	231
17	Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen	247
	17.1 Explizite Formel für Clebsch-Gordan-Koeffizienten	262

17.2 Wigner-Eckart-Theorem	267
17.3 Landè-Faktor	277
18 Elastische Streutheorie	281
18.1 Streuphasen	287
18.2 Die Stationäre Schrödinger-Gleichung als Integralgleichung	300
18.3 Coulomb-Streuung	303
19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung	305
19.1 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren	309
19.2 Ideales Fermi-Gas bei Temperatur $T = 0$	320
19.3 Operatoren im Formalismus der Zweiten Quantisierung	324
19.4 Das Jellium-Modell des Elektronengases	339
19.5 Austauschwechselwirkung	351

Vorwort

Richard Feynman (Nobelpreis für Physik 1965) bemerkte einmal: „I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics.“

Zweck dieser Vorlesung ist es, den Studierenden darzulegen, wie man quantenmechanische Berechnungen durchführt.

Fragestellungen betreffend die Interpretation und die mit der Quantenmechanik einhergehenden Probleme in der Philosophie werden am Ende der Vorlesung (nur ganz kurz) zur Sprache kommen.

1 Teilchen oder Welle?

Wir betrachten ein einfaches kinematisches Problem der klassischen Physik. Ein Teilchen (Massenpunkt) der Masse m soll sich unter dem Einfluss einer Kraft \mathbf{F} bewegen. Wie sieht die Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$ des Teilchens als Funktion der Zeit aus?

Handelt es sich um eine **konservative Kraft**, so gilt bekanntlich

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

wobei $V(\mathbf{r})$ die potentielle Energie des Teilchens ist. In der elementaren Mechanik wird dieses Problem gelöst, indem ausgehend von einer vorgegebenen Anfangsposition \mathbf{r}_0 und vorgegebenen Anfangsgeschwindigkeit \mathbf{v}_0 zur Zeit $t = 0$ die Position $\mathbf{r}(t)$ des Teilchens zu späteren Zeiten $t > 0$ aus der **Newton'schen Bewegungsgleichung** berechnet wird:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}(t) = \mathbf{F}[\mathbf{r}(t)]. \quad (1.2)$$

Dies ist eine Anfangswertaufgabe für eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Zeit und bestimmt (im Prinzip in deterministischer Weise) die Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$ des Teilchens.

In der Quantenmechanik wird dieses Problem völlig anders angegangen. Anstelle der Newton'schen Bewegungsgleichung zur Bestimmung der Trajektorie $\mathbf{r}(t)$ des Teilchens wird eine **lineare** partielle Differentialgleichung, die sog. **Schrödinger-Gleichung**, für eine dem Teilchen zugeordnete **Wellenfunktion** $\Psi(\mathbf{r}, t)$ betrachtet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.3)$$

Als Vorfaktor der partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial t}$ und $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r_1}, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3} \right)$ tritt hier die fundamentale Konstante der Quantenmechanik auf, nämlich $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34}$ Js, wobei h das **Planck'sche Wirkungsquantum** ist. Die Zahl $i = \sqrt{-1}$ ist die imaginäre Einheit in der komplexen Zahlenebene. Zur Beschreibung physikalischer Sachverhalte werden in der Quantenmechanik also unbedingt die komplexen Zahlen benötigt. Die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ des Teilchens ist eine komplexe skalare Funktion des Orts \mathbf{r} und der Zeit t . Das Symbol $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2}$ bezeichnet den Laplace-Operator.

1 Teilchen oder Welle?

Da die Schrödinger-Gleichung eine lineare partielle Differentialgleichung ist, gilt das **Superpositionsprinzip**. Sind etwa $\Psi_I(\mathbf{r}, t)$ und $\Psi_{II}(\mathbf{r}, t)$ Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ist mit beliebigen komplexen Konstanten c_I und c_{II} auch die Linearkombination

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_I \Psi_I(\mathbf{r}, t) + c_{II} \Psi_{II}(\mathbf{r}, t) \quad (1.4)$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung.

Zur Illustration des Superpositionsprinzips in der Quantenmechanik betrachten wir ein fundamentales Experiment für freie Elektronen, siehe Abb. 1.2, das sog. Doppelspalt-Experiment. Aus einer Feldemissionsquelle treten *einzelne* Elektronen

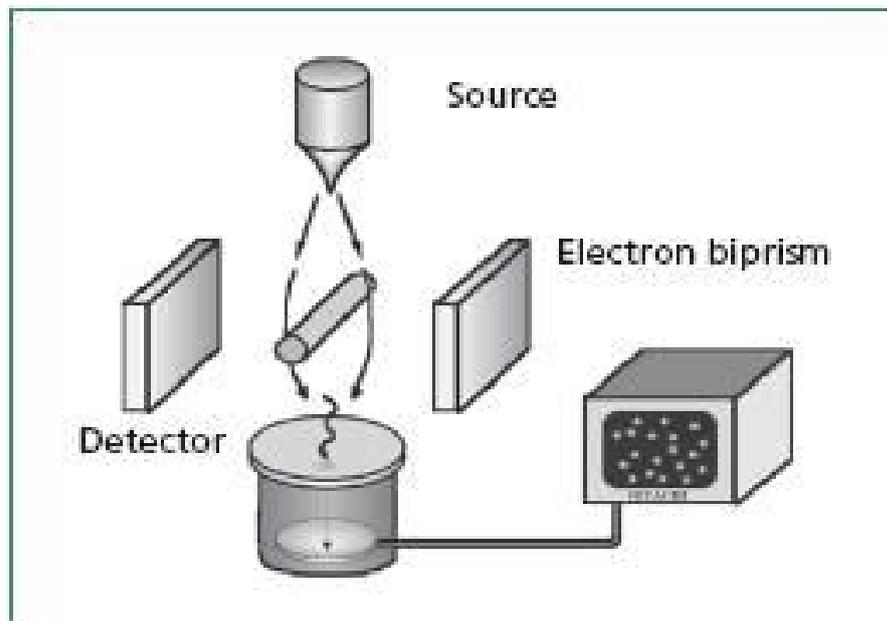


Abbildung 1.1: Doppelspalt-Experiment mit nur einem Elektron nach A. Tonomura

aus und gelangen nach Durchqueren einer Potentialdifferenz eU in eine sog. Biprisma-Anordnung, siehe Abb. 1.2, und schlagen anschließend auf einen Detektor auf, wobei (mittels einer Elektronik) der Einschlagpunkt des Elektrons auf der Oberfläche des Detektors visualisiert und abgespeichert wird. Die in die Apparatur, siehe Abb. 1.1, eintretenden Elektronen mit fixer Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ und fixem Impuls \mathbf{p} definieren ein Ensemble identisch präparierter Teilchen mit *de Broglie*-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$. Für das Gelingen des Experiments ist es wichtig, dass immer nur ein Elektron zur Zeit unterwegs ist, und dass der Durchmesser des Filamentdrahtes im Biprisma deutlich kleiner ist als die räumliche Kohärenzlänge $D = \frac{\lambda}{2\alpha}$ der Elektronen (α ist der Öffnungswinkel des Elektronenstrahls). Das Elektron interferiert beim Durchqueren der Anordnung dann sozusagen mit sich

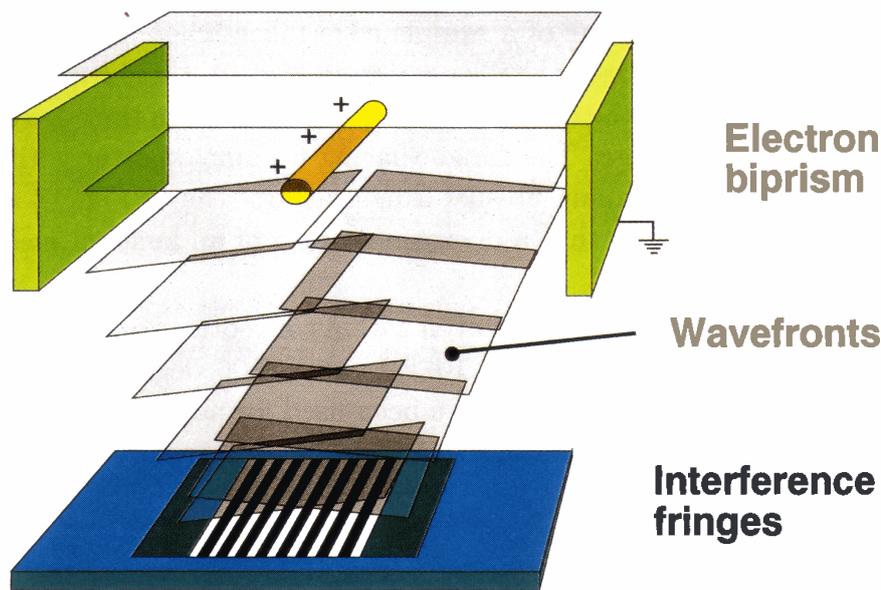


Abbildung 1.2: Elektron-Biprisma-Anordnung nach G. Möllenstedt

selbst, da es einmal den linken (L) und einmal den rechten (R) Pfad vorbei am positiv gespannten Filamentdraht in der Mitte der Anordnung einschlagen kann. Sei $\Psi_L(\mathbf{r}, t)$ die Wellenfunktion des Elektrons, wenn es den linken Pfad nimmt, und sei $\Psi_R(\mathbf{r}, t)$ die Wellenfunktion des Elektrons, wenn es den rechten Pfad nimmt. Die resultierende Wellenfunktion des Teilchens, nachdem es die Biprisma-Anordnung in Abb. 1.2 durchlaufen hat, ist am Ort \mathbf{r}_D auf dem Detektorschirm eine Superposition beider Alternativen, d.h.

$$\Psi(\mathbf{r}_D, t) = \Psi_L(\mathbf{r}_D, t) + \Psi_R(\mathbf{r}_D, t). \quad (1.5)$$

Dass tatsächlich *ein und nur ein* Elektron die Biprisma-Anordnung (wie beschrieben) durchlaufen hat, wird dadurch festgestellt, dass immer nur **ein** scharf lokalisierter heller Leuchtpunkt entsteht, der die Einschlagposition des betreffenden Elektrons auf dem zweidimensionalen Detektorbildschirm wiedergibt, siehe Abb. 1.1. Nach erfolgter Ortsmessung ist die vormals über die Apparatur ausgedehnte Wellenfunktion des Elektrons auf einen geometrischen Punkt lokalisiert. In Abb. 1.3 sehen wir die Ergebnisse des Doppelspalt-Experiments für eine Anzahl N identisch präparierter Elektronen, welche nacheinander die Apparatur durchlaufen haben, und auf dem Detektorbildschirm ihre jeweiligen Einschlagpunkte als helle Leuchtpunkte markieren. Man könnte vermeintlich glauben, es sei nur deshalb Interferenz beobachtet worden, weil eben *zwei* Elektronen, die die Apparatur gleichzeitig durchlaufen haben, interferieren. Aber die Bedingungen des Experiments

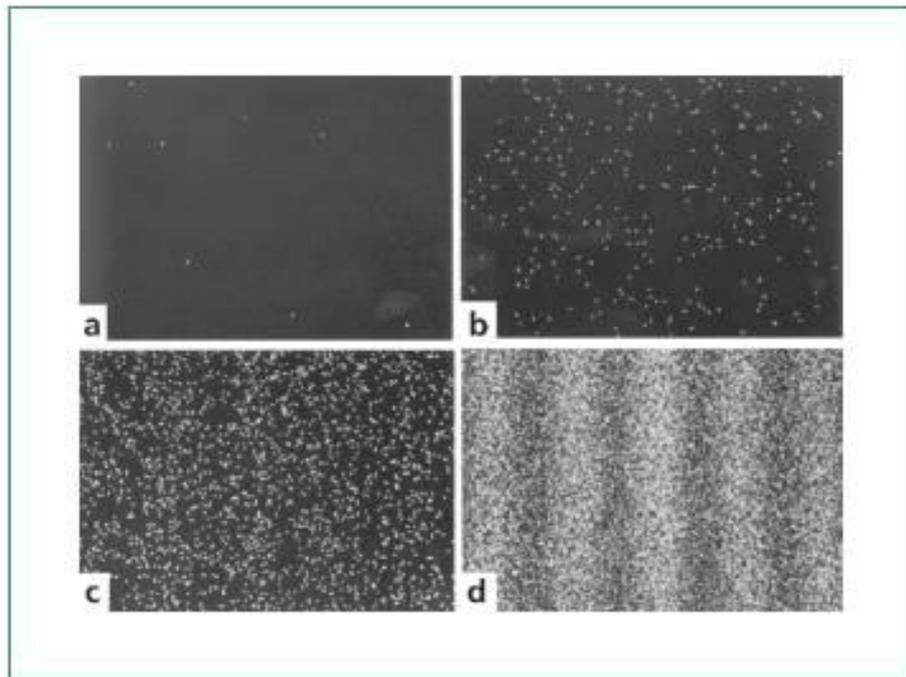


Abbildung 1.3: Entstehung des Interferenzmusters für $N \gg 1$ nach A. Tonomura; a: $N = 8$, b: $N = 200$, c: $N = 6000$, d: $N = 140000$.

schließen diese Möglichkeit ohne den geringsten Zweifel aus! Aus der Feldemissionsquelle treten nur wenige Elektronen pro Sekunde aus. Die Elektronen werden typischerweise durch eine Potentialdifferenz U von 50 kV beschleunigt, wobei sie eine Geschwindigkeit von $120000 \frac{\text{km}}{\text{s}} \simeq 0.4c$ erreichen. Damit ist die Verweildauer in der etwa 1 m langen Apparatur weniger als 10 ns. Die Zeitspanne, die verstreicht, bis ein Leuchtpunkt die Einschlagposition des Elektrons auf dem Detektorschirm markiert, ist noch erheblich kürzer. Es befindet sich somit mit (nahezu) 100 % Gewissheit immer nur *ein* Elektron zur Zeit in der Apparatur, und doch findet man für $N \gg 1$ ein charakteristisches Interferenzmuster für die Intensität auf dem Detektorbildschirm, so wie man es vom bekannten Doppelspalt-Experiment der Wellenoptik her kennt (Abb. 1.3d).

Gemäß der statistischen Deutung der Wellenfunktion (Max Born 1926) ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ein Maß für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens am Ort \mathbf{r} zur Zeit t . Genauer gilt, die Größe

$$P_G(t) = \int_G d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \quad (1.6)$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, zur Zeit t das Teilchen im Inneren eines Gebietes $G \subset \mathbb{R}^3$ anzutreffen. Somit ist $0 \leq P_G(t) \leq 1$. Steht fest, dass das Teilchen sich nie in G aufhält, so ist $P_G(t) = 0$. Steht fest, dass das Teilchen sich ausschließlich nur in G befinden kann, so ist $P_G(t) = 1$.

Demnach gilt für eine Position \mathbf{r}_D auf dem Detektorschirm

$$\begin{aligned} |\Psi(\mathbf{r}_D, t)|^2 &= [\Psi_L^\dagger(\mathbf{r}_D, t) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{r}_D, t)] [\Psi_L(\mathbf{r}_D, t) + \Psi_R(\mathbf{r}_D, t)] \\ &= |\Psi_L(\mathbf{r}_D, t)|^2 + |\Psi_R(\mathbf{r}_D, t)|^2 + 2\text{Re} [\Psi_L^\dagger(\mathbf{r}_D, t) \Psi_R(\mathbf{r}_D, t)]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Die Ursache für das in Abb. 1.3d sichtbare Interferenzmuster ist auf den Term $2\text{Re} [\Psi_L^\dagger(\mathbf{r}_D, t) \Psi_R(\mathbf{r}_D, t)]$ zurückzuführen.

Man muss also zur Kenntnis nehmen, dass es in der Quantenmechanik offenbar vom Typ des Experiments abhängt, ob das Elektron als Teilchen oder als Welle in Erscheinung tritt! Der Bruch mit den Modellvorstellungen der klassischen Physik ist total.

Da das Teilchen (im vorliegenden Fall) jederzeit mit Sicherheit irgendwo im Raum \mathbb{R}^3 anzutreffen ist, gilt notwendig bei Intregation über alle Orte \mathbf{r}' :

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 = 1. \quad (1.8)$$

Physikalisch sinnvolle Wellenfunktionen zur Beschreibung eines Teilchens sind in der Quantenmechanik auf Eins normiert. Man bezeichnet solche Wellenfunktionen als *quadrat-integrierbar*.

Gegeben sei eine räumliche Anfangsverteilung $\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \Psi_0(\mathbf{r})$ der Wellenfunktion eines Teilchens zur Zeit $t = 0$. Dann lässt sich die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$

1 Teilchen oder Welle?

des Teilchens zu späteren Zeiten $t > 0$ durch Lösen eines Anfangswertproblems aus der Schrödinger-Gleichung berechnen. In diesem Sinne ist die Quantenmechanik deterministisch! Zugleich ist die Quantenmechanik auch völlig unbestimmt, da der Ausgang einer **Einzelmessung**, etwa der Messung der kartesischen Koordinate r_j des Positionsvektors \mathbf{r} des Teilchens zur Zeit t , nicht mit Bestimmtheit vorhersagbar ist. Die j -te kartesische Koordinate der Position des Teilchens zum Zeitpunkt t besitzt den **Erwartungswert**

$$\begin{aligned}\langle \hat{r}_j \rangle_\Psi &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 r'_j \\ \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi &= \langle r_1(t) \rangle_\Psi \langle r_2(t) \rangle_\Psi \langle r_3(t) \rangle_\Psi.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Die Größe $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi$ ist dabei ausdrücklich *nicht* der Mittelwert einer Serie *nacheinander* durchgeführter Ortsmessungen am *selben* Teilchen! Denn nach jeder Ortsmessung befindet sich das Teilchen womöglich in einem anderen Zustand, der dann wiederum durch eine neue (andere) Wellenfunktion zu beschreiben wäre! Man spricht in diesem Zusammenhang vom **Kollaps** der Wellenfunktion als Resultat einer Einzelmessung.

Die Deutung des Erwartungswertes $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi$ als Maß für die instantane Position des Teilchens ist in der Quantenmechanik eine andere. Sie bezieht sich auf ein **Ensemble** von (im Prinzip unendlich vielen) *identisch* präparierten Teilchen, dessen Mitglieder alle durch ein und dieselbe Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben werden. Das 3-Tupel von Zahlen $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi$ liefert den *wahrscheinlichsten* Wert dafür, bei *einer* Ortsmessung die Mitglieder dieses Ensembles mit einer Ortskoordinate \mathbf{r} zur Zeit t anzutreffen. Der Erwartungswert Gl. (1.9) ist zugleich der Mittelwert wiederholter durchgeführter Ortsmessungen an einem Ensemble **identisch präparierter** Teilchen, die sich alle zur Zeit $t = 0$ im Ausgangszustand $\Psi_0(\mathbf{r})$ befunden haben!

Damit die Messung der Position eines Teilchens ein sinnvolles Ergebnis liefert, muss die Streuung der Messwerte um den Erwartungswert $\langle \hat{r}_j \rangle_\Psi$ klein sein. Man berechnet dazu das sog. **Schwankungsquadrat**:

$$\begin{aligned}[\Delta_\Psi(\hat{r}_j)]^2 &= \langle \hat{r}_j^2 \rangle_\Psi - \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi^2 \\ &= \left\langle \left[\hat{r}_j - \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi \right]^2 \right\rangle_\Psi > 0.\end{aligned}\tag{1.10}$$

Je kleiner das Schwankungsquadrat einer Observablen ist, desto größer ist die Konfidenz dafür, im Experiment den *berechneten* Erwartungswert der Observablen tatsächlich zu *messen*.

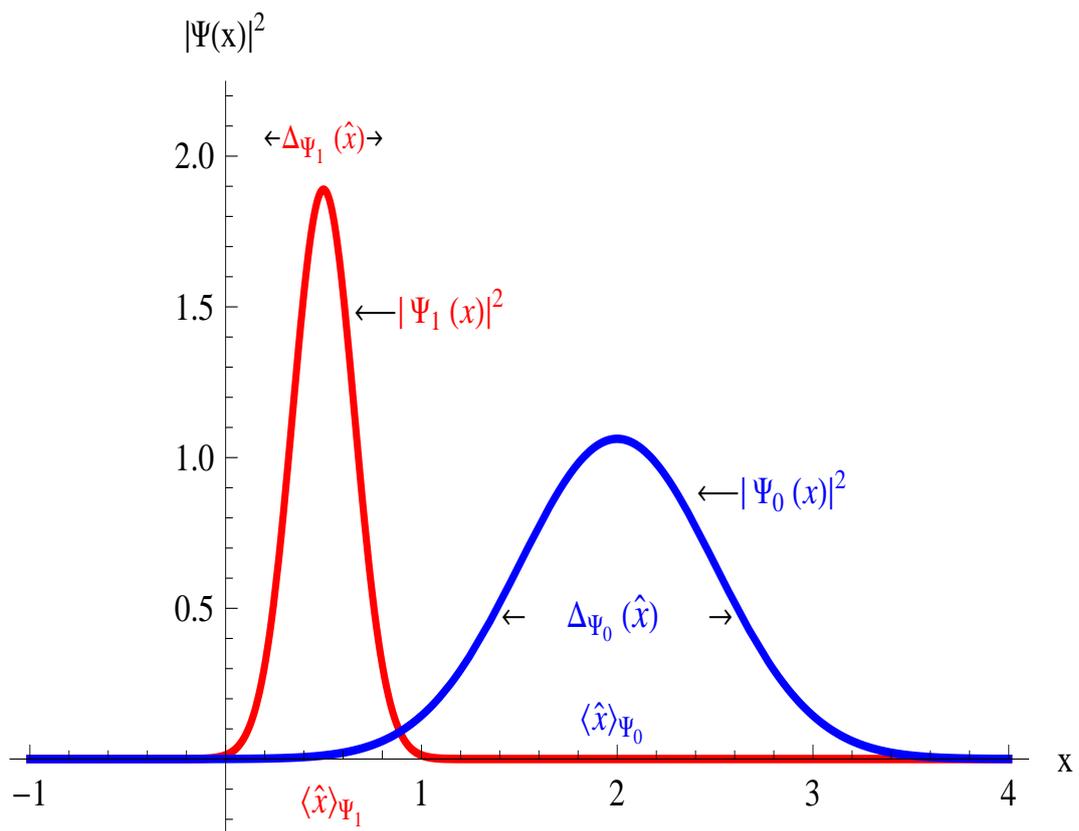


Abbildung 1.4: Quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsverteilungen für ein lokalisiertes Teilchen bei $x = 0.5$ (rote Linie) und ein weniger gut lokalisiertes Teilchen bei $x = 2$ (blaue Linie).

2 Ort, Impuls und das Theorem von Ehrenfest

Ausgehend von Gl. (1.9) für den Erwartungswert $\langle \hat{r}_j \rangle_\Psi$ der Position eines durch die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschriebenen Teilchens interessieren wir uns jetzt dafür, wie schnell sich das Teilchen bewegt. Dazu berechnen wir die Geschwindigkeit als erste Ableitung des Erwartungswertes des Ortes nach der Zeit:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 r'_j & (2.1) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \Psi(\mathbf{r}', t)] \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(\left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right]^\dagger r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \\
 &\quad \times \left(\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right]^\dagger r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right) \\
 &\stackrel{(1.3)}{=} \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(\begin{aligned} & - \left\{ \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla' \right)^2 + V(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}', t) \right\}^\dagger r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) \\ & + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \left\{ \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla' \right)^2 + V(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}', t) \right\} \end{aligned} \right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(\begin{aligned} & \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) \\ & - \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \left[+ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \end{aligned} \right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r_1'^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2'^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3'^2} \right) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) \\ & - \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r_1'^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2'^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3'^2} \right) \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \end{aligned} \right).
 \end{aligned}$$

Terme mit zweiten Ortsableitungen $\frac{\partial^2}{\partial r_j'^2}$ und $j \neq m$ kompensieren sich nach partieller Integration gegenseitig zu Null. Randterme geben keinen Beitrag, wenn wir

2 Ort, Impuls und das Theorem von Ehrenfest

voraussetzen, dass die Wellenfunktion genügend rasch im Unendlichen abfällt. Ist das Teilchen stattdessen im Inneren eines Gebietes $G \subset \mathbb{R}^3$ für alle Zeiten eingeschlossen, so fallen die Randterme ebenfalls weg, wenn die Wellenfunktion auf der Oberfläche ∂G des Gebietes G den Wert Null annimmt. Diese Annahme wollen wir im Folgenden immer stillschweigend treffen!

Es bleibt somit nur der Term mit $j = m$ übrig (der Index j ist fix, über doppelt auftretende Indices wird hier *nicht* summiert):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi &= \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(- \left[\frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] \frac{\partial}{\partial r'_j} [r'_j \Psi(\mathbf{r}', t)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial r'_j} [\Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) r'_j] \left[\frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right) \\ &= \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \left(- \left[\frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] \Psi(\mathbf{r}', t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left[\frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Nochmalige partielle Integration des ersten Terms auf der rechten Seite liefert schließlich

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi = \frac{1}{m} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi(\mathbf{r}', t).$$

Dann gilt nach dem Gesagten:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi = \frac{1}{m} \langle \hat{p}_j \rangle_\Psi.$$

Dieses Ergebnis legt es nahe, den Erwartungswert für den Impuls eines Teilchens zu *definieren* als

$$\langle \hat{p}_j \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{p}_j \Psi(\mathbf{r}', t),$$

d.h. es ist dem Impuls eines Teilchens in der Quantenmechanik ein **Operator** \hat{p}_j zugeordnet:

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_j}. \quad (2.3)$$

Entsprechend können wir für den Erwartungswert der Position des Teilchens schreiben

$$\langle \hat{r}_j \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{r}_j \Psi(\mathbf{r}', t),$$

d.h. es ist dem Ort des Teilchens in der Quantenmechanik ein entsprechender **Operator** \hat{r}_j zugeordnet.

Die Operatoren \hat{r}_j bzw. \hat{p}_j liefern bei Anwendung auf eine quadratintegrierbare Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}', t)$ ganz verschiedene Ergebnisse:

$$\begin{aligned} \hat{r}_j \Psi(\mathbf{r}', t) &= r'_j \Psi(\mathbf{r}', t) \\ \hat{p}_j \Psi(\mathbf{r}', t) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi(\mathbf{r}', t). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Bei den oben definierten Operatoren \hat{r}_j und \hat{p}_j handelt es sich also um hermitesche Operatoren auf dem Hilbert Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$. Offensichtlich kommt es bei Operatoren auf die **Reihenfolge** an (!):

$$(\hat{p}_j \circ \hat{r}_{j'} - \hat{r}_{j'} \circ \hat{p}_j) \Psi(\mathbf{r}', t) \equiv [\hat{p}_j, \hat{r}_{j'}]_- \Psi(\mathbf{r}', t) = \delta_{j,j'} \frac{\hbar}{i} \Psi(\mathbf{r}', t).$$

Da die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}', t)$ nach Anwendung des Kommutators von Orts- und Impuls-Operator identisch reproduziert wird, schreibt man kürzer:

$$[\hat{p}_j, \hat{r}_{j'}]_- = \hat{p}_j \circ \hat{r}_{j'} - \hat{r}_{j'} \circ \hat{p}_j = \delta_{j,j'} \frac{\hbar}{i} \hat{1},$$

wobei $\hat{1}$ der Identitätsoperator ist.

Entsprechend zur vorherigen Betrachtung zeigen wir für die zeitliche Änderung des Erwartungswertes des Impulses:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_j \rangle_\Psi = \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right) \Psi(\mathbf{r}', t) \quad (2.5)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left(\left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right]^\dagger \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right) \Psi(\mathbf{r}', t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right) \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right) \quad (2.6)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left(- \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right]^\dagger \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right) \Psi(\mathbf{r}', t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \right)$$

$$\stackrel{(1.3)}{=} \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left(- \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\mathbf{r}') \right] \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \Psi(\mathbf{r}', t) \right] + \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_j} \right] \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}', t) \right)$$

$$\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi(\mathbf{r}', t) \left[-\frac{\partial V(\mathbf{r}')}{\partial r'_j} \right] \Psi(\mathbf{r}', t)$$

$$= \left\langle -\frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \right\rangle_\Psi = \langle F_j \rangle_\Psi,$$

wobei „p.I.“ für partielle Integration steht.

Die definierten Erwartungswerte für Ort und Impuls eines Teilchens besitzen in der Quantenmechanik eine Abhängigkeit von der Zeit, die auf den ersten Blick mit

2 Ort, Impuls und das Theorem von Ehrenfest

den Gesetzen der klassischen Mechanik kompatibel ist (Ehrenfest 1927):

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi &= \frac{1}{m} \langle \hat{p}_j \rangle_\Psi \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_j \rangle_\Psi &= \left\langle -\frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \right\rangle_\Psi.\end{aligned}\quad (2.7)$$

Im Fall einer *quadratischen* Abhängigkeit des Potentials von der Koordinate r_j (Harmonischer Oszillator) liefert die Quantenmechanik und die klassische Mechanik ein identisches Ergebnis für die zeitliche Abhängigkeit von Ort und Impuls, denn es gilt für den Spezialfall

$$V(\mathbf{r}) = \frac{c_1}{2} r_1^2 + \frac{c_2}{2} r_2^2 + \frac{c_3}{2} r_3^2 \quad (2.8)$$

die Relation

$$\begin{aligned}\left\langle -\frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \right\rangle_\Psi &= -c_j \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi \\ &= -\frac{\partial \left(\frac{c_1}{2} \langle \hat{r}_1 \rangle_\Psi^2 + \frac{c_2}{2} \langle \hat{r}_2 \rangle_\Psi^2 + \frac{c_3}{2} \langle \hat{r}_3 \rangle_\Psi^2 \right)}{\partial \langle r_j \rangle_\Psi} \\ &= -\frac{\partial V(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi)}{\partial \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi}.\end{aligned}\quad (2.9)$$

Allgemein gilt aber

$$\left\langle -\frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \right\rangle_\Psi \neq -\frac{\partial V(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle_\Psi)}{\partial \langle \hat{r}_j \rangle_\Psi}.$$

Man muss demnach (außer beim Harmonischen Oszillator) immer quantenmechanisch rechnen!

Nach dem Gesagten dürfen wir die Schrödinger-Gleichung Gl. (1.3) in folgender Form schreiben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t),$$

wobei \hat{H} der sog. **Hamilton-Operator** ist:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{r}}) \\ \hat{\mathbf{p}}^2 &= \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} \right).\end{aligned}\quad (2.10)$$

In der klassischen Mechanik ist die Summe von kinetischer Energie und potentieller Energie eines Teilchens gerade die zugeordnete Hamiltonfunktion! In der

Quantenmechanik werden aus Ort und Impuls lineare hermitesche Operatoren. Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik erfolgt, indem die klassische Hamiltonfunktion ermittelt wird (am Einfachsten ist es, man drückt alles in kartesischen Koordinaten aus), und anschließend die Ortsvariable r_j durch den Ortsoperator \hat{r}_j , und die Impulsvariable p_j durch den Impulsoperator \hat{p}_j ersetzt wird. So entsteht aus der klassischen Hamiltonfunktion der Hamilton-Operator \hat{H} der Quantenmechanik.

Der Erwartungswert

$$E = \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}', t)$$

repräsentiert die Energie E des Teilchens in einem durch die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ gegebenen Zustand. In Analogie zu den bereits vorgeführten Rechnungen in Gl. (2.1) zeigt man unschwer mittels partieller Integration, dass E für einen *zeitunabhängigen* Hamiltonoperator \hat{H} eine **Erhaltungsgröße** ist:

$$\frac{dE}{dt} = 0. \quad (2.11)$$

Aus physikalischer Sicht muss diese Eigenschaft für ein konservatives System selbstverständlich auch in der Quantenmechanik gelten!

3 Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion für zeitunabhängigen Hamilton-Operator

Für ein System mit *zeitunabhängigem* Hamilton-Operator \hat{H} können wir die Schrödinger-Gleichung (1.3) durch eine Exponentialreihe (*formal*) lösen:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_A(\mathbf{r}) &= \Psi(\mathbf{r}, t=0).\end{aligned}$$

Hier ist

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n \quad (3.1)$$

der sog. Zeitentwicklungsoperator. Das Symbol $\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n$ bedeutet, der Operator $\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$ soll n -mal hintereinander angewendet werden:

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n = \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \dots \circ \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)}_{n\text{-mal}}$$

Man bestätigt für einen von t unabhängigen Operator \hat{H} sofort:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n = n\hat{H} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^{n-1}$$

und folglich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \hat{H} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right),$$

was zu zeigen war.

3 Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion für zeitunabh. Hamilton-Op.

Die gefundene formale Lösung zeigt uns sofort, dass die Normierungsbedingung für alle Zeiten t gilt, wenn sie nur zur Zeit $t = 0$ bereits erfüllt war:

$$\begin{aligned}
 \int_G d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^n \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}', t).
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r})$$

enthält Ortsableitungen $\frac{\partial^2}{\partial r_j^2}$, die nach partieller Integration nicht mehr auf die Funktion $\psi_A(\mathbf{r}')$, sondern auf die Funktion $\Psi(\mathbf{r}', t)$ wirken. Da wir nur quadratintegrierbare Wellenfunktionen $\psi_A(\mathbf{r}')$ betrachten, die ja für $|\mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ (genügend schnell) gegen Null streben, gibt es bei partieller Integration bzgl. der Integrationsvariablen r'_j keine Randterme! Sukzessive partielle Integration, für jede Potenz $(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t)^n$, Term für Term, liefert:

$$\begin{aligned}
 &\int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^n \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \circ \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^{n-1} \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left(+\frac{i}{\hbar} t \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} \right) + V(\mathbf{r}') \right] \circ \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^{n-1} \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}', t),
 \end{aligned}$$

und nach zweimaliger partieller Integration bzgl. r'_j ,

$$\begin{aligned}
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^{n-1} \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \left(+\frac{i}{\hbar} t \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} \right) + V(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)^{n-1} \psi_A(\mathbf{r}') \right]^\dagger \left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right) \Psi(\mathbf{r}', t),
 \end{aligned}$$

nach weiteren $n - 1$ solchen Schritten entsteht so

$$\begin{aligned}
 & \vdots \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \underbrace{\left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right) \circ \left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right) \circ \dots \circ \left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right)}_{n\text{-mal}} \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right)^n \Psi(\mathbf{r}', t).
 \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(+\frac{i}{\hbar} t \hat{H} \right)^n \Psi(\mathbf{r}', t) & (3.3) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \exp\left(\frac{i}{\hbar} t \hat{H}\right) \Psi(\mathbf{r}', t) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \underbrace{\exp\left(\frac{i}{\hbar} t \hat{H}\right) \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)}_{=\hat{1}} \psi_A(\mathbf{r}') \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_A^\dagger(\mathbf{r}') \psi_A(\mathbf{r}') \\
 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' |\psi_A(\mathbf{r}')|^2 \\
 &= 1.
 \end{aligned}$$

Die gezeigte Invarianz bzgl. partieller Integration bringt zum Ausdruck, dass \hat{H} ein *hermitescher* Operator ist, wenn er auf quadratintegrierbare Wellenfunktionen $\Psi(\mathbf{r}', t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ angewendet wird. Die allgemeine Definition hermitescher linearer Operatoren im Hilbertraum wird in Kapitel 12 des Scriptums abgehandelt.

Es ist nicht leicht, die formale Potenzreihe für den Zeitentwicklungsoperator direkt auszuwerten. Eine nützliche Methode besteht darin, zunächst die **Eigenwerte** E_n und **Eigenfunktionen** $\psi_n(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators zu bestimmen. Für den Fall eines Hamilton Operators \hat{H} mit diskretem Spektrum gilt:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) &= E_n \psi_n(\mathbf{r}) & (3.4) \\
 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}') &= \delta_{m,n} \\
 m, n &\in I.
 \end{aligned}$$

Dabei bilden die Funktionen $\{\psi_n(\mathbf{r}')\}_{n \in I}$ ein vollständiges **Orthonormalsystem**, wobei I eine geeignete diskrete Indexmenge bezeichnet, die dem Abzählen der Eigenfunktionen dient. Jede quadratintegrierbare Anfangsverteilung $\psi_A(\mathbf{r}) =$

3 Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion für zeitunabh. Hamilton-Op.

$\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$ der Wellenfunktion kann aufgrund der Vollständigkeit der Eigenfunktionen $\{\psi_n(\mathbf{r}')\}_{n \in I}$ in eine unendliche Reihe entwickelt werden:

$$\begin{aligned}\psi_A(\mathbf{r}) &= \sum_{n \in I} c_n \psi_n(\mathbf{r}) \\ c_m &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') \psi_A(\mathbf{r}').\end{aligned}\quad (3.5)$$

Dies stellt eine Verallgemeinerung des Konzeptes der Fourier-Reihe dar, so wie man es aus der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen von den regulären Sturm-Liouville-Eigenwertaufgaben her kennt.

Nach dem Gesagten folgt sofort

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_A(\mathbf{r}) &= \sum_{n \in I} c_n \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = \sum_{n \in I} c_n E_n \psi_n(\mathbf{r}) \\ \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)^j \psi_A(\mathbf{r}) &= \sum_{n \in I} c_n \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)^j \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{n \in I} c_n \left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)^j \psi_n(\mathbf{r}) \\ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)^j \psi_A(\mathbf{r}) &= \sum_{n \in I} c_n \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)^j \psi_n(\mathbf{r}) \\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \psi_A(\mathbf{r}) &= \sum_{n \in I} c_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (3.6)$$

Damit ist die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung als Superposition von Eigenfunktionen $\psi_n(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators dargestellt:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \psi_A(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \psi_n(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (3.7)$$

Die Koeffizienten c_n werden aus der Anfangsverteilung $\psi_A(\mathbf{r})$ gemäß Gl. (3.5) bestimmt. Es gilt in der Tat:

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\quad (3.8)$$

Für die Energie des Teilchens im Zustand $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ergibt sich sofort die Darstellung

$$\begin{aligned}
E &= \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} = \int_G d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}', t) & (3.9) \\
&\stackrel{(3.7)}{=} \int_G d^3r' \sum_{m \in I} c_m^\dagger \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') \hat{H} \sum_{n \in I} c_n \psi_n(\mathbf{r}') \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right] \\
&= \sum_{m, n \in I} c_m^\dagger c_n \int_G d^3r' \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') \hat{H} \psi_n(\mathbf{r}') \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right] \\
&= \sum_{m, n \in I} c_m^\dagger c_n \int_G d^3r' \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') E_n \psi_n(\mathbf{r}') \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right] \\
&= \sum_{m, n \in I} c_m^\dagger c_n E_n \underbrace{\int_G d^3r' \psi_m^\dagger(\mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}')}_{=\delta_{m,n}} \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t\right] \\
&= \sum_{n \in I} |c_n|^2 E_n.
\end{aligned}$$

Das bedeutet, es ist $|c_n|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie E eines Teilchens, das durch die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben wird, den Wert E_n zu erhalten. Selbstverständlich gilt

$$\sum_{n \in I} |c_n|^2 = 1. \quad (3.10)$$

Befindet sich das Teilchen zur Zeit $t = 0$ in einem Eigenzustand,

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \psi_n(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

so ist die zeitliche Entwicklung besonders einfach zu beschreiben:

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{r}, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \Psi(\mathbf{r}, t = 0) & (3.12) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \psi_n(\mathbf{r}) \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \psi_n(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Man nennt solche speziellen Lösungen der Schrödinger-Gleichung Gl. (1.3) **stationär**, denn die Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$ ist an jedem Ort \mathbf{r} zeitunabhängig. Für stationäre quadratintegrierbare Wellenfunktionen $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t)\psi_n(\mathbf{r})$ gilt:

$$E = \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} = \langle \hat{H} \rangle_{\psi_n} = E_n.$$

3 Zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion für zeitunabh. Hamilton-Op.

Die Konfidenz, dass der Erwartungswert $\langle \hat{H} \rangle_{\Psi}$ für einen stationären Zustand Ψ tatsächlich ein repräsentatives Messergebnis für die Energie des Teilchens vorherzusagen kann, ist *maximal*, denn das Schwankungsquadrat der Energie ist *exakt* gleich Null:

$$\begin{aligned} [\Delta_{\Psi}(\hat{H})]^2 &= \langle \hat{H}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{H} \rangle_{\Psi}^2 \\ &= \langle \hat{H}^2 \rangle_{\psi_n} - \langle \hat{H} \rangle_{\psi_n}^2 = 0. \end{aligned}$$

4 Teilchen im Kasten

Wir betrachten das vielleicht einfachste Modellsystem der Quantenmechanik: ein Teilchen der Masse m befindet sich in einem Kasten $0 \leq r_j \leq L$ mit völlig undurchdringlichen Wänden bei $r_j = 0$ und bei $r_j = L$. Im Inneren des Kastens bewegt sich das Teilchen kräftefrei, an den Wänden wird das Teilchen elastisch reflektiert.

Das Wesentliche erkennt man schon bei Beschränkung auf nur *eine* räumliche Dimension: $D = 1$. Zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ des Teilchens $0 \leq x \leq L$ gemäß Gl. (3.7) benötigen wir die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ und Eigenwerte E_n des Hamiltonoperators:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x). \quad (4.1)$$

Da sich das Teilchen im Inneren des Kastens kräftefrei bewegt, ist dort das Potential eine Konstante, die wir zu Null setzen. An der Wand des Kastens ist das Potential unendlich hoch:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq x \leq L, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.2)$$

Dies impliziert für die Eigenfunktion $\psi_n(x)$ von \hat{H} die Randbedingung:

$$\psi_n(x=0) = 0 = \psi_n(x=L). \quad (4.3)$$

Die Eigenwertaufgabe

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (4.4)$$

führt dann für $0 < x < L$ auf eine gewöhnliche Differentialgleichung:

$$\psi_n''(x) + k_n^2\psi_n(x) = 0. \quad (4.5)$$

Hier ist $\hbar k_n = \sqrt{2mE_n}$. Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$\psi_n(x) = s_n \sin(k_n x) + c_n \cos(k_n x). \quad (4.6)$$

4 Teilchen im Kasten

Die Randbedingungen Gl. (4.3) schränken nun die möglichen Werte für die Konstanten c_n und k_n ein auf

$$\begin{aligned}c_n &= 0 \\k_n &= \frac{\pi}{L}n \\n &= 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\tag{4.7}$$

Die verbleibende Konstante s_n ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned}1 &\stackrel{!}{=} \int_0^L dx' |\psi_n(x')|^2 = |s_n|^2 \int_0^L dx' \sin^2(k_n x') = |s_n|^2 \frac{L}{2} \\s_n &= \sqrt{\frac{2}{L}}.\end{aligned}\tag{4.8}$$

Somit lauten die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ und die zugeordneten Eigenwerte E_n des Hamiltonoperators für das Kastenpotential in $D = 1$:

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \\E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2 \\n &= 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\tag{4.9}$$

In Abbildung 4.1 sind die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ für $n = 1, 2, 3, 4$ graphisch dargestellt. Die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ sind mit Bezug auf das Zentrum des Kastens bei $x = \frac{L}{2}$ gerade Funktionen von x für $n = 1, 3, 5, \dots$ und ungerade Funktionen für $n = 2, 4, 6, \dots$. Ein **Knotenpunkt** ist ein Punkt x_K im Inneren des Kastens, an dem die Eigenfunktion verschwindet: $\psi_n(x = x_K) = 0$. Mit zunehmender Quantenzahl n , d.h. zunehmender Energie E_n , wächst die Zahl der Knotenpunkte von $\psi_n(x)$. Der **Grundzustand** $\psi_1(x)$ ist der Eigenzustand niedrigster Energie $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}$, er hat *keine* Knotenpunkte.

Mit der Existenz von Knotenpunkten einher geht die Orthogonalität verschiedener Eigenfunktionen:

$$\int_0^L dx' \psi_{n_1}^\dagger(x') \psi_{n_2}(x') = \delta_{n_1, n_2}.\tag{4.10}$$

Die Eigenfunktionen sind vollständig. Eine beliebige quadratintegrierbare Funktion $f(x)$ lässt sich im Intervall $0 < x < L$ nach den Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ entwickeln:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \psi_n(x).\tag{4.11}$$

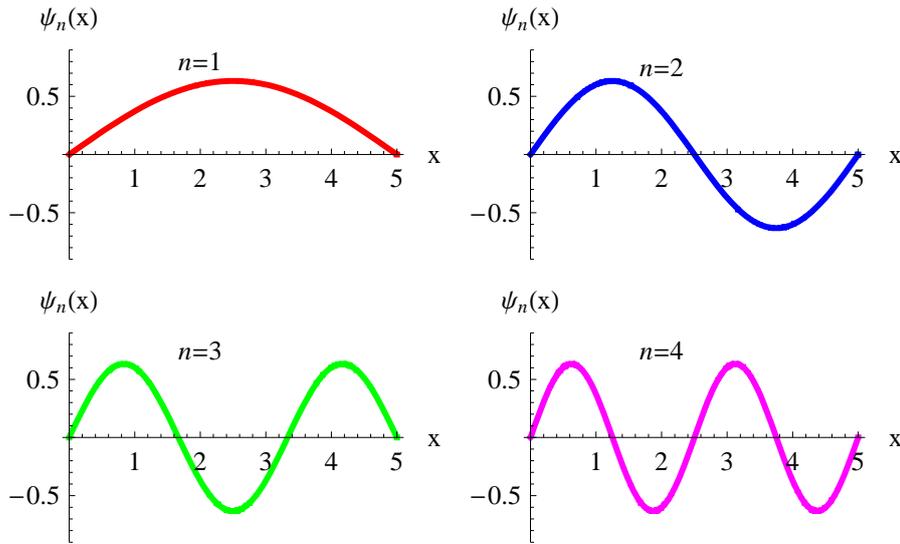


Abbildung 4.1: Die ersten 4 Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ für ein Kastenpotential ($L = 5$ nm).

Im Fall eines Kastenpotentials ist das gerade die bekannte Darstellung einer Funktion $f(x)$ als Fourier-Reihe. Die Koeffizienten f_m sind notwendig zu

$$f_m = \int_0^L dx' \psi_m^\dagger(x') f(x') \quad (4.12)$$

gegeben.

Die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung im Kasten lauten

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= \psi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{\hbar}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} n^2 t\right) \\ \Psi_n(x, t = 0) &= \psi_n(x). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Ausgehend von einer vorgegebenen Wellenfunktion $\Psi(x, t = 0)$ zur Anfangszeit $t = 0$ findet man sofort die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Kasten als Superposition von stationären Lösungen:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t). \quad (4.14)$$

Um die Entwicklungskoeffizienten c_n zu finden, muss man lediglich den Anfangszustand $\Psi_n(x, t = 0)$ nach dem vollständigen Orthonormalsystem der Eigenfunk-

4 Teilchen im Kasten

tionen von \hat{H} zu entwickeln:

$$\Psi(x, t = 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x). \quad (4.15)$$

Dann folgt unmittelbar

$$c_m = \int_0^L dx' \psi_m^\dagger(x') \Psi(x', t = 0). \quad (4.16)$$

Das vorgestellte Verfahren ist allgemein und beschränkt sich nicht nur auf das Kastenpotential! Für den Fall $D = 3$ lautet das Potential

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 \leq r_j \leq L_j, j = 1, 2, 3, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.17)$$

Aus dem bereits Gesagten für $D = 1$ folgt unmittelbar, dass das Schrödinger-Eigenwertproblem für den dreidimensionalen Kasten,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) &= E_n\psi_n(\mathbf{r}) & (4.18) \\ \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{p}}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} \right) \\ \mathbf{r} &= (r_1, r_2, r_3), \end{aligned}$$

die Lösung

$$\begin{aligned} \psi_n(\mathbf{r}) &= \psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) & (4.19) \\ &= \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\left(\frac{\pi n_1}{L_1} r_1\right) \sin\left(\frac{\pi n_2}{L_2} r_2\right) \sin\left(\frac{\pi n_3}{L_3} r_3\right) \\ E_n &= E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right) \end{aligned}$$

besitzt. Hier bezeichnet n einen Multi-Index, $n = (n_1, n_2, n_3)$, und $n_j = 1, 2, 3, \dots$ läuft über alle natürlichen Zahlen.

Für die hochsymmetrische Situation $L_1 = L_2 = L_3 = L$ gibt es das Entartungsphänomen, d.h. es gibt mehrere verschiedene Eigenfunktionen $\psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r})$ zum gleichen Eigenwert. Sind die Kantenlängen annähernd gleich, $L_1 \simeq L_2 \simeq L_3$, so liegt näherungsweise Entartung vor und es bilden sich **Energieschalen**, vgl. Abbildung 4.2.

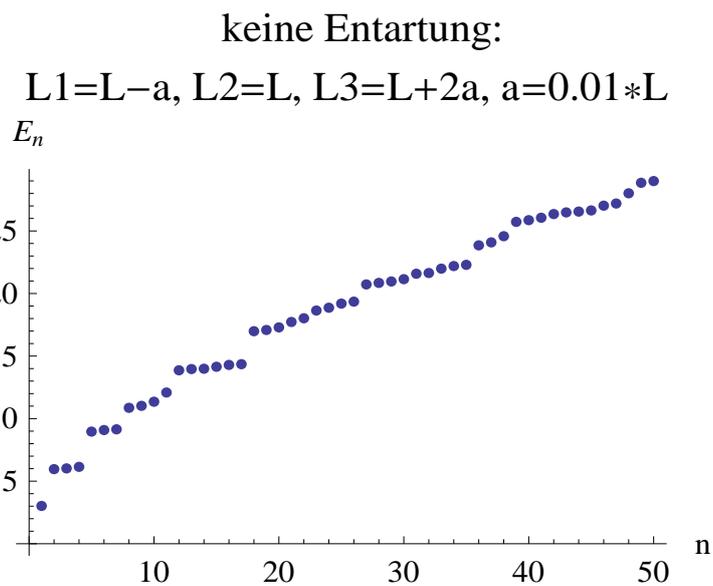
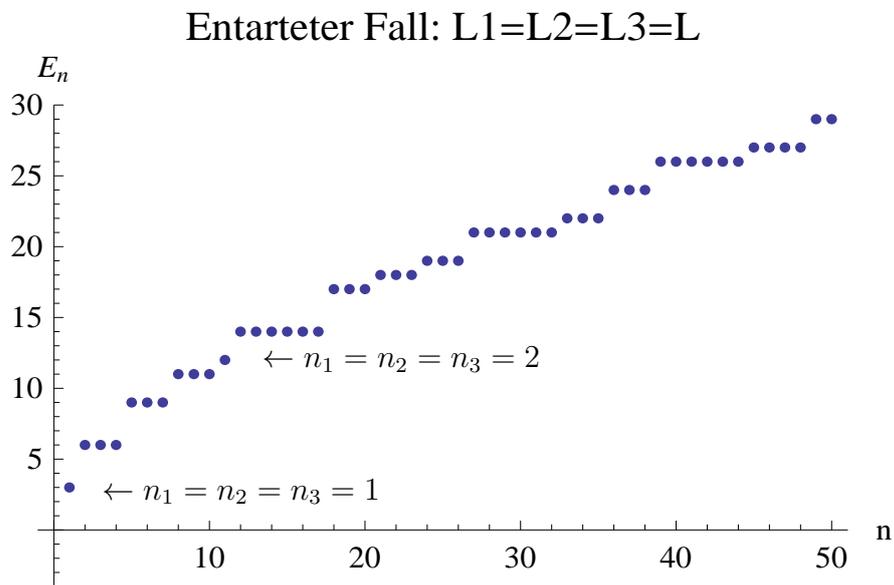


Abbildung 4.2: Energie-Eigenwerte im Kasten mit Volumen $L_1 \cdot L_2 \cdot L_3$.

5 Freies Teilchen als Wellenpaket

Im Unterschied zum Problem des Teilchens im Kasten aus dem vorherigen Kapitel ist ein *freies* Teilchen völlig kräftefrei, d.h. das Potential $V(\mathbf{r})$ kann überall gleich Null gesetzt werden. Physikalisch ist das Teilchen dann als Eigenfunktion

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \quad (5.1)$$

zum Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ vollständig charakterisiert. Mit

$$\begin{aligned} \hat{p}_j &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_j} \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2}{2m} \end{aligned} \quad (5.2)$$

folgt demnach

$$\begin{aligned} \hat{p}_j \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) &= p'_j \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \\ \hat{H} \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) &= E_{p'} \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \\ E_{p'} &= \frac{p_1'^2 + p_2'^2 + p_3'^2}{2m}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (5.4)$$

für ein freies Teilchen ergeben sich nach dem Gesagten zu:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_p t\right]. \quad (5.5)$$

Der Eigenwert $E_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ ist gleich der kinetischen Energie eines freien Teilchens mit Impuls \mathbf{p} (oder de-Broglie Wellenlänge $\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{|\mathbf{p}|}$). Folglich sind die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen in der Quantenmechanik von der Form:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t\right)\right]. \quad (5.6)$$

5 Freies Teilchen als Wellenpaket

Anders als beim Problem des Kastenpotentials mit unendlich hohen Wänden, z.B. bei $r_j = 0$ bzw. $r_j = L_j$, existiert für ein freies Teilchen keine Randbedingung, die ja zu einer **Quantisierung** der Energie-Eigenwerte führen würde. Für ein freies Teilchen ist *jeder* (reelle) Impulswert \mathbf{p} und damit jeder Energiewert $E_p \geq 0$ zulässig.

Aber es gibt noch ein Problem. Die mittels unseres Separationsansatzes gefundene stationäre Lösung $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ der Schrödinger-Gleichung für einen *fixen* Impuls \mathbf{p} bzw. eine fixe Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ ist in der Tat **nicht** quadratintegrierbar, denn das Normierungsintegral

$$\int_G d^3r |\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|^2 = |G| \quad (5.7)$$

wächst proportional zum Integrationsvolumen $|G|$. Somit ist $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ zwar eine stationäre, aber physikalisch unzulässige Lösung der Schrödinger-Gleichung!

Eine quadratintegrierbare und damit physikalisch zulässige Lösung $\Psi(\mathbf{r}, t)$ der Schrödinger-Gleichung für **ein** freies Teilchen, das zur Zeit $t = 0$ durch eine vorgegebene (auf Eins normierte) Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$ beschrieben wurde, lässt sich für spätere Zeiten $t > 0$ als eine gewichtete Superposition von *unendlich vielen* solcher stationären Lösungen $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ konstruieren:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} A_{\mathbf{p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t \right) \right]. \quad (5.8)$$

Somit gilt insbesondere:

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} A_{\mathbf{p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right]. \quad (5.9)$$

Damit ist zugleich die Amplitude $A_{\mathbf{p}}$ festgelegt. Denn mit Hilfe einer Fourier-Rücktransformation erhalten wir jetzt umgekehrt aus der Kenntnis von $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$ die unbekanntenen Amplituden $A_{\mathbf{p}}$ zu

$$A_{\mathbf{p}} = \int d^3r \Psi(\mathbf{r}, t = 0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right]. \quad (5.10)$$

Das Problem, eine physikalisch zulässige (d.h. auf Eins normierbare) Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein freies propagierendes Teilchen zu finden, ist somit vollständig gelöst.

Einsetzen der gefundenen Darstellung für $A_{\mathbf{p}}$ liefert:

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{r}, t) &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} A_{\mathbf{p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t \right) \right] \quad (5.11) \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 r' \Psi(\mathbf{r}', t=0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}' \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t \right) \right] \\
&= \int d^3 r' \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t \right) \right] \Psi(\mathbf{r}', t=0) \\
&\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\equiv K(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t)} \\
&= \int d^3 r' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t=0).
\end{aligned}$$

Die Funktion $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t)$ heißt Propagator des freien Teilchens:

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) &\quad (5.12) \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t \right) \right] \\
&= \prod_{j=1,2,3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_j \cdot (r_j - r'_j) - \frac{p_j^2}{2m} t \right) \right] \\
&= \prod_{j=1,2,3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{t}{2m} \left(p_j^2 - p_j \frac{2m(r_j - r'_j)}{t} \right) \right] \\
&= \prod_{j=1,2,3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{t}{2m} \left[\underbrace{\left(p_j - \frac{m(r_j - r'_j)}{t} \right)^2}_{=p_j'^2} - \frac{m^2 (r_j - r'_j)^2}{t^2} \right] \right\} \\
&= \prod_{j=1,2,3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(r_j - r'_j)^2}{t} \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j'}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{t}{2m} p_j'^2 \right\}}_{=e^{-i\frac{\pi}{4}} \cdot \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{m}{it}}} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{m}{it} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{t} \right].
\end{aligned}$$

Für kleine Zeiten t repräsentiert der Propagator $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t)$, betrachtet als Funktion der Variablen \mathbf{r}' , eine äußerst lokalisierte Funktion an der Stelle $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$. Im Grenzwert $t \rightarrow 0$ entsteht hieraus eine sog. δ -Distribution:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{m}{it} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{t} \right] = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.13)$$

Dies entspricht in der Quantenmechanik einem Teilchen, das zur Zeit $t = 0$ an der Stelle $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ als Massenpunkt lokalisiert war.

5 Freies Teilchen als Wellenpaket

Ausgehend von einer quadratintegrierbaren Anfangsverteilung $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$, die zur Zeit $t = 0$ vorgegeben ist, folgt nach dem Gesagten für die Lösung der Schrödinger-Gleichung zu späteren Zeiten $t > 0$ der Ausdruck:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t = 0) \\ &= \int d^3r' \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{m}{it} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{t} \right] \Psi(\mathbf{r}', t = 0).\end{aligned}\quad (5.14)$$

Man überzeugt sich leicht durch direkte Rechnung, dass für alle Zeiten t gilt:

$$\int d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 = \int d^3r' |\Psi(\mathbf{r}', t = 0)|^2 = 1. \quad (5.15)$$

Damit ist die gefundene Funktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ quadratintegrierbar.

Solche auf Eins normierbare, *nicht stationäre* Lösungen der Schrödinger-Gleichung nennt man ein **Wellenpaket**. Physikalische Zustände eines Teilchens sind demnach durch quadratintegrierbare (auf Eins normierte) Lösungen der Schrödinger-Gleichung zu beschreiben.

Wir veranschaulichen das Gesagte an einem Wellenpaket in $D = 1$ Dimensionen,

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right) \right], \quad (5.16)$$

und betrachten den Fall einer schmalen Verteilung A_p von Impulsen mit einer Breite $\sigma \ll |p_0|$ um einen Mittelwert p_0 :

$$A_p = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} [\Theta_H(p - p_0 + \sigma) - \Theta_H(p - p_0 - \sigma)]. \quad (5.17)$$

Hier bezeichnet Θ_H die sog. Heaviside-Stufenfunktion:

$$\Theta_H(p) = \begin{cases} 1 & \text{falls } p > 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.18)$$

Damit dieses Wellenpaket zur Zeit $t = 0$ auf Eins normiert ist, gilt notwendig:

$$\begin{aligned}1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_p A_p^\dagger \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p - p') x \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_p A_p^\dagger \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p - p') x \right]}_{=2\pi\hbar\delta(p-p')} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p A_p^\dagger,\end{aligned}\quad (5.19)$$

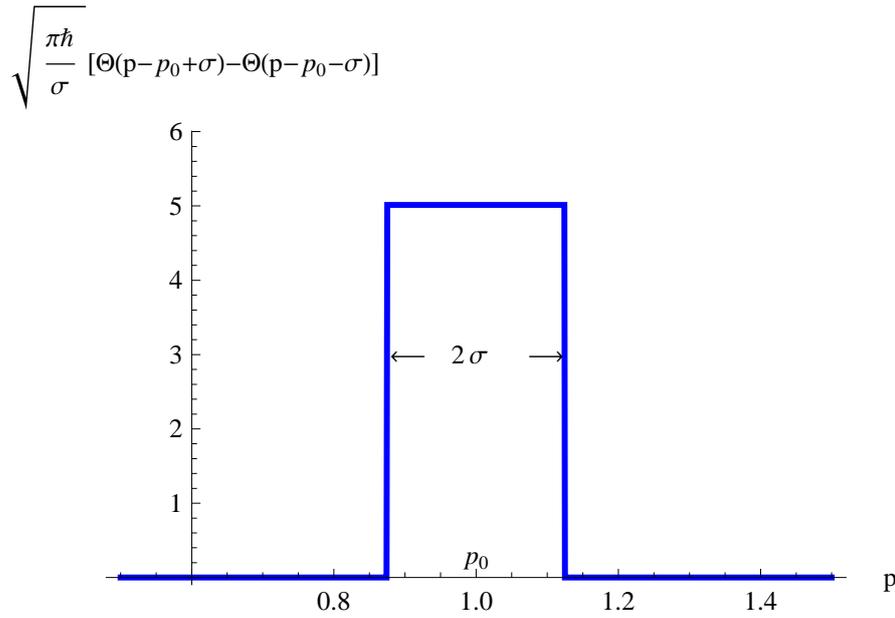


Abbildung 5.1: Kastenförmige Impulsverteilung

d.h. die Amplitude A_p des Wellenpakets erfüllt eine entsprechende Normierungsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |A_p|^2 = 1. \quad (5.20)$$

Der Vorfaktor $\sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}}$ in Gl. (5.17) sorgt also dafür, dass das Maximum der Verteilung mit abnehmender Breite der Verteilung derart zunimmt, dass die Normierungsbedingung Gl. (5.20) erfüllt ist.

Es ist instruktiv die Gestalt des Wellenpakets zur Zeit $t = 0$ im Ortsraum zu berechnen:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t = 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \quad (5.21) \\ &= \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} \int_{p_0-\sigma}^{p_0+\sigma} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \\ &\stackrel{p=p_0+p'}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} \int_{-\sigma}^{\sigma} \frac{dp'}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p' x\right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\frac{\hbar}{ix} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p' x\right) \right]_{p'=-\sigma}^{p'=\sigma} \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} \frac{\sigma}{\pi\hbar} \frac{\sin\left(\frac{\sigma}{\hbar} x\right)}{\frac{\sigma}{\hbar} x} \end{aligned}$$

5 Freies Teilchen als Wellenpaket

$$= \sqrt{\frac{\sigma}{\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{\sigma}{\hbar}x\right)}{\frac{\sigma}{\hbar}x} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x\right).$$

Die Einhüllende des Wellenpakets zur Zeit $t = 0$, entsprechend einer Amplitudenwahl A_p in Gl. (5.17) mit Varianz σ , ist also durch die langsam veränderliche Funktion $\sqrt{\frac{\sigma}{\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{\sigma}{\hbar}x\right)}{\frac{\sigma}{\hbar}x}$ gegeben. In Abb. 5.2 ist für eine Parameterwahl $\sigma = 0.125p_0$ die Funktion $\text{Re } \Psi(x, t = 0)$ zusammen mit ihrer Einhüllenden eingezeichnet. Wellenpakete dienen in der Quantenmechanik der Beschreibung von pro-

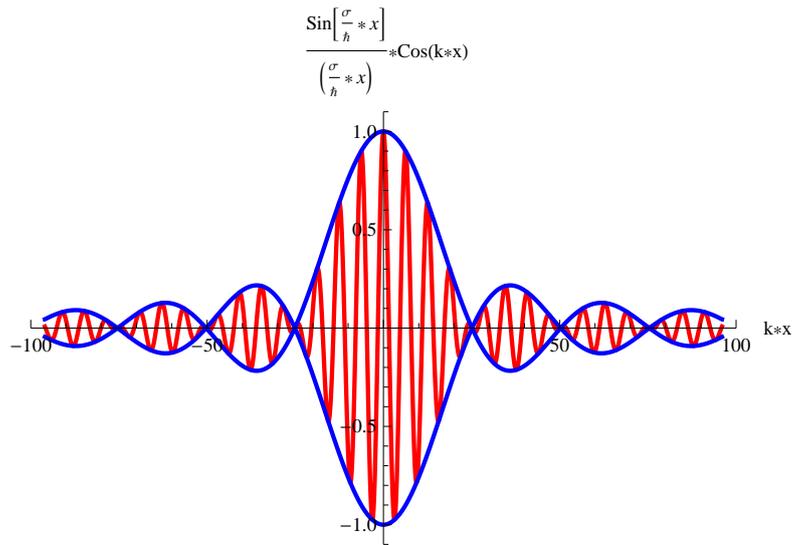


Abbildung 5.2: Wellenpaket

pagierenden Teilchen mit Energie $E > 0$. Die Bezeichnung *Teilchen* wird dabei für Elektronen, Neutronen und Protonen verwendet, ohne dass damit klassische Teilcheneigenschaften zu implizieren wären! Das Gesagte überträgt sich entsprechend auch für aus solchen Elementarteilchen zusammengesetzte Gebilde, z.B. einzelne Atome oder Moleküle, sofern die inneren Freiheitsgrade keine Rolle spielen.

Für die Konstruktion *normierbarer* Lösungen der Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen müssen wir nach dem Gesagten Wellenpakete bilden. Diese sind keine stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

Beim Teilchen im Kasten wurde eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Psi(\mathbf{r}, t)$ zur Beschreibung eines Teilchens als *diskrete* Summe (unendlich vieler) stationärer Wellenfunktionen superponiert:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) \quad (5.22)$$

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right).$$

Die stationären Lösungen $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ waren dabei **stehende** Wellen, da an den Wänden des Kastens die **Eigenfunktionen** $\psi_n(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators den Wert Null annehmen müssen, um die Randbedingungen zu erfüllen.

Im Unterschied dazu sind die stationären Lösungen des Hamilton-Operators eines freien Teilchens mit fixer Energie E und Impuls \mathbf{p} *propagierende* ebene Wellen der Form

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = A_{\mathbf{p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - E_p t) \right], \quad (5.23)$$

wobei $E_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$. Als Phase der ebenen Wellen wird die Funktion $\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - E_p t}{\hbar}$ identifiziert. Die Flächen konstanter Phase sind Ebenen. Daher die Bezeichnung ebene Welle. Offensichtlich kann eine einzige ebene Welle nicht auf Eins normiert werden.

Da man Wellenpakete aus unendlich vielen stationären Lösungen superponieren kann, spielen ebene Wellen mit fixem Impuls \mathbf{p} dennoch eine wichtige Rolle. Man verwendet sie z.B. zur Beschreibung der **Streuung** von frei einlaufenden Teilchen mit positiver Energie $E_p > 0$ an einem Potential.

Wir wollen jetzt herauszufinden, mit welcher Geschwindigkeit ein Wellenpaket propagiert. Der Einfachheit halber betrachten wir wieder ein eindimensionales Problem, $D = 1$. Da wir eine hohe Konfidenz für den Erwartungswert des Impuls fordern, ist notwendig das Schwankungsquadrat $\langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{p} \rangle_{\Psi}^2$ sehr klein, so dass die Amplitude A_p eine Funktion mit einem stark ausgeprägten Maximum bei $p = p_0$ ist, die für große Abweichung vom Wert p_0 rasch gegen Null geht. Wir fragen, mit welcher Geschwindigkeit v sich das zugeordnete Wellenpaket ausbreitet:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right) \right]. \quad (5.24)$$

Unter den gemachten Annahmen für die Amplitudenfunktion A_p ist es zulässig, die langsam variierende Phasenfunktion $px - \frac{p^2}{2m}t$ im Argument der ebenen Welle $\exp[\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)]$ vor einem Faktor A_p um die Stelle $p = p_0$ zu linearisieren. Wir substituieren $p = p_0 + q$ und entwickeln für kleine q :

$$\begin{aligned} px - \frac{p^2}{2m}t &= (p_0 + q)x - \frac{(p_0 + q)^2}{2m}t \\ &\simeq (p_0 + q)x - \frac{p_0^2 + 2p_0q}{2m}t. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Den Term zweiter Ordnung vernachlässigen wir. Denn ist $|q|$ klein, so ist der Fehler der Entwicklung klein. Ist $|q|$ aber groß, so ist das dennoch unerheblich für das Integral über alle q , denn die Funktion $A_p = A_{p_0+q}$ wird sehr klein für große $|q|$.

5 Freies Teilchen als Wellenpaket

Dann gilt nach dem Gesagten:

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right) \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} A_{p_0+q} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_0 + q) x + \frac{i}{\hbar} \frac{(p_0 + q)^2}{2m} t \right] \\
 &\simeq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} A_{p_0+q} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_0 + q) x - \frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2 + 2p_0q}{2m} t \right] \\
 &= \exp \left[+ \frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} A_{p_0+q} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_0 + q) \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right] \\
 &= \exp \left[+ \frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t \right] \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} A_p \exp \left[\frac{i}{\hbar} p \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right]}_{\equiv [\Psi(x', t=0)]_{x' = x - \frac{p_0}{m} t}} \\
 &= \exp \left[+ \frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t \right] \Psi \left(x - v_g t, t = 0 \right),
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

wobei

$$v_g = \frac{p_0}{m} = \left[\frac{\partial E_p}{\partial p} \right]_{p=p_0} \tag{5.27}$$

die **Gruppengeschwindigkeit** des Wellenpakets ist. Im Unterschied zur Gruppengeschwindigkeit ist die **Phasengeschwindigkeit**

$$v_{ph} = \left[\frac{E_p}{p} \right]_{p=p_0} = \frac{p_0}{2m} \tag{5.28}$$

des Wellenpakets nur *halb* so groß! Wir sehen, es gilt (annähernd):

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi(x - v_g t, t = 0)|^2 \tag{5.29}$$

Demnach stimmt die Gruppengeschwindigkeit mit der klassischen Geschwindigkeit $v_{cl} = \frac{p_0}{m}$ des Teilchens überein, nicht die Phasengeschwindigkeit!

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Wie beschreibt man einen Strom von Teilchen (oder Ladungen) in der Quantenmechanik? Ein Teilchenstrom ist zunächst definiert als die zeitliche Änderung $\frac{d}{dt}N_G(t)$ der Teilchenzahl N_G in einem Volumen $|G|$. Diese Größe lässt sich direkt zur **Teilchendichte** $\rho(\mathbf{r}, t)$ im Inneren und zur **Stromdichte** $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ auf der Oberfläche ∂G des Gebietes G in Beziehung setzen. Nimmt etwa die Teilchenzahl im Inneren des Gebietes G im Lauf der Zeit ab, so entspricht das einem Fluss von Teilchen, die durch die Oberfläche ∂G des Gebietes G austreten. Dabei treten pro Zeiteinheit durch ein Flächenelement df der Oberfläche ∂G (mit nach *außen* orientierter Flächennormalen $\hat{\mathbf{n}}$) eine Anzahl $[\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in G}$ Teilchen aus. Nehmen wir **Teilchenzahlerhaltung** an, d.h. es gehen keine Teilchen verloren noch werden welche erzeugt, so gilt notwendig:

$$\frac{d}{dt}N_G(t) = - \int_{\partial G} df \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \stackrel{\text{Satz von Gau\ss}}{=} - \int_G d^3r \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (6.1)$$

Nun ist die Teilchenzahl im Gebiet G gleich dem Volumenintegral der Teilchendichte:

$$N_G(t) = \int_G d^3r \rho(\mathbf{r}, t). \quad (6.2)$$

Für ein Gebiet G , das im Lauf der Zeit seine Gestalt nicht ändert, folgt nach dem Gesagten sofort:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}N_G(t) &= \int_G d^3r \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) \\ &= - \int_G d^3r \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (6.3)$$

Wir erhalten so die **Kontinuitätsgleichung**:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (6.4)$$

Unter einem **Strahl** von Teilchen verstehen wir ein Ensemble nicht wechselwirkender Teilchen mit fixer Geschwindigkeit \mathbf{v} und *positiver* Energie $E > 0$, die sich entlang der Achse eines schmalen Zylinders bzw. eines Kegels mit sehr kleinem Öffnungswinkel ausbreiten. Da die *stationäre* Wellenfunktion eines einzelnen

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Teilchens im Strahl nicht quadratintegrierbar ist, ist es zweckmäßig, das Betragsquadrat der Wellenfunktion *eines* Teilchens mit der Teilchendichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ im Strahl zu identifizieren:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.5)$$

Die physikalisch sinnvolle Normierung für die Teilchen im Strahl ist dann:

$$N_G = \int_G d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (6.6)$$

wobei das Gebiet G einen Abschnitt des Strahlkegels darstellt. Eine kurze Rechnung liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^\dagger \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Es folgt nach Einsetzen des Hamilton-Operators

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

für ein Teilchen in einem beliebigen reellen Potential $V(\mathbf{r})$ der Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \right] \\ &= -\operatorname{div} \frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \right] \\ &= -\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Somit ist die Stromdichte in einem Strahl nicht wechselwirkender Teilchen gegeben zu

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \right]. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Für einen *stationären* Fluss von Teilchen der Energie $E > 0$ gilt insbesondere:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \psi_E(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= \rho_E(\mathbf{r}) = |\psi_E(\mathbf{r})|^2 \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi_E(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (6.10)$$

Ein stationärer Teilchenfluss $\mathbf{j}_E(\mathbf{r})$ hat wegen $\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\rho_E(\mathbf{r}) = 0$ somit die Eigenschaft:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \operatorname{div} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.11)$$

Für den Spezialfall eines stationären Fluss von *freien* Teilchen, die mit Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m}$ fliegen, folgt sofort:

$$\begin{aligned} \Psi_E(\mathbf{r}, t) &= A_E \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et) \right] \\ E &= \frac{p^2}{2m} \\ \rho_E(\mathbf{r}) &= |A_E|^2 \\ \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) &= |A_E|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} = \rho_E \mathbf{v}. \end{aligned}$$

Typischerweise betrachtet man bei einem stationären **Streuproblem** eine Pluralität von identisch präparierten Teilchen, die alle mit Geschwindigkeit \mathbf{v} fliegen, und die nach dem Aufprall auf ein (z.B. ruhendes) Target von ihrer ursprünglichen Flugrichtung $\hat{\mathbf{v}}$ mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit $|W(\hat{\mathbf{v}}, \hat{\mathbf{v}}')|^2 / R^2$ in andere Flugrichtungen $\hat{\mathbf{v}}'$ abgelenkt werden. Dabei ergibt sich eine charakteristische Verteilung der gestreuten Teilchen auf einer das Target umgebenden Vollkugel mit Radius R . Durch die Analyse der Abhängigkeit gemessener Streuraten von der Energie E und vom Raumwinkel $d\Omega(\theta, \phi)$ (in großer Entfernung R vom Target) lassen sich wichtige Rückschlüsse über die mikroskopische Wechselwirkung zwischen den Teilchen im Strahl mit den Atomen bzw. Atomkernen des Targets ziehen. Viele grundlegende Informationen betreffend den Aufbau und die Struktur der Materie basieren auf **elastischen** Streuexperimenten, bei denen sowohl der Anfangs- als auch der Endzustand der gestreuten Teilchen im Energiekontinuum bei ein und derselben Energie $E > 0$ liegen.

Bevor wir die Streuung von Teilchen in $D = 3$ räumlichen Dimensionen diskutieren, betrachten wir Streuprozesse in $D = 1$ Dimensionen. Das wohl einfachste Beispiel ist ein Stufenpotential wie in Abb. 6.1 skizziert, also

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0, \\ U & \text{falls } x > 0. \end{cases} \quad (6.12)$$

In dem Fall gibt es beim elastischen Streuprozess für von links einlaufende Teilchen mit fixer Energie $E = \frac{p^2}{2m} > 0$ nur zwei Möglichkeiten:

1. $0 < E < U$
2. $U < E$.

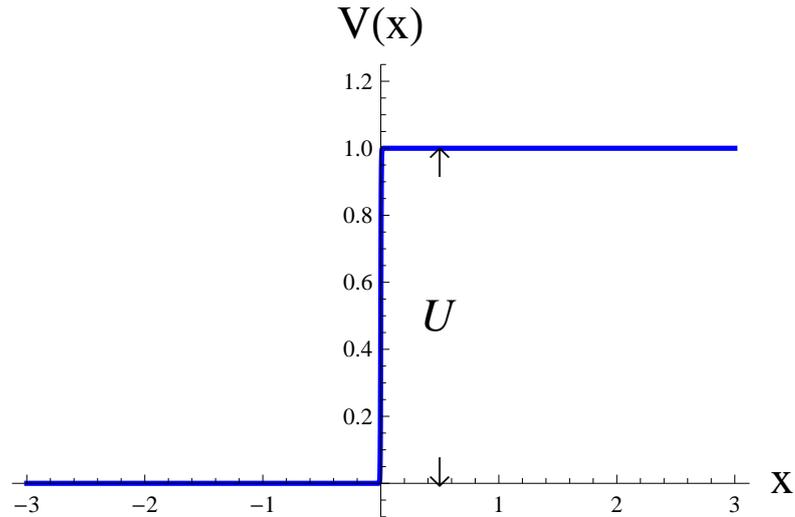


Abbildung 6.1: Stufenpotential

Für $0 < E < U$ sagt die klassische Mechanik voraus, dass alle Teilchen im Strahl ihre Bewegungsrichtung umkehren, d.h. die Teilchen werden an der Potentialstufe **total reflektiert**. Im Fall $U < E$ dagegen werden gemäß der klassischen Mechanik *alle* im Strahl befindlichen Teilchen über die Barriere hinweg fliegen.

Was sagt die Quantenmechanik? Zunächst ordnen wir den Teilchen mit Energie $E > 0$ in einem stationären Strahl eine stationäre Wellenfunktion

$$\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (6.13)$$

zu. Für $E > U$ setzen wir an

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A_E^{(in)} e^{ik_E x} + A_E^{(r)} e^{-ik_E x} & \text{falls } x < 0, \\ A_E^{(t)} e^{iq_E x} & \text{falls } x > 0, \end{cases} \quad (6.14)$$

dagegen für $0 < E < U$:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A_E^{(in)} e^{ik_E x} + A_E^{(r)} e^{-ik_E x} & \text{falls } x < 0, \\ A_E^{(t)} e^{-\kappa_E x} & \text{falls } x > 0. \end{cases} \quad (6.15)$$

Der von links einlaufenden Welle $A_E^{(in)} e^{i(k_E x - \frac{E}{\hbar}t)}$ ist im Gebiet $x < 0$ eine in entgegengesetzter Richtung propagierende Welle $A_E^{(r)} e^{i(-k_E x - \frac{E}{\hbar}t)}$ überlagert. Damit unser Ansatz für $\Psi_E(x, t)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_E(x, t) = \hat{H} \Psi_E(x, t) \quad (6.16)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x),$$

wobei $V(x)$ wie in Gl. (6.12) definiert ist, muss also gelten:

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x). \quad (6.17)$$

Für $E > U$ führt das auf

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k_E^2}{2m} = \frac{\hbar^2 q_E^2}{2m} + U \\ k_E &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ q_E &= \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}, \end{aligned} \quad (6.18)$$

und für $0 < E < U$ ergibt sich notwendig:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k_E^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \kappa_E^2}{2m} + U \\ k_E &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \kappa_E &= \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Da $\Psi_E(x, t)$ als Lösung der Schrödinger-Gleichung für alle Werte x eine stetig differenzierbare Funktion ist, sind insbesondere an der Stelle $x = 0$ an die Funktion $\psi_E(x)$ zwei Anschlussbedingungen zu stellen:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0^-} \psi_E(x) &= \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi_E(x) \\ \lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x) &= \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Dies ergibt zwei lineare Gleichungen zur Bestimmung der Amplituden $A_E^{(r)}$ und $A_E^{(t)}$. Für $E > U$ finden wir

$$\begin{aligned} A_E^{(in)} + A_E^{(r)} &= A_E^{(t)} \\ k_E (A_E^{(in)} - A_E^{(r)}) &= q_E A_E^{(t)}, \end{aligned} \quad (6.21)$$

und weiter:

$$\begin{aligned} A_E^{(t)} &= \frac{2}{1 + \frac{q_E}{k_E}} A_E^{(in)} \\ A_E^{(r)} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{q_E}{k_E}\right) A_E^{(t)} = \frac{1 - \frac{q_E}{k_E}}{1 + \frac{q_E}{k_E}} A_E^{(in)} \\ \frac{q_E}{k_E} &= \sqrt{1 - \frac{U}{E}}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Für $0 < E < U$ finden wir

$$\begin{aligned} A_E^{(in)} + A_E^{(r)} &= A_E^{(t)} \\ ik_E (A_E^{(in)} - A_E^{(r)}) &= -\kappa_E A_E^{(t)}, \end{aligned} \quad (6.23)$$

und daraus:

$$\begin{aligned} A_E^{(t)} &= \frac{2}{1 + \frac{i\kappa_E}{k_E}} A_E^{(in)} \\ A_E^{(r)} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\kappa_E}{k_E}\right) A_E^{(t)} = \frac{1 - \frac{i\kappa_E}{k_E}}{1 + \frac{i\kappa_E}{k_E}} A_E^{(in)} \\ \frac{\kappa_E}{k_E} &= \sqrt{\frac{U}{E}} - 1. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung für Teilchen, die von links kommend mit Energie $E = E_p = \frac{p^2}{2m} > 0$ auf die Potentialstufe (6.12) auftreffen, ergeben sich nach dem Gesagten zu

$$\begin{aligned} E > U & \quad (6.25) \\ \Psi_E(x, t) &= A_E^{(in)} \begin{cases} \left(e^{ik_E x} + \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{-ik_E x} \right) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & \text{falls } x < 0, \\ \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{i\sqrt{1 - \frac{U}{E}} k_E x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & \text{falls } x > 0, \end{cases} \\ 0 < E < U & \\ \Psi_E(x, t) &= A_E^{(in)} \begin{cases} \left(e^{ik_E x} + \frac{1 - i\sqrt{\frac{U}{E} - 1}}{1 + i\sqrt{\frac{U}{E} - 1}} e^{-ik_E x} \right) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & \text{falls } x < 0, \\ \frac{2}{1 + i\sqrt{\frac{U}{E} - 1}} e^{-\sqrt{\frac{U}{E} - 1} k_E x} e^{-\frac{iE}{\hbar} t} & \text{falls } x > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Dieser Lösung der Schrödinger-Gleichung entspricht ein stationärer Teilchenfluss

$$j_E(x) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\psi_E^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x) \right]. \quad (6.26)$$

Es folgt für $0 < E < U$:

$$\begin{aligned}
x &< 0 && (6.27) \\
j_E(x) &= \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \operatorname{Im} \left[\left(\frac{e^{-ik_E x}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} + \frac{e^{ik_E x}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{e^{ik_E x}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} + \frac{e^{-ik_E x}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} \right) \right] \\
&= \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \operatorname{Re} \left[\left(\frac{e^{-ik_E x}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} + \frac{e^{ik_E x}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} \right) \left(-\frac{e^{ik_E x}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} + \frac{e^{-ik_E x}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} \right) \right] \\
&= |A_E^{(in)}|^2 \frac{\sqrt{2mE}}{m} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 - \frac{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{-2ik_E x} + \frac{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{2ik_E x} - 1 \\ +1 - \frac{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{2ik_E x} + \frac{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{-2ik_E x} - 1 \end{bmatrix} \\
&\equiv 0.
\end{aligned}$$

Das Ergebnis $j_E(x) \equiv 0$ im Gebiet $x < 0$ bedeutet, der Strom der *einlaufenden* Teilchen wird durch einen **entgegengesetzt** fließenden Strom von *reflektierten* Teilchen *exakt* kompensiert:

$$\begin{aligned}
\rho_E &= |A_E^{(in)}|^2 && (6.28) \\
j_E^{(in)} &= \rho_E \frac{\hbar k_E}{m} \\
j_E^{(r)} &= \rho_E \frac{\hbar k_E}{m} \\
j_E &= j_E^{(in)} - j_E^{(r)} \equiv 0.
\end{aligned}$$

Diese Deutung ist in Übereinstimmung mit dem Ergebnis für den Teilchenfluss im Gebiet $x > 0$:

$$\begin{aligned}
x &> 0 && (6.29) \\
j_E(x) &= \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \\
&\times \operatorname{Im} \left[\left(\frac{2}{1-i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{-\sqrt{\frac{U}{E}-1} k_E x} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{1+i\sqrt{\frac{U}{E}-1}} e^{-\sqrt{\frac{U}{E}-1} k_E x} \right) \right] \\
&= -\frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \operatorname{Im} \left[\frac{4E}{U} e^{-2\sqrt{\frac{U}{E}-1} k_E x} \right] \\
&\equiv 0.
\end{aligned}$$

Dass man für $0 < E < U$ im Gebiet $x > 0$ für den stationären Teilchenstrom den Wert $j_E(x) \equiv 0$ erhält, entspricht der klassischen Anschauung: alle mit Energie

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

$0 < E < U$ von links auf die Stufe bei $x = 0$ auftreffenden Teilchen werden **total reflektiert**.

Welches Ergebnis ergibt sich für die in das Gebiet $x > 0$ transmittierten Teilchen für $E > U$? Klassisch erwartet man, da die Energie E der einlaufenden Teilchen größer ist als die Stufenhöhe U , dass der Teilchenfluss $j_E^{(t)}$ der transmittierten Teilchen gleich dem Teilchenfluss $j_E^{(in)}$ der einlaufenden Teilchen ist, also $j_E^{(t)} \equiv j_E^{(in)}$. Die quantenmechanische Rechnung liefert dagegen das Ergebnis:

$$\begin{aligned}
 j_E^{(t)} &= j_E(\infty) = \lim_{x \rightarrow \infty} j_E(x) & (6.30) \\
 &= \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \\
 &\quad \times \text{Im} \left[\left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{-i\sqrt{1 - \frac{U}{E}} k_E x} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{i\sqrt{1 - \frac{U}{E}} k_E x} \right) \right] \\
 &= \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar} \text{Re} \left[\left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \right] \\
 &= |A_E^{(in)}|^2 \frac{\hbar k_E}{m} \frac{4 \cdot \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2} \\
 &= j_E^{(in)} \frac{4 \cdot \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2} \\
 &< j_E^{(in)}.
 \end{aligned}$$

Die überraschende Eigenschaft, dass der transmittierte Teilchenstrom **kleiner** ist als der einlaufende Teilchenstrom, also $j_E^{(t)} < j_E^{(in)}$ für den Fall $E > U$ im Gebiet $x > 0$, ist in der Tat ein rein quantenmechanischer Effekt! Während die klassische Mechanik $j_E^{(t)} \equiv j_E^{(in)}$ für $x > 0$ vorhersagt, zeigt die Quantenmechanik, dass nicht alle Teilchen mit Sicherheit in das Gebiet $x > 0$ gelangen können, da offenbar ein Bruchteil der Teilchen auch im Fall $E > U$ reflektiert wird („over the barrier reflection“).

Wir berechnen jetzt noch für diesen Fall, also für $E > U$, die Stromdichte $j_E(x)$ im Gebiet $x < 0$ für $x \rightarrow -\infty$:

$$\begin{aligned}
 &j_E(-\infty) & (6.31) \\
 &= \lim_{x \rightarrow -\infty} \text{Im} \left[\psi_E^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x) \right] \\
 &= \frac{\hbar}{m} |A_E^{(in)}|^2 \text{Im} \left[\left(\frac{e^{-ik_E x}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{ik_E x} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{e^{ik_E x}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{-ik_E x} \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= |A_E^{(in)}|^2 \frac{\hbar k_E}{m} \operatorname{Re} \left[\left(\begin{array}{c} e^{-ik_E x} \\ + \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{ik_E x} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} e^{ik_E x} \\ - \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} e^{-ik_E x} \end{array} \right) \right] \\
&= |A_E^{(in)}|^2 \frac{\hbar k_E}{m} \operatorname{Re} \left[1 + \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \underbrace{\left(e^{2ik_E x} - e^{-2ik_E x} \right)}_{=2i \sin(2k_E x)} - \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \right] \\
&= j_E^{(in)} \cdot \left[1 - \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \right] \\
&= j_E^{(in)} - j_E^{(r)}.
\end{aligned}$$

Hier ist

$$j_E^{(in)} = |A_E^{(in)}|^2 \frac{\hbar k_E}{m} \quad (6.32)$$

die Stromdichte der einlaufenden Teilchen, während

$$j_E^{(r)} = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 j_E^{(in)}$$

die Stromdichte der reflektierten Teilchen beschreibt. Die für die Potentialstufe Gl. (6.12) durchgeführte Rechnung zeigt dabei:

$$j_E^{(in)} = j_E^{(r)} + j_E^{(t)}. \quad (6.33)$$

Dies ist in der Tat eine allgemein gültige Identität, die von irgendwelchen Details des streuenden Potentials $V(x)$ gar nicht abhängig ist. Aufgrund der Eigenschaft

$$\operatorname{div} j_E(x) = 0 = \frac{d}{dx} j_E(x) \quad (6.34)$$

für eine stationäre Stromdichte $j_E(x)$ folgt nämlich immer:

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} j_E(x) = [j_E(x)]_{x=-\infty}^{x=\infty} = j_E(\infty) - j_E(-\infty). \quad (6.35)$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
j_E(\infty) &= j_E^{(t)} \\
j_E(-\infty) &= j_E^{(in)} - j_E^{(r)},
\end{aligned} \quad (6.36)$$

woraus sofort Gl. (6.33) folgt.

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Die Quotienten der Teilchenströme bezogen auf die Stromdichte $j_E^{(in)}$ der einlaufenden Teilchen nennt man **Reflektionskoeffizient** R_E und **Transmissionskoeffizient** T_E :

$$\begin{aligned} R_E &= \frac{j_E^{(r)}}{j_E^{(in)}} \\ T_E &= \frac{j_E^{(t)}}{j_E^{(in)}}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Aufgrund der Teilchenzahlerhaltung gilt demnach für beliebige Streupotentiale $V(x)$:

$$R_E + T_E = 1. \quad (6.38)$$

Für das in Gl. (6.12) definierte Stufenpotential ergibt sich nach dem Gesagten für $0 < E < U$:

$$\begin{aligned} R_E &= 1 \\ T_E &= 0. \end{aligned}$$

Dagegen gilt für $E > U$:

$$\begin{aligned} R_E &= \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \\ T_E &= \frac{4 \cdot \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2}. \end{aligned} \quad (6.39)$$

In der Tat bestätigt man leicht:

$$\begin{aligned} R_E + T_E &= \frac{\left(1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2 + 4 \cdot \sqrt{1 - \frac{U}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2} \\ &= \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E}}\right)^2} \\ &= 1. \end{aligned}$$

In Abb. 6.2 ist der Verlauf des Transmissionskoeffizienten T_E vs. $\frac{U}{E}$ graphisch dargestellt. Eine erhebliche Abweichung vom klassischen Ergebnis $T_E \equiv 1$ ist erst in der Nähe der Schwelle $E \gtrsim U$ festzustellen.

Zur Beschreibung **eines** propagierenden Teilchens müssen wir nach den Ausführungen des vorigen Kapitels viele stationäre Wellenfunktionen $\Psi_E(x, t)$, wie in

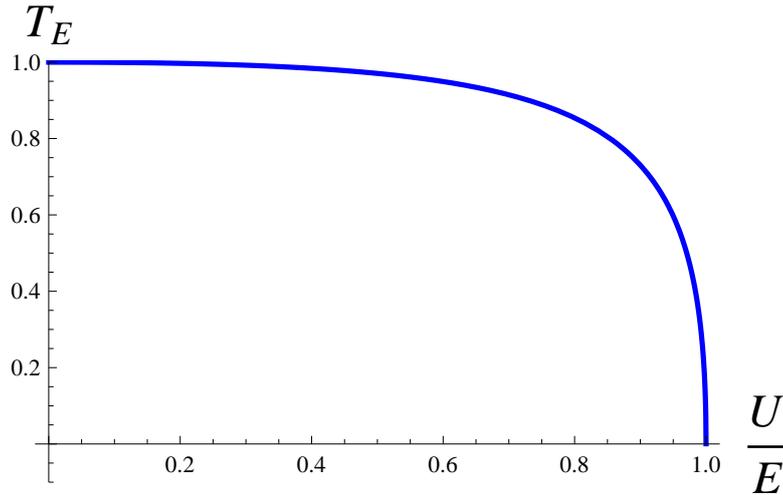


Abbildung 6.2: Transmissionskoeffizient T_E für Stufenpotential der Höhe U .

Gl. (6.25) definiert, zu einem Wellenpaket superponieren. Wir wählen der Einfachheit halber eine auf Eins normierte Verteilung von Impulsen für die einlaufenden Teilchen wie im vorherigen Kapitel, siehe Gl.(5.18), mit kleiner Breite 2σ um den Mittelwert p_C

$$A_{E_p}^{(in)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sigma}} & \text{falls } -\sigma < p - p_C < \sigma, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.40)$$

Wir nehmen ferner an, dass die Energie $E_p = \frac{p^2}{2m}$ sämtlicher das Wellenpaket $\Psi(x, t)$ zusammensetzenden stationären Lösungen $\Psi_{E_p}(x, t)$ oberhalb des Schwellenwertes U liegen soll:

$$E_p > U \quad (6.41)$$

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} \begin{cases} \left(e^{i\frac{p}{\hbar}x} + \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \right) e^{-\frac{iE_p}{\hbar}t} & \text{falls } x < 0, \\ \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}} e^{i\sqrt{1 - \frac{U}{E_p}} \frac{p}{\hbar}x} e^{-\frac{iE_p}{\hbar}t} & \text{falls } x > 0. \end{cases}$$

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Mit den Definitionen

$$\begin{aligned}\Psi^{(in)}(x, t) &= \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} e^{i\frac{p}{\hbar}x} e^{-\frac{iE_p}{\hbar}t} \text{ falls } x < 0 \\ \Psi^{(r)}(x, t) &= \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} e^{-\frac{iE_p}{\hbar}t} \text{ falls } x < 0 \\ \Psi^{(t)}(x, t) &= \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}} e^{i\sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}\frac{p}{\hbar}x} e^{-\frac{iE_p}{\hbar}t} \text{ falls } x > 0\end{aligned}$$

folgt sofort

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \Psi^{(in)}(x, t) + \Psi^{(r)}(x, t) & \text{falls } x < 0, \\ \Psi^{(t)}(x, t) & \text{falls } x > 0. \end{cases}$$

In Abb. 6.3 ist die dem Wellenpaket $\Psi(x, t)$ zugeordnete Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$|\Psi(x, t)|^2 = \begin{cases} |\Psi^{(in)}(x, t) + \Psi^{(r)}(x, t)|^2 & \text{falls } x < 0, \\ |\Psi^{(t)}(x, t)|^2 & \text{falls } x > 0 \end{cases}$$

für verschiedene Zeiten vor und nach dem Auftreffen des Teilchens auf die Potentialstufe Gl. (6.12) graphisch dargestellt. Zur numerischen Berechnung von $\Psi(x, t)$ ist es zweckmäßig, die Einheiten für Länge x_0 , Zeit t_0 , Energie E_0 und Impuls p_0 eines Teilchens mit Masse m so zu wählen, dass gilt

$$\frac{p_0 x_0}{\hbar} = 1 = \frac{E_0 t_0}{\hbar}. \quad (6.42)$$

Mit $p_0 = m \frac{x_0}{t_0}$ folgt dann notwendig $E_0 = \frac{p_0^2}{m}$. In der Tat

$$E_0 t_0 = \frac{p_0^2}{m} t_0 = p_0 \frac{p_0}{m} t_0 = p_0 \frac{x_0}{t_0} t_0 = p_0 x_0. \quad (6.43)$$

Die Energieeinheit E_0 im von uns gewählten Einheitensystem ist somit gleich der *doppelten* kinetischen Energie eines mit Geschwindigkeit $\frac{x_0}{t_0}$ gleichförmig bewegten freien Teilchens der Masse m . Wir erhalten $\frac{px - E_p t}{\hbar} = \frac{p_0 x_0}{\hbar} \bar{p} \bar{x} - \frac{E_0 t_0}{\hbar} \bar{E}_p \bar{t} = \bar{p} \bar{x} - \bar{E}_p \bar{t}$, wobei $\bar{p} = \frac{p}{p_0}$, $\bar{x} = \frac{x}{x_0}$, $\bar{t} = \frac{t}{t_0}$, $\bar{E}_p = \frac{E_p}{E_0} = \frac{\bar{p}^2}{2}$. Die Stufenhöhe ist in Abb. 6.3 zu $\frac{U}{E_0} = 1$ gewählt. Die Breite der Impulsverteilung $A_{E_p}^{(in)}$ ist zu $\frac{2\sigma}{E_0} = 0.5$, der mittlere Impuls der Verteilung zu $\frac{p_c}{p_0} = 1.675$ gewählt. Für die Energie des kleinsten Impulses $p_c - \sigma$ im Paket ergibt sich dann ein Wert, der zwar in der Nähe von U liegt, aber immer noch größer als die Höhe U der Potentialstufe ist: $\frac{E_{(p_c - \sigma)}}{E_0} = \frac{(\frac{p_c - \sigma}{p_0})^2}{2} = 1.01531 > 1 = \frac{U}{E_0}$. Die Parameter sind so aufeinander abgestimmt, dass

klassisch keine totale Reflektion erfolgen kann. Die Abb. 6.3 zeigt verschiedene Momentaufnahmen der betreffenden Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\Psi(x, t)|^2$ für fixe Zeitpunkte $\frac{t}{t_0} \in \{-40, -20, -5, 0, 5, 20, 50\}$ als Funktion der Ortskoordinate $\frac{x}{x_0}$.

Für $x < 0$ stammt der Hauptbeitrag zu $|\Psi(x, t)|^2$ von der Funktion $\Psi^{(in)}(x, t)$ zu früheren Zeiten $t < 0$ her, also bevor das Teilchen die Potentialstufe bei $x = 0$ erreicht hat, während zu späteren Zeiten $t > 0$ der Hauptbeitrag zu $|\Psi(x, t)|^2$ von den beiden Wellenfunktionen $\Psi^{(r)}(x, t)$ und $\Psi^{(t)}(x, t)$ herrührt, also nachdem das Teilchen bei $x = 0$ reflektiert bzw. transmittiert wurde. Für $t \simeq 0$ interferiert die einlaufende Wellenfunktion $\Psi^{(in)}(x, t)$ mit der reflektierten Wellenfunktion $\Psi^{(r)}(x, t)$, was im Gebiet $x < 0$ in der Umgebung der Barriere zu merklichen Interferenzen führt.

Es sei betont, dass bei einer Messung der Position *eines* Teilchens das betreffende Teilchen immer entweder links oder rechts von der Potentialstufe bei $x = 0$ angetroffen wird, es findet **keine** Zerlegung des ursprünglichen Teilchens in links und rechts laufende Fragmente statt. Erst bei einer Wiederholung des Streuexperiments mit vielen identisch präparierten einlaufenden Teilchen erhält man eine Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür, das Teilchen links bzw. rechts von der Barriere anzutreffen!

Eine andere Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\Psi(x, t)|^2$ für ein einlaufendes Teilchen ist in Abb. 6.4 für die Zeitpunkte $\frac{t}{t_0} \in \{-40, -20, -5, 0, 5, 20, 50\}$ als Funktion der Ortskoordinate $\frac{x}{x_0}$ dargestellt. Die Stufenhöhe des Potentials ist dabei wie schon in Abb. 6.3 zu $\frac{U}{E_0} = 1$ gewählt. Auch die Breite der Impulsverteilung $A_{E_p}^{(in)}$ stimmt mit derjenigen in Abb. 6.3 überein, also $\frac{2\sigma}{E_0} = 0.5$. Allerdings liegt der Mittelwert der Impulsverteilung jetzt bei einem kleineren Wert $\frac{p_c}{p_0} = 1.125$, um sicherzustellen, dass die Energie des größten im Wellenpaket vorkommenden Impulses $p_c + \sigma$ immer noch knapp unterhalb der Stufenhöhe U liegt: $\frac{E(p_c + \sigma)}{E_0} = 0.945$. Demnach kann so ein Wellenpaket in der Region $x > 0$ nicht propagieren und es erfolgt **Totalreflektion** bei $x = 0$.

Das betrachtete Wellenpaket $\Psi(x, t)$ ist eine quadratintegrierbare Lösung der Schrödinger-Gleichung, d.h. es gilt

$$|C_\Psi|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^\dagger(x, t) \Psi(x, t) < \infty,$$

wie wir nun zeigen. Dabei dürfen wir aufgrund von Gl. (3.2) zur Berechnung von $|C_\Psi|^2$ insbesondere den Zeitpunkt $t = 0$ wählen:

$$|C_\Psi|^2 = \lim_{X \rightarrow \infty} \int_{-X}^X dx \Psi^\dagger(x, t = 0) \Psi(x, t = 0).$$

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

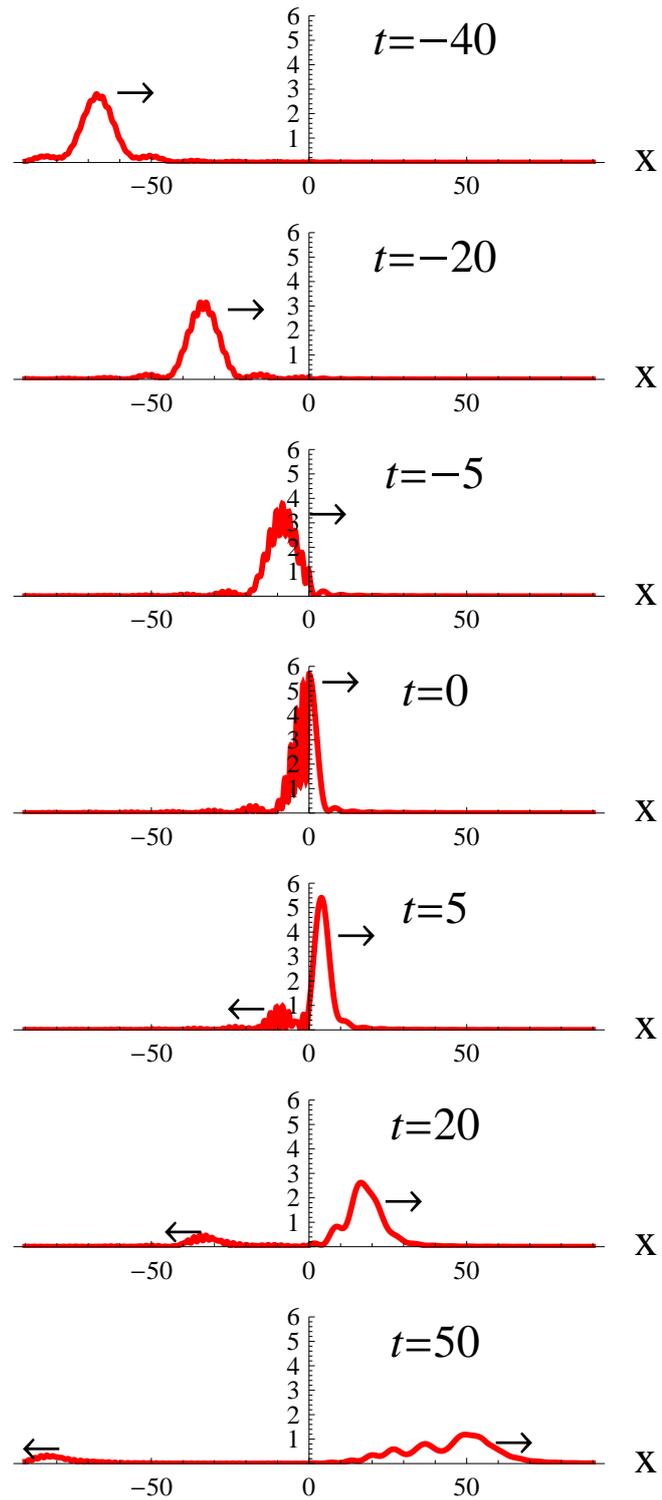


Abbildung 6.3: „Over the barrier reflection“

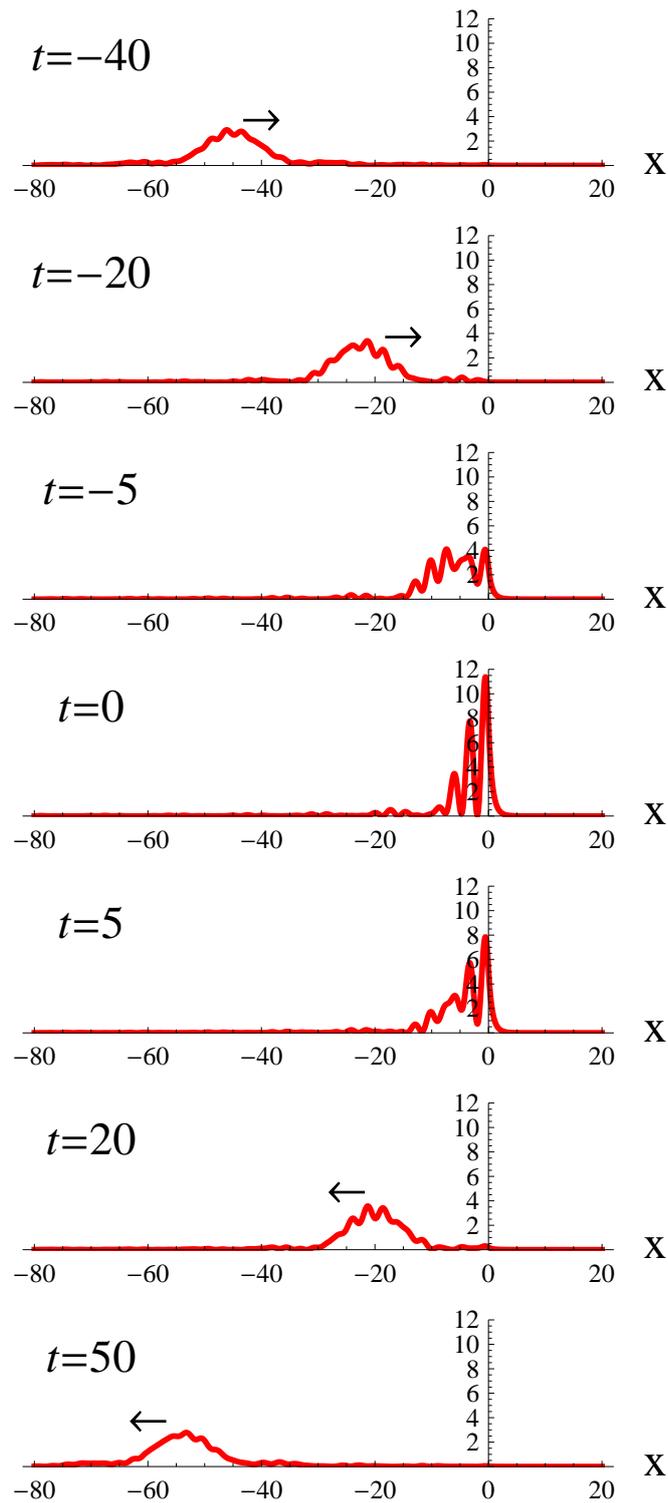


Abbildung 6.4: Totalreflektion

6 Elastische Streuung von Teilchen am Stufenpotential ($D = 1$)

Definiere für eine übersichtlichere Rechnung die Funktion

$$w(p) := \sqrt{1 - \frac{U}{E_p}}. \quad (6.44)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} |C_\Psi|^2 &= \lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_{p'}}^{(in)} \\ &\quad \times \left\{ \int_{-X}^0 dx \left(e^{-i\frac{p}{\hbar}x} + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} e^{i\frac{p}{\hbar}x} \right) \left(e^{i\frac{p'}{\hbar}x} + \frac{1-w(p')}{1+w(p')} e^{-i\frac{p'}{\hbar}x} \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_0^X dx \left(\frac{2}{1+w(p)} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \right) \left(\frac{2}{1+w(p')} e^{i\frac{p'}{\hbar}x} \right) \right\} \\ &= \lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)} \\ &\quad \times \left\{ \int_{-X}^0 dx \left(1 + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \cdot \frac{1-w(p')}{1+w(p')} \right) e^{-i\frac{p-p'}{\hbar}x} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-X}^0 dx \frac{1-w(p')}{1+w(p')} e^{-i\frac{p+p'}{\hbar}x} + \int_{-X}^0 dx \frac{1-w(p)}{1+w(p)} e^{i\frac{p+p'}{\hbar}x} \right. \\ &\quad \left. + \int_0^X dx \frac{2}{1+w(p)} \cdot \frac{2}{1+w(p')} e^{-i\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}x} \right\}. \end{aligned}$$

Da $|C_\Psi|^2$ eine (positive) reelle Zahl ist, sollte der Imaginärteil des Integrals auf der rechten Seite identisch verschwinden. In der Tat liefert Symmetrisieren des Integranden nach Umbenennung der Integrationsvariablen $(p, p') \rightarrow (p', p)$:

$$\begin{aligned} |C_\Psi|^2 &= \lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)} \quad (6.45) \\ &\quad \times \left\{ \int_{-X}^0 dx \left(1 + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \cdot \frac{1-w(p')}{1+w(p')} \right) \frac{1}{2} \left(e^{-i\frac{p-p'}{\hbar}x} + e^{i\frac{p-p'}{\hbar}x} \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_{-X}^0 dx \left(\frac{1-w(p')}{1+w(p')} + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \right) \frac{1}{2} \left(e^{-i\frac{p+p'}{\hbar}x} + e^{i\frac{p+p'}{\hbar}x} \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_0^X dx \frac{2}{1+w(p)} \cdot \frac{2}{1+w(p')} \frac{1}{2} \left(e^{-i\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}x} + e^{i\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}x} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)} \\
&\quad \times \left\{ \int_{-X}^0 dx \left(1 + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \cdot \frac{1-w(p')}{1+w(p')} \right) \cos\left(\frac{p-p'}{\hbar}x\right) \right. \\
&\quad + \int_{-X}^0 dx \left(\frac{1-w(p')}{1+w(p')} + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \right) \cos\left(\frac{p+p'}{\hbar}x\right) \\
&\quad \left. + \int_0^X dx \frac{2}{1+w(p)} \cdot \frac{2}{1+w(p')} \cos\left(\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}x\right) \right\} \\
&= \lim_{X \rightarrow \infty} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \cdot \frac{1-w(p')}{1+w(p')} \right) \frac{\sin\left(\frac{p-p'}{\hbar}X\right)}{\frac{p-p'}{\hbar}} \right. \\
&\quad + \left(\frac{1-w(p')}{1+w(p')} + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \right) \frac{\sin\left(\frac{p+p'}{\hbar}X\right)}{\frac{p+p'}{\hbar}} \\
&\quad \left. + \frac{2}{1+w(p)} \cdot \frac{2}{1+w(p')} \frac{\sin\left(\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}X\right)}{\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}} \right\}.
\end{aligned}$$

Sei

$$k \in \left\{ \frac{p-p'}{\hbar}, \frac{p+p'}{\hbar}, \frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar} \right\}.$$

Für $X \rightarrow \infty$ oszillieren die Integranden proportional zu einem Faktor $\frac{\sin(kX)}{k}$ derart rasch, dass im Grenzwert $X \rightarrow \infty$ für $k \neq 0$ der Beitrag des Integranden zum Integral über $dp dp' \dots$ gleich Null ist. Der Fall $k = 0$ bedarf allerdings einer gesonderten Betrachtung. In Abb. 6.5 ist verdeutlicht, wie die Kurvenschar $\frac{\sin(kX)}{k}$ im Grenzwert $X \rightarrow \infty$ gegen eine Deltafunktion strebt:

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{\sin(kX)}{k} = \pi \delta(k). \quad (6.46)$$

Im Endergebnis wird das Doppelintegral über dp bzw. dp' auf ein einfaches Integral, z.B. nur über die Variable p , reduziert. Somit folgt

$$\begin{aligned}
|C_\Psi|^2 &= \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{dp'}{2\pi\hbar} A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)} \left\{ \left(1 + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \cdot \frac{1-w(p')}{1+w(p')} \right) \pi \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \right. \\
&\quad + \left(\frac{1-w(p')}{1+w(p')} + \frac{1-w(p)}{1+w(p)} \right) \pi \delta\left(\frac{p+p'}{\hbar}\right) \\
&\quad \left. + \frac{2}{1+w(p)} \cdot \frac{2}{1+w(p')} \pi \delta\left(\frac{w(p)p-w(p')p'}{\hbar}\right) \right\}.
\end{aligned}$$

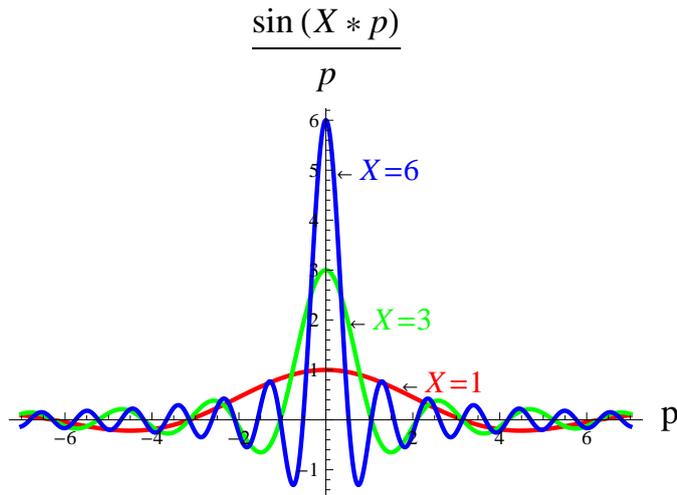


Abbildung 6.5: Kurvenschar konvergiert gegen eine Deltafunktion für $X \rightarrow \infty$.

Der Term in der zweiten Zeile liefert keinen Beitrag, da die Funktion $A_{E_p}^{(in)} A_{E_{p'}}^{(in)}$ für $p = p' = 0$ identisch Null ist. Die Terme in der ersten Zeile und der dritten Zeile liefern für $p = p'$ einen Beitrag. Die δ -Funktion im Term in der dritten Zeile ist aufgrund der Relation

$$\delta [F(p)] = \sum_m \frac{1}{|F'(p_m)|} \delta(p - p_m) \quad (6.47)$$

mit

$$\begin{aligned} F(p_m) &= 0 \\ F'(p) &= \frac{d}{dp} F(p) \\ F'(p_m) &\neq 0 \end{aligned} \quad (6.48)$$

äquivalent zu

$$\delta\left(\frac{w(p)p - w(p')p'}{\hbar}\right) = w(p)\delta\left(\frac{p - p'}{\hbar}\right). \quad (6.49)$$

Also

$$\begin{aligned} |C_\Psi|^2 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} [A_{E_p}^{(in)}]^2 \left\{ 1 + \left(\frac{1-w(p)}{1+w(p)} \right)^2 + \left(\frac{2}{1+w(p)} \right)^2 w(p) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} [A_{E_p}^{(in)}]^2 \underbrace{\left[1 + \frac{(1-w(p))^2 + 4w(p)}{(1+w(p))^2} \right]}_{=2} \\ &= \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} [A_{E_p}^{(in)}]^2 = \frac{\pi\hbar}{\sigma} \int_{p_c-\sigma}^{p_c+\sigma} \frac{dp}{2\pi\hbar} \\ &= 1. \end{aligned}$$

Das Wellenpaket $\Psi(x, t)$ in Gl. (6.41) ist auf Eins normiert, da die Amplitudenfunktion $A_{E_p}^{(in)}$ bereits normiert war!

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Wir betrachten eine kastenförmige Potentialbarriere (siehe Abb. 7.1):

$$V(x) = \begin{cases} U & \text{falls } |x| < a, \\ 0 & \text{falls } |x| > a. \end{cases}$$

Da es sich um ein abschnittsweise konstantes Potential handelt, sind die Lösungen

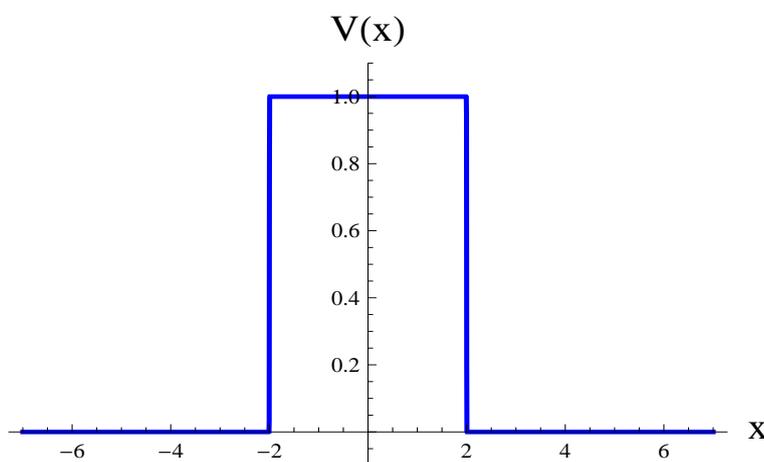


Abbildung 7.1: Kastenförmige Potentialbarriere der Höhe $U > 0$.

der Schrödinger-Gleichung im Intervall $|x| < a$ und in den beiden angrenzenden Intervallen $x > a$ bzw. $x < -a$ Linearkombinationen von Exponentialfunktionen. Für $U > 0$ besitzt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_E(x, t) = \hat{H} \Psi_E(x, t)$$

zum Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

ein Kontinuum von stationären Lösungen $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ mit positiver Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$, während für $U < 0$, wie wir im Folgenden zeigen werden,

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

neben einem Kontinuum stationärer Lösungen mit $E > 0$ auch eine diskrete Anzahl N von Lösungen mit negativer Energie $E = E_n < 0$, $n = 1, 2, \dots, N$ existiert. Dabei gilt in $D = 1$ räumlichen Dimensionen $N \geq 1$, d.h. es gibt mindestens einen gebundenen Zustand.

Wir betrachten zuerst den Fall $U > 0$. In Kapitel 6 betrachteten wir ein aus dem Gebiet $x < 0$ auf eine Potentialstufe der Höhe $U > 0$ zulaufendes Wellenpaket, welches ausschließlich aus stationären Zuständen mit Energie $0 < E_p < U$ zusammengesetzt war. Dabei stellte sich heraus (siehe Abb. 6.4, dass für Zeiten $t \simeq 0$ eine endlich große Wahrscheinlichkeit dafür existiert, das Teilchen auch in der klassisch verbotenen Zone $x > 0$ anzutreffen. Allerdings wurde der Effekt mit zunehmender Eindringtiefe $x > 0$ in die verbotene Zone *exponentiell klein*. Es ist daher naheliegender zu fragen, ob bei einer Potentialbarriere der Höhe $U > 0$ mit **endlich großer Breite** $2a$, ein Teilchen durch die Barriere hindurch auf die andere Seite gelangen kann, auch wenn das betreffende Wellenpaket aus lauter stationären Zuständen mit Energie $0 < E < U$ zusammengesetzt ist.

Zur Konstruktion so eines Wellenpakets machen für die stationären Wellenfunktionen den Ansatz

$$\begin{aligned} \Psi_E(x, t) &= \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ \psi_E(x) &= \begin{cases} A_E^{(in)} e^{ik_E x} + A_E^{(r,1)} e^{-ik_E x} & \text{falls } x < -a, \\ A_E^{(t,1)} e^{-\kappa_E x} + A_E^{(r,2)} e^{\kappa_E x} & \text{falls } -a < x < a, \\ A_E^{(t,2)} e^{ik_E x} & \text{falls } a < x. \end{cases} \end{aligned}$$

Aus der Forderung

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

folgt dann sofort

$$\begin{aligned} 0 < E &= \frac{\hbar^2 k_E^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \kappa_E^2}{2m} + U < U \\ k_E &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \kappa_E &= \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} = k_E \cdot \sqrt{\frac{U}{E} - 1}. \end{aligned}$$

Um eine für *alle* x stetig differenzierbare stationäre Wellenfunktion zu erhalten, sind insbesondere an den Sprungstellen des Potentials bei $x = \pm a$ die folgenden

Anschlussbedingungen zu erfüllen:

$$\lim_{x \rightarrow -a-0^+} \psi_E(x) = \lim_{x \rightarrow -a+0^+} \psi_E(x) \quad (7.1)$$

$$\lim_{x \rightarrow -a-0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x) = \lim_{x \rightarrow -a+0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x)$$

$$\lim_{x \rightarrow a-0^+} \psi_E(x) = \lim_{x \rightarrow a+0^+} \psi_E(x) \quad (7.2)$$

$$\lim_{x \rightarrow a-0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x) = \lim_{x \rightarrow a+0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_E(x).$$

Das sind vier lineare Gleichungen zur Bestimmung der vier unbekanntenen Amplituden $A_E^{(r,1)}$, $A_E^{(t,1)}$, $A_E^{(r,2)}$, $A_E^{(t,2)}$:

$$\begin{aligned} x &= -a \\ A_E^{(in)} e^{-ik_E a} + A_E^{(r,1)} e^{ik_E a} &= A_E^{(t,1)} e^{\kappa_E a} + A_E^{(r,2)} e^{-\kappa_E a} \end{aligned} \quad (7.3)$$

$$ik_E \left(A_E^{(in)} e^{-ik_E a} - A_E^{(r,1)} e^{ik_E a} \right) = \kappa_E \left(-A_E^{(t,1)} e^{\kappa_E a} + A_E^{(r,2)} e^{-\kappa_E a} \right) \quad (7.4)$$

$$\begin{aligned} x &= a \\ A_E^{(t,1)} e^{-\kappa_E a} + A_E^{(r,2)} e^{\kappa_E a} &= A_E^{(t,2)} e^{ik_E a} \end{aligned} \quad (7.5)$$

$$\kappa_E \left(-A_E^{(t,1)} e^{-\kappa_E a} + A_E^{(r,2)} e^{\kappa_E a} \right) = ik_E A_E^{(t,2)} e^{ik_E a}. \quad (7.6)$$

Zur Bestimmung des Transmissionskoeffizienten T_E ist der stationäre Teilchenstrom im Intervall $x > 0$ zu berechnen. Dieser ist im vorliegenden Fall zu

$$j_E^{(t)} = \left| A_E^{(t,2)} \right|^2 \frac{\hbar k_E}{m} \quad (7.7)$$

gegeben. Aus (7.5) und (7.6) erhalten wir für die Unbekannten $A_E^{(t,1)}$ und $A_E^{(r,2)}$:

$$A_E^{(r,2)} = \frac{\kappa_E + ik_E}{2\kappa_E} e^{-(\kappa_E - ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)} \quad (7.8)$$

$$A_E^{(t,1)} = \frac{\kappa_E - ik_E}{2\kappa_E} e^{(\kappa_E + ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)}.$$

Einsetzen in (7.3) und (7.4) ergibt zwei Gleichungen für die Unbekannten $A_E^{(r,1)}$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

und $A_E^{(t,2)}$:

$$\begin{aligned}
 & A_E^{(in)} e^{-ik_E a} + A_E^{(r,1)} e^{ik_E a} & (7.9) \\
 & = A_E^{(t,1)} e^{\kappa_E \cdot a} + A_E^{(r,2)} e^{-\kappa_E \cdot a} \\
 & = \frac{\kappa_E - ik_E}{2\kappa_E} e^{(2\kappa_E + ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)} + \frac{\kappa_E + ik_E}{2\kappa_E} e^{-(2\kappa_E - ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)} \\
 & = \left(\frac{\kappa_E - ik_E}{2\kappa_E} e^{2\kappa_E \cdot a} + \frac{\kappa_E + ik_E}{2\kappa_E} e^{-2\kappa_E \cdot a} \right) e^{ik_E \cdot a} A_E^{(t,2)} \\
 & = \left[\cosh(2\kappa_E \cdot a) - \frac{ik_E}{\kappa_E} \sinh(2\kappa_E \cdot a) \right] e^{ik_E \cdot a} A_E^{(t,2)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & A_E^{(in)} e^{-ik_E a} - A_E^{(r,1)} e^{ik_E a} & (7.10) \\
 & = \frac{\kappa_E}{ik_E} \left(-A_E^{(t,1)} e^{\kappa_E \cdot a} + A_E^{(r,2)} e^{-\kappa_E \cdot a} \right) \\
 & = \frac{\kappa_E}{ik_E} \left(-\frac{\kappa_E - ik_E}{2\kappa_E} e^{(2\kappa_E + ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)} + \frac{\kappa_E + ik_E}{2\kappa_E} e^{-(2\kappa_E - ik_E) \cdot a} A_E^{(t,2)} \right) \\
 & = \left(-\frac{\kappa_E - ik_E}{2ik_E} e^{2\kappa_E \cdot a} + \frac{\kappa_E + ik_E}{2ik_E} e^{-2\kappa_E \cdot a} \right) e^{ik_E \cdot a} A_E^{(t,2)} \\
 & = \left[\cosh(2\kappa_E \cdot a) + i \frac{\kappa_E}{k_E} \sinh(2\kappa_E \cdot a) \right] e^{ik_E \cdot a} A_E^{(t,2)}.
 \end{aligned}$$

Addieren von (7.9) und (7.10) liefert

$$2A_E^{(in)} e^{-ik_E a} = \left[2 \cosh(2\kappa_E \cdot a) + i \left(\frac{\kappa_E}{k_E} - \frac{k_E}{\kappa_E} \right) \sinh(2\kappa_E \cdot a) \right] e^{ik_E \cdot a} A_E^{(t,2)},$$

also

$$A_E^{(t,2)} = \frac{e^{-ik_E a}}{\cosh(2\kappa_E \cdot a) + \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa_E}{k_E} - \frac{k_E}{\kappa_E} \right) \sinh(2\kappa_E \cdot a)} A_E^{(in)}. \quad (7.11)$$

Somit ist der Transmissionskoeffizient bestimmt zu

$$\begin{aligned}
0 &< E < U \\
T_E &= \frac{j_E^{(t)}}{j_E^{(in)}} = \frac{|A_E^{(t,2)}|^2}{|A_E^{(in)}|^2} = \frac{1}{\cosh^2(2\kappa_E \cdot a) + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa_E}{k_E} - \frac{k_E}{\kappa_E} \right)^2 \sinh^2(2\kappa_E \cdot a)} \\
&= \frac{1}{1 + \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa_E}{k_E} - \frac{k_E}{\kappa_E} \right)^2 \right] \sinh^2(2\kappa_E \cdot a)} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa_E}{k_E} + \frac{k_E}{\kappa_E} \right)^2 \sinh^2(2\kappa_E \cdot a)} \\
&= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{U}{E}} - 1 + \frac{1}{\sqrt{\frac{U}{E}-1}} \right)^2 \sinh^2(2\kappa_E \cdot a)}
\end{aligned}$$

Es existiert offenbar für eine endlich dicke Barriere für $0 < E < U$ ein endlich großer Transmissionskoeffizient $T_E > 0$. Dieser rein quantenmechanische Effekt wird als **Tunneleffekt** bezeichnet. Auf die Barriere auftreffende Teilchen mit Energie $0 < E < U$, die gemäß der klassischen Mechanik total reflektiert werden, können in der Quantenmechanik mit endlich großer Wahrscheinlichkeit auf die andere Seite der Barriere „tunneln“. Allerdings wird der Effekt mit zunehmender Dicke $2a$ der Barriere *exponentiell* klein.

Der Tunneleffekt erklärt in der Kernphysik den Alpha-Zerfall und bildet in Sternen die Basis für die Fusion von Wasserstoff zu Helium. Er ist grundlegend für Anwendungen in der Halbleiterphysik und in der Supraleitungselektronik. Im sog. Rastertunnelmikroskop wird der Tunnelstrom durch eine Metallspitze, die vorsichtig über einer leitenden Oberfläche bewegt wird, als Funktion des Ortes der Spitze gemessen. In dem Fall ist die Tunnelbarriere das Vakuum zwischen Metallspitze und Oberfläche (z.B. Graphit, Si oder Cu). Je nach Abstand der Spitze von der Oberfläche ändert sich die effektive Breite der Barriere, wodurch es zu entsprechend empfindlichen Schwankungen des Tunnelstroms durch die Spitze kommt. Eine Darstellung der Linien konstanten Tunnelstroms bildet die Basis für ein bildgebendes Verfahren zur Untersuchung von Oberflächen mit einer hohen Auflösung, die es ermöglicht, einzelne Atome auf der Oberfläche „sichtbar“ zu machen.

Für den Fall, dass die Energie der auf die Barriere zuffliegenden Teilchen *größer* ist als die Höhe der Barriere, $E > U > 0$, setzen wir jetzt an:

$$\begin{aligned}
\Psi_E(x, t) &= \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} & (7.12) \\
\psi_E(x) &= \begin{cases} A_E^{(in)} e^{ik_E \cdot x} + A_E^{(r,1)} e^{-ik_E \cdot x} & \text{falls } x < -a, \\ A_E^{(t,1)} e^{iq_E \cdot x} + A_E^{(r,2)} e^{-iq_E \cdot x} & \text{falls } -a < x < a, \\ A_E^{(t,2)} e^{ik_E \cdot x} & \text{falls } a < x. \end{cases}
\end{aligned}$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Dann liefert die Forderung

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

unmittelbar

$$\begin{aligned} k_E &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ q_E &= \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar} = k_E \cdot \sqrt{1 - \frac{U}{E}}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

also

$$0 < U < E = \frac{\hbar^2 k_E^2}{2m} = \frac{\hbar^2 q_E^2}{2m} + U.$$

Die Anschlussbedingungen Gl. (7.1) und Gl. (7.2) ergeben jetzt – in völliger Analogie zur vorherigen Betrachtung – für die Amplitude der transmittierten Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} E > U > 0 \\ A_E^{(t,2)} &= \frac{e^{-ik_E a}}{\cos(2q_E \cdot a) + \frac{i}{2} \left(\frac{q_E}{k_E} + \frac{k_E}{q_E} \right) \sin(2q_E \cdot a)} A_E^{(in)}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Dieses Ergebnis für $A_E^{(t,2)}$ ist offensichtlich die analytische Fortsetzung des entsprechenden Ausdrucks in Gl. (7.11):

$$A_{0 < E < U}^{(t,2)} = \left[A_{E > U > 0}^{(t,2)} \right]_{q_E \rightarrow i\kappa_E}.$$

Es folgt aus dem hergeleiteten Ausdruck Gl. (7.14) für die Amplitude $A_E^{(t,2)}$ der entsprechende Transmissionskoeffizient T_E für Teilchen mit Energie oberhalb der Barrierenhöhe U :

$$\begin{aligned} E > U \\ T_E &= \frac{j_E^{(t)}}{j_E^{(in)}} = \frac{|A_E^{(t,2)}|^2}{|A_E^{(in)}|^2} = \frac{1}{\cos^2(2q_E \cdot a) + \frac{1}{4} \left(\frac{q_E}{k_E} + \frac{k_E}{q_E} \right)^2 \sin^2(2q_E \cdot a)} \\ &= \frac{1}{1 + \left[\frac{1}{4} \left(\frac{q_E}{k_E} + \frac{k_E}{q_E} \right)^2 - 1 \right] \sin^2(2q_E \cdot a)} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_E}{k_E} - \frac{k_E}{q_E} \right)^2 \sin^2(2q_E \cdot a)} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 - \frac{U}{E}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2 \sin^2(2q_E \cdot a)}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Bemerkenswert sind im Fall $E > U$ die **Oszillationen** des Transmissionskoeffizienten als Funktion der Schichtdicke $2a$. Für bestimmte Werte $E = E_j > U$ mit $2q_{E_j} \cdot a = j \cdot \pi$ mit $j = 1, 2, 3, \dots$ ist $\sin(2q_{E_j}a) = 0$ und es gibt perfekte Transmission: $T_{E_j} = 1$, also $R_{E_j} = 0$. Die entsprechenden Werte E_j sind zu

$$\begin{aligned} E_j &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{j \cdot \pi}{2a} \right)^2 + U \\ j &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (7.16)$$

gegeben. Für $E \neq E_j$ hat der Reflektionskoeffizient wieder einen endlichen Wert: $R_E = 1 - T_E > 0$ („over the barrier reflection“).

Ein nützlicher dimensionsloser Parameter zur Charakterisierung des Streuvermögens der kastenförmigen Potentialbarriere ist

$$g^2 = \frac{8ma^2U}{\hbar^2} > 0. \quad (7.17)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{E_j}{U} &= \frac{\hbar^2}{2mU} \left(\frac{j \cdot \pi}{2a} \right)^2 + 1 \\ &= \frac{\hbar^2}{8ma^2U} \cdot \pi^2 j^2 + 1 \\ &= \frac{\pi^2 j^2}{g^2} + 1. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} 2q_E a &= \sqrt{4 \cdot q_E^2 \cdot a^2} \\ &= \sqrt{\frac{8m(E-U)}{\hbar^2} \cdot a^2} \\ &= \sqrt{\frac{8ma^2U}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{\frac{E}{U} - 1} \\ &= g \cdot \sqrt{\frac{E}{U} - 1} \\ 2\kappa_E \cdot a &= \sqrt{4 \cdot \kappa_E^2 \cdot a^2} \\ &= \sqrt{\frac{8m(U-E)}{\hbar^2} \cdot a^2} \\ &= \sqrt{\frac{8ma^2U}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{1 - \frac{E}{U}} \\ &= g \cdot \sqrt{1 - \frac{E}{U}}, \end{aligned} \quad (7.19)$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

und weiter:

$$T_E = \begin{cases} \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 - \frac{U}{E}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{U}{E}}} \right)^2} \sin^2 \left(g \cdot \sqrt{\frac{E}{U} - 1} \right) & \text{falls } 0 < U < E, \\ \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{U}{E} - 1} + \frac{1}{\sqrt{\frac{U}{E} - 1}} \right)^2} \sinh^2 \left(g \cdot \sqrt{1 - \frac{E}{U}} \right) & \text{falls } 0 < E < U. \end{cases} \quad (7.20)$$

In Abb. 7.2 ist der Transmissionskoeffizient T_E einer kastenförmigen Barriere vs. $\frac{E}{U}$ für $g = 4$ und für $g = 1$ graphisch dargestellt. Für $g = 4$ sind für $\frac{E}{U} = \frac{E_j}{U} = \frac{\pi^2 j^2}{g^2} + 1$ deutlich ausgeprägte Transmissionsresonanzen sichtbar. Die Eigenschaft $T_E > 0$ für Energiewerte E kleiner als die Höhe U der Barriere, $0 < \frac{E}{U} < 1$, ist der bereits diskutierte Tunneleffekt.

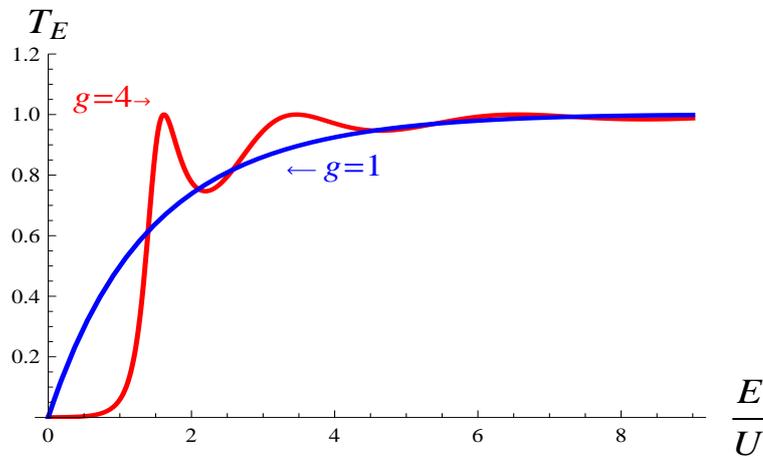


Abbildung 7.2: Transmissionskoeffizient der kastenförmigen Barriere.

Wir diskutieren nun den Fall $U < 0$. Man spricht dann von einem **Potentialtopf** (siehe Abbildung 7.3). Wie schon vorher bei der Behandlung der Streuung von Teilchen an einer Potentialbarriere der Höhe $U > 0$ betrachten wir jetzt ein aus dem Gebiet $x < -a$ auf einen Potentialtopf der Breite $2a$ und der Tiefe $-|U| < 0$ zulaufendes Wellenpaket, welches ausschließlich aus stationären Wellenfunktionen $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ mit positiver Energie $E > 0$ zusammengesetzt ist. Dabei sind die dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x)$$

zugeordneten Eigenfunktionen $\psi_E(x)$ zu positiver Energie $E > 0$, wie schon in Gl. (7.12), als abschnittsweise definierte Linearkombination von Exponentialfunktionen gegeben. Die entsprechenden Wellenzahlen für die Abschnitte $x < -a$,

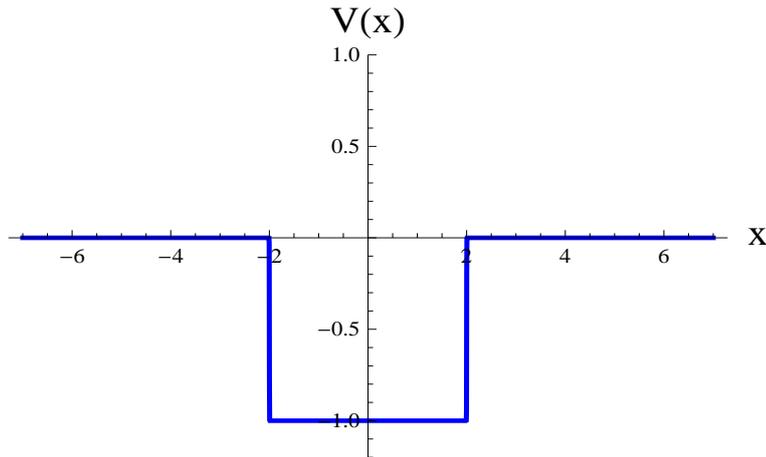


Abbildung 7.3: Potentialtopf der Tiefe $U < 0$.

$-a < x < a$ und $a < x$ sind nun zu

$$\begin{aligned}
 k_E &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\
 q_E &= \frac{\sqrt{2m(E + |U|)}}{\hbar} = k_E \cdot \sqrt{\frac{|U|}{E} + 1}
 \end{aligned}
 \tag{7.21}$$

gegeben, wie man durch Einsetzen von (7.12) in die definierende Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

leicht bestätigt. Da jetzt gilt $q_E > k_E$ ist das Teilchen im Anziehungsbereich des Potentialtopfes $-a < x < a$ *schneller* als im Gebiet außerhalb des Topfes, also für $x < -a$ bzw. $a < x$. In Analogie zur vorherigen Betrachtung für $0 < U < E$ folgt aus den Anschlussbedingungen bei $x = \pm a$ ein lineares Gleichungssystem, aus dem die Amplitude der transmittierten Wellenfunktion $A_E^{(t,2)}$ als Vielfaches der Amplitude $A_E^{(in)}$ folgt. Wir bekommen so das Ergebnis:

$$\begin{aligned}
 -|U| &< 0 < E \\
 A_E^{(t,2)} &= \frac{e^{-ik_E a}}{\cos(2q_E \cdot a) + \frac{i}{2} \left(\frac{q_E}{k_E} + \frac{k_E}{q_E} \right) \sin(2q_E \cdot a)} A_E^{(in)}.
 \end{aligned}
 \tag{7.22}$$

Der zugeordnete Transmissionskoeffizient für Teilchenstreuung am Potentialtopf

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

berechnet sich aus dem stationären Teilchenfluss zu $T_E = \frac{j_E^{(t)}}{j_E^{(in)}} = \frac{|A_E^{(t,2)}|^2}{|A_E^{(in)}|^2}$, also:

$$-|U| < 0 < E \quad (7.23)$$

$$T_E = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 + \frac{|U|}{E}} - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{|U|}{E}}} \right)^2 \sin^2 \left(g \cdot \sqrt{\frac{E}{|U|} + 1} \right)}$$

In Abb. 7.4 ist für den Fall $-|U| < 0 < E$ der Transmissionskoeffizient T_E für einen Potentialtopf vs. $\frac{E}{|U|}$ für $g = 4$ und für $g = 1$ graphisch dargestellt. Für $g = 4$ sind für $\frac{E}{|U|} = \frac{E_j}{|U|} = \frac{\pi^2 j^2}{g^2} - 1$ deutlich ausgeprägte Transmissionsresonanzen sichtbar.

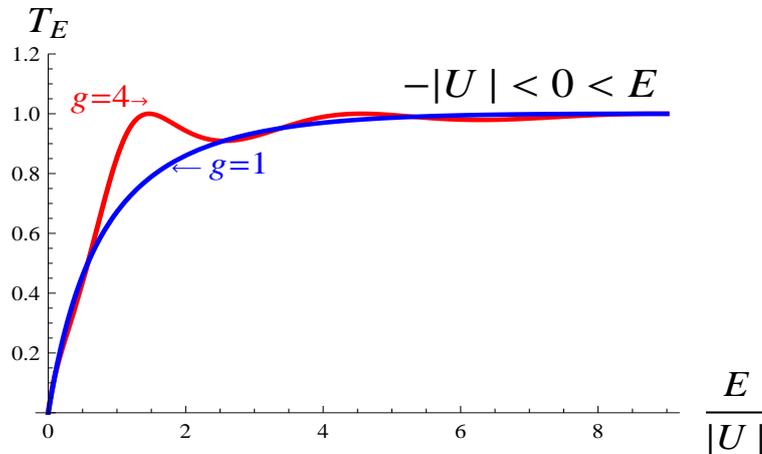


Abbildung 7.4: Transmissionskoeffizient des Potentialtopfes.

Der Experimentalphysiker Carl Ramsauer entdeckte 1920 den nach ihm benannten Effekt über die extreme Durchlässigkeit von Gasen wie Argon oder Neon bei Experimenten mit niederenergetischen (langsamen) Elektronen. Der Effekt gilt heute als der erste experimentelle Hinweis dafür, dass Elektronen nicht mit klassischer Mechanik beschreibbar sind. Wenn Elektronen ein Gas durchqueren, treten sie mit den Gasmolekülen in Wechselwirkung. Als Maß für das Ablenkungsvermögen eines am positiv geladenen Atomkern vorbeifliegenden Elektrons dient der **Wirkungsquerschnitt** σ_E , der, analog zum Reflektionskoeffizienten $R_E = 1 - T_E$ in $D = 1$ räumlichen Dimensionen, den Teilchenfluss der gestreuten Teilchen in $D = 3$ räumlichen Dimensionen charakterisiert. Nach den Vorstellungen der klassischen Mechanik sollte σ_E bei Streuung im $\frac{1}{r}$ -Potential dabei um so größer sein, je *kleiner* die kinetische Energie des Elektrons ist. Hochenergetische Elektronen sollten es dem entsprechend leichter haben, das Gas zu durchdringen, als niederenergetische

Elektronen. Ramsauer stellte jedoch fest, dass der Wirkungsquerschnitt mit der kinetischen Energie der Elektronen in nicht monotoner Weise variiert. Mit wachsender Elektronenenergie steigt der Wirkungsquerschnitt ab 1 eV zunächst auf ein Maximum an, um bei Werten oberhalb von 20 eV dann wieder stark abzufallen, teilweise unter den Wert des minimalen Wirkungsquerschnitt bei geringeren Energien. Die Erklärung des Effektes kann nur im Rahmen der Quantenmechanik erfolgen und beruht auf dem physikalischen Bild, dass (negativ geladene) Elektronen, d.h. Wellenpakete mit genügend hoher kinetischer Energie $E > 0$, aufgrund der Coulomb-Anziehung des (positiv geladenen) Atomkerns durch eine Art Potentialtopf der Tiefe $-|U|$ fliegen! Dabei treten die bereits besprochenen Transmissionsresonanzen auf.

Wir diskutieren schließlich die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung für Teilchen, die in einem Potentialtopf der Tiefe $|U|$ gebunden sind:

$$-|U| < E < 0.$$

Im Gebiet $|x| > a$ ist das Potential $V(x) = 0$, im Abschnitt $|x| < a$ ist $V(x) = -|U|$. Eine stationäre Lösung $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ der Schrödinger-Gleichung ist daher als abschnittsweise definierte Linearkombination von Exponentialfunktionen gegeben:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa_E x} & \text{falls } x < -a, \\ B_- \sin(q_E x) + B_+ \cos(q_E x) & \text{falls } -a < x < a, \\ Ce^{-\varkappa_E x} & \text{falls } a < x. \end{cases}$$

Gemäß der für eine stationäre Lösung notwendigen Bedingung

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (7.24)$$

folgt sofort

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 \varkappa_E^2}{2m} &= E < 0 \\ \frac{\hbar^2 q_E^2}{2m} - |U| &= E < 0, \end{aligned}$$

wobei aufgrund der Annahme $-|U| < E < 0$ gilt:

$$\frac{\hbar^2 q_E^2}{2m} > 0.$$

Demnach sind die Wellenzahlen zu

$$\begin{aligned} \varkappa_E &= \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} > 0 \\ q_E &= \frac{\sqrt{2m(|U| + E)}}{\hbar} > 0 \end{aligned} \quad (7.25)$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

gegeben. Wir zeigen jetzt, dass in der Quantenmechanik ein Teilchen, das sich mit Energie $E < 0$ im Potentialtopf aufhält, nur für ganz bestimmte Energiewerte $E = E_n < 0$ eine stationäre Wellenfunktion $\Psi_{E_n}(x, t) = \psi_{E_n}(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ besitzt, wobei es eine endlich große Wahrscheinlichkeit $|\psi_{E_n}(x)|^2 dx$ dafür gibt, das Teilchen auch in der klassisch verbotenen Zone $|x| > a$ links oder rechts des Potentialtopfes im Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen. Die betreffende Eigenfunktion $\psi_{E_n}(x)$ zum Eigenwert E_n besitzt die Eigenschaft, außerhalb des Topfes für $|x| \gg a$ exponentiell schnell gegen Null zu streben,

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi_{E_n}(x) = 0,$$

und sie ist auf Eins normierbar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{E_n}(x)|^2 = 1.$$

Insbesondere müssen Eigenfunktionen $\psi_{E_n}(x)$ zum Eigenwert $E_n < 0$ als Lösung einer Differentialgleichung zweiter Ordnung die uns bekannten Anschlussbedingungen, Gl. (7.2) und Gl. (7.1), bei $x = a$ und bei $x = -a$ erfüllen. Im Unterschied zum *Streuproblem* für ein propagierendes Teilchen mit Energie $E > 0$, das z.B. bei $x \rightarrow -\infty$ einer anderen Randbedingung als bei $x \rightarrow \infty$, ist das *Eigenwertproblem* für ein im Potentialtopf gebundenes Teilchen mit Energie $E = E_n < 0$ **invariant** bzgl. der Symmetrieoperation

$$\hat{x} \rightarrow \hat{\Pi} \circ \hat{x} \circ \hat{\Pi} = -\hat{x},$$

da wegen $\hat{V}(-x) = \hat{V}(x)$ gilt:

$$\begin{aligned} \hat{\Pi} \circ \hat{H} \circ \hat{\Pi} &= \hat{\Pi} \circ \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \right] \circ \hat{\Pi} \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} + \hat{V}(-x) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \\ &= \hat{H}. \end{aligned}$$

Es folgt, dass die Lösungen $\psi_{E_n}(x)$ des Eigenwertproblems (7.24) für einen Hamilton-Operator \hat{H} , der mit dem Paritätsoperator $\hat{\Pi}$ vertauscht, entweder gerade Parität besitzen, d.h. es gilt $\psi_{E_{n+}}(-x) = \psi_{E_{n+}}(x)$, oder aber ungerade Parität besitzen, d.h. es gilt $\psi_{E_{n-}}(-x) = -\psi_{E_{n-}}(x)$. Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein im Potentialtopf gefangenes Wellenpaket, das nur

aus stationären Lösungen mit Energie $E = E_n < 0$ gebildet wird, ist demnach eine Linearkombination von Lösungen gerader und ungerader Parität:

$$\Psi(x, t) = \sum_n \left[c_{n-} \psi_{E_{n-}}(x) e^{-i \frac{E_{n-}}{\hbar} t} + c_{n+} \psi_{E_{n+}}(x) e^{-i \frac{E_{n+}}{\hbar} t} \right].$$

Hierbei gilt:

gerade Parität (7.26)

$$\psi_{E_{n+}}(x) = \begin{cases} A_+ e^{\kappa_E x} & \text{falls } x < -a, \\ B_+ \cos(q_E x) & \text{falls } -a < x < a, \\ A_+ e^{-\kappa_E x} & \text{falls } a < x, \end{cases}$$

ungerade Parität (7.27)

$$\psi_{E_{n-}}(x) = \begin{cases} -A_- e^{\kappa_E x} & \text{falls } x < -a, \\ B_- \sin(q_E x) & \text{falls } -a < x < a, \\ A_- e^{-\kappa_E x} & \text{falls } a < x. \end{cases}$$

Der Vorteil, die Paritätseigenschaft der Eigenfunktionen $\psi_{E_{n\pm}}(x)$ zum Hamilton-Operator \hat{H} zu berücksichtigen, besteht darin, dass die Anschlussbedingungen bei $x = \pm a$ aufgrund der Symmetrie des Problems jetzt nur auf einer Seite, etwa bei $x = a$, zu stellen sind:

gerade Parität (7.28)

$$\begin{aligned} B_+ \cos(q_E a) &= A_+ e^{-\kappa_E a} \\ -B_+ q_E \sin(q_E a) &= -A_+ \kappa_E e^{-\kappa_E a} \end{aligned}$$

ungerade Parität (7.29)

$$\begin{aligned} B_- \sin(q_E a) &= A_- e^{-\kappa_E a} \\ B_- q_E \cos(q_E a) &= -A_- \kappa_E e^{-\kappa_E a} \end{aligned}$$

Dies sind zwei gekoppelte *homogene* lineare Gleichungen für zwei unbekannte Amplituden A_+ , B_+ bzw. A_- , B_- :

gerade Parität (7.30)

$$\begin{bmatrix} -e^{-\kappa_E a} & \cos(q_E a) \\ \kappa_E e^{-\kappa_E a} & -q_E \sin(q_E a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_+ \\ B_+ \end{bmatrix} = 0$$

ungerade Parität (7.31)

$$\begin{bmatrix} -e^{-\kappa_E a} & \sin(q_E a) \\ \kappa_E e^{-\kappa_E a} & q_E \cos(q_E a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_- \\ B_- \end{bmatrix} = 0.$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Notwendig für die Existenz nicht trivialer Amplituden A_+ , B_+ bzw. A_- , B_- ist das Verschwinden der Determinante der betreffenden homogenen linearen Gleichungen:

$$\begin{aligned} & \text{gerade Parität} \\ 0 & \stackrel{!}{=} \det \begin{bmatrix} -e^{-\kappa_E a} & \cos(q_E a) \\ \kappa_E e^{-\kappa_E a} & -q_E \sin(q_E a) \end{bmatrix} \\ & = [q_E \sin(q_E a) - \kappa_E \cos(q_E a)] e^{-\kappa_E a} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{ungerade Parität} \\ 0 & \stackrel{!}{=} \det \begin{bmatrix} -e^{-\kappa_E a} & \sin(q_E a) \\ \kappa_E e^{-\kappa_E a} & q_E \cos(q_E a) \end{bmatrix} \\ & = [-q_E \cos(q_E a) - \kappa_E \sin(q_E a)] e^{-\kappa_E a}. \end{aligned}$$

Es folgen hieraus unter Berücksichtigung der aus Gl. (7.25) folgenden Identität

$$\kappa_E^2 + q_E^2 = \frac{2m|U|}{\hbar^2}$$

jetzt zwei simultan zu erfüllende transzendente Gleichungen zur Bestimmung der Eigenwerte $E = E_n < 0$:

$$\begin{aligned} & \text{gerade Parität} & (7.32) \\ (\kappa_E a) & = (q_E a) \tan(q_E a) \\ (q_E a)^2 + (\kappa_E a)^2 & = \frac{2ma^2|U|}{\hbar^2} = \frac{g^2}{4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{ungerade Parität} & (7.33) \\ (\kappa_E a) & = -(q_E a) \cot(q_E a) \\ (q_E a)^2 + (\kappa_E a)^2 & = \frac{2ma^2|U|}{\hbar^2} = \frac{g^2}{4}. \end{aligned}$$

In Abb. 7.5 sind die Funktionen $y = x \tan x$ bzw. $y = -x \cot x$ mit zusammen mit dem Kreissegment $y = \sqrt{\frac{g^2}{4} - x^2}$ für $g \in \{2, 4, 8\}$ graphisch dargestellt. Es ist hierbei $x = q_E a$ und $y = \kappa_E a$. Die Schnittpunkte (x_{n+}, y_{n+}) des Kreises $x^2 + y^2 = \frac{g^2}{4}$ mit der Kurve $x \tan x$ (kleine rote Kreise), bzw. die Schnittpunkte (x_{n-}, y_{n-}) des Kreises $x^2 + y^2 = \frac{g^2}{4}$ mit der Kurve $-x \cot x$ (kleine orangefarbene Kreise), bestimmen die gesuchten Eigenwerten $E_{n\pm}$ für gerade bzw. ungerade Parität zu:

$$\begin{aligned} 0 & < y_{n\pm}^2 = (\kappa_{E_{n\pm}} a)^2 = \frac{2m(-E_{n\pm})a^2}{\hbar^2} \\ E_{n\pm} & = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} y_{n\pm}^2. \end{aligned}$$

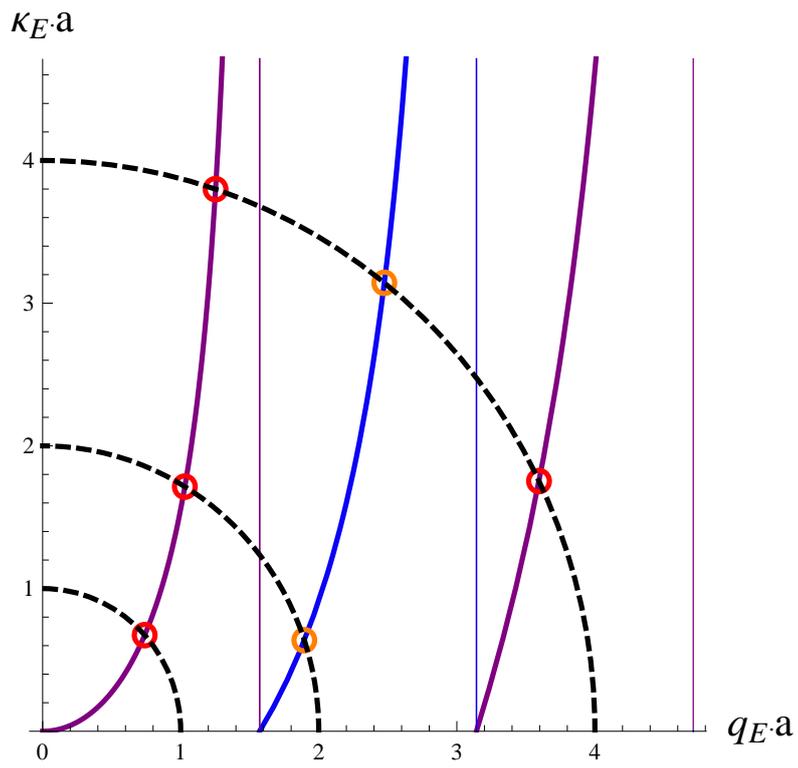


Abbildung 7.5: Graphische Lösung der transzendenten Gleichungen (7.32) und (7.33).

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Die numerische Berechnung der Schnittpunkte, $x_{n\pm} = q_{E_{n\pm}} a$ und $y_{n\pm} = \varkappa_{E_{n\pm}} a$ für $g \in \{2, 4, 8\}$ ergibt die Werte:

gerade Parität			ungerade Parität		
g	x_{n_+}	y_{n_+}	g	x_{n_-}	y_{n_-}
2	0.739085	0.673612	2	—	—
4	1.02987	1.71446	4	1.89549	0.638045
8	1.25235	3.7989	8	2.47458	3.14269
8	3.5953	1.75322			

Für $0 < g < \pi$ existiert ein einziger gebundener Zustand mit Energie E_{0+} . Die zugeordnete Eigenfunktion $\psi_{E_{0+}}(x)$ besitzt eine gerade Parität. Für $g \ll 1$ folgt näherungsweise $y = x \tan x \simeq x^2$, d.h. $y + y^2 \simeq \frac{g^2}{4}$, oder $(y + \frac{1}{2})^2 \simeq \frac{1+g^2}{4}$, also $y = -\frac{1}{2}(1 - \sqrt{1+g^2}) \simeq \frac{g^2}{4}$. Eine Approximation für die Grundzustandsenergie für ein Teilchen, das sich in einem flachen Potentialtopf $g \ll 1$ befindet, ist somit

$$E_{0+} \simeq -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{2ma^2 |U|}{\hbar^2} \right)^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2} |U|^2.$$

Je tiefer oder breiter der Potentialtopf ist, desto mehr gebundene Zustände können in ihm existieren. So gibt es für $\pi < g < 2\pi$ zwei gebundene Zustände, eine Eigenfunktion $\psi_{E_{0+}}(x)$ mit gerader Parität und eine Eigenfunktion $\psi_{E_{1-}}(x)$ mit ungerader Parität, wobei $-|U| < E_{0+} < E_{1-} < 0$. Für $2\pi < g < 3\pi$ existieren schon drei gebundene Zustände: zwei Eigenfunktionen $\psi_{E_{0+}}(x)$ und $\psi_{E_{2+}}(x)$ mit gerader Parität, und eine Eigenfunktion $\psi_{E_{1-}}(x)$ mit ungerader Parität, wobei $-|U| < E_{0+} < E_{1-} < E_{2+} < 0$. In Abhängigkeit von der Bindungsstärke g des Potentials existiert i.a. eine Anzahl

$$N = 1 + \left\lfloor \frac{g}{\pi} \right\rfloor$$

gebundener Zustände, wobei der Grundzustand $\psi_{E_{0+}}(x)$ immer gerade Parität besitzt. Bei der Sortierung der Eigenwerte der Größe nach folgt auf einen Zustand gerader Parität immer ein Zustand ungerader Parität:

$$-|U| < E_{0+} < E_{1-} < E_{2+} < \dots < E_{N\pm} < 0.$$

Um die Eigenfunktionen für in Potentialtopf gebundene Teilchen explizit angeben zu können, müssen die Koeffizienten A_{\pm} und B_{\pm} bestimmt werden. Die aus den Anschlussbedingungen folgenden linearen Gleichungen Gl. (7.28) bzw. Gl. (7.29) können, weil es homogene Gleichungen sind, aber nur das Verhältnis $\frac{A_{\pm}}{B_{\pm}}$ bzw.

$\frac{A_-}{B_-}$ festlegen. Die Normierung der Eigenfunktionen auf Eins liefert eine weitere unabhängige Gleichung für die Koeffizienten A_{\pm} und B_{\pm} . Einmal für

$$\begin{aligned}
& \text{gerade Parität} \\
1 & \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{E_{n_+}}(x)|^2 \\
& = \int_{-\infty}^{-a} dx |A_+ e^{\kappa_E x}|^2 + \int_{-a}^a dx |B_+ \cos(q_E x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |A_+ e^{-\kappa_E x}|^2 \\
& = a \left[|A_+|^2 \frac{e^{-2\kappa_E a}}{\kappa_E a} + |B_+|^2 \left(1 + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a} \right) \right],
\end{aligned}$$

und entsprechend für

$$\begin{aligned}
& \text{ungerade Parität} \\
1 & \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{E_{n_-}}(x)|^2 \\
& = \int_{-\infty}^{-a} dx |A_- e^{\kappa_E x}|^2 + \int_{-a}^a dx |B_- \sin(q_E x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |A_- e^{-\kappa_E x}|^2 \\
& = a \left[|A_-|^2 \frac{e^{-2\kappa_E a}}{\kappa_E a} + |B_-|^2 \left(1 - \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a} \right) \right].
\end{aligned}$$

Aus den beiden homogenen Gleichungen Gl. (7.28) und Gl. (7.29) folgern wir unschwer:

$$\begin{aligned}
|B_+|^2 \cos^2(q_E a) & = |A_+|^2 e^{-2\kappa_E a} \\
|B_-|^2 \sin^2(q_E a) & = |A_-|^2 e^{-2\kappa_E a}.
\end{aligned}$$

Einsetzen dieser Ausdrücke in die Normierungsbedingung ergibt

$$\begin{aligned}
|B_+|^2 & = \frac{1}{a} \frac{1}{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}} \\
|A_+|^2 & = \frac{1}{a} \frac{e^{2\kappa_E a} \cos^2(q_E a)}{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}},
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
|B_-|^2 & = \frac{1}{a} \frac{1}{1 + \frac{\sin^2(q_E a)}{\kappa_E a} - \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}} \\
|A_-|^2 & = \frac{1}{a} \frac{e^{2\kappa_E a} \sin^2(q_E a)}{1 + \frac{\sin^2(q_E a)}{\kappa_E a} - \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}}.
\end{aligned}$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Damit folgt als explizites Ergebnis für die Eigenfunktionen des Potentialtopfes

$$E = E_{n_+} \quad \text{gerade Parität}$$

$$\psi_{E_{n_+}}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\cos(q_E a)}{\sqrt{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}}} e^{\kappa_E(x+a)} & \text{falls } x < -a, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}}} \cos(q_E x) & \text{falls } -a < x < a, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\cos(q_E a)}{\sqrt{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}}} e^{-\kappa_E(x-a)} & \text{falls } a < x, \end{cases}$$

und für

$$E = E_{n_-} \quad \text{ungerade Parität}$$

$$\psi_{E_{n_-}}(x) = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\sin(q_E a)}{1 + \frac{\sin^2(q_E a)}{\kappa_E a} - \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}} e^{\kappa_E(x+a)} & \text{falls } x < -a, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\cos^2(q_E a)}{\kappa_E a} + \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}}} \sin(q_E x) & \text{falls } -a < x < a, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\sin(q_E a)}{1 + \frac{\sin^2(q_E a)}{\kappa_E a} - \frac{\sin(2q_E a)}{2q_E a}} e^{-\kappa_E(x-a)} & \text{falls } a < x. \end{cases}$$

In Abb. 7.6 sind die Eigenfunktionen $\psi_{E_{n_{\pm}}}(x)$ eines Potentialtopfes mit Bindungsstärke $g = \sqrt{\frac{8ma^2|U|}{\hbar^2}}$ graphisch dargestellt. Es existieren gemäß der Tabelle für $g = 8$ dann zwei Eigenfunktionen mit gerader Parität und eine Eigenfunktion mit ungerader Parität.

Im vorliegenden Fall eines Potentialtopfes zeigt man unschwer durch direkte Rechnung, dass die Eigenfunktionen $\psi_{E_n}(x)$ des Hamilton-Operators \hat{H} zu verschiedenen Eigenwerten E_n und $E_{n'}$ zueinander orthogonal sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E_n}^\dagger(x, t) \psi_{E_{n'}}(x, t) = \delta_{n, n'}$$

Ebenso liefert eine explizite Rechnung, dass eine Wellenfunktion für ein im Potentialtopf gebundenes Teilchen, bestehend aus einer Superposition von Eigenfunktionen mit Eigenwerten $E_n < 0$, immer orthogonal zu einer stationären Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein frei propagierendes Teilchen mit $E_p > 0$ ist, das aus dem Unendlichen einlaufend am Potentialtopf gestreut wird:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{E_p}^\dagger(x, t) \Psi_{E_n}(x, t) = 0$$

Desgleichen zeigt man durch explizites Rechnen, dass stationäre Lösungen

$$\Psi_{E_p}(x, t) = \psi_{E_p}(x) e^{-i\frac{E_p}{\hbar}t}$$

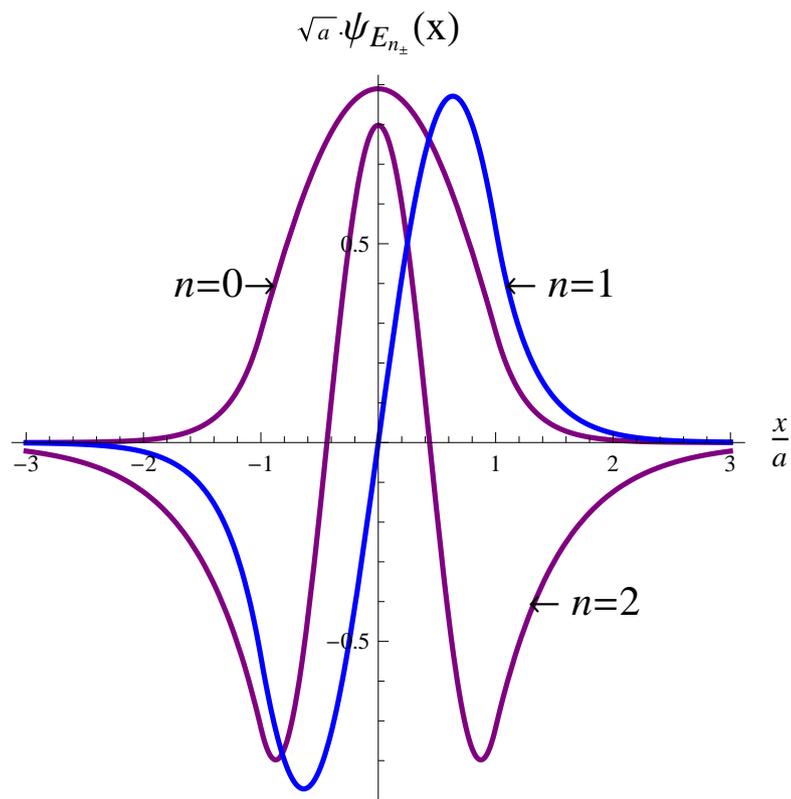


Abbildung 7.6: Eigenfunktionen des Potentialtopfes für $n = 0, 1, 2$.

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

der Schrödinger-Gleichung für zwei ungebundene, also frei propagierende Teilchen mit positiver Energie $E_p = \frac{p^2}{2m} > 0$ und $E_{p'} = \frac{p'^2}{2m} > 0$, die am Potentialtopf gestreut werden, für $p \neq p'$ zueinander orthogonal sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{E_{p'}}^\dagger(x, t) \Psi_{E_p}(x, t) = 0 \quad p \neq p'$$

Die angestellten expliziten Rechnungen zur Orthogonalität der Wellenfunktionen zweier Teilchen mit verschiedener Energie E_p und $E_{p'}$ für die Potentialbarriere oder den Potentialtopf sind länglich und unnötig kompliziert.

Wir zeigen jetzt die Orthogonalitätseigenschaft für stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung mittels einer Überlegung, die größere Allgemeinheit beanspruchen darf. Wir betrachten dazu (in $D = 1$ räumlichen Dimensionen) ein *beliebiges* Potentialprofil $V(x)$, das für großen Abstand $|x|$ zum Ursprung rasch abfällt, z.B. $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |x| V(x) = 0$, so dass alle Teilchen in großer Entfernung außerhalb des Wirkungsbereichs des Potentials *frei* propagieren. Es gilt nach dem Gesagten:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_E(x, t) &= \hat{H} \Psi_E(x, t) \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \\ \Psi_{E_p}(x, t) &= \psi_{E_p}(x) e^{-i\frac{E_p}{\hbar}t} \\ E_p &= \frac{p^2}{2m} > 0 \\ \hat{H} \psi_{E_p}(x) &= E_p \psi_{E_p}(x). \end{aligned}$$

Eine Eigenfunktion $\psi_{E_p}(x)$ von \hat{H} mit Energie $E_p = \frac{p^2}{2m} > 0$ besitzt außerhalb des Wirkungsbereiches des Potentials, für $|x| \geq X$, d.h. für freie, von links einlaufende Teilchen die folgende asymptotische Form:

$$\begin{aligned} \psi_{E_p}(x) &\rightarrow A_{E_p}^{(in)} \begin{cases} e^{i\frac{p}{\hbar}x} + \sqrt{R_{E_p}} e^{i\alpha_p} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} & \text{falls } x \leq -X, \\ \sqrt{T_{E_p}} e^{i\gamma_p} e^{i\frac{p}{\hbar}x} & \text{falls } x \geq X \end{cases} \quad (7.34) \\ E_p &= \frac{p^2}{2m} > 0. \end{aligned}$$

Die Erhaltung der Teilchenzahl impliziert (siehe Kapitel 6):

$$T_{E_p} + R_{E_p} = 1.$$

Wir betrachten jetzt zwei von links einlaufende Teilchen, mit unterschiedlichem Impuls $p_1 > 0$ und $p_2 > 0$. Dann gilt nach dem Gesagten

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{p_1^2 - 2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi_{E_{p_1}}(x) &= 0 \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{p_2^2 - 2mV(x)}{\hbar^2} \right] \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) &= 0. \end{aligned} \quad (7.35)$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit $\psi_{E_{p_2}}^\dagger(x)$, die zweite Gleichung mit $\psi_{E_{p_1}}(x)$, und bilden sodann die Differenz:

$$\psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{E_{p_1}}(x) - \psi_{E_{p_1}}(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) = \frac{p_2^2 - p_1^2}{\hbar^2} \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \psi_{E_{p_1}}(x). \quad (7.36)$$

Diese Identität integrieren wir bzgl. der Variablen x von $x = -X$ bis $x = X$ und erhalten:

$$\begin{aligned} & \int_{-X}^X dx \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \psi_{E_{p_1}}(x) \\ &= \frac{\hbar^2}{p_2^2 - p_1^2} \int_{-X}^X dx \left[\psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{E_{p_1}}(x) - \psi_{E_{p_1}}(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{p_2^2 - p_1^2} \int_{-X}^X dx \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{E_{p_1}}(x) - \psi_{E_{p_1}}(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{p_2^2 - p_1^2} \left[\psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{E_{p_1}}(x) - \psi_{E_{p_1}}(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \right]_{x=-X}^{x=X}. \end{aligned} \quad (7.37)$$

Für $|X| \gg 1$ setzen wir die Asymptotik Gl. (7.34) ein und erhalten:

$$= \frac{\left[A_{E_{p_2}}^{(in)} \right]^\dagger A_{E_{p_1}}^{(in)}}{\frac{p_1+p_2}{\hbar} \cdot \frac{p_2-p_1}{\hbar}} \left[\begin{aligned} & i \frac{p_1+p_2}{\hbar} \sqrt{T_{E_{p_2}}} \sqrt{T_{E_{p_1}}} e^{i(\gamma_{p_1}-\gamma_{p_2})} e^{i \frac{p_1-p_2}{\hbar} X} \\ & -i \frac{p_1+p_2}{\hbar} \left[e^{-i \frac{p_1-p_2}{\hbar} X} - \sqrt{R_{E_{p_1}}} \sqrt{R_{E_{p_2}}} e^{i(\alpha_{p_1}-\alpha_{p_2})} e^{i \frac{p_1-p_2}{\hbar} X} \right] \\ & +i \frac{p_1-p_2}{\hbar} \left[\sqrt{R_{E_{p_1}}} e^{i\alpha_{p_1}} e^{i \frac{p_1+p_2}{\hbar} X} + \sqrt{R_{E_{p_2}}} e^{-i\alpha_{p_2}} e^{-i \frac{p_1+p_2}{\hbar} X} \right] \end{aligned} \right].$$

Für $p_2 \neq p_1$ und $|\frac{p_1-p_2}{\hbar} X| \gg 1$ können wir die Phasendifferenzen $\gamma_{p_1} - \gamma_{p_2}$ bzw. $\alpha_{p_1} - \alpha_{p_2}$ im Vergleich zu $\frac{p_1-p_2}{\hbar} X$ vernachlässigen. Die Terme $e^{i \frac{p_1 \pm p_2}{\hbar} X}$ oszillieren unendlich schnell für $X \rightarrow \infty$ und liefern keinen Beitrag zu Integralen über p_1 bzw. p_2 (Lemma von Riemann-Lebesgue). Es verbleiben für $|\frac{p_1 \pm p_2}{\hbar} X| \gg 1$ die Terme

$$= \left[A_{E_{p_2}}^{(in)} \right]^\dagger A_{E_{p_1}}^{(in)} \left[\frac{1}{\frac{p_2-p_1}{\hbar}} \left\{ i \left(\sqrt{T_{E_{p_2}}} \sqrt{T_{E_{p_1}}} + \sqrt{R_{E_{p_1}}} \sqrt{R_{E_{p_2}}} - 1 \right) \cos \left(\frac{p_1-p_2}{\hbar} X \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\sqrt{T_{E_{p_2}}} \sqrt{T_{E_{p_1}}} + \sqrt{R_{E_{p_1}}} \sqrt{R_{E_{p_2}}} + 1 \right) \sin \left(\frac{p_1-p_2}{\hbar} X \right) \right\} \right].$$

7 Kastenförmige Potentialbarriere und Potentialtopf ($D = 1$)

Allerdings ist der Fall $p_1 = p_2$ gesondert zu betrachten. Unter Verwendung der Identität

$$T_{E_p} + R_{E_p} = 1$$

folgt sofort:

$$\begin{aligned}
 & \lim_{p_1 \rightarrow p_2} \frac{\sqrt{T_{E_{p_2}}}\sqrt{T_{E_{p_1}}} + \sqrt{R_{E_{p_1}}}\sqrt{R_{E_{p_2}}} - 1}{p_2 - p_1} & (7.38) \\
 = & \lim_{p_1 \rightarrow p_2} \frac{\sqrt{T_{E_{p_2}}} - \sqrt{T_{E_{p_1}}}}{p_2 - p_1} \sqrt{T_{E_{p_1}}} + \sqrt{R_{E_{p_1}}} \frac{\sqrt{R_{E_{p_2}}} - \sqrt{R_{E_{p_1}}}}{p_2 - p_1} \\
 = & \frac{\partial}{\partial p} \left[\frac{1}{2} (\sqrt{T_{E_p}})^2 + \frac{1}{2} (\sqrt{R_{E_p}})^2 \right]_{p=p_2} \\
 = & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} [T_{E_p} + R_{E_p}] \\
 = & 0.
 \end{aligned}$$

Der Vorfaktor der rasch oszillierenden Funktion $\cos(\frac{p_1-p_2}{\hbar}X)$ verschwindet somit für $p_1 \rightarrow p_2$ identisch. Es bleibt für $p_1 \rightarrow p_2$ nur noch der Term proportional zu $\frac{\sin(\frac{p_1-p_2}{\hbar}X)}{\frac{p_2-p_1}{\hbar}}$ übrig:

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \int_{-X}^X dx \psi_{p_2}^\dagger(x) \psi_{p_1}(x) = |A_{E_{p_2}}^{(in)}|^2 \underbrace{\left(1 + T_{E_{p_2}} + R_{E_{p_2}}\right)}_{=1} \lim_{X \rightarrow \infty} \frac{\sin\left(\frac{p_1-p_2}{\hbar}X\right)}{\frac{p_2-p_1}{\hbar}}.$$

Aufgrund der Identität Gl. (6.46), die auf Dirichlet zurückgeht, liefert der zweite Term im Grenzwert $p_2 \rightarrow p_1$, z.B. bei Integration über p_1 , ein endliches Resultat. Also folgt

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \int_{-X}^X dx \psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \psi_{E_{p_1}}(x) = |A_{E_{p_2}}^{(in)}|^2 2\pi\hbar\delta(p_2 - p_1).$$

Wählen wir $A_{E_{p_2}}^{(in)} = 1$ sind die Eigenfunktionen des kontinuierlichen Spektrums auf eine Deltafunktion normiert!

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{E_{p_2}}^\dagger(x) \Psi_{E_{p_1}}(x) = 2\pi\hbar\delta(p_2 - p_1).$$

Anmerkung: Die Eigenfunktionen $\psi_{E_n}(x)$ des *diskreten* Spektrums von \hat{H} mit Eigenwert $E_n < 0$ streben für $|x| \rightarrow \infty$ gegen Null. Folglich sind die Eigenfunktionen $\psi_{E_p}(x)$ des kontinuierlichen Spektrums von \hat{H} mit Eigenwert $E_p = \frac{p^2}{2m} > 0$ ($p > 0$) immer orthogonal zu einer Eigenfunktion $\psi_{E_n}(x)$ des diskreten Spektrums mit $E_n < 0$, wie man leicht aus der Identität Gl. (7.36) abliest.

Wir können jetzt eine beliebige Funktion der Variablen x , z.B. die Wellenfunktion $\Psi(x, t = 0)$ eines Teilchens zur Anfangszeit $t = 0$, in Analogie zu einer Fourierreihe nach den normierten Eigenfunktionen des Hamilton-Operators

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x)$$

entwickeln:

$$\Psi(x, t = 0) = \underbrace{\sum_n c_n \psi_{E_n}(x)}_{\text{Gebundene Zustände mit } E_n < 0} + \underbrace{\int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} C_p \psi_{E_p}(x)}_{\text{Kontinuumszustände mit } E_p > 0} .$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi_{E_n}(x) &= E_n \psi_{E_n}(x) \\ \hat{H} \psi_{E_p}(x) &= E_p \psi_{E_p}(x) \\ E_p &= \frac{p^2}{2m} > 0 \\ E_n &< 0. \end{aligned}$$

Mittels der abgeleiteten Orthogonalitätsrelationen

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E_p}^\dagger(x) \psi_{E_{p'}}(x) &= 2\pi\hbar \delta(p - p') \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E_n}^\dagger(x) \psi_{E_{n'}}(x) &= \delta_{n,n'} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{E_p}^\dagger(x) \psi_{E_n}(x) &= 0 \end{aligned}$$

berechnet man die Entwicklungskoeffizienten c_m und C_q wie folgt:

$$\begin{aligned} c_m &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{E_m}^\dagger(x') \Psi(x', t = 0) \\ C_q &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{E_q}^\dagger(x') \Psi(x', t = 0). \end{aligned} \quad (7.39)$$

Somit

$$\begin{aligned} \Psi(x, t = 0) &= \sum_m \psi_{E_m}(x) c_m + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} \psi_{E_q}(x) C_q \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\sum_m \psi_{E_m}(x) \psi_{E_m}^\dagger(x') + \int_0^\infty \frac{dq}{2\pi\hbar} \psi_{E_q}(x) \psi_{E_q}^\dagger(x') \right] \Psi(x', t = 0). \end{aligned}$$

Die letzte Zeile liefert gerade die Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_n \psi_{E_n}(x) \psi_{E_n}^\dagger(x') + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \psi_{E_p}(x) \psi_{E_p}^\dagger(x') = \delta(x - x').$$

8 Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip

Die klassische Hamiltonfunktion eines Teilchens im konservativen Kraftfeld $F = -\nabla V(x)$ ist zu

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (8.1)$$

gegeben. Im **Phasenraum** der klassischen Mechanik bewegt sich das System auf der Energieschale

$$\mathcal{H}[x(t), p(t)] = E = \text{const.}$$

Dabei sind die klassische Bahn $x(t)$ und der Impuls $p(t)$ des Teilchens Lösungen der **Hamiltonschen Bewegungsgleichungen**. Diese lauten ausgedrückt als **Poisson-Klammer**:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}p(t) &= \{p, \mathcal{H}(x, p)\} \\ \frac{d}{dt}x(t) &= \{x, \mathcal{H}(x, p)\}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Allgemein ist die Poisson-Klammer zweier Funktionen $A = A(x, p)$ und $B = B(x, p)$ auf dem Phasenraum definiert zu

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x}. \quad (8.3)$$

Besonders einfach ist die Poisson-Klammer von Ort x und Impuls p :

$$\begin{aligned} \{x, p\} &= 1 \\ \{x, x\} &= 0 \\ \{p, p\} &= 0. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Da diese Relation, wie man mittels einer kanonischen Transformation in der Analytischen Mechanik beweist, für alle Zeiten t gilt, spricht man auch von den fundamentalen Poisson-Klammern.

Mit Hilfe der Produktregel für die Differentiation leitet man unschwer eine nützliche Regel für Poisson-Klammern ab. Für Funktionen $A = A(x, p)$, $B = B(x, p)$ und $C = C(x, p)$ auf dem Phasenraum gilt:

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}. \quad (8.5)$$

8 Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip

Ferner gilt die **Jacobi Identität**:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0. \quad (8.6)$$

Wir betrachten zur Illustration des Formalismus' den **harmonischen Oszillator**, ein exakt lösbares Modellsystem. Ein Teilchen der Masse m erfährt gemäß dem Hooke'schen Gesetz eine *rücktreibende* Kraft proportional zur instantanen Auslenkung $x(t)$ aus der Ruhelage:

$$F(t) = -C \cdot x(t).$$

Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators ist die Summe aus kinetischer Energie $\frac{p^2}{2m}$ und potentieller Energie $\frac{C}{2}x^2$:

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{C}{2}x^2.$$

Es folgt mittels der Regeln Gl. (8.4) und Gl. (8.5) sofort die Poisson Klammer:

$$\begin{aligned} \{x, \mathcal{H}(x, p)\} &= \frac{p}{m} \\ \{p, \mathcal{H}(x, p)\} &= -C \cdot x. \end{aligned}$$

Die entsprechende Hamiltonsche Bewegungsgleichung (8.2) zur Bestimmung der Bahnkurve $x(t)$ des Teilchens ist demnach

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x(t) &= \frac{p(t)}{m} \\ \frac{d}{dt}p(t) &= -C \cdot x(t). \end{aligned}$$

Also

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{C}{m} \right) x(t) = 0.$$

Die Lösung dieser gewöhnlichen Differentialgleichung mit den Anfangswerten

$$\begin{aligned} [x(t)]_{t=0} &= x_0 \\ \left[\frac{d}{dt}x(t) \right]_{t=0} &= \frac{p_0}{m} \end{aligned}$$

führt auf die wohlbekannt **harmonische** Schwingung:

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \\ x(t+T) &= x(t). \end{aligned} \quad (8.7)$$

Hier ist T die **Periode** der Schwingung und

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{m}} = \frac{2\pi}{T} \quad (8.8)$$

ist die zugeordnete **Kreisfrequenz**.

Dass wir die Lösung dieses elementaren Problems mit dem Formalismus der Poisson Klammern herleiten hat damit zu tun, dass wir auf eine **strukturelle Ähnlichkeit** von klassischer Mechanik und Quantenmechanik hinweisen möchten. In der Quantenmechanik werden nach der in Kapitel 2 beschriebenen Vorschrift den klassischen kanonisch konjugierten Variablen, Ort x und Impuls p , entsprechende hermitesche lineare Operatoren \hat{x} und \hat{p} zugeordnet. Die Wirkung dieser Operatoren auf eine quadratintegrierbare Wellenfunktion $\Psi(x', t)$ ist definiert zu:

$$\begin{aligned} \hat{x}\Psi(x', t) &= x'\Psi(x', t) \\ \hat{p}\Psi(x', t) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \Psi(x', t). \end{aligned}$$

Dies impliziert für den **Kommutator** von Orts- und Impulsoperator:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x', t) &= (\hat{x} \circ \hat{p} - \hat{p} \circ \hat{x}) \Psi(x', t) \\ &= \frac{\hbar}{i} x' \frac{\partial}{\partial x'} \Psi(x', t) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} [x' \Psi(x', t)] \\ &= -\frac{\hbar}{i} \Psi(x', t) \\ &= i\hbar \Psi(x', t), \end{aligned}$$

d.h. es gilt:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}. \quad (8.9)$$

Es sieht so aus, als könne man von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik übergehen, in dem man die Poisson Klammern von Ort und Impuls durch den Kommutator der entsprechenden Operatoren der Quantenmechanik ersetzt:

$$\{x, p\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{p}].$$

Der Übergang von der Poisson Klammer für Observable der klassischen Mechanik hin zum Kommutator für die entsprechenden hermiteschen Operatoren der Quantenmechanik heißt **Korrespondenzprinzip**. In der Quantenmechanik ist allerdings im Unterschied zur klassischen Physik bei der Multiplikation auf die Reihenfolge von konjugierten Observablen, wie etwa \hat{x} und \hat{p} , zu achten!

An die Stelle der klassischen Hamiltonfunktion $\mathcal{H}(x, p)$, wie sie in Gl. (8.1) für ein Teilchen im konservativen Kraftfeld $F = -\nabla V$ angegeben wurde, tritt in der

8 Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip

Quantenmechanik der entsprechende zeitunabhängige Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

An die Stelle der Newtonschen Bewegungsgleichung, die eine *gewöhnliche* Differentialgleichung zur Bestimmung der Trajektorie $x(t)$ eines Massenpunktes (Teilchens) ist, tritt in der Quantenmechanik die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t).$$

Diese ist eine partielle Differentialgleichung in Raum und Zeit. Sie benötigt als Anfangswert zur Zeit $t = 0$ eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi_A(x)$, die als Funktion des Orts überall, wo sich das Teilchen mit endlicher Wahrscheinlichkeit aufhalten kann, bekannt sein muss:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\psi_A(x')|^2 = 1.$$

Um z.B. den Erwartungswert der Position eines Teilchens zu einer späteren Zeit $t > 0$ zu berechnen,

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_{\Psi} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) \hat{x} \Psi(x', t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) x' \Psi(x', t), \end{aligned}$$

ist ausgehend von der vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi_A(x)$ zur Zeit $t = 0$ die Lösung $\Psi(x, t)$ der Schrödinger Gleichung für spätere Zeiten $t > 0$ zu berechnen. Für einen *zeitunabhängigen* Hamilton-Operator \hat{H} kann die Lösung der Schrödinger-Gleichung (formal) angegeben werden zu:

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_A(x).$$

Da \hat{H} ein hermitescher Operator ist, ist mit $\Psi(x, t)$ zugleich die adjungierte Wellenfunktion $\Psi^\dagger(x, t)$ (unter dem Integralzeichen!) wie folgt darstellbar:

$$\Psi^\dagger(x', t) = \left[\exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar} t\right) \psi_A(x') \right]^\dagger = \psi_A^\dagger(x') \exp\left(\frac{i\hat{H}}{\hbar} t\right).$$

Diese formale Relation hat nur eine Bedeutung unter dem Integralzeichen, z.B. bei der Berechnung von Erwartungswerten. Sei $\Phi(x', t)$ eine quadratintegrierbare Funktion. Betrachte das **Skalarprodukt** von Φ mit der quadratintegrierbaren Funktion $\Psi(x, t)$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi, \Phi \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) \Phi(x', t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_A(x') \right]^\dagger \Phi(x', t). \end{aligned} \tag{8.10}$$

Der Hamilton-Operator \hat{H} enthält Ortsableitungen $\frac{\partial}{\partial x}$, die nach partieller Integration nicht auf die Funktion $\Psi^\dagger(x', t)$, sondern auf die Funktion $\Phi(x', t)$ wirken. Der Operator

$$\exp\left(-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{\hbar}\right)^n}{n!} (-i\hat{H})^n$$

lässt sukzessiv partielle Integration zu, für jede Potenz n , Term für Term:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[(-i\hat{H})^n \psi_A(x') \right]^\dagger \Phi(x', t) \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[(-i\hat{H}) \circ (-i\hat{H})^{n-1} \psi_A(x') \right]^\dagger \Phi(x', t) \\ \stackrel{\text{p.I.}}{=} & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[(-i\hat{H})^{n-1} \psi_A(x') \right]^\dagger (-i\hat{H})^\dagger \Phi(x', t) \\ & \vdots \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') \left[(-i\hat{H})^\dagger \right]^n \Phi(x', t) \\ \stackrel{\hat{H}^\dagger = \hat{H}}{=} & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') (i\hat{H})^n \Phi(x', t), \end{aligned}$$

dabei steht wie zuvor „p.I.“ für partielle Integration. Also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \psi_A(x') \right]^\dagger \Phi(x', t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \Phi(x', t).$$

Diese Relation impliziert

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_\Psi &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) \hat{x} \Psi(x', t) \\ \stackrel{\text{p.I.}}{=} & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \psi_A(x') \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') \hat{x}_H(t) \psi_A(x') \\ = & \langle \hat{x}_H(t) \rangle_{\psi_A}. \end{aligned}$$

Der Operator

$$\hat{x}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$$

bezeichnet das sog. **Heisenberg-Bild** des Ortsoperators \hat{x} .

Es folgt in Verallgemeinerung unserer für den Ortsoperator \hat{x} angestellten Überlegung nun für den Erwartungswert eines beliebigen *zeitunabhängigen* linearen

8 Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip

hermiteschen Operators $\hat{C} = C(\hat{x}, \hat{p})$:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{C} \rangle_{\Psi} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^{\dagger}(x', t) \hat{C} \Psi(x', t) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^{\dagger}(x') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \circ \hat{C} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_A(x') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^{\dagger}(x') \hat{C}_H(t) \psi_A(x') \\
 &= \langle \hat{C}_H(t) \rangle_{\psi_A}.
 \end{aligned} \tag{8.11}$$

Hier bezeichnet

$$\hat{C}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \circ \hat{C} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \tag{8.12}$$

das **Heisenberg-Bild** des Operators \hat{C} . Die zeitliche Evolution des Systems vollzieht sich im Heisenbergbild als **zeitabhängige Transformation** der Operatoren, während die Wellenfunktion zeitlich unveränderlich ist. Während sich im **Schrödinger-Bild** die Wellenfunktion zeitlich verändert, und die Operatoren zeitunabhängig sind, ist es im Heisenberg-Bild umgekehrt. Beide Methoden liefern für den Erwartungswert einer Observablen den gleichen Wert!

Der Schrödinger-Gleichung zur Bestimmung der zeitlichen Evolution der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ entspricht im Heisenberg-Bild eine äquivalente **Heisenbergsche Bewegungsgleichung** für Operatoren:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \hat{C}_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \circ \frac{1}{i\hbar} [\hat{C}, \hat{H}] \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{C}_H(t), \hat{H}] \\
 &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{C}_H(t)].
 \end{aligned} \tag{8.13}$$

Die enge Analogie zwischen dem Kommutator in der Heisenbergschen Bewegungsgleichung Gl. (8.2) und der Poisson-Klammer im Hamilton-Formalismus der Analytischen Mechanik Gl. (8.2) ist offensichtlich!

Für den Kommutator eines linearen Operators \hat{A} mit einem Produkt $\hat{B} \circ \hat{C}$ zweier linearer Operatoren \hat{B} und \hat{C} gilt in völliger Analogie zu Gl. (8.5)

$$[\hat{A}, \hat{B} \circ \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] \circ \hat{C} + \hat{B} \circ [\hat{A}, \hat{C}]. \tag{8.14}$$

Der Beweis wird durch explizite Rechnung geführt und beruht auf dem für lineare

Operatoren gültigen Distributiv- und Assoziativgesetz:

$$\begin{aligned}
& [\hat{A}, \hat{B}] \circ \hat{C} + \hat{B} \circ [\hat{A}, \hat{C}] \\
&= (\hat{A} \circ \hat{B} - \hat{B} \circ \hat{A}) \circ \hat{C} + \hat{B} \circ (\hat{A} \circ \hat{C} - \hat{C} \circ \hat{A}) \\
&= (\hat{A} \circ \hat{B}) \circ \hat{C} - (\hat{B} \circ \hat{A}) \circ \hat{C} + \hat{B} \circ (\hat{A} \circ \hat{C}) - \hat{B} \circ (\hat{C} \circ \hat{A}) \\
&= \hat{A} \circ (\hat{B} \circ \hat{C}) - (\hat{B} \circ \hat{A}) \circ \hat{C} + (\hat{B} \circ \hat{A}) \circ \hat{C} - (\hat{B} \circ \hat{C}) \circ \hat{A} \\
&= \hat{A} \circ (\hat{B} \circ \hat{C}) - (\hat{B} \circ \hat{C}) \circ \hat{A} \\
&= [\hat{A}, \hat{B} \circ \hat{C}].
\end{aligned}$$

Für drei lineare Operatoren \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} gilt die sog. **Jacobi Identität**:

$$\begin{aligned}
& [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] \\
&= \begin{cases} (\hat{A} \circ \hat{B} - \hat{B} \circ \hat{A}) \circ \hat{C} - \hat{C} \circ (\hat{A} \circ \hat{B} - \hat{B} \circ \hat{A}) \\ + (\hat{B} \circ \hat{C} - \hat{C} \circ \hat{B}) \circ \hat{A} - \hat{A} \circ (\hat{B} \circ \hat{C} - \hat{C} \circ \hat{B}) \\ + (\hat{C} \circ \hat{A} - \hat{A} \circ \hat{C}) \circ \hat{B} - \hat{B} \circ (\hat{C} \circ \hat{A} - \hat{A} \circ \hat{C}) \end{cases} \\
&= \hat{0}.
\end{aligned}$$

Vertauscht ein (zeitunabhängiger) hermitescher Operator \hat{L} mit dem Hamilton-Operator \hat{H} , so gilt offensichtlich $\hat{L}_H(t) = \hat{L}$, also $\frac{d}{dt}\hat{L}_H(t) = \hat{0}$, d.h. der Erwartungswert $\langle \hat{L} \rangle_\Psi = \langle \hat{L}_H(t) \rangle_{\psi_A} = \langle \hat{L} \rangle_{\psi_A}$ ist ebenfalls zeitunabhängig. Eine Observable \hat{L} für die gilt $[\hat{L}, \hat{H}] = \hat{0}$ wird als **Erhaltungsgröße** bezeichnet. Sie kann gleichzeitig mit der Energie gemessen werden.

Die Berechnung des Heisenberg-Bilds Gl. (8.12) wird übersichtlicher, wenn man den **Superoperator** $\text{ad}(\cdot)$ einführt. Dieser ist als ein linearer Operator definiert, der nicht auf Funktionen, sondern auf lineare Operatoren \hat{B} wirkt. Der Superoperator $\text{ad}(\hat{A})$ wirkt per definitionem derart, dass er einem linearen Operator \hat{B} den Kommutator mit dem linearen Operator \hat{A} als Resultat zuordnet:

$$\begin{aligned}
\text{ad}(\hat{A}) \circ \hat{B} &= [\hat{A}, \hat{B}] & (8.15) \\
[\text{ad}(\hat{A})]^2 \circ \hat{B} &= \text{ad}(\hat{A}) \circ \text{ad}(\hat{A}) \circ \hat{B} \\
&= \text{ad}(\hat{A}) \circ [\hat{A}, \hat{B}] \\
&= [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\
&\text{usw.}
\end{aligned}$$

Definiere den Operator

$$\hat{B}(\tau) = \exp(\tau\hat{A}) \circ \hat{B} \circ \exp(-\tau\hat{A}).$$

8 Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip

Für $\tau = \frac{i}{\hbar}t$ und $\hat{A} = \hat{H}$ liefert der Ausdruck wieder das Heisenberg-Bild. Das Exponential eines linearen Operators \hat{A} ist über die Potenzreihe der Exponentialfunktion definiert:

$$\begin{aligned}\exp(\tau\hat{A}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{A}^n \\ \hat{A}^n &= \underbrace{\hat{A} \circ \hat{A} \circ \dots \circ \hat{A}}_{n\text{-mal}} \\ \hat{A}^0 &= \hat{1}.\end{aligned}$$

Dann folgt sofort

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau} \exp(\tau\hat{A}) &= \frac{\partial}{\partial\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{A}^n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\tau^{n-1}}{n!} \hat{A}^n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau^{n-1}}{(n-1)!} \hat{A}^{n-1} \circ \hat{A} \\ &\stackrel{n'=n-1}{=} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\tau^{n'}}{(n')!} \hat{A}^{n'} \circ \hat{A} \\ &= \exp(\tau\hat{A}) \circ \hat{A} \\ &= \hat{A} \circ \exp(\tau\hat{A}).\end{aligned}$$

Im allgemeinen ist der Kommutator von zwei linearen Operatoren \hat{A} und \hat{B} verschieden von Null:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \circ \hat{B} - \hat{B} \circ \hat{A} \neq \hat{0}.$$

Dann ist Vorsicht geboten. Der Operator $\hat{B}(\tau)$ genügt aber, wenn wir sorgfältig auf die Reihenfolge von \hat{A} und \hat{B} achten, einer linearen Differentialgleichung erster Ordnung:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau} \hat{B}(\tau) &= \exp(\tau\hat{A}) \circ (\hat{A} \circ \hat{B} - \hat{B} \circ \hat{A}) \circ \exp(-\tau\hat{A}) \\ &= \exp(\tau\hat{A}) \circ [\hat{A}, \hat{B}] \circ \exp(-\tau\hat{A}) \\ &= [\hat{A}, \hat{B}(\tau)] \\ &= \text{ad}(\hat{A}) \circ \hat{B}(\tau).\end{aligned}$$

Die (formale) Lösung dieser linearen Differentialgleichung erster Ordnung zum Anfangswert

$$\hat{B}(\tau = 0) = \hat{B}$$

lautet dann:

$$\hat{B}(\tau) = \exp \left[\tau \cdot \text{ad} \left(\hat{A} \right) \right] \circ \hat{B}.$$

Mit der bekannten Potenzreihenentwicklung der Exponentialfunktion folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \hat{B}(\tau) &= \exp \left[\tau \cdot \text{ad} \left(\hat{A} \right) \right] \circ \hat{B} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \left(\text{ad} \left(\hat{A} \right) \right)^n \circ \hat{B} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \underbrace{\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \dots \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \dots \right] \right]}_{n\text{-mal } \hat{A}}. \end{aligned}$$

Insbesondere gilt für $\tau = 1$:

$$\begin{aligned} \exp \left(\hat{A} \right) \circ \hat{B} \circ \exp \left(-\hat{A} \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\text{ad} \left(\hat{A} \right) \right)^n \circ \hat{B} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \dots \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \dots \right] \right]}_{n\text{-mal } \hat{A}}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Diese Formel ist als **BCH-Identität** bekannt. Sie heißt nach den Mathematikern **Baker**, **Campbell** und **Hausdorff**, die die Identität unabhängig voneinander (schon vor der Entdeckung der Quantenmechanik) in ihren Arbeiten über Lie-Algebren zu Beginn des vorigen Jahrhunderts verwendeten.

Nach dem Gesagten ist

$$\begin{aligned} \hat{C}_H(t) &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right) \circ \hat{C} \circ \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{i}{\hbar} t \right)^n}{n!} \underbrace{\left[\hat{H}, \left[\hat{H}, \dots \left[\hat{H}, \hat{C} \right] \dots \right] \right]}_{n\text{-mal } \hat{H}}. \end{aligned}$$

Es gelingt in der Regel nicht, das Heisenberg-Bild Gl. (8.12) für einen linearen Operators \hat{C} in geschlossener Form zu finden. Eine Ausnahme stellt der harmonische Oszillator dar, mit dem wir in den beiden nächsten Kapiteln 9 und 10 explizite Berechnungen anstellen werden.

9 Differentiation linearer Operatoren nach einem Parameter

Für lineare Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit $[\hat{A}, \hat{B}] \neq \hat{0}$ ist die Berechnung der Ableitung einer Linearkombination

$$\hat{C}(\lambda) = \hat{A} + \lambda\hat{B}$$

nach einem Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$ ganz einfach:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) = \hat{B}.$$

Aber für das Quadrat $[\hat{C}(\lambda)]^2 = (\hat{A} + \lambda\hat{B})^2$ sieht es schon anders aus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} [\hat{C}(\lambda)]^2 &= \frac{\partial}{\partial \lambda} [\hat{C}(\lambda) \circ \hat{C}(\lambda)] \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \hat{C}(\lambda) + \hat{C}(\lambda) \circ \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \\ &= \hat{B} \circ (\hat{A} + \lambda\hat{B}) + (\hat{A} + \lambda\hat{B}) \circ \hat{B} \\ &= 2\lambda\hat{B}^2 + \hat{B} \circ \hat{A} + \hat{A} \circ \hat{B} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2 [\hat{C}(\lambda)] \circ \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] &= 2 [\hat{A} + \lambda\hat{B}] \circ \hat{B} \\ &= 2\lambda\hat{B}^2 + 2\hat{A} \circ \hat{B} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2 \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ [\hat{C}(\lambda)] &= 2\hat{B} \circ [\hat{A} + \lambda\hat{B}] \\ &= 2\lambda\hat{B}^2 + 2\hat{B} \circ \hat{A}. \end{aligned}$$

Offensichtlich ist die übliche Kettenregel beim Differenzieren dann und nur dann anwendbar, wenn $\hat{C}(\lambda)$ und $\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda)$ vertauschen:

$$\left[\hat{C}(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] = \hat{0},$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \lambda} [\hat{C}(\lambda)]^2 = 2 \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ [\hat{C}(\lambda)] = 2 [\hat{C}(\lambda)] \circ \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right].$$

9 Differentiation linearer Operatoren nach einem Parameter

In der Regel sind $\hat{C}(\lambda)$ und $\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda)$ aber nicht vertauschbar. Wie rechnet man dann z.B. die Ableitung der Exponentialfunktion $\exp[\hat{C}(\lambda)]$ nach dem Parameter λ aus?

Um die Antwort zu finden, betrachten wir einen von zwei Parametern $\tau, \lambda \in \mathbb{R}$ abhängigen Operator

$$\hat{F}(\tau, \lambda) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\tau \hat{C}(\lambda)].$$

Offensichtlich gilt

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \hat{F}(\tau, \lambda) = \hat{0}. \quad (9.1)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{F}(\tau, \lambda) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\ &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{\partial}{\partial \tau} \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\ &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \{ \hat{C}(\lambda) \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \} \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] + \hat{C}(\lambda) \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] + \hat{C}(\lambda) \circ \hat{F}(\tau, \lambda), \end{aligned}$$

also

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{F}(\tau, \lambda) = \hat{C}(\lambda) \circ \hat{F}(\tau, \lambda) + \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)]. \quad (9.2)$$

Dies ist für die Funktion $\hat{F}(\tau, \lambda)$ bzgl. der Variablen τ eine *inhomogene* Differentialgleichung erster Ordnung. Die allgemeine Lösung der *homogenen* Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{Y}(\tau) = \hat{C}(\lambda) \circ \hat{Y}(\tau)$$

zum (allgemeinen!) Anfangswert $\hat{A} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \hat{Y}(\tau)$ ist

$$\hat{Y}(\tau) = \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{A}.$$

Um eine spezielle Lösung der inhomogenen Differentialgleichung zu konstruieren, wenden wir das Verfahren der Variation der Konstanten an:

$$\begin{aligned} \hat{F}(\tau, \lambda) &= \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{A}(\tau) \\ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{F}(\tau, \lambda) &= \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \right) \circ \hat{A}(\tau) + \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{A}(\tau) \\ &= \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{C}(\lambda) \circ \hat{A}(\tau) + \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{A}(\tau). \end{aligned}$$

Andererseits soll $\hat{F}(\tau, \lambda)$ der inhomogenen Differentialgleichung (9.2) genügen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{F}(\tau, \lambda) &= \hat{C}(\lambda) \circ \hat{F}(\tau, \lambda) + \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\
 &= \hat{C}(\lambda) \circ \underbrace{\exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{A}(\tau)}_{=\hat{F}(\tau, \lambda)} + \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\
 &= \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{C}(\lambda) \circ \hat{A}(\tau) + \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right] \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Der Vergleich beider Ausdrücke liefert

$$\begin{aligned}
 &\exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{A}(\tau) + \underbrace{\exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{C}(\lambda) \circ \hat{A}(\tau)}_{\text{hebt sich weg!}} \\
 &= \underbrace{\exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{C}(\lambda) \circ \hat{A}(\tau)}_{\text{hebt sich weg!}} + \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)],
 \end{aligned}$$

und weiter

$$\begin{aligned}
 \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{A}(\tau) &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\
 \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{A}(\tau) &= \exp [-\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \\
 \hat{A}(\tau) - \hat{A}(0) &= \int_0^\tau ds \exp [-s \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [s \hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Damit ist die allgemeine Lösung der inhomogenen Differentialgleichung (9.2) zum Anfangswert Gl. (9.1) gegeben zu:

$$\begin{aligned}
 \hat{F}(\tau, \lambda) &= \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \hat{A}(\tau) \\
 &= \exp [\tau \hat{C}(\lambda)] \circ \left\{ \hat{A}(0) + \int_0^\tau ds \exp [-s \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [s \hat{C}(\lambda)] \right\} \\
 &= \int_0^\tau ds \exp [(\tau - s) \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [s \hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Wir erhalten für $\tau \rightarrow 1$ somit die nützliche Formel:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\hat{C}(\lambda)] = \int_0^1 ds \exp [(1 - s) \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [s \hat{C}(\lambda)].$$

9 Differentiation linearer Operatoren nach einem Parameter

Substitution $s' = 1 - s$ ergibt die äquivalente Formel:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\hat{C}(\lambda)] &= \int_0^1 ds' \exp [s' \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [(1 - s') \hat{C}(\lambda)] & (9.3) \\
 &= \int_0^1 ds' \underbrace{\exp [s' \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [-s' \hat{C}(\lambda)]}_{\equiv \exp [s' \operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda)} \circ \exp [\hat{C}(\lambda)] \\
 &= \int_0^1 ds' \exp [s' \operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \circ \exp [\hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Wir suchen nun das Produkt von zwei Exponentialfunktionen wieder als Exponentialfunktion darzustellen:

$$\begin{aligned}
 \exp (\lambda \hat{A}) \circ \exp (\lambda \hat{B}) &= \exp [\hat{C}(\lambda)] & (9.4) \\
 \lim_{\lambda \rightarrow 0} \hat{C}(\lambda) &= \hat{0}.
 \end{aligned}$$

Die Lösung dieses Problems im allgemeinen Fall führt auf die sog. **Magnus-Reihe**, eine unendliche Reihe für $\hat{C}(\lambda)$ mit allen möglichen Kombinationen von Kommutatoren gebildet aus \hat{A} und \hat{B} . Ableiten nach dem Parameter λ ergibt zunächst eine lineare Differentialgleichung für $\exp[\hat{C}(\lambda)]$:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\hat{C}(\lambda)] & (9.5) \\
 &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \{ \exp (\lambda \hat{A}) \circ \exp (\lambda \hat{B}) \} \\
 &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp (\lambda \hat{A}) \right\} \circ \exp (\lambda \hat{B}) + \exp (\lambda \hat{A}) \circ \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \exp (\lambda \hat{B}) \right\} \\
 &= \exp (\lambda \hat{A}) \circ \hat{A} \circ \exp (\lambda \hat{B}) + \exp (\lambda \hat{A}) \circ \hat{B} \circ \exp (\lambda \hat{B}) \\
 &= \exp (\lambda \hat{A}) \circ (\hat{A} + \hat{B}) \circ \exp (\lambda \hat{B}) \\
 &= \exp (\lambda \hat{A}) \circ (\hat{A} + \hat{B}) \circ \exp (-\lambda \hat{A}) \circ \exp (\lambda \hat{A}) \circ \exp (\lambda \hat{B}) \\
 &= \exp (\lambda \hat{A}) \circ (\hat{A} + \hat{B}) \circ \exp (-\lambda \hat{A}) \circ \exp [\hat{C}(\lambda)] \\
 &= (\hat{A} + \exp (\lambda \hat{A}) \circ \hat{B} \circ \exp (-\lambda \hat{A})) \circ \exp [\hat{C}(\lambda)] \\
 &= (\hat{A} + \exp [\lambda \operatorname{ad} \hat{A}] \circ \hat{B}) \circ \exp [\hat{C}(\lambda)] \\
 &= \{ \exp [\lambda \operatorname{ad} \hat{A}] \circ (\hat{A} + \hat{B}) \} \circ \exp [\hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Andererseits gilt formal nach Gl. (9.3):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \lambda} \exp [\hat{C}(\lambda)] &= \left\{ \int_0^1 ds' \exp [s' \operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right\} \circ \exp [\hat{C}(\lambda)] \\ &= \left\{ \frac{\exp [\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] - \hat{1}}{\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)} \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) \right\} \circ \exp [\hat{C}(\lambda)].\end{aligned}$$

Vergleich mit Gl (9.3) führt jetzt auf

$$\frac{\exp [\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] - \hat{1}}{\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)} \circ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) = \exp [\lambda \operatorname{ad} \hat{A}] \circ (\hat{A} + \hat{B}).$$

Das ist eine nicht lineare Differentialgleichung für die Operatorfunktion $\hat{C}(\lambda)$:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) = \frac{\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)}{\exp [\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)] - \hat{1}} \circ \left\{ \exp [\lambda \operatorname{ad} \hat{A}] \circ (\hat{A} + \hat{B}) \right\}. \quad (9.6)$$

Sie lässt sich rekursiv lösen. Es gilt

$$\frac{x}{\exp(x) - 1} = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}x^2 - \frac{1}{720}x^4 + O(x^6).$$

Also

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) = \left\{ \begin{array}{l} \hat{1} - \frac{1}{2} \operatorname{ad} \hat{C}(\lambda) \\ + \frac{1}{12} [\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)]^2 \\ - \frac{1}{720} [\operatorname{ad} \hat{C}(\lambda)]^4 + \dots \end{array} \right\} \circ \left\{ \underbrace{\exp [\lambda \operatorname{ad} \hat{A}] \circ (\hat{A} + \hat{B})}_{= \hat{A} + \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots} \right\}.$$

Mit dem Potenzreihenansatz

$$\hat{C}(\lambda) = \lambda \hat{C}_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \hat{C}_2 + \frac{\lambda^3}{3!} \hat{C}_3 + \dots \quad (9.7)$$

folgt jetzt

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{C}(\lambda) &= \hat{C}_1 + \lambda \hat{C}_2 + \frac{\lambda^2}{2!} \hat{C}_3 + \dots \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \hat{1} \\ -\frac{1}{2} \operatorname{ad} (\lambda \hat{C}_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \hat{C}_2 + \frac{\lambda^3}{3!} \hat{C}_3 + \dots) \\ + \frac{1}{12} [\operatorname{ad} (\lambda \hat{C}_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \hat{C}_2 + \frac{\lambda^3}{3!} \hat{C}_3 + \dots)]^2 \\ - \frac{1}{720} [\operatorname{ad} (\lambda \hat{C}_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \hat{C}_2 + \frac{\lambda^3}{3!} \hat{C}_3 + \dots)]^4 + \dots \end{array} \right\} \left(\begin{array}{l} \hat{A} + \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}] \\ + \frac{\lambda^2}{2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \end{array} \right).\end{aligned}$$

9 Differentiation linearer Operatoren nach einem Parameter

Koeffizientenvergleich der Potenzen λ^0 , λ , λ^2 , usw. führt auf eine Rekursion, gemäß der die Operatoren \hat{C}_1 , \hat{C}_2 , \hat{C}_3 usw. bestimmt werden können:

$$\begin{aligned}
 \hat{C}_1 &= \hat{A} + \hat{B} \\
 \hat{C}_2 &= [\hat{A}, \hat{B}] \\
 \frac{1}{2}\hat{C}_3 &= -\frac{1}{2}[\hat{C}_1, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{4}[\hat{C}_2, \hat{A} + \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\
 &= -\frac{1}{2}[\hat{A} + \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{4}[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A} + \hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\
 &= -\frac{1}{2}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{4}[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A} + \hat{B}] \\
 &= \frac{1}{4}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{4}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]].
 \end{aligned}$$

Damit ergeben sich die ersten drei Terme der Magnus-Reihenentwicklung zu

$$\begin{aligned}
 \hat{C}(\lambda) &= \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^3}{12}[(\hat{A} - \hat{B}), [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \\
 \exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp(\lambda\hat{B}) &= \exp[\hat{C}(\lambda)].
 \end{aligned}$$

Man kann zeigen, dass die Reihe für genügend kleine Werte von $|\lambda|$ konvergiert. Einfacher liegen die Verhältnisse für den Spezialfall

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = \hat{0} = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]. \quad (9.8)$$

Alle Koeffizienten in der Magnus-Reihe von Potenzen höherer Ordnung λ^n mit $n \geq 3$ sind dann identisch Null und es folgt *exakt*:

$$\hat{C}(\lambda) = \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}].$$

Wie man leicht einsieht, verschwindet unter der Voraussetzung von Gl. (9.8) der Kommutator von $\hat{C}(\lambda)$ und $\frac{\partial}{\partial \lambda}\hat{C}(\lambda)$:

$$\left[\hat{C}(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda}\hat{C}(\lambda) \right] = \left[\lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}], (\hat{A} + \hat{B}) + \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \right] = \hat{0}.$$

Damit ist gezeigt, dass für lineare Operatoren \hat{A} und \hat{B} mit der Eigenschaft

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = \hat{0} = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$$

gilt:

$$\begin{aligned}\exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp(\lambda\hat{B}) &= \exp\left\{\lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right\} & (9.9) \\ &= \exp(\lambda\hat{A} + \lambda\hat{B}) \circ \exp\left(\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right) \\ \exp(\lambda\hat{A} + \lambda\hat{B}) &= \exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp(\lambda\hat{B}) \circ \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right) \\ &= \exp(\lambda\hat{B}) \circ \exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp\left(+\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right) \\ \exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp(\lambda\hat{B}) &= \exp(\lambda\hat{B}) \circ \exp(\lambda\hat{A}) \circ \exp(\lambda^2[\hat{A}, \hat{B}]).\end{aligned}$$

Die hergeleitete Regel ist nützlich um z.B. Linearkombinationen von Orts- und Impulsoperatoren im Argument der Exponentialfunktion zu vereinfachen!

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Harmonische Oszillationen treten überall in den Anwendungen der Quantenmechanik auf. So wird z.B. die Schwingungsenergie der Atome in Festkörpern oder Molekülen bei kleiner Auslenkung aus der Gleichgewichtslage in guter Näherung durch eine **quadratische Form** beschrieben, welche durch eine kanonische Transformation in eine entsprechende Zahl von *unabhängigen* eindimensionalen harmonischen Oszillatoren zerlegt werden kann. Auch elektromagnetische Strahlung ist (dynamisch gesehen) äquivalent zu einem System harmonischer Oszillatoren.

Der Hamilton-Operator des eindimensionalen ($D = 1$) harmonischen Oszillators lautet:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2.$$

Im Schrödinger-Bild spielen die *stationären* Wellenfunktionen

$$\Psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

als spezielle Lösungen der Schrödinger-Gleichung eine wichtige Rolle:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_E(x, t) = \hat{H}\Psi_E(x, t).$$

Dabei ist $\psi_E(x)$ notwendig eine Eigenfunktion des Hamilton-Operators \hat{H} zum Eigenwert E :

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x).$$

Gibt es im Heisenberg-Bild eine analoge Konstruktion für Operatoren? Wir suchen jetzt **stationäre Operatoren** im Heisenberg-Bild:

$$\begin{aligned}\hat{A}_E(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{a}_E \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \hat{a}_E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ [\hat{A}_E(t)]^\dagger &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{a}_E^\dagger \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \hat{a}_E^\dagger e^{i\frac{E}{\hbar}t} \\ [\hat{A}_E(t)]^\dagger \circ \hat{A}_E(t) &= \hat{a}_E^\dagger \circ \hat{a}_E.\end{aligned}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Damit der Operator $\hat{A}_E(t)$ Lösung der Heisenbergschen Bewegungsgleichung ist,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_E(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_E(t)],$$

müssen die Operatoren \hat{a}_E notwendig eine (verallgemeinerte) Eigenwertgleichung erfüllen:

$$\begin{aligned} (\text{ad } \hat{H}) \hat{a}_E &= -E\hat{a}_E \\ [\hat{H}, \hat{a}_E] &= -E\hat{a}_E. \end{aligned} \tag{10.1}$$

Also

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{A}_E(t) &= \frac{i}{\hbar} (\text{ad } \hat{H}) \circ \hat{A}_E(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} (\text{ad } \hat{H}) \circ \hat{a}_E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} E\hat{a}_E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} E\hat{A}_E(t). \end{aligned}$$

Eine zusätzliche Bedingung, nämlich die Kommutator-Relation

$$[\hat{a}_E, \hat{a}_{E'}^\dagger] = \delta_{E,E'} \hat{1}, \tag{10.2}$$

tritt jetzt an die Stelle der Orthonormalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_E^\dagger(x) \psi_{E'}(x) = \delta_{E,E'}$$

für die Eigenfunktionen $\psi_E(x)$ im Schrödinger-Bild!

Um einen expliziten Ausdruck für den stationären Operator \hat{c}_E im Fall des harmonischen Oszillators zu finden, machen wir mit zwei noch zu bestimmenden reellen Parametern $u = u_E$ und $v = v_E$ den folgenden **Ansatz**:

$$\begin{aligned} \hat{a}_E &= u\hat{x} + iv\hat{p} \\ \hat{a}_E^\dagger &= u\hat{x} - iv\hat{p}. \end{aligned}$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned}
 -(\text{ad } \hat{H}) \circ \hat{a}_E &= -[\hat{H}, \hat{a}_E] \\
 &= [\hat{a}_E, \hat{H}] \\
 &= \left[u\hat{x} + iv\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \right] \\
 &= \frac{u}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] + \frac{ivm\omega^2}{2} [\hat{p}, \hat{x}^2] \\
 &\stackrel{(8.14)}{=} \frac{u}{2m} 2i\hbar\hat{p} + \frac{ivm\omega^2}{2} (-2i\hbar\hat{x}) \\
 &= i\frac{\hbar u}{m}\hat{p} + \hbar v m \omega^2 \hat{x} \\
 E\hat{a}_E &= E(u\hat{x} + iv\hat{p}).
 \end{aligned}$$

Die Forderung

$$-[\hat{H}, \hat{a}_E] \stackrel{!}{=} E\hat{a}_E$$

führt jetzt auf die äquivalente Bedingung

$$i\left(\frac{\hbar u}{m} - Ev\right)\hat{p} + (\hbar v m \omega^2 - Eu)\hat{x} \stackrel{!}{=} \hat{0}.$$

Da \hat{p} und \hat{x} linear unabhängig sind, folgt ein homogenes Gleichungssystem für die Parameter $u = u_E$ und $v = v_E$:

$$\begin{aligned}
 \hbar v m \omega^2 - Eu &= 0 \\
 \frac{\hbar u}{m} - Ev &= 0.
 \end{aligned} \tag{10.3}$$

Also folgt ein homogenes lineares Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} -E & \hbar m \omega^2 \\ \frac{\hbar}{m} & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0.$$

Für die Existenz nicht trivialer Lösungen $u = u_E$ und $v = v_E$ des homogenen Gleichungssystems ist eine Lösbarkeitsbedingung zu erfüllen:

$$\det \begin{pmatrix} -E & \hbar m \omega^2 \\ \frac{\hbar}{m} & -E \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0.$$

Also

$$E = \pm \hbar \omega.$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Aus der Orthogonalitätsbedingung

$$\begin{aligned}\hat{1} &\stackrel{!}{=} [\hat{a}_E, \hat{a}_E^\dagger] \\ &= [u\hat{x} + iv\hat{p}, u\hat{x} - iv\hat{p}] \\ &= \hbar(vu + uv)\hat{1}\end{aligned}$$

folgt

$$\hbar u = \frac{1}{2v}.$$

Einsetzen in (10.3) liefert

$$0 = \frac{1}{2mv} - Ev.$$

Da wir die Parameter u und v als reelle Zahlen angenommen haben, kommt nur der positive Eigenwert $E = \hbar\omega > 0$ in Frage. Wir erhalten als Lösung für die Parameter u und v :

$$\begin{aligned}v &= \frac{1}{\sqrt{2mE}} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \\ u &= \frac{\sqrt{2mE}}{2\hbar} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}.\end{aligned}$$

Da das obige Eigenwertproblem des Superoperators $-\text{ad } \hat{H}$ für den harmonischen Oszillators in $D = 1$ nur den *einen* Eigenwert $E = \hbar\omega$ besitzt, können wir den Index E fortlassen. Wir schreiben dann abkürzend:

$$\begin{aligned}\hat{a}_E &\equiv \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \\ \hat{a}_E^\dagger &\equiv \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}.\end{aligned}\tag{10.4}$$

Es gilt per constructionem:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a} \circ \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} = \hat{1}.\tag{10.5}$$

Es ist zweckmäßig, die Operatoren \hat{x} und \hat{p} durch die stationären Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger auszudrücken. Addition bzw. Subtraktion der Gleichungen (13.21) liefert:

$$\begin{aligned}\frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{2} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} \\ \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2i} &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}.\end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger).\end{aligned}\tag{10.6}$$

Damit folgt durch Einsetzen

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \\ &= -\frac{1}{2m} \frac{m\hbar\omega}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} (-\hat{a}^2 + \hat{a} \circ \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} - \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a} \circ \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2}) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a} \circ \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \frac{1}{2} \cdot \hat{1} \right).\end{aligned}$$

Ausgedrückt durch \hat{a}^\dagger und \hat{a} erhält der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators eine besonders einfache Gestalt!

Das Heisenberg-Bild des Ortsoperator \hat{x} und des Impulsoperators \hat{p} können wir nun explizit angeben. Mit

$$\begin{aligned}\hat{a}_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \circ \hat{a} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) = \hat{a}e^{-i\omega t} = \hat{A}_E(t) \\ \hat{a}_H^\dagger(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \circ \hat{a}^\dagger \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} = \hat{A}_E^\dagger(t)\end{aligned}\tag{10.7}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

folgt unmittelbar durch Einsetzen der in Gl. (10.6) hergeleiteten Darstellung:

$$\begin{aligned}
 \hat{x}_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) & (10.8) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\hat{a}_H(t) + \hat{a}_H^\dagger(t)] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \cos(\omega t) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (-i) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \sin(\omega t) \\
 &= \hat{x} \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin(\omega t)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{p}_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ \hat{p} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) & (10.9) \\
 &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \circ (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
 &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) [\hat{a}_H(t) - \hat{a}_H^\dagger(t)] \\
 &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) (\hat{a}e^{-i\omega t} - \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}) \\
 &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \cos(\omega t) - \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sin(\omega t) \\
 &= \hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t).
 \end{aligned}$$

Beim harmonischen Oszillator erhält man das Heisenberg-Bild des Orts- und Impulsoperators offenbar aus den *klassischen* Bahnen $x(t)$ und $p(t) = m\frac{d}{dt}x(t)$, so wie in Gl. (8.7) angegeben, indem man anstelle der klassischen Anfangswerte $x(t=0)$ und $p(t=0)$ einfach die entsprechenden Operatoren für Ort und Impuls einsetzt. Dieses einfache Rezept ist (leider) nur für den harmonischen Oszillator richtig! Für ein anharmonisches Potential, z.B. $V(x) = \frac{V_2}{2}x^2 + \frac{V_4}{24}x^4$, ist diese Eigenschaft nicht länger gegeben!

Wir zeigen jetzt:

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}] &= \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_{=0} \circ \hat{a} + \hat{a}^\dagger \circ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} \\
 &= \hat{a}
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}] &= \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]}_{=0} \circ \hat{a} + \hat{a}^\dagger \circ \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{=-1} \\ &= -\hat{a}^\dagger. \end{aligned}$$

Eine weitere nützliche Regel ist

$$\exp(x\hat{a}) \circ \hat{a}^\dagger \circ \exp(-x\hat{a}) = \hat{a}^\dagger + x \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_{=\hat{1}} + \frac{x^2}{2} \underbrace{[a, [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]]}_{=0} + \dots = \hat{a}^\dagger + x\hat{1} \quad (10.10)$$

$$\exp(x\hat{a}^\dagger) \circ \hat{a} \circ \exp(-x\hat{a}^\dagger) = \hat{a} + x \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{=-\hat{1}} + \frac{x^2}{2} \underbrace{[\hat{a}^\dagger, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]]}_{=0} + \dots = \hat{a} - x\hat{1}.$$

Es gilt, wie man für $n \in \mathbb{N}$ leicht mit Hilfe vollständiger Induktion beweist:

$$\begin{aligned} \exp(x\hat{a}) \circ (\hat{a}^\dagger)^n \circ \exp(-x\hat{a}) &= \left\{ \exp(x\hat{a}) \circ \hat{a}^\dagger \circ \exp(-x\hat{a}) \right\}^n = (\hat{a}^\dagger + x\hat{1})^n \\ \exp(x\hat{a}^\dagger) \circ \hat{a}^n \circ \exp(-x\hat{a}^\dagger) &= \left\{ \exp(x\hat{a}^\dagger) \circ \hat{a} \circ \exp(-x\hat{a}^\dagger) \right\}^n = (\hat{a} - x\hat{1})^n. \end{aligned}$$

Für eine Potenzreihe der Gestalt

$$P(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = \sum_{n,m=0}^{\infty} p_{n,m} \cdot (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}^m$$

folgt dann sofort

$$\begin{aligned} \exp(x\hat{a}) \circ P(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \circ \exp(-x\hat{a}) &= P(\hat{a}^\dagger + x\hat{1}, \hat{a}) \\ \exp(x\hat{a}^\dagger) \circ P(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \circ \exp(-x\hat{a}^\dagger) &= P(\hat{a}^\dagger, \hat{a} - x\hat{1}). \end{aligned}$$

Taylor-Entwicklung bzgl. der Variablen x liefert in der ersten Ordnung die nützliche Regel:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, P(\hat{a}^\dagger, \hat{a})] &= \frac{\partial}{\partial \hat{a}^\dagger} P(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) \\ [\hat{a}^\dagger, P(\hat{a}^\dagger, \hat{a})] &= -\frac{\partial}{\partial \hat{a}} P(\hat{a}^\dagger, \hat{a}). \end{aligned} \quad (10.11)$$

Insbesondere

$$\begin{aligned} [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] &= n \cdot (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \\ [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^n] &= -n \cdot \hat{a}^{n-1}. \end{aligned}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Wir berechnen jetzt das Spektrum des hermiteschen Operators $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$. Sei $\psi_\nu(x)$ eine auf Eins normierte Eigenfunktion des Operators $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum Eigenwert ν :

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \psi_\nu(x) &= \nu \psi_\nu(x) \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^\dagger(x) \psi_\nu(x) &= 1.\end{aligned}$$

Aufgrund der Selbstadjungiertheit von $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ ist der Eigenwert ν eine reelle Zahl. Wir zeigen jetzt, dass $\nu \geq 0$ gelten muss. Dazu betrachten wir die Norm der Wellenfunktion $\hat{a} \psi_\nu(x)$:

$$\begin{aligned}0 &\leq \langle \hat{a} \psi_\nu, \hat{a} \psi_\nu \rangle \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a} \psi_\nu(x)]^\dagger \hat{a} \psi_\nu(x) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^\dagger(x) \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \psi_\nu(x) \\ &= \nu \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\nu^\dagger(x) \psi_\nu(x)}_{=1} \\ &= \nu,\end{aligned}$$

wie zuvor steht „p.I.“ für partielle Integration. Entweder es ist $\hat{a} \psi_\nu(x) \equiv 0$, oder aber $\hat{a} \psi_\nu(x)$ ist eine weitere Eigenfunktion des Operators $\hat{a}^\dagger \hat{a}$:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \hat{a} \psi_\nu(x) &= (\hat{a} \circ \hat{a}^\dagger - \hat{1}) \circ \hat{a} \psi_\nu(x) \\ &= \hat{a} \circ (\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} - \hat{1}) \psi_\nu(x) \\ &= \hat{a} (\nu - 1) \psi_\nu(x) \\ &= (\nu - 1) \hat{a} \psi_\nu(x).\end{aligned}$$

Entsprechend folgt für $j = 2, 3, \dots$, dass $\hat{a}^j \psi_\nu(x)$ eine Eigenfunktion von $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum Eigenwert $\nu - j$ ist:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \hat{a}^j \psi_\nu(x) &= (\hat{a} \circ \hat{a}^\dagger - \hat{1}) \hat{a}^j \psi_\nu(x) \\ &= \hat{a} \circ (\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} - \hat{1}) \hat{a}^{j-1} \psi_\nu(x) \\ &= \hat{a} \circ (\nu - (j-1) - 1) \hat{a}^{j-1} \psi_\nu(x) \\ &= (\nu - j) \hat{a}^j \psi_\nu(x).\end{aligned}$$

Das beschriebene Verfahren lässt sich fortsetzen, aber nicht beliebig oft! Denn es

gilt

$$\begin{aligned}
0 &\leq \langle \hat{a}^{j+1}\psi_\nu, \hat{a}^{j+1}\psi_\nu \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a}^j \psi_\nu^\dagger(x)] \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} [\hat{a}^j \psi_\nu(x)] \\
&= (\nu - j) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a}^j \psi_\nu^\dagger(x)] [\hat{a}^j \psi_\nu(x)]}_{\geq 0} \\
&= (\nu - j) \langle \hat{a}^j \psi_\nu, \hat{a}^j \psi_\nu \rangle,
\end{aligned}$$

d.h. es ist notwendig

$$\nu - j \geq \frac{\langle \hat{a}^{j+1}\psi_\nu, \hat{a}^{j+1}\psi_\nu \rangle}{\langle \hat{a}^j \psi_\nu, \hat{a}^j \psi_\nu \rangle} \geq 0.$$

Betrachte die Funktion $\psi_0(x) = \hat{a}^J \psi_\nu(x)$, wobei J die *größte* natürliche Zahl mit der Eigenschaft $J \leq \nu$ ist. Dann gilt notwendig

$$\hat{a}\psi_0(x) = 0. \quad (10.12)$$

Anderenfalls wäre $\nu - J < 0$, was ein Widerspruch zur gezeigten Ungleichung darstellt. Damit ist $\psi_0(x)$ als Eigenfunktion des Operators $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum Eigenwert Null etabliert. Einsetzen des oben hergeleiteten Ausdrucks für den Operator \hat{a} als Linearkombination von \hat{x} und \hat{p} führt unmittelbar auf eine Differentialgleichung erster Ordnung zur Bestimmung von $\psi_0(x)$:

$$\begin{aligned}
0 \stackrel{!}{=} \hat{a}\psi_0(x) &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \psi_0(x) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{1}{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}} \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x).
\end{aligned}$$

Die Lösung lautet

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \quad (10.13)$$

Sie ist bereits auf Eins normiert:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-s^2) \\
&= 1.
\end{aligned}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Wir steigen jetzt auf der Leiter eine Sprosse nach oben. Wir zeigen unschwer, dass die Funktion $\hat{a}^\dagger \psi_0(x)$ eine Eigenfunktion von $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum Eigenwert 1 ist:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_0(x) &= \hat{a}^\dagger \circ (\hat{1} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}) \psi_0(x) \\ &= \hat{a}^\dagger (1 + 0) \psi_0(x) \\ &= 1 \cdot \hat{a}^\dagger \psi_0(x).\end{aligned}$$

Und entsprechend auf der zweiten Sprosse:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^2 \psi_0(x) &= (\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \circ \hat{a}^\dagger) \hat{a}^\dagger \psi_0(x) \\ &= \hat{a}^\dagger \circ (\hat{1} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}) \hat{a}^\dagger \psi_0(x) \\ &= \hat{a}^\dagger (1 + 1) \hat{a}^\dagger \psi_0(x) \\ &= 2 (\hat{a}^\dagger)^2 \psi_0(x).\end{aligned}$$

Die fortgesetzte Anwendung von \hat{a}^\dagger auf die Funktion $\psi_0(x)$ generiert eine nicht endende Folge von neuen Funktionen $(\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x)$, die sämtlich für $n = 0, 1, 2, \dots$ Eigenfunktionen des Operators $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum ganzzahligen Eigenwert n sind.

Wir behaupten jetzt: die Funktionen $\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x)$ mit $n \in \mathbb{N}$ sind orthogonal und auf Eins normiert. Sei $m \geq n$. Dann zeigen wir:

$$\begin{aligned}&\langle (\hat{a}^\dagger)^m \psi_0(x), (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x) \rangle \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \langle (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \psi_0(x), \hat{a} \circ \hat{a}^\dagger \circ (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0(x) \rangle \\ &= \langle (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \psi_0(x), (1 + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}) \circ (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0(x) \rangle \\ &= \langle (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \psi_0(x), \left\{ (\hat{a}^\dagger)^{n-1} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \circ (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \right\} \psi_0(x) \rangle \\ &= \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \psi_0(x), \left\{ (\hat{a}^\dagger)^{n-1} + \hat{a}^\dagger \circ \left(\underbrace{\left[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \right]}_{\equiv (n-1)(\hat{a}^\dagger)^{n-2}} + \underbrace{(\hat{a}^\dagger)^{n-1} \circ \hat{a}}_{\text{kein Beitrag: } \hat{a}\psi_0(x)=0} \right) \right\} \psi_0(x) \right\rangle \\ &= n \cdot \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \psi_0(x), (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0(x) \right\rangle.\end{aligned}$$

Diese Rekursion liefert nach n Schritten:

$$\begin{aligned}&\langle (\hat{a}^\dagger)^m \psi_0(x), (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x) \rangle \\ &= n(n-1)(n-2) \cdots 2 \cdot 1 \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-n} \psi_0(x), \psi_0(x) \right\rangle \\ &= n! \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-n} \psi_0(x), \psi_0(x) \right\rangle.\end{aligned}$$

Für $m = n$ folgt

$$\left\langle \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x), \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \right\rangle = \langle \psi_0(x), \psi_0(x) \rangle = 1.$$

Für $m > n$ ergibt partielle Integration dann:

$$\begin{aligned} \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-n} \psi_0(x), \psi_0(x) \right\rangle &= \left\langle \hat{a}^\dagger \circ (\hat{a}^\dagger)^{m-n-1} \psi_0(x), \psi_0(x) \right\rangle \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \left\langle (\hat{a}^\dagger)^{m-n-1} \psi_0(x), \underbrace{\hat{a} \psi_0(x)}_{=0} \right\rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Der Fall $m < n$ lässt sich durch komplexe Konjugation auf den Fall $m > n$ zurückführen. Nach dem Gesagten bilden die Funktionen

$$\psi_n(x) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x)$$

ein Orthonormalsystem:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^\dagger(x) \psi_n(x) = \delta_{m,n}.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \hat{a} \psi_n(x) &= \frac{\hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) && (10.14) \\ &= \frac{[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] + (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \\ &= \frac{n \cdot (\hat{a}^\dagger)^{n-1} + (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[(\sqrt{n} \cdot \sqrt{n}) (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \psi_0(x) + (\hat{a}^\dagger)^n \underbrace{\hat{a} \psi_0(x)}_{=0} \right] \\ &= \sqrt{n} \frac{(\hat{a}^\dagger)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \psi_0(x) \\ &= \sqrt{n} \cdot \psi_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Ebenso gilt

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger \psi_n(x) &= \frac{\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) & (10.15) \\
 &= \sqrt{n+1} \frac{(\hat{a}^\dagger)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} \psi_0(x) \\
 &= \sqrt{n+1} \cdot \psi_{n+1}(x).
 \end{aligned}$$

Jetzt ist klar, weshalb man die Operatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} auch **Leiteroperatoren** nennt. Die Funktionen $\psi_n(x)$ sind die Eigenfunktionen des Operators $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ zum ganzzahligen Eigenwert $n \geq 0$:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} \psi_n(x) &= \hat{a}^\dagger \sqrt{n} \cdot \psi_{n-1}(x) \\
 &= \sqrt{n} \cdot \hat{a}^\dagger \psi_{n-1}(x) \\
 &= \sqrt{n} \cdot \sqrt{(n-1)+1} \cdot \psi_n(x) \\
 &= n \cdot \psi_n(x)
 \end{aligned}$$

Es folgt nach dem Gesagten:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 & (10.16) \\
 &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \frac{1}{2} \cdot \hat{1} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{H} \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) \\
 E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Somit sind für $n = 0, 1, 2, \dots$ die Funktionen $\psi_n(x)$ zugleich die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators \hat{H} des harmonischen Oszillators zum Eigenwert E_n .

Die Energieniveaus E_n des eindimensionalen harmonischen Oszillators sind **äquidistant**. Der Oszillator kann nur Energie in ganzzahligen Vielfachen des Wertes $\hbar\omega$ beim Übergang zwischen verschiedenen Niveaus aufnehmen oder abgeben. Eine oft verwendete Deutung der Eigenfunktion $\psi_n(x)$ eines Teilchens beim harmonischen Oszillator ist, dass diese einer Anregung von n Schwingungsquanten gleicher Energie $\hbar\omega$ entspricht. Dann ist $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ der Operator, dessen Eigenwert im Zustand $\psi_n(x)$ gleich der Anzahl der angeregten Quanten ist. Man nennt $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ einen **Teilchenzahloperator**, weil er die angeregten Quanten zählt. Der Operator \hat{a}^\dagger heißt **Erzeugungsoperator**, weil er gemäß Gl. (10.15) ein Quant erzeugt, der Operator \hat{a} heißt **Vernichtungsoperator**, weil er gemäß Gl. (10.14) ein Quant vernichtet.

Hervorzuheben ist, dass die sog. **Nullpunktenergie**, das Energieniveau des Grundzustands, positiv ist:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > 0.$$

Dies ist ein großer Unterschied zur klassischen Physik! Auch am absoluten Temperatur-Nullpunkt führen die Atome in einem Kristall eine Bewegung um ihre Gleichgewichtslage aus!

Die explizite Berechnung der höheren Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ kann im Prinzip ausgehend vom Grundzustand $\psi_0(x)$ rekursiv erfolgen. Für den ersten angeregten Zustand folgt

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \hat{a}^\dagger \psi_0(x) \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \psi_0(x) \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{m\omega}{\sqrt{2m\hbar\omega}} x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \cdot \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right),\end{aligned}$$

für den zweiten angeregten Zustand erhalten wir:

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{\sqrt{2}} \psi_0(x) = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \psi_1(x) \\ &= \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(2\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(2\frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{\hbar} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x^2 - 1 \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(2\frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).\end{aligned}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

In Abb. 10.1 sind die ersten fünf Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators zusammen mit der Parabel $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ graphisch dargestellt. Die Fortsetzung

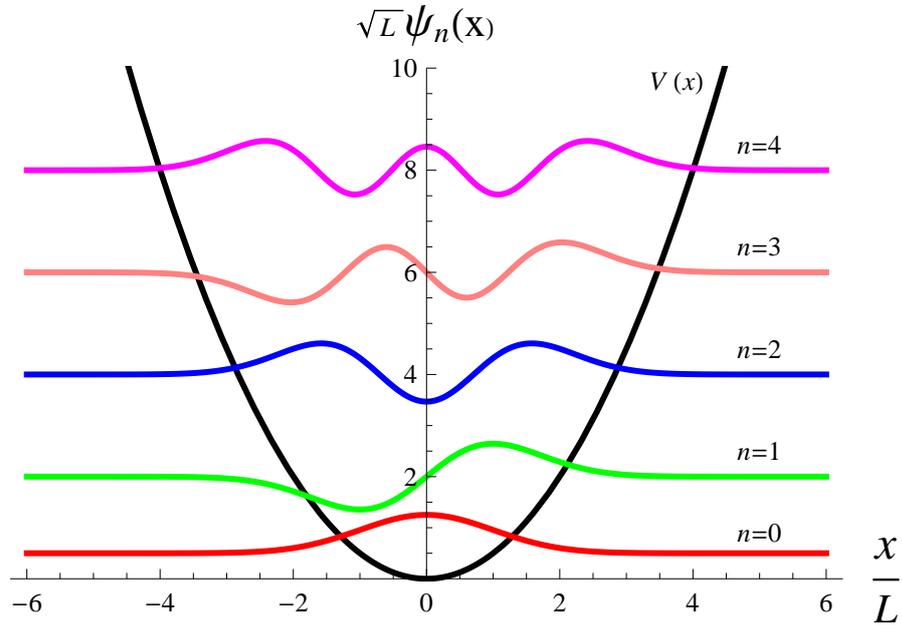


Abbildung 10.1: Die ersten fünf Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators.

des Rekursionsverfahrens zur Berechnung der höheren Eigenfunktionen für $n = 3, 4, 5, \dots$ ist umständlich. Daher stellen wir eine andere, einfachere Methode vor, die auf einem Trick beruht. Wir schreiben unter Verwendung der BCH-Identität Gl. (8.16):

$$\begin{aligned}
 (\hat{a}^\dagger)^n &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right)^n \\
 &= \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} (\hat{p} + im\omega\hat{x})^n \\
 &= \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} \left\{ \hat{p} - \frac{m\omega}{2\hbar} \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}^2]}_{=2\frac{\hbar}{i}\hat{x}} + \frac{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^2}{2!} \underbrace{[[\hat{p}, \hat{x}^2], \hat{x}^2]}_{=0} + \dots \right\}^n \\
 &\stackrel{(8.16)}{=} \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} \left\{ \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right) \circ \hat{p} \circ \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right) \right\}^n \\
 &= \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right) \circ \hat{p}^n \circ \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2\right).
 \end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2\right) \circ \hat{p}^n \circ \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2\right) \psi_0(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{(-i)^n}{(\sqrt{2m\hbar\omega})^n} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left[\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \psi_0(x)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\
&\quad \times \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left[\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left[\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\
&\quad \times \exp\left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left[\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \left[\exp(\xi^2) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \exp(-\xi^2)\right]_{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x}.
\end{aligned}$$

Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators sind somit gegeben zu:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right).$$

Hier ist

$$H_n(\xi) = \exp(\xi^2) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \exp(-\xi^2)$$

ein sog. **Hermite-Polynom**. Für $n = 0, 1, 2, 3$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
H_0(\xi) &= 1 \\
H_1(\xi) &= 2\xi \\
H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\
H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi.
\end{aligned}$$

Wir leiten jetzt noch eine nützliche Integraldarstellung für die Hermite-Polynome her. Dazu schreiben wir unter Verwendung des Cauchy'schen Integralsatzes

(C.I.)

$$\begin{aligned}
 1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp(-\eta^2) \\
 &\stackrel{\text{C.I.}}{=} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp[-(\eta + i\xi)^2] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(\xi^2) \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp[-(\eta^2 + 2i\eta\xi)],
 \end{aligned}$$

und erhalten nach Multiplikation mit $\exp(-\xi^2)$ auf beiden Seiten der Gleichung die sog. **Stratonovic-Identität**:

$$\exp(-\xi^2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp[-(\eta^2 + 2i\eta\xi)]. \quad (10.17)$$

Es folgt durch Einsetzen die gesuchte **Integraldarstellung** der Hermite-Polynome:

$$\begin{aligned}
 H_n(\xi) &= \exp(\xi^2) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \exp(-\xi^2) \quad (10.18) \\
 &= \exp(\xi^2) \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp[-(\eta^2 + 2i\eta\xi)] \\
 &= \exp(\xi^2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta (2i\eta)^n \exp[-(\eta^2 + 2i\eta\xi)] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta (i\eta)^n \exp[-(\eta^2 + 2i\eta\xi - \xi^2)] \\
 &= \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta (i\eta)^n \exp[-(\eta + i\xi)^2] \\
 &\stackrel{\text{C.I.}}{=} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds [(i(s - i\xi))]^n \exp(-s^2) \\
 &= \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^n \exp(-s^2).
 \end{aligned}$$

Offensichtlich gilt:

$$\begin{aligned}
 H_{2m+1}(0) &= \frac{2^{2m+1}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (is)^{2m+1} \exp(-s^2) \\
 &= \frac{2^{2m+1}}{\sqrt{\pi}} \left(\underbrace{\int_{-\infty}^0 ds (is)^{2m+1} \exp(-s^2)}_{=\int_0^{\infty} ds (-is)^{2m+1} \exp(-s^2)} + \int_0^{\infty} ds (is)^{2m+1} \exp(-s^2) \right) \\
 H_{2m+1}(0) &= 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{2m}(0) &= \frac{(2i)^{2m}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds s^{2m} \exp(-s^2) = \frac{(-4)^m}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{(-4)^m}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\left(m - \frac{1}{2}\right) \left(m - \frac{3}{2}\right) \cdots \frac{1}{2}}_{m\text{-mal}} \cdot \underbrace{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}_{=\sqrt{\pi}} \\
&= (-2)^m (2m - 1) \cdot (2m - 3) \cdots 3 \cdot 1 \\
&= (-2)^m \cdot \frac{(2m - 1)!}{(m - 1)!}.
\end{aligned}$$

Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des harmonischen Oszillators $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ mit ungerader Quantenzahl $n = 2m + 1$ haben alle bei $x = 0$ eine Nullstelle! Dies ist Ausdruck der Symmetrie der Hermite-Polynome:

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi).$$

Aus der Integraldarstellung Gl. (10.18) folgt sofort:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) &= \frac{d}{d\xi} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^n \exp(-s^2) & (10.19) \\
&= 2n \cdot \frac{2^{n-1}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^{n-1} \exp(-s^2) \\
&= 2n \cdot H_{n-1}(\xi).
\end{aligned}$$

Desweiteren gilt:

$$\begin{aligned}
&\left(-2\xi \frac{d}{d\xi} + 2n\right) H_n(\xi) \\
&= -2\xi \cdot n \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^{n-1} \exp(-s^2) + 2n \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^n \exp(-s^2) \\
&= 2n \cdot \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds [-\xi + (\xi + is)] \cdot (\xi + is)^{n-1} \exp(-s^2) \\
&= 2n \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (is) \cdot (\xi + is)^{n-1} \exp(-s^2) \\
&= -in \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^{n-1} \left[\frac{d}{ds} \exp(-s^2) \right] \\
&\stackrel{\text{p.I.}}{=} in \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \left[\frac{d}{ds} (\xi + is)^{n-1} \right] \exp(-s^2) \\
&= (i)^2 n(n-1) \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^{n-2} \exp(-s^2) \\
&= -\frac{d^2}{d\xi^2} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^n \exp(-s^2)
\end{aligned}$$

$$= -\frac{d^2}{d\xi^2} H_n(\xi),$$

wie bereits zuvor steht „p.I.“ für partielle Integration. Damit ist gezeigt:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + 2n \right) H_n(\xi) = 0. \quad (10.20)$$

Einsetzen von Gl. (10.19) in die Differentialgleichung der Hermite-Polynome Gl. (10.20) liefert die nützliche Rekursionsformel:

$$\begin{aligned} H_{n+2}(\xi) &= 2\xi \cdot H_{n+1}(\xi) - 2(n+1) H_n(\xi) \\ H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi. \end{aligned}$$

Auch die sog. **erzeugende Funktion**

$$E(\xi, z) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{z^n}{n!}$$

der Hermite-Polynome ist mit Hilfe der Integraldarstellung leicht zu berechnen. Sie heißt erzeugende Funktion, weil offensichtlich gilt:

$$H_n(\xi) = \left[\frac{\partial^n}{\partial z^n} E(\xi, z) \right]_{z=0}.$$

Wir erhalten durch Einsetzen der Integraldarstellung Gl. (10.18) und unter Verwendung des Cauchy-Integralsatzes

$$\begin{aligned} E(\xi, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{z^n}{n!} & (10.21) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds (\xi + is)^n \exp(-s^2) \frac{z^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-s^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[2(\xi + is)z]^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-s^2) \exp[2(\xi + is)z] \\ &= \exp(2\xi z) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-s^2 + 2iz \cdot s) \\ &= \exp(2\xi z) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp[-(s - iz)^2 - z^2] \\ &= \exp(2\xi z - z^2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp[-(s - iz)^2] \end{aligned}$$

$$\stackrel{\text{C.I.}}{=} \exp(2\xi z - z^2) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds' \exp(-s'^2)}_{=1}$$

$$= \exp(2\xi z - z^2).$$

Es gibt einen hübschen Trick, ein Hermite-Polynom für beliebigen ganzzahligen Index n numerisch zu berechnen. Dazu betrachten wir die Fourier-Transformation der Funktion $e^{-\xi^2} H_n(\xi)$ und verwenden wieder den Cauchy-Integralsatz:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-i\eta\xi) \exp(-\xi^2) H_n(\xi) \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-i\eta\xi) \exp(-\xi^2) \left[\frac{\partial^n}{\partial z^n} \exp(2\xi z - z^2) \right]_{z=0} \\ = & \left[\frac{\partial^n}{\partial z^n} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-i\eta\xi) \exp(-\xi^2 + 2\xi z - z^2) \right]_{z=0} \\ = & \left[\frac{\partial^n}{\partial z^n} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp(-i\eta\xi) \exp[-(\xi - z)^2] \right]_{z=0} \\ \stackrel{s=\xi-z}{=} & \left[\frac{\partial^n}{\partial z^n} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp[-i\eta(s+z)] \exp(-s^2) \right]_{z=0} \\ = & (-i\eta)^n \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-i\eta s) \exp(-s^2) \\ = & (-i\eta)^n \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left[-\left(s + i\frac{\eta}{2}\right)^2 - \frac{\eta^2}{4}\right] \\ = & (-i\eta)^n \exp\left(-\frac{\eta^2}{4}\right) \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left[-\left(s + i\frac{\eta}{2}\right)^2\right] \\ \stackrel{\text{C.I.}}{=} & (-i\eta)^n \exp\left(-\frac{\eta^2}{4}\right) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-t^2)}_{=\sqrt{\pi}} \\ = & \sqrt{\pi} \cdot (-i\eta)^n \exp\left(-\frac{\eta^2}{4}\right). \end{aligned}$$

Fourier-Rücktransformation liefert die gesuchte Formel

$$\exp(-\xi^2) H_n(\xi) = \sqrt{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{2\pi} \exp(i\eta\xi) (-i\eta)^n \exp\left(-\frac{\eta^2}{4}\right).$$

Die Erwartungswerte für Ort und Impuls eines Teilchens in einem stationären Zustand $\Psi_{E_n}(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ des harmonischen Oszillators sind aufgrund der bereits diskutierten Orthonormalität der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ gleich Null. Dies

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

folgt unmittelbar aus der Darstellung Gl. (10.6) von Orts- und Impulsoperator durch Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_{E_n}} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_n} \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\underbrace{\sqrt{n} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \psi_{n-1}(x')}_{=0} + \underbrace{\sqrt{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \psi_{n+1}(x')}_{=0} \right] \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Entsprechend:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p} \rangle_{\Psi_{E_n}} &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) \langle \hat{a} - \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_n} \\
 &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) \left[\underbrace{\sqrt{n} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \psi_{n-1}(x')}_{=0} - \underbrace{\sqrt{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \psi_{n+1}(x')}_{=0} \right] \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Für die Schwankungsquadrate von Ort und Impuls erhalten wir dagegen:

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta_n \hat{x} \rangle_{\Psi_{E_n}}^2 &= \langle \hat{x}^2 \rangle_{\Psi_{E_n}} - \underbrace{\langle \hat{x} \rangle_{\Psi_{E_n}}^2}_{=0} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_n} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left\langle \hat{a}^2 + \underbrace{\hat{a} \circ \hat{a}^\dagger}_{=\hat{1} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \right\rangle_{\psi_n} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{1} + \hat{a}^{\dagger 2} \rangle_{\psi_n} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\underbrace{\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_n}}_{=0} + \underbrace{\langle 2\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{1} \rangle_{\psi_n}}_{=2n+1} + \underbrace{\langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle_{\psi_n}}_{=0} \right] \\
 &= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned}$$

und entsprechend:

$$\begin{aligned}
\langle \Delta \hat{p} \rangle_{\Psi_{E_n}}^2 &= \langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi_{E_n}} - \underbrace{\langle \hat{p} \rangle_{\Psi_{E_n}}^2}_{=0} \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_n} \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left\langle \hat{a}^2 - \underbrace{\hat{a} \circ \hat{a}^\dagger}_{=\hat{1} + \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}} - \hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \right\rangle_{\psi_n} \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \hat{a}^2 - 2\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} - \hat{1} + \hat{a}^{\dagger 2} \rangle_{\psi_n} \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2} \left[\underbrace{\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_n}}_{=0} - \underbrace{\langle 2\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \hat{1} \rangle_{\psi_n}}_{=2n+1} + \underbrace{\langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle_{\psi_n}}_{=0} \right] \\
&= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich das Produkt von Impuls- und Ortsunschärfe für die *stationären* Zustände des harmonischen Oszillators zu:

$$\langle \Delta \hat{p} \rangle_{\Psi_{E_n}} \cdot \langle \Delta \hat{x} \rangle_{\Psi_{E_n}} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.22)$$

Das Produkt von Impuls- und Ortsunschärfe für die stationären Zustände $\Psi_{E_n}(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ des harmonischen Oszillators ist am kleinsten im Grundzustand $n = 0$ und wächst linear mit der Quantenzahl n an!

Für den *klassischen* harmonischen Oszillator ist die Wahrscheinlichkeit ρ_{kl} dafür, ein Teilchen mit Energie E bei seiner Bewegung im Volumenelement $dx dp$ des Phasenraumes ($D = 1$) am Phasenraumpunkt (x, p) anzutreffen, gegeben zu

$$\rho_{kl}(x, p) = \frac{1}{T} dx dp \delta \left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right).$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

In der Tat ist $\rho_{kl}(x, p)$ auf Eins normiert:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \rho_{kl}(x, p) &= \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \delta \left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \\
 &= \frac{1}{T} \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \sqrt{2m} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dp' \delta (E - p'^2 - x'^2) \\
 &= \frac{1}{T} \frac{2}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dp' \delta (E - p'^2 - x'^2) \\
 &= \frac{1}{T} \frac{2}{\omega} \int_0^{2\pi} d\varphi \underbrace{\int_0^{\infty} dr r \delta (E - r^2)}_{=\frac{1}{2}} \\
 &= \frac{1}{T} \frac{2\pi}{\omega} = 1.
 \end{aligned}$$

Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens mit Energie E in einem kleinen Bereich dx der Bahnkurve am Ort x ist nach dem Gesagten:

$$\begin{aligned}
 \rho_{kl}(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \rho_{kl}(x, p) dx \\
 &= \frac{1}{T} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \delta \left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \\
 &= \frac{2}{T} dx \int_0^{\infty} dp \delta \left(E - \frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right) \\
 &= \frac{2}{T} dx \frac{1}{\left| \frac{p_0}{m} \right|} \int_0^{\infty} dp \delta (p - p_0).
 \end{aligned}$$

Mit p_0 als Nullstelle folgt

$$p_0 = \sqrt{2m \left(E - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right)}.$$

Also

$$\rho_{kl}(x) dx = \frac{2m}{T} dx \frac{1}{\sqrt{2m \left(E - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right)}}.$$

Am klassischen Umkehrpunkt x_u ist der Impuls gleich Null und es folgt:

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{m}{2} \omega^2 x_u^2 \\
 x_u &= \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.
 \end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned}\rho_{kl}(x) dx &= \frac{2m}{T} dx \frac{1}{\sqrt{2m \left(\frac{m}{2} \omega^2 x_u^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right)}} \\ &= \frac{2}{T \cdot \omega} dx \frac{1}{\sqrt{x_u^2 - x^2}} \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{dx}{\sqrt{x_u^2 - x^2}}.\end{aligned}$$

Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen mit Energie E ist demnach:

$$\rho_{kl}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x_u^2 - x^2}}.$$

Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen mit Energie $E = E_n$ ist dagegen:

$$\begin{aligned}\rho_{qm}(x) &= |\psi_n(x)|^2 \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^n n!} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \left[H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \right]^2 \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^n n!} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar} x_u^2 \cdot \left(\frac{x}{x_u}\right)^2\right] \left[H_n \left(\sqrt{\left(\frac{m\omega}{\hbar} x_u^2\right)} \cdot \frac{x}{x_u} \right) \right]^2.\end{aligned}$$

Hier ist der entsprechende Umkehrpunkt x_u definiert zu:

$$\begin{aligned}\frac{m\omega}{\hbar} x_u^2 &= \frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1 \\ \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{2}} &= \left(\frac{2n + 1}{\pi x_u^2} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{2n + 1}}{x_u} \frac{1}{\sqrt{\pi}}.\end{aligned}$$

Also erhalten wir

$$\rho_{qm}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{2n + 1}}{x_u} \frac{1}{2^n n!} \exp\left[-(2n + 1) \left(\frac{x}{x_u}\right)^2\right] \left[H_n \left(\sqrt{2n + 1} \cdot \frac{x}{x_u} \right) \right]^2.$$

In Abb. 10.2 und 10.3 sind beide Verteilungsfunktionen zum Vergleich dargestellt. Im Unterschied zum klassischen Verhalten kann sich in der Quantenmechanik das Teilchen auch in der klassisch verbotenen Region $x > x_u$ bzw. $x < -x_u$ aufhalten. Für $n \gg 1$ approximiert $\rho_{qm}(x)$ jedoch im Mittel die klassische Verteilungsfunktion $\rho_{kl}(x)$. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Bohrschen Korrespondenzprinzip, das besagt, dass ein quantenmechanisches System sich für große Quantenzahlen dem klassischen System annähert.

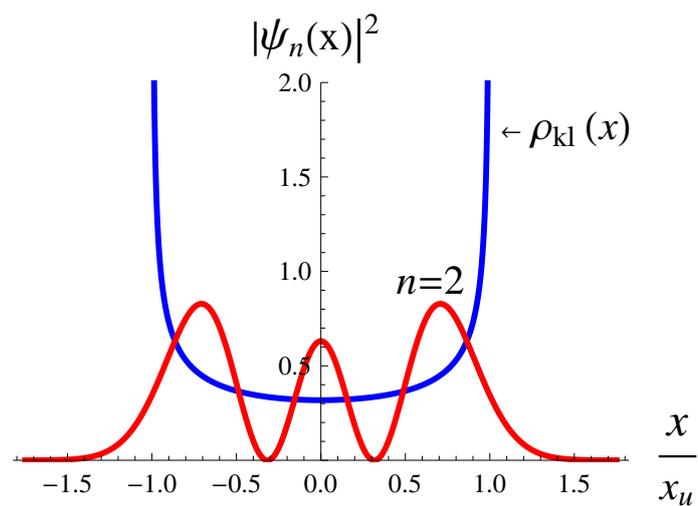
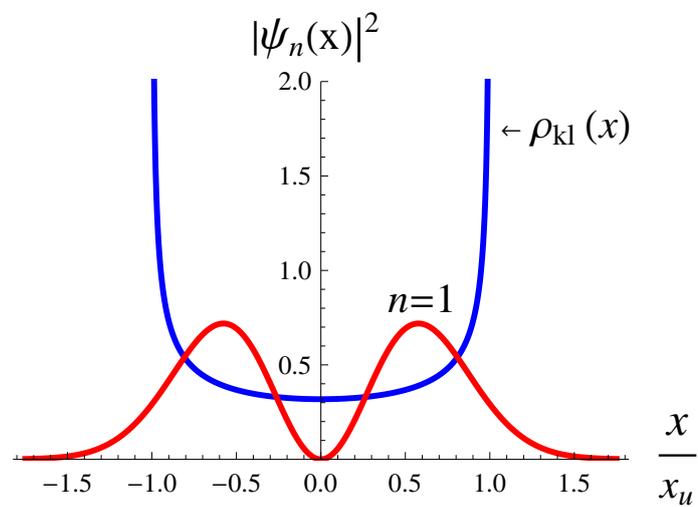
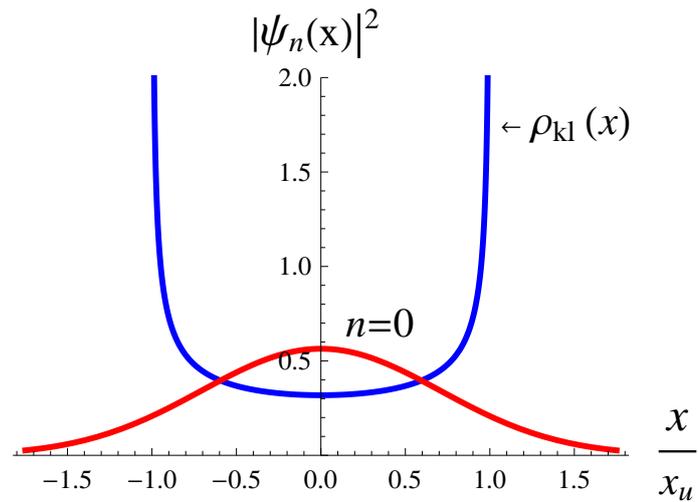


Abbildung 10.2: Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

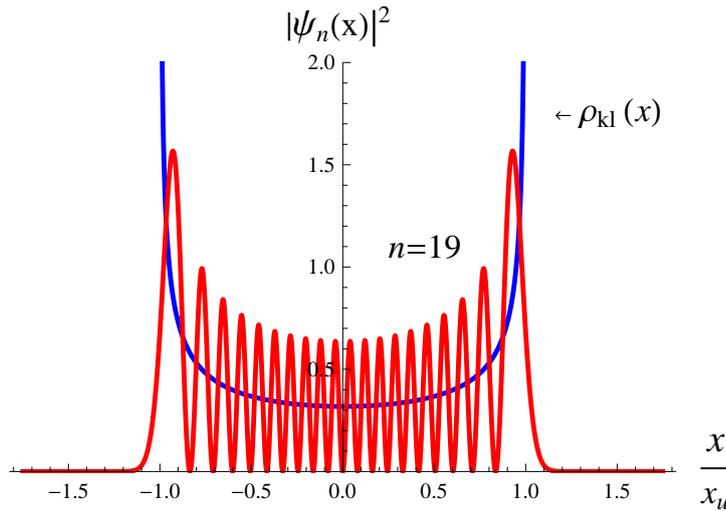


Abbildung 10.3: Vergleich mit klassischer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Wir konstruieren abschließend den Propagator

$$K_\omega(x, x', t) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^\dagger(x') \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

der dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \circ \hat{a} + \frac{1}{2} \hat{1} \right)$$

des harmonischen Oszillators zugeordnet ist. Es gilt demnach

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n(x) &= E_n\psi_n(x) \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right). \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} K_\omega(x, x', t) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+x'^2)} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x'\right) (e^{-i\omega t})^n. \end{aligned}$$

Mittels der Integraldarstellung Gl. (10.18) kann die Summe über n explizit be-

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

rechnet werden. Dazu kürzen wir ab

$$\begin{aligned} w &= e^{-i\omega t} \\ u &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \\ v &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x', \end{aligned} \quad (10.23)$$

und erhalten somit:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=0}^{\infty} H_n(u) H_n(v) \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^n}{n!} \\ &= \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} (u + i\xi)^n \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{-\eta^2} (v + i\eta)^n \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{-\xi^2} e^{-\eta^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[2(u + i\xi) \cdot 2(v + i\eta) \cdot \frac{w}{2}\right]^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{-(\xi^2 + \eta^2)} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{[2(u + i\xi)(v + i\eta)w]^n}{n!}}_{\equiv e^{2(u+i\xi)(v+i\eta)w}} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{-(\xi^2 + \eta^2)} \cdot e^{2(u+i\xi)(v+i\eta)w} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left[-(\xi^2 + \eta^2) - 2\xi\eta w + 2iw(\xi v + \eta u) + 2uvw \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp \left[-(\xi, \eta) \begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + 2iw(v, u) \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2uvw \right]. \end{aligned} \quad (10.24)$$

Die Summe über n ist eine Exponentialreihe und besitzt einen unbeschränkt großen Konvergenzradius. Nun schreiben wir

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und erhalten:

$$\begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix} = \hat{1} + w\hat{\sigma}_x. \quad (10.25)$$

Es ergibt sich hieraus für die Quadratwurzel der Matrix:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix}^{\frac{1}{2}} &= \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} & (10.26) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l \\
&= \sum_{l=0,2,4,\dots} \binom{\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l + \sum_{l=1,3,5,\dots} \binom{\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{2m} w^{2m} \hat{1} + \sum_{m=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{2m+1} w^{2m+1} \hat{\sigma}_x \\
&= \frac{\sqrt{1+w} + \sqrt{1-w}}{2} \hat{1} + \frac{\sqrt{1+w} - \sqrt{1-w}}{2} \hat{\sigma}_x \\
&= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{1+w} + \sqrt{1-w}}{2} & \frac{\sqrt{1+w} - \sqrt{1-w}}{2} \\ \frac{\sqrt{1+w} - \sqrt{1-w}}{2} & \frac{\sqrt{1+w} + \sqrt{1-w}}{2} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Hierbei wurde verwendet

$$(\hat{\sigma}_x)^l = \begin{cases} \hat{1} & \text{falls } l = 0, 2, 4, \dots, \\ \hat{\sigma}_x & \text{falls } l = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (10.27)$$

Wir halten fest:

$$\begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix} = \hat{1} + w\hat{\sigma}_x = \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \circ \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x}. \quad (10.28)$$

Entsprechend zeigen wir:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix}^{-\frac{1}{2}} &= \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} & (10.29) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x}} \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \binom{-\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l \\
&= \sum_{l=0,2,4,\dots} \binom{-\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l + \sum_{l=1,3,5,\dots} \binom{-\frac{1}{2}}{l} w^l (\hat{\sigma}_x)^l \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \binom{-\frac{1}{2}}{2m} w^{2m} \hat{1} + \sum_{m=0}^{\infty} \binom{-\frac{1}{2}}{2m+1} w^{2m+1} \hat{\sigma}_x \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \hat{1} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \hat{\sigma}_x
\end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \end{pmatrix}.$$

Die Inverse existiert in der komplexen w -Ebene mit Ausnahme der beiden Punkte $w = \pm 1$. Die hergeleiteten Identitäten ermöglichen die Darstellung:

$$\begin{aligned} & \exp \left[-(\xi, \eta) \begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2iw(v, u) \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2uvw \right] \\ &= \exp \left[\begin{array}{c} -(\xi, \eta) \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \\ +2iw(v, u) \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2uvw \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (10.30)$$

Wir definieren jetzt neue Integrationsvariablen:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix} &= \sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{1+w} + \sqrt{1-w}}{2} & \frac{\sqrt{1+w} - \sqrt{1-w}}{2} \\ \frac{\sqrt{1+w} - \sqrt{1-w}}{2} & \frac{\sqrt{1+w} + \sqrt{1-w}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.31)$$

Waren ξ und η noch reelle Variablen, so sind ξ' und η' jetzt allerdings komplexe Variablen, da w eine komplexe Zahl ist. Umgekehrt gilt

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix}.$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} H_n(u) H_n(v) \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} d\xi d\eta \exp \left[-(\xi, \eta) \begin{pmatrix} 1 & w \\ w & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2iw(v, u) \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} + 2uvw \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} d\xi' d\eta' \det \left[\frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(\xi', \eta')} \right] \exp \left[-(\xi', \eta') \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix} \right. \\ & \quad \left. + 2iw(v, u) \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix} + 2uvw \right]. \end{aligned} \quad (10.32)$$

Weitere elementare Rechnungen ergeben:

$$\begin{aligned}
& \det \left[\frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(\xi', \eta')} \right] & (10.33) \\
&= \det \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} \\
&= \det \left(\begin{array}{cc} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \end{array} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}},
\end{aligned}$$

und weiter:

$$\begin{aligned}
& (v, u) \left(\sqrt{\hat{1} + w\hat{\sigma}_x} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix} & (10.34) \\
&= (v, u) \left(\begin{array}{cc} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} - \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+w}} + \frac{1}{\sqrt{1-w}} \right) \end{array} \right) \begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \xi' + \frac{1}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \eta'.
\end{aligned}$$

Kombinieren wir die hergeleiteten Formeln folgt:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^{\infty} H_n(u) H_n(v) \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^n}{n!} & (10.35) \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}} \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} d\xi' d\eta' \exp \left\{ \begin{array}{c} -(\xi'^2 + \eta'^2) \\ +iw \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \xi' \\ +iw \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \eta' \\ +2uvw \end{array} \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}} \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} d\xi' d\eta' \exp \left\{ \begin{array}{c} - \left[\xi' - i\frac{w}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \right]^2 \\ - \frac{w^2}{4} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right)^2 \\ - \left[\eta' - i\frac{w}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \right]^2 \\ - \frac{w^2}{4} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right)^2 \\ +2uvw \end{array} \right\}.
\end{aligned}$$

10 Harmonischer Oszillator und Leiteroperatoren

Wir definieren neue Integrationsvariablen,

$$\begin{aligned}\xi'' &= \xi' - i\frac{w}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right) \\ \eta'' &= \eta' - i\frac{w}{2} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right),\end{aligned}\quad (10.36)$$

und erhalten die sog. **Mehlersche Formel** für Hermite-Polynome:

$$\begin{aligned}& \sum_{n=0}^{\infty} H_n(u) H_n(v) \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^n}{n!} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}} \frac{1}{\pi} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^2} d\xi'' d\eta'' \exp(-\xi''^2 - \eta''^2)}_{=1} \\ & \quad \times \exp \left\{ -\frac{w^2}{4} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} - \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right)^2 - \frac{w^2}{4} \left(\frac{u+v}{\sqrt{1+w}} + \frac{u-v}{\sqrt{1-w}} \right)^2 + 2uvw \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}} \exp \left\{ -\frac{w^2}{2} \left[\frac{(u+v)^2}{1+w} + \frac{(u-v)^2}{1-w} \right] + 2uvw \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+w} \cdot \sqrt{1-w}} \exp \left[\frac{2uvw - (u^2 + v^2)w^2}{1-w^2} \right].\end{aligned}\quad (10.37)$$

Damit erhalten wir für den Propagator des harmonischen Oszillators die Darstellung

$$\begin{aligned}K_\omega(x, x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^\dagger(x') e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + x'^2) \right] \frac{e^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{1+e^{-i\omega t}} \cdot \sqrt{1-e^{-i\omega t}}} \\ & \quad \times \exp \left\{ \frac{2\frac{m\omega}{\hbar}xx'e^{-i\omega t} - \frac{m\omega}{\hbar}(x^2+x'^2)e^{-2i\omega t}}{1-e^{-2i\omega t}} \right\}.\end{aligned}$$

Nach weiteren elementaren Umformungen lautet das Ergebnis für den Propagator des harmonischen Oszillators ($D=1$):

$$\begin{aligned}K_\omega(x, x', t) & \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{1+e^{-i\omega t}} \cdot \sqrt{1-e^{-i\omega t}}} \exp \left[i\frac{m\omega}{2\hbar} \cdot \frac{\cos(\omega t)(x^2+x'^2) - 2xx'}{\sin(\omega t)} \right].\end{aligned}\quad (10.38)$$

Die Potenzreihe bzgl. der Variablen $w = e^{-i\omega t}$ stellt eine analytische Funktion in der komplexen t -Ebene mit Ausnahme der Punkte $w = \pm 1$ dar, die (an den

klassischen Umkehrpunkten des Oszillators) zu den Zeiten $t = t_N = \frac{\pi N}{\omega}$ mit $N = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ erreicht werden. In der Literatur wird der Präfaktor für den Propagator des harmonischen Oszillators oft zu $\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2i \sin(\omega t)}}$ angegeben. Das stimmt aber nur für Zeiten t mit $0 < t < t_1 = \frac{\pi}{\omega}$, d.h. *bevor* der Umkehrpunkt erreicht wurde! Man muss aufpassen, denn für $t > t_1$ ist

$$e^{i\frac{\omega}{2}t} \cdot \sqrt{1 + e^{-i\omega t}} \cdot \sqrt{1 - e^{-i\omega t}} \neq \sqrt{e^{i\omega t} \cdot (1 + e^{-i\omega t})(1 - e^{-i\omega t})}.$$

Nach Passieren des jeweiligen Umkehrpunktes gibt es einen zusätzlichen Phasenfaktor $e^{-i\frac{\pi}{2} \lfloor \frac{\omega}{\pi} t \rfloor}$ (Souriau 1974). Unser Ergebnis Gl. (10.38) für den Propagator des harmonischen Oszillators ist exakt für alle Zeiten t , wie man sich durch Betrachten des Verzweigungsschnitts der komplexen Quadratwurzeln $\sqrt{1 \pm e^{-i\omega t}}$ unschwer klar macht:

$$\frac{e^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{1 + e^{-i\omega t}} \cdot \sqrt{1 - e^{-i\omega t}}} = e^{-i\frac{\pi}{2}(\frac{1}{2} + \lfloor \frac{\omega}{\pi} t \rfloor)} \sqrt{\frac{1}{2|\sin(\omega t)|}}. \quad (10.39)$$

Für $\omega \rightarrow 0$ liefert die Formel das schon in Kapitel 5 hergeleitete Ergebnis (5.12) für den Propagator eines freien Teilchens:

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} K_{\omega}(x, x', t) &= \left(\frac{m}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{it}} \exp\left\{i \cdot \frac{m}{\hbar} \frac{1}{2t} [(x^2 + x'^2) - 2xx']\right\} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar it}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{i \cdot \frac{m}{\hbar} \frac{(x - x')^2}{2t}\right\}. \end{aligned}$$

Für $t \rightarrow 0^+$ erhalten wir wieder eine Darstellung der Deltafunktion:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^{\dagger}(x') &= \lim_{t \rightarrow 0^+} K_{\omega}(x, x', t) \\ &= \lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\frac{m}{2\pi\hbar it}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{i \cdot \frac{m}{\hbar} \frac{(x - x')^2}{2t}\right\} \\ &= \delta(x - x'). \end{aligned}$$

Zugleich ist hiermit ein Beweis für die Vollständigkeit der Eigenfunktionen $\{\psi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ des harmonischen Oszillators erbracht! Nach dem Gesagten ist für einen *beliebigen* quadratintegrierbaren Anfangszustand $\psi_A(x)$ die Funktion

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K_{\omega}(x, x', t) \psi_A(x')$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung zum Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators mit Anfangswertverteilung $\lim_{t \rightarrow 0^+} \Psi(x, t) = \psi_A(x)$.

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Das Ergebnis für die Erwartungswerte von Ort und Impuls in einem stationären Zustand $\Psi_{E_n}(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ des Hamilton-Operators des harmonischen Oszillators, nämlich

$$\langle \hat{x} \rangle_{\Psi_{E_n}} = 0 = \langle \hat{p} \rangle_{\Psi_{E_n}}$$

stimmt nicht mit der klassischen Anschauung überein, gemäß der wir für die Position eines Teilchens in Abhängigkeit von der Zeit t eine harmonische Schwingung um die Ruhelage bei $x = 0$ erwarten. In der Tat sind wieder Wellenpakete zu bilden, um Übereinstimmung mit der klassischen Anschauung zu erzielen!

Wir konstruieren jetzt eine spezielle Lösung $\Psi_L(x, t)$ der Schrödinger-Gleichung zum Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators. Zur Zeit $t = 0$ sei eine Anfangswellenfunktion zu

$$\Psi_L(x, t = 0) = \psi_0(x - L)$$

vorgegeben. Es handelt sich also um Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(x)$ des harmonischen Oszillators, die um eine Distanz L nach rechts „ausgelenkt“ wurde. Somit ist die Funktion $\Psi_L(x, t = 0)$ ein bei $x = L$ lokalisiertes Wellenpaket, eine Gaußkurve mit Varianz $\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$. Die Lösung $\Psi_L(x, t)$ der Schrödingergleichung zu diesem Anfangszustand ist

$$\begin{aligned} \Psi_L(x, t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi_0(x - L) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,L} \psi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,L} \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right). \end{aligned} \quad (11.1)$$

Zu berechnen sind demnach die Entwicklungskoeffizienten

$$c_{n,L} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \psi_0(x' - L).$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Dazu stellen wir fest:

$$\begin{aligned}
 & \psi_0(x-L) \stackrel{\text{Taylor-Reihe}}{=} \exp\left(-L\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0(x) \\
 &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right)\psi_0(x) \\
 &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}L\underbrace{\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-i)(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}_{=\hat{p}}\right]\psi_0(x) \\
 &= \exp\left[-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right)(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)\right]\psi_0(x).
 \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned}
 c_{n,L} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\psi_0(x) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \underbrace{\left[\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}}\psi_{n-1}(x')\right]^\dagger}_{=\psi_n(x')} e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\psi_0(x) \\
 &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{n-1}^\dagger(x) \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\psi_0(x) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{n-1}^\dagger(x) \left\{ \underbrace{\left[\frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\right]}_{\stackrel{(10.11)}{=} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{L}{\sqrt{n}}\right) e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}} + e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)} \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} \right\} \psi_0(x) \\
 &= \left\{ \underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{L}{\sqrt{n}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{n-1}^\dagger(x) e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\psi_0(x)}_{=c_{n-1,L}} \right. \\
 &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{n-1}^\dagger(x) e^{-\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}\psi_0(x)}_{=0} \right\} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right) c_{n-1,L} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right)^2 c_{n-2,L} \\
 &\vdots \text{ (Rekursion)} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right)^n c_{0,L},
 \end{aligned}$$

dabei steht „p.I.“ für partielle Integration. Zu berechnen bleibt

$$\begin{aligned}
c_{0,L} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_0^\dagger(x') \psi_0(x' - L) \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x'^2\right) \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x' - L)^2\right] \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}L^2\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(2x'^2 - 2Lx')\right] \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}L^2\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x'^2 - Lx')\right] \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}L^2\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x' - \frac{L}{2}\right)^2 + \frac{m\omega}{4\hbar}L^2\right] \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}L^2\right) \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x' - \frac{L}{2}\right)^2\right] \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}L^2\right) \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-s^2)}_{=1} \\
&= \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}L^2\right).
\end{aligned}$$

Die gesuchten Entwicklungskoeffizienten sind

$$c_{n,L} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}L^2\right).$$

Einsetzen liefert die gesuchte zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}
\Psi_L(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,L} \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}L\right)^n}_{=c_{n,L}} e^{-\frac{m\omega}{4\hbar}L^2} \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)}_{=\psi_n(x)} \underbrace{e^{-i\omega t\left(n+\frac{1}{2}\right)}}_{=\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{4\hbar}(L^2 + 2x^2) - i\frac{\omega t}{2}\right] \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{L}{2}e^{-i\omega t}\right]^n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)}_{=E\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{L}{2}e^{-i\omega t}\right]} \\
&\quad \text{erzeugende Funktion Hermite Polynome} \\
&\stackrel{(10.21)}{=} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\begin{array}{c} -\frac{m\omega}{4\hbar}(L^2 + 2x^2) \\ -i\frac{\omega t}{2} \end{array}\right] \exp\left\{\begin{array}{c} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{L}{2}e^{-i\omega t} \\ -\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{L}{2}e^{-i\omega t}\right]^2 \end{array}\right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{4\hbar}(L^2 + 2x^2) - i\frac{\omega t}{2}\right] \exp\left\{\frac{m\omega}{\hbar}Le^{-i\omega t} \cdot x - \frac{m\omega}{\hbar}\frac{L^2}{4}e^{-2i\omega t}\right\} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{4\hbar}\left[L^2 + 2x^2 - 4xLe^{-i\omega t} + L^2e^{-2i\omega t}\right] - i\frac{\omega t}{2}\right\} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\left[\frac{1}{2}(x - Le^{-i\omega t})^2 + \frac{L^2}{4}(1 - e^{-2i\omega t})\right] - i\frac{\omega t}{2}\right\} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\begin{array}{c} -i\frac{\omega t}{2} - i\frac{m\omega}{\hbar}xL \sin(\omega t) \\ +i\frac{m\omega}{4\hbar}L^2 \sin(2\omega t) \end{array}\right] \\
 &\quad \times \exp\left\{-\frac{m\omega}{4\hbar}\left[\begin{array}{c} L^2 + 2x^2 - 4xL \cos(\omega t) \\ +L^2 \cos(2\omega t) \end{array}\right]\right\} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\begin{array}{c} -i\frac{\omega t}{2} - i\frac{m\omega}{\hbar}Lx \sin(\omega t) \\ +i\frac{m\omega}{4\hbar}L^2 \sin(2\omega t) \end{array}\right] \\
 &\quad \times \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2 - 2Lx \cos(\omega t) + L^2 \cos^2(\omega t)\right]\right\} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[\begin{array}{c} -i\frac{\omega t}{2} - i\frac{m\omega}{\hbar}Lx \sin(\omega t) \\ +i\frac{m\omega}{4\hbar}L^2 \sin(2\omega t) \end{array}\right] \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}[x - L \cos(\omega t)]^2\right\}.
 \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass die zugeordnete Wahrscheinlichkeitsdichte eine zeitabhängige Gauß-Verteilung ist:

$$|\Psi_L(x, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}[x - L \cos(\omega t)]^2\right\}.$$

Das Maximum von $|\Psi_L(x, t)|^2$ als Funktion der Zeit folgt exakt der klassischen Bahn $x(t) = L \cos(\omega t)$, in Übereinstimmung mit der anschaulichen Vorstellung von der Bewegung eines Teilchens im Parabelpotential eines harmonischen Oszillators!

Wir berechnen jetzt für den Hamilton-Operator \hat{H} des harmonischen Oszillators Gl. (10.16) die Schwankungsquadrate von Ort und Impuls für einen *allgemeinen* auf Eins normierten Anfangszustand $\psi_A(x)$ zur Zeit $t = 0$:

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)\psi_A(x).$$

Zur Vereinfachung der Rechnung ist es zweckmäßig, vom Schrödinger-Bild zum

Heisenberg-Bild zu wechseln:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle_{\Psi} &= \langle \hat{x}_H(t) \rangle_{\psi_A} = \left\langle \hat{x} \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin(\omega t) \right\rangle_{\psi_A} \\
&= \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \cos(\omega t) + \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \\
\langle \hat{p} \rangle_{\Psi} &= \langle \hat{p}_H(t) \rangle_{\psi_A} = \langle \hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t) \rangle_{\psi_A} \\
&= \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \cos(\omega t) - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t).
\end{aligned}$$

Es folgt:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle_{\Psi}^2 &= \left(\langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \cos(\omega t) + \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) \right)^2 & (11.2) \\
&= \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \cos^2(\omega t) + 2 \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} + \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle_{\Psi}^2 &= \left(\langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \cos(\omega t) - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t) \right)^2 \\
&= \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \cos^2(\omega t) - 2 \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\
&\quad + \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 (m\omega)^2 \sin^2(\omega t).
\end{aligned}$$

Ferner

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}^2 \rangle_{\Psi} &= \langle \hat{x}_H^2(t) \rangle_{\psi_A} & (11.3) \\
&= \left\langle \left(\hat{x} \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin(\omega t) \right)^2 \right\rangle_{\psi_A}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} \cos^2(\omega t) + \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} & (11.4) \\
&\quad + \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi} &= \langle \hat{p}_H^2(t) \rangle_{\psi_A} \\
&= \langle (\hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t))^2 \rangle_{\psi_A} \\
&= \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} \cos^2(\omega t) - \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\
&\quad + \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} (m\omega)^2 \sin^2(\omega t).
\end{aligned}$$

Die hergeleiteten Ausdrücke gelten wie gesagt allgemein, für einen beliebigen auf Eins normierten Anfangszustand $\psi_A(x)$.

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Wir führen jetzt die Berechnung der betreffenden Erwartungswerte von Ort und Impuls für den speziell gewählten Anfangszustand

$$\psi_A(x) = \psi_L(x) = \psi_0(x - L) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right)\psi_0(x)$$

durch und erhalten:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_L} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_L^\dagger(x') \hat{x} \psi_L(x') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \psi_0(x') \right\}^\dagger \hat{x} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \psi_0(x') \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_0^\dagger(x') \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \psi_0(x') \\ &= \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\rangle_{\psi_0} \\ &\stackrel{(8.16)}{=} \left\langle \hat{x} + \frac{i}{\hbar}L[\hat{p}, \hat{x}] + \dots \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \left\langle \hat{x} + L\hat{1} \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \underbrace{\langle \hat{x} \rangle_{\psi_0}}_{=0} + L \langle \hat{1} \rangle_{\psi_0} \\ &= L, \end{aligned}$$

und:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle_{\psi_L} &= \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{p} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \langle \hat{p} \rangle_{\psi_0} = 0. \end{aligned}$$

Desweiteren:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_L} &= \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x}^2 \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \left\langle \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\}^2 \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \left\langle (\hat{x} + L\hat{1})^2 \right\rangle_{\psi_0} \\ &= \underbrace{\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_0}}_{=\frac{\hbar}{2m\omega}} + 2L \underbrace{\langle \hat{x} \rangle_{\psi_0}}_{=0} + L^2 \underbrace{\langle \hat{1}^2 \rangle_{\psi_0}}_{=1} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} + L^2, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_L} &= \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{p}^2 \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_0} \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2}.
 \end{aligned}$$

Schließlich

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_L} &= \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ (\hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x}) \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \left\langle \begin{array}{l} \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{p} \\ + \hat{p} \circ \exp\left(\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \circ \hat{x} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}L\hat{p}\right) \end{array} \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \left\langle \begin{array}{l} (\hat{x} + L\hat{1}) \circ \hat{p} \\ + \hat{p} \circ (\hat{x} + L\hat{1}) \end{array} \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_0} + \underbrace{2L\langle \hat{p} \rangle_{\psi_0}}_{=0} \\
 &= \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_0}.
 \end{aligned}$$

Einsetzen der Leiteroperator-Darstellung Gl. (10.6) von Orts- und Impulsoperator ergibt weiter

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_L} &= \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_0} \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-i) \left\langle (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \circ (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) + (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \circ (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \frac{\hbar}{2i} \left\langle 2\hat{a}^2 - 2(\hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_0} \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left(\underbrace{\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_0}}_{=0} - \underbrace{\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_0}}_{=0} \right) \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Einsetzen der erhaltenen Ergebnisse für die in Gl. (11.1) definierte Wellenfunktion $\Psi_L(x, t)$ ergibt:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_L} &= L \cos(\omega t) \\
 \langle \hat{p} \rangle_{\Psi_L} &= -m\omega L \sin(\omega t) = m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_L}.
 \end{aligned}$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Für das Schwankungsquadrat des Ortes im Zustand $\Psi_L(x, t)$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 [\Delta_{\Psi_L}(\hat{x})]^2 &= \langle \hat{x}^2 \rangle_{\Psi_L} - \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_L}^2 \\
 &= \underbrace{\langle \hat{x}^2 \rangle_{\Psi_L}}_{=\frac{\hbar}{2m\omega} + L^2} \cos^2(\omega t) + \underbrace{\langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\Psi_L}}_{=0} \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \\
 &\quad + \underbrace{\langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi_L}}_{=\frac{m\hbar\omega}{2}} \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2} - \underbrace{\langle \hat{x} \rangle_{\Psi_L}^2}_{=L^2 \cos^2(\omega t)} \\
 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + L^2 \right) \cos^2(\omega t) + \frac{m\hbar\omega \sin^2(\omega t)}{2(m\omega)^2} - L^2 \cos^2(\omega t) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \underbrace{[\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t)]}_{=1} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega}.
 \end{aligned}$$

Für das Schwankungsquadrat des Impulses im Zustand $\Psi_L(x, t)$ erhalten wir entsprechend:

$$[\Delta_{\Psi_L}(\hat{p})]^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi_L} - \langle \hat{p} \rangle_{\Psi_L}^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}.$$

Beide Schwankungsquadrate, $\langle \Delta \hat{p} \rangle_{\Psi_L}^2$ und $\langle \Delta \hat{x} \rangle_{\Psi_L}^2$, sind im speziellen Zustand $\Psi_L(x, t)$ von Gl. (11.1) zeitunabhängig! Für das Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe ergibt sich für diesen Zustand

$$\Delta_{\Psi_L}(\hat{p}) \cdot \Delta_{\Psi_L}(\hat{x}) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{\hbar}{2}.$$

Das ist das gleiche Ergebnis wie wir es bereits in Gl. (10.22) für den Grundzustand ($n = 0$) des harmonischen Oszillators gefunden haben!

Lässt sich das für den harmonischen Oszillator erhaltene Resultat für das Produkt von Impuls- und Ortsunschärfe verbessern? Wir verallgemeinern die Fragestellung und suchen jetzt nach der **optimalen** unteren Schranke für die Unschärfe zweier beliebiger hermitescher Operatoren $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{p})$ und $\hat{B} = B(\hat{x}, \hat{p})$ über einem beliebigen auf Eins normierten Zustand $\Psi(x, t)$.

Sei $\Psi(x, t)$ eine (auf Eins normierte) Lösung der Schrödinger Gleichung zum (allgemeinen) Hamilton-Operator \hat{H} . Betrachte für einen reellen Parameter $\lambda > 0$ die reelle Funktion

$$f(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\Phi_\lambda(x', t)|^2,$$

wobei die Funktion $\Phi_\lambda(x, t)$ folgendermaßen definiert ist:

$$\begin{aligned}\Phi_\lambda(x, t) &= \left(\frac{1}{\lambda}\hat{a} - i\lambda\hat{b}\right)\Psi(x, t) \\ \hat{a} &= \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\Psi \cdot \hat{1} \\ \hat{b} &= \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_\Psi \cdot \hat{1},\end{aligned}$$

und $\langle\hat{A}\rangle_\Psi$ bzw. $\langle\hat{B}\rangle_\Psi$ sind die Erwartungswerte der hermiteschen Operatoren \hat{A} und \hat{B} im vorgegebenen Zustand $\Psi(x', t)$:

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle_\Psi &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) \hat{A} \Psi(x', t) \\ \langle\hat{B}\rangle_\Psi &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Psi^\dagger(x', t) \hat{B} \Psi(x', t)\end{aligned}$$

Da $f(\lambda)$ als Integral über die nicht negative Funktion $|\Phi_\lambda(x', t)|^2$ ebenfalls nicht negativ ist, gilt offensichtlich die Ungleichung:

$$\begin{aligned}0 &\leq f(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\Phi_\lambda(x', t)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Phi_\lambda^\dagger(x', t) \Phi_\lambda(x', t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \left(\frac{1}{\lambda}\hat{a} - i\lambda\hat{b}\right)\Psi(x, t) \right\}^\dagger \left(\frac{1}{\lambda}\hat{a} - i\lambda\hat{b}\right)\Psi(x, t) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^\dagger(x, t) \left(\frac{1}{\lambda}\hat{a} + i\lambda\hat{b}\right) \circ \left(\frac{1}{\lambda}\hat{a} - i\lambda\hat{b}\right)\Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^\dagger(x, t) \left\{ \frac{1}{\lambda^2}\hat{a}^2 - i[\hat{a} \circ \hat{b} - \hat{b} \circ \hat{a}] + \lambda^2\hat{b}^2 \right\} \Psi(x, t) \\ &= \frac{1}{\lambda^2} \langle\hat{a}^2\rangle_\Psi - \langle i[\hat{a}, \hat{b}] \rangle_\Psi + \lambda^2 \langle\hat{b}^2\rangle_\Psi,\end{aligned}$$

dabei steht „p.I.“ für partielle Integration. Die Funktion $f(\lambda)$ hat ein Minimum bei $\lambda = \lambda_0 > 0$. Somit gilt

$$0 \leq f(\lambda_0) \leq f(\lambda).$$

Die Stelle λ_0 wird aus der Forderung

$$\left[\frac{d}{d\lambda} f(\lambda) \right]_{\lambda=\lambda_0} \stackrel{!}{=} 0$$

bestimmt. Also

$$\begin{aligned}-\frac{1}{\lambda_0^4} \langle\hat{a}^2\rangle_\Psi + \langle\hat{b}^2\rangle_\Psi &= 0 \\ \lambda_0^2 &= \sqrt{\frac{\langle\hat{a}^2\rangle_\Psi}{\langle\hat{b}^2\rangle_\Psi}}.\end{aligned}$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} 0 &\leq f(\lambda_0) = \frac{1}{\lambda_0^2} \langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi - \langle i [\hat{a}, \hat{b}] \rangle_\Psi + \lambda_0^2 \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi \\ &= \sqrt{\langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi \cdot \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi} - \langle i [\hat{a}, \hat{b}] \rangle_\Psi + \sqrt{\langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi \cdot \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi}. \end{aligned}$$

Vertauschen wir die Rolle von \hat{a} und \hat{b} , ändert sich nur das Vorzeichen des Kommutators. Folglich gilt immer die Ungleichung:

$$-\sqrt{\langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi \cdot \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi} \leq \left\langle \frac{i}{2} [\hat{a}, \hat{b}] \right\rangle_\Psi \leq \sqrt{\langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi \cdot \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi}.$$

Dies ist äquivalent zu

$$\left| \left\langle \frac{i}{2} [\hat{a}, \hat{b}] \right\rangle_\Psi \right| \leq \sqrt{\langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi \cdot \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi}.$$

Aber

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \hat{a}^2 \rangle_\Psi = \langle \hat{A}^2 \rangle_\Psi - \langle \hat{A} \rangle_\Psi^2 = [\Delta_\Psi(\hat{A})]^2 \\ 0 &\leq \langle \hat{b}^2 \rangle_\Psi = \langle \hat{B}^2 \rangle_\Psi - \langle \hat{B} \rangle_\Psi^2 = [\Delta_\Psi(\hat{B})]^2 \\ [\hat{a}, \hat{b}] &= [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi \cdot \hat{1}, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi \cdot \hat{1}] = [\hat{A}, \hat{B}]. \end{aligned}$$

Wie auch immer die Lösung $\Psi(x, t)$ der Schrödinger Gleichung zu einem beliebig gewählten (auf Eins normierten) Anfangszustand $\Psi(x, t=0)$ aussehen mag, stets gilt für die Produkte der Schwankungsquadrate zweier hermitescher Operatoren \hat{A} und \hat{B} über diesem Zustand die sog. **Unschärferelation**:

$$\Delta_\Psi(\hat{A}) \cdot \Delta_\Psi(\hat{B}) \geq \left| \left\langle \frac{i}{2} [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle_\Psi \right|. \quad (11.5)$$

Für Impuls und Ort folgt insbesondere die Heisenbergsche Unschärferelation:

$$\Delta_\Psi(\hat{p}) \Delta_\Psi(\hat{x}) \geq \left| \left\langle \frac{i}{2} [\hat{p}, \hat{x}] \right\rangle_\Psi \right| = \frac{\hbar}{2}. \quad (11.6)$$

Die Unbestimmtheit $\Delta_\Psi(\hat{p})$ des Impulses nimmt in dem Maße ab wie die Unbestimmtheit $\Delta_\Psi(\hat{x})$ der Ortskoordinate zunimmt, oder umgekehrt.

Oft wird gesagt, in der Quantenmechanik könne **nicht gleichzeitig** der Ort und der Impuls eines Teilchens, in welchem Zustand Ψ auch immer, beliebig genau gemessen werden! Doch Vorsicht ist geboten! Gl. (11.6) ist mitnichten eine Aussage über die Genauigkeit einer Messapparatur, die in unseren Gedankenexperimenten beliebig exakt sein darf. Es wird nur ausgesagt, dass wenn an einem **Ensemble**

identisch präparierter Teilchen, alle im Zustand Ψ , abwechselnd Ortsmessungen oder Impulsmessungen *wiederholt* durchgeführt werden, die Messergebnisse für die Position x des Teilchens eine Standardabweichung $\Delta_{\Psi}(\hat{x})$, sowie die Messergebnisse für den Impuls p des Teilchens eine Standardabweichung $\Delta_{\Psi}(\hat{p})$ haben, deren Produkt $\Delta_{\Psi}(\hat{p}) \Delta_{\Psi}(\hat{x})$ nicht kleiner sein kann als $\frac{\hbar}{2}$! Es ist nichts darüber ausgesagt, ob und wie die Messung von x die Messung von p am selben Teilchen „stören“ würde! Die Heisenbergsche Unschärferelation ist vielmehr eine Aussage über intrinsische statistische Fluktuationen des Ensemble von identisch präparierten Teilchen in der Quantenmechanik. Über den Ausgang einer Einzelmessung wird gar nichts gesagt!

Abb. 11.1 bringt die charakteristische Unsicherheit in der Quantenmechanik auf den Punkt!



Abbildung 11.1:

Da jetzt bewiesen ist, dass die optimale Schranke für das Produkt von Impuls- und Ortsunschärfe gleich $\frac{\hbar}{2}$ ist, ist es instruktiv, für einen *allgemeinen* auf Eins normierten Anfangszustand $\psi_A(x)$ die Ergebnisse Gl. (11.2) und Gl. (11.3) durch Leiteroperatoren Gl. (10.6) auszudrücken:

$$\begin{aligned}
 [\Delta_{\Psi}(\hat{x})]^2 &= \langle \hat{x}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{x} \rangle_{\Psi}^2 \\
 &= \begin{cases} \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} \cos^2(\omega t) + \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \\ \quad + \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2} \\ - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \cos^2(\omega t) - 2 \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \\ \quad - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2} \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left\{ \begin{array}{l} \left(\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \cos^2(\omega t) \\ + \left(\langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \right) \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \\ + \left(\langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2} \end{array} \right. \\
 [\Delta_{\Psi}(\hat{p})]^2 &= \langle \hat{p}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{p} \rangle_{\Psi}^2 \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} \cos^2(\omega t) - \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ + \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} (m\omega)^2 \sin^2(\omega t) \\ - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \cos^2(\omega t) + 2 \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 (m\omega)^2 \sin^2(\omega t) \end{array} \right. \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \left(\langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \cos^2(\omega t) \\ - \left(\langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \right) m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ + \left(\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \right) (m\omega)^2 \sin^2(\omega t). \end{array} \right.
 \end{aligned}$$

Es folgt durch Einsetzen

$$\begin{aligned}
 &\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\left\langle (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\left\langle \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\begin{array}{l} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \left(\left\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{array} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2} \left(- \left\langle (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} + \langle \hat{a} - \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\left\langle -\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - (\hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} + \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 + \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\begin{array}{l} - \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ - \left(\left\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \right\rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{array} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \\
&= \frac{\hbar}{2i} \left(\begin{aligned} & \langle (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) + (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \rangle_{\psi_A} \\ & - 2 \langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a} - \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{aligned} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\langle \hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \left(\langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right).
\end{aligned}$$

Somit dürfen wir schreiben:

$$\begin{aligned}
[\Delta_\Psi(\hat{x})]^2 &= \left\{ \begin{aligned} & \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\begin{aligned} & \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ & + \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ & + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{aligned} \right) \cos^2(\omega t) \\ & + \frac{\hbar}{i} \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) \frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega} \\ & + \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\begin{aligned} & - \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ & - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ & + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{aligned} \right) \frac{\sin^2(\omega t)}{(m\omega)^2} \end{aligned} \right. \\
&= \left\{ \begin{aligned} & \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\begin{aligned} & \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \\ & + \langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \end{aligned} \right) \underbrace{\left(\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t) \right)}_{=\cos(2\omega t)} \\ & + \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \underbrace{\left(\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t) \right)}_{=1} \\ & + \frac{\hbar}{i} \left(\begin{aligned} & \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ & - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \end{aligned} \right) \underbrace{\frac{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}{m\omega}}_{=\frac{1}{2m\omega} \sin(2\omega t)} \end{aligned} \right.
\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left\{ \begin{array}{l} \left(\begin{array}{l} \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \\ + \langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \end{array} \right) \cos(2\omega t) \\ + \left(\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2\langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \\ + \frac{1}{i} \left(\begin{array}{l} \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \\ - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \end{array} \right) \sin(2\omega t) . \end{array} \right.$$

und ebenso:

$$\begin{aligned} & [\Delta_\Psi(\hat{p})]^2 \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \left(\langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{p} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \cos^2(\omega t) \\ - \left(\langle \hat{x} \circ \hat{p} + \hat{p} \circ \hat{x} \rangle_{\psi_A} - 2\langle \hat{p} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A} \right) m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ + \left(\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{x} \rangle_{\psi_A}^2 \right) (m\omega)^2 \sin^2(\omega t) \end{array} \right. \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\begin{array}{l} - \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2\langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{array} \right) \cos^2(\omega t) \\ - \frac{\hbar}{i} \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) m\omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) \\ + \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\begin{array}{l} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2\langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \end{array} \right) (m\omega)^2 \sin^2(\omega t) \end{array} \right. \\ &= \left\{ \begin{array}{l} - \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\begin{array}{l} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \\ + \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \end{array} \right) \underbrace{(\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t))}_{=\cos(2\omega t)} \\ + \frac{m\hbar\omega}{2} \left(\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2\langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \underbrace{(\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t))}_{=1} \\ - \frac{\hbar}{i} \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) m\omega \underbrace{\sin(\omega t) \cos(\omega t)}_{=\frac{1}{2}\sin(2\omega t)} \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$= \frac{m\hbar\omega}{2} \left\{ \begin{array}{l} - \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) + \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) \cos(2\omega t) \\ + \left(\langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - 2 \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \\ - \frac{1}{i} \left(\left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) - \left(\langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right) \sin(2\omega t). \end{array} \right.$$

Wir beobachten

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 + \langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \cos(2\omega t) \\ & + \frac{1}{2i} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 - \langle (\hat{a}^\dagger)^2 \rangle_{\psi_A} + \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A}^2 \right) \sin(2\omega t) \\ & = \operatorname{Re} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \cos(2\omega t) + \operatorname{Im} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \sin(2\omega t) \\ & = \sqrt{\left[\operatorname{Re} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right]^2 + \left[\operatorname{Im} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right) \right]^2} \sin(2\omega t + \delta) \\ & = \left| \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right| \sin(2\omega t + \delta) \\ \tan \delta & = \frac{\operatorname{Re} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right)}{\operatorname{Im} \left(\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right)}. \end{aligned}$$

Dann folgt:

$$\begin{aligned} [\Delta_\Psi(\hat{x})]^2 &= \frac{\hbar}{m\omega} \left\{ \begin{array}{l} \left| \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right| \sin(2\omega t + \delta) \\ + \left(\frac{1}{2} \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right) \end{array} \right. \\ [\Delta_\Psi(\hat{p})]^2 &= m\hbar\omega \left\{ \begin{array}{l} - \left| \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right| \sin(2\omega t + \delta) \\ + \left(\frac{1}{2} \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right). \end{array} \right. \end{aligned}$$

Wir erhalten dann für das Produkt der Schwankungsquadrate von Impuls- und Ortsoperator den handlichen Ausdruck:

$$[\Delta_\Psi(\hat{p})]^2 [\Delta_\Psi(\hat{x})]^2 = \hbar^2 \left[\begin{array}{l} \left(\frac{1}{2} \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right)^2 \\ - \left| \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right|^2 \sin^2(2\omega t + \delta) \end{array} \right]. \quad (11.7)$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Da die Wellenfunktion $\psi_A(x)$ auf Eins normiert ist, gilt $\langle \hat{1} \rangle_{\psi_A} = 1$ und wir formen um:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} &= \frac{1}{2} \langle [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} \\ &= \frac{1}{2} \langle \hat{1} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} \\ &= \frac{1}{2} \langle \hat{1} \rangle_{\psi_A} + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} \\ &= \frac{1}{2} + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A}. \end{aligned}$$

Schließlich folgt das Resultat:

$$[\Delta_\Psi(\hat{p})]^2 [\Delta_\Psi(\hat{x})]^2 = \hbar^2 \left[\begin{array}{l} \left(\frac{1}{2} + \langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \right)^2 \\ - \left| \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \right|^2 \sin^2(2\omega t + \delta) \end{array} \right]. \quad (11.8)$$

Wir suchen einen Zustand $\Psi(x, t) = \exp(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t)\psi_A(x)$, so dass die optimale untere Schranke für das Produkt der Schwankungsquadrate von Impuls- und Ortsoperator für alle Zeiten t angenommen wird:

$$[\Delta_\Psi(\hat{p})]^2 [\Delta_\Psi(\hat{x})]^2 \stackrel{!}{=} \frac{\hbar^2}{4}.$$

Das ist in der Tat eine implizite Bestimmungsgleichung für die gesuchte Wellenfunktion $\psi_A(x)$. Die Forderung besagt, dass erstens der Koeffizient der zeitlich veränderlichen Funktion $\sin^2(2\omega t + \delta)$ gleich Null sein muss,

$$\langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 \stackrel{!}{=} 0, \quad (11.9)$$

und zweitens muss gelten:

$$\langle \hat{a}^\dagger\hat{a} \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \stackrel{!}{=} 0. \quad (11.10)$$

Da die Leiteroperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} nicht hermitesche Operatoren sind, ist Vorsicht geboten! Sei $\psi_A(x)$ der gesuchte Zustand. Dann existieren nach dem Orthogonalisierungsverfahren von E. Schmidt auf Eins normierte Zustände $\phi_j(x)$, die alle für $j = 1, 2, 3, \dots$ zum Ausgangszustand $\psi_A(x)$ orthogonal sind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_j^\dagger(x) \psi_A(x) = 0.$$

Desgleichen sind je zwei Zustände $\phi_j(x)$ und $\phi_{j'}(x)$ mit $j \neq j'$ zueinander orthogonal:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_j^\dagger(x) \phi_{j'}(x) = \delta_{j,j'}.$$

Es gilt die Vollständigkeitsrelation:

$$\psi_A(x) \psi_A^\dagger(x') + \sum_{j=1}^{\infty} \phi_j(x) \phi_j^\dagger(x') = \delta(x - x').$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle_{\psi_A} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_A(x) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger [\hat{a} \psi_A(x)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger \delta(x - x') [\hat{a} \psi_A(x')] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger \left(\psi_A(x) \psi_A^\dagger(x') + \sum_{j=1}^{\infty} \phi_j(x) \phi_j^\dagger(x') \right) [\hat{a} \psi_A(x')] \\ &= \left\{ \begin{aligned} &\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger \psi_A(x) \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') [\hat{a} \psi_A(x')] \right) \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger \phi_j(x) \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx' \phi_j^\dagger(x') [\hat{a} \psi_A(x')] \right) \end{aligned} \right\} \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \left\{ \begin{aligned} &\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \hat{a}^\dagger \psi_A(x) \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_A^\dagger(x') \hat{a} \psi_A(x') \right) \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx' \phi_j^\dagger(x') \hat{a} \psi_A(x') \right|^2 \end{aligned} \right\} \\ &= \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} + \sum_{j=1}^{\infty} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx' \phi_j^\dagger(x') \hat{a} \psi_A(x') \right|^2, \end{aligned}$$

wobei „p.I.“ für partielle Integration steht. Bestehen auf der Forderung Gl. (11.10) impliziert die notwendige Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \phi_j^\dagger(x') \hat{a} \psi_A(x') = 0 \text{ für alle } j = 1, 2, 3, \dots$$

Der Zustand $\hat{a} \psi_A(x')$ ist orthogonal zu *allen* linear unabhängigen Funktionen $\phi_j(x)$. Das geht nur wenn $\hat{a} \psi_A(x)$ ein (i.a. komplexes) Vielfaches der Funktion $\psi_A(x)$ ist:

$$\hat{a} \psi_A(x) = \alpha \psi_A(x). \quad (11.11)$$

Demnach ist $\psi_A(x)$ eine Eigenfunktion des Absteigeoperators \hat{a} zum komplexen Eigenwert α . Die Forderungen Gl. (11.9) und Gl. (11.10) sind nach dem Gesagten für den Zustand $\psi_A(x)$ identisch erfüllt:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}^2 \rangle_{\psi_A} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \hat{a} \circ \hat{a} \psi_A(x) = \alpha^2 \\ \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^2 &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \hat{a} \psi_A(x) \right)^2 = \alpha^2 \\ \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle_{\psi_A} &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx [\hat{a} \psi_A(x)]^\dagger [\hat{a} \psi_A(x)] = \alpha^\dagger \alpha = |\alpha|^2 \\ \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi_A} &= \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A} \langle \hat{a} \rangle_{\psi_A}^\dagger = \alpha \alpha^\dagger = |\alpha|^2. \end{aligned}$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Wir suchen nun die Funktion $\psi_A(x)$ durch die Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ des harmonischen Oszillators auszudrücken:

$$\psi_A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,A} \psi_n(x). \quad (11.12)$$

Dann gilt notwendig für die Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned} c_{n,A} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^\dagger(x) \psi_A(x) & (11.13) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}} \psi_{n-1}(x) \right]^\dagger \psi_A(x) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{-\infty}^{\infty} dx [\psi_{n-1}(x)]^\dagger \underbrace{\hat{a} \psi_A(x)}_{=\alpha \psi_A(x)} \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{n}} c_{n-1,A} \\ &= \frac{\alpha^2}{\sqrt{n(n-1)}} c_{n-2,A} \\ &\vdots \\ &= \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_{0,A}. \end{aligned} \quad (11.14)$$

Folglich ist

$$\begin{aligned} \psi_A(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,A} \psi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_{0,A} \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \\ &= c_{0,A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} \psi_0(x) \\ &= c_{0,A} \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \end{aligned}$$

Die Konstante $c_{0,A}$ bestimmen wir aus der Forderung, dass $\psi_A(x)$ auf Eins normiert

sein soll:

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \psi_A(x) \\
&= |c_{0,A}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \right]^\dagger \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\
&\stackrel{\text{p.I.}}{=} |c_{0,A}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\
&= |c_{0,A}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \left[\exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \underbrace{\exp(-\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha^\dagger \hat{a})}_{=\hat{1}} \right] \psi_0(x) \\
&= |c_{0,A}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \left[\exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a}) \right] \exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \psi_0(x).
\end{aligned}$$

Nun ist

$$\exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^\dagger)^n}{n!} \underbrace{\hat{a}^n \psi_0(x)}_{=0 \text{ für } n=1,2,3,\dots} = \psi_0(x)$$

und

$$\begin{aligned}
&\exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a}) \\
&= \exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n \right) \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ (\hat{a}^\dagger)^n \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \left(\underbrace{\exp(\alpha^\dagger \hat{a}) \circ \hat{a}^\dagger \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a})}_{\text{Gl. (10.10)}_{\hat{a}^\dagger + \alpha^\dagger \hat{1}}} \right)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger + \alpha^\dagger \hat{1})^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\alpha \hat{a}^\dagger + \alpha \alpha^\dagger \hat{1})^n \\
&= \exp(\alpha \hat{a}^\dagger + \alpha \alpha^\dagger \hat{1}) \\
&= \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \exp(\alpha \alpha^\dagger \hat{1}).
\end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_A^\dagger(x) \psi_A(x) \\
 &= |c_{0,A}|^2 \exp(\alpha\alpha^\dagger) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\
 &\stackrel{\text{p.I.}}{=} |c_{0,A}|^2 \exp(\alpha\alpha^\dagger) \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\underbrace{\exp(\alpha^\dagger\hat{a}) \psi_0(x)}_{=\psi_0(x)} \right]^\dagger \psi_0(x) \\
 &= |c_{0,A}|^2 \exp(\alpha\alpha^\dagger) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2}_{=1} \\
 &= |c_{0,A}|^2 \exp(\alpha\alpha^\dagger) \\
 c_{0,A} &= \exp\left(-\frac{\alpha\alpha^\dagger}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Die gesuchten auf Eins normierten Zustände minimaler Unschärfe für das Schwankungsquadrat von Impuls und Ort beim harmonischen Oszillators sind somit bestimmt zu:

$$\begin{aligned}
 \psi_A(x) &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) \\
 &= \psi(x; \alpha) \equiv \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \psi_0(x).
 \end{aligned}$$

Hier ist $\alpha \in \mathbb{C}$ eine beliebige komplexe Zahl. Die Zustände $\psi(x; \alpha)$ heißen wegen der Eigenschaft, das Produkt der Schwankungsquadrate von Impuls und Ort beim harmonischen Oszillator zu minimieren, **kohärente Zustände**.

In der Tat ist der kohärente Zustand $\psi(x; \alpha)$ eine bzgl. des Ursprungs verschobene Gaußkurve mit einem ortsabhängigen Phasenfaktor. Um das einzusehen, setzen wir

$$\begin{aligned}
 \hat{A} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \\
 \hat{B} &= -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \\
 \lambda &= \alpha.
 \end{aligned}$$

und verwenden die in Kapitel 9 hergeleitete Formel Gl. (9.9) für lineare Operatoren

\hat{A} und \hat{B} , die beide mit ihrem Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}]$ vertauschen:

$$\begin{aligned}
\exp(\alpha \hat{a}^\dagger) &= \exp\left[\alpha\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\right] \\
&= \exp\left[\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right] \circ \exp\left[\alpha\frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right] \circ \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}, -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right]\right) \\
&= \exp\left[\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right] \circ \exp\left[\alpha\frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right] \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4}\hat{1}\right).
\end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned}
\psi(x; \alpha) &\equiv \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4}\right) \exp\left[\alpha\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right)\right] \underbrace{\exp\left[-\alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right] \psi_0(x)}_{\text{Taylor-Reihe } \psi_0\left(x - \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)} \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4}\right) \exp\left[\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \psi_0\left(x - \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right) \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4}\right) \exp\left[\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \\
&\quad \times \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^2\right]}_{=\psi_0\left(x - \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)} \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{\alpha^2}{4}\right) \exp\left[\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{\alpha^2}{4}\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + \alpha^2}{2}\right) \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + 2\alpha\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\alpha_I^2 + \alpha_{II}^2 + \alpha_I^2 - \alpha_{II}^2 + 2i\alpha_I\alpha_{II}}{2}\right) \\
&\quad \times \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + 2(\alpha_I + i\alpha_{II})\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-i\alpha_I\alpha_{II}) \exp\left[2i\alpha_{II}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + 2\alpha_I\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \alpha_I^2\right]
\end{aligned}$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-i\alpha_I\alpha_{II}) \exp\left[2i\alpha_{II}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \alpha_I\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\right)^2\right].$$

Die Amplitude L der Auslenkung um den Ursprung ist demnach

$$L = |\alpha_I| \cdot \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}.$$

Der eingangs betrachtete Zustand $\psi_0(x - L)$ entspricht der Wahl $\alpha_{II} = 0$, $\alpha_I > 0$. Die zeitliche Evolution eines kohärenten Zustands folgt nach dem Gesagten zu

$$\begin{aligned} \Psi(x, t; \alpha) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi(x; \alpha) \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \circ \underbrace{\exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)}_{=\hat{1}} \psi_0(x) \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \circ \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \right\} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi_0(x). \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi_0(x) = \exp\left(-i\frac{E_0}{\hbar}t\right) \psi_0(x) = \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \psi_0(x)$$

und

$$\begin{aligned} &\exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \circ \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \\ &= \exp\left[\alpha \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \hat{a}^\dagger \circ \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)\right] \\ &\stackrel{\text{Gl. (10.7)}}{=} \exp\left[\alpha\hat{a}_H^\dagger(-t)\right] = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger e^{-i\omega t}). \end{aligned}$$

Damit lautet die gesuchte stationäre Lösung der Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator

$$\begin{aligned} \Psi(x, t; \alpha) &= \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha e^{-i\omega t}\hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\ &= \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \psi(x; \alpha e^{-i\omega t}). \end{aligned}$$

Die konstruierten Lösungen $\Psi(x, t)$ zerfließen demnach nicht mit der Zeit wie sonst für Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung üblich, sondern sie

kehren in den alten Zustand zurück. Das Label „ α “ des kohärenten Zustands rotiert auf einem Kreis mit Radius $|\alpha|$ um den Ursprungspunkt $(0,0)$ der komplexen Zahlenebene mit konstanter Winkelgeschwindigkeit ω im Uhrzeigersinn. Um in den Ausgangszustand zurückzukehren, ist aber die doppelte Periode $2T$ abzuwarten:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t + T; \alpha) &= -\Psi(x, t; \alpha) \\ \Psi(x, t + 2T; \alpha) &= \Psi(x, t; \alpha).\end{aligned}$$

Für die zugeordnete Wahrscheinlichkeitsdichte gilt aber

$$|\Psi(x, t + T; \alpha)|^2 = |\Psi(x, t; \alpha)|^2,$$

was in Übereinstimmung mit der klassischen Anschauung ist.

Die Erwartungswerte der Besetzungszahl $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$ und des Quadrates der Besetzungszahl $\hat{N}^2 = (\hat{a}^\dagger \circ \hat{a})^2$ im kohärenten Zustand $\psi(x; \alpha)$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$ sind

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle_{\psi_A} &= |\alpha|^2 \\ \langle \hat{N}^2 \rangle_{\psi_A} &= |\alpha|^2 + |\alpha|^4.\end{aligned}$$

Die Unschärfe der Besetzungszahl ist demnach gegeben zu

$$\begin{aligned}\Delta_{\psi_A}(\hat{N}) &= \left[\langle \hat{N}^2 \rangle_{\psi_A} - \langle \hat{N} \rangle_{\psi_A}^2 \right]^{\frac{1}{2}} = |\alpha| \\ &= \langle \hat{N} \rangle_{\psi_A}^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

Für das Produkt der Besetzungszahlunschärfe mit der Ortsunschärfe im kohärenten Zustand $\psi(x; \alpha)$ mit der Wahl eines reellen Parameters α , also $\alpha_{II} = 0$, folgt mit

$$\Delta_{\psi_A}(\hat{x}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

das Ergebnis

$$\Delta_{\psi_A}(\hat{N}) \cdot \Delta_{\psi_A}(\hat{x}) = |\alpha_I| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \equiv \frac{L}{2},$$

wobei

$$L = |\alpha_I| \cdot \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}.$$

Je größer die Besetzungszahl $\langle \hat{N} \rangle$, desto genauer lässt sich die Position des Teilchens bestimmen:

$$\frac{\Delta_{\psi_A}(\hat{x})}{L} = \frac{1}{2\Delta_{\psi_A}(\hat{N})} = \frac{1}{2\langle \hat{N} \rangle_{\psi_A}^{\frac{1}{2}}}.$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

Ein Teilchen sei durch die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(x, t; \alpha) = \exp(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H})\psi(x; \alpha)$ beschrieben. Dann gilt nach dem Gesagten:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^{\dagger}(x, t; \alpha) \hat{H} \Psi(x, t; \alpha) = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^{\dagger}(x; \alpha) \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \circ \hat{H} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \psi(x; \alpha) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^{\dagger}(x; \alpha) \hat{H} \psi(x; \alpha) \\
 &\stackrel{(11.12)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_{n'=0}^{\infty} \psi_{n'}^{\dagger}(x) c_{n',A}^{\dagger} \right) \hat{H} \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_{n,A} \psi_n(x) \right) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\sum_{n'=0}^{\infty} \psi_{n'}^{\dagger}(x) c_{n',A}^{\dagger} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_{n,A} \hat{H} \psi_n(x) \right) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_{n,A}|^2 E_n.
 \end{aligned}$$

Hier wurde verwendet

$$\begin{aligned}
 \hat{H} \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) \\
 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}^{\dagger}(x) \psi_n(x) &= \delta_{n,n'} \\
 E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit $|c_{n,A}|^2$, bei einer Messung der Energie des Teilchens im kohärenten Zustand $\Psi(x, t; \alpha)$ bei seiner Bewegung im Potential des harmonischen Oszillators den Wert E_n zu messen, ist gemäß Gl. (11.13):

$$\begin{aligned}
 |c_{n,A}|^2 &= \left(\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \right) \left(\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \right)^{\dagger} |c_{0,A}|^2 \\
 &= \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \exp(-|\alpha|^2) \\
 &= \frac{\left(\langle \hat{a}^{\dagger} \circ \hat{a} \rangle_{\psi_A} \right)^n}{n!} \exp\left(-\langle \hat{a}^{\dagger} \circ \hat{a} \rangle_{\psi_A}\right).
 \end{aligned}$$

Das ist eine **Poisson-Verteilung**.

Kohärente Zustände sind auf Eins normiert. Jedoch sind kohärente Zustände

$\psi(x; \alpha)$ und $\psi(x; \beta)$ für $\alpha \neq \beta$ **nicht** orthogonal:

$$\begin{aligned} \langle \beta, \alpha \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^\dagger(x; \beta) \psi(x; \alpha) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\exp\left(-\frac{|\beta|^2}{2}\right) \exp(\beta \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \right]^\dagger \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \exp\left(-\frac{|\beta|^2 + |\alpha|^2}{2}\right) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \exp(\beta^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x). \end{aligned}$$

Nun gilt aufgrund der Operator-Identität Gl. (9.9)

$$\begin{aligned} &\exp(\beta^\dagger \hat{a}) \circ \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \\ &= \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(\beta^\dagger \hat{a}) \circ \exp\left(\beta^\dagger \alpha \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_{=1}\right) \\ &= \exp(\beta^\dagger \alpha) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(\beta^\dagger \hat{a}). \end{aligned}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \langle \beta, \alpha \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^\dagger(x; \beta) \psi(x; \alpha) \\ &= \exp\left(-\frac{|\beta|^2 + |\alpha|^2}{2} + \beta^\dagger \alpha\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^\dagger(x) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(\beta^\dagger \hat{a}) \psi_0(x) \\ &\stackrel{\text{p.I.}}{=} \exp\left(-\frac{|\beta|^2 + |\alpha|^2}{2} + \beta^\dagger \alpha\right) \\ &\quad \times \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\underbrace{\exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x)}_{=\psi_0(x)} \right]^\dagger \circ \underbrace{\exp(\beta^\dagger \hat{a}) \psi_0(x)}_{=\psi_0(x)}}_{=1} \\ &= \exp\left(-\frac{|\beta|^2 + |\alpha|^2}{2} + \beta^\dagger \alpha\right) \\ |\langle \beta, \alpha \rangle|^2 &= \exp(-|\alpha - \beta|^2). \end{aligned}$$

Für $|\alpha - \beta| \gg 1$ wird der Überlapp der Wellenfunktionen $\psi(x; \alpha)$ und $\psi(x; \beta)$ exponentiell klein!

Die Gesamtheit aller kohärenten Zustände $\psi_A(x; \alpha)$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ bildet ein sog.

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

überevollständiges System. Betrachte dazu

$$\begin{aligned}\alpha &= \alpha_I + i\alpha_{II} \\ \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha f(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha_I \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha_{II} f(\alpha_I + i\alpha_{II}) \\ &\stackrel{\text{Polarkoordinaten}}{=} \int_0^{\infty} d|\alpha| |\alpha| \int_0^{2\pi} d\varphi f(|\alpha| e^{i\varphi}).\end{aligned}$$

Sei

$$K(x, x') = \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \psi(x; \alpha) \psi^\dagger(x'; \alpha).$$

Dann erhalten wir:

$$\begin{aligned}& \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, x') \Psi(x') \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} d^2\alpha \psi(x; \alpha) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^\dagger(x'; \alpha) \Psi(x') \\ &= \int_0^{\infty} d|\alpha| |\alpha| \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^n e^{in\varphi}}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) \right] \\ & \quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^m e^{-im\varphi}}{\sqrt{m!}} \psi_m^\dagger(x') \right] \Psi(x') \\ &= \int_0^{\infty} d|\alpha| |\alpha| \exp(-|\alpha|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} \underbrace{\left(\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(n-m)\varphi} \right)}_{=2\pi\delta_{n,m}} \psi_n(x) \\ & \quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_m^\dagger(x') \Psi(x') \\ &= 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{\left(\int_0^{\infty} d|\alpha| |\alpha| \exp(-|\alpha|^2) |\alpha|^{2n} \right)}_{=\frac{1}{2}n!} \psi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_n^\dagger(x') \Psi(x') \\ &= \pi \int_{-\infty}^{\infty} dx' \underbrace{\left(\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n^\dagger(x') \right)}_{=\lim_{t \rightarrow 0^+} K_\omega(x, x', t)} \Psi(x') \\ &= \pi \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x - x') \Psi(x').\end{aligned}$$

Damit lautet die Vollständigkeitsrelation für kohärente Zustände:

$$\int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\alpha}{\pi} \psi(x; \alpha) \psi^\dagger(x'; \alpha) = \delta(x - x').$$

Jede beliebige quadratintegrierbare Funktion $\Psi(x)$ kann nach dem überevollständigen System der kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators entwickelt

werden:

$$\begin{aligned}
\Psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') \Psi(x') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\alpha}{\pi} \psi(x; \alpha) \psi^\dagger(x'; \alpha) \Psi(x') \\
&= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\alpha}{\pi} \underbrace{\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^\dagger(x'; \alpha) \Psi(x') \right]}_{\equiv c(\alpha)} \psi(x; \alpha) \\
&= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d^2\alpha}{\pi} c(\alpha) \psi(x; \alpha) \\
c(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^\dagger(x'; \alpha) \Psi(x').
\end{aligned}$$

Betrachte den Operator

$$\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^\dagger \hat{a}).$$

Es gilt aufgrund der Operator-Identität Gl. (9.9)

$$\hat{D}(\alpha) = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \exp(-\alpha^\dagger \hat{a}).$$

Somit folgt sofort:

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha) \psi_0(x) &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \circ \underbrace{\exp(-\alpha^\dagger \hat{a})}_{\hat{a}\psi_0(x)=0} \psi_0(x) \\
&= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \psi_0(x) \\
&= \psi(x; \alpha)
\end{aligned}$$

Der Operator $\hat{D}(\alpha)$ ist unitär, d.h. es gilt:

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha) \circ [\hat{D}(\alpha)]^\dagger &= \hat{1} = [\hat{D}(\alpha)]^\dagger \circ \hat{D}(\alpha) \\
[\hat{D}(\alpha)]^\dagger &= \hat{D}(-\alpha).
\end{aligned} \tag{11.15}$$

Wir beobachten:

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha + \beta) &= \exp[(\alpha + \beta) \hat{a}^\dagger - (\alpha + \beta)^\dagger \hat{a}] \\
&= \exp[\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^\dagger \hat{a} + \beta \hat{a}^\dagger - \beta^\dagger \hat{a}] \\
&= \exp[\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^\dagger \hat{a}] \circ \exp[\beta \hat{a}^\dagger - \beta^\dagger \hat{a}] \exp\left(-\frac{1}{2} [\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^\dagger \hat{a}, \beta \hat{a}^\dagger - \beta^\dagger \hat{a}]\right) \\
&= \exp\left(-\frac{\alpha \beta^\dagger - \alpha^\dagger \beta}{2}\right) \hat{D}(\alpha) \circ \hat{D}(\beta),
\end{aligned}$$

11 Unschärferelation und Kohärente Zustände des harmonischen Oszillators

vertausche nun α und β

$$= \exp\left(\frac{\alpha\beta^\dagger - \alpha^\dagger\beta}{2}\right) \hat{D}(\beta) \circ \hat{D}(\alpha).$$

Es folgt die sog. **Weyl-Identität**:

$$\hat{D}(\alpha) \circ \hat{D}(\beta) = \exp(\alpha\beta^\dagger - \alpha^\dagger\beta) \hat{D}(\beta) \circ \hat{D}(\alpha). \quad (11.16)$$

Diese Relation überträgt die ursprüngliche kanonische Vertauschungsregel

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

für die *nicht beschränkten* linearen Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger auf die *beschränkten* unitären Operatoren $\hat{D}(\alpha)$.

Mit der Regel Gl. (10.11) aus Kapitel 10 berechnen wir jetzt den Kommutator:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{D}(\alpha)] &= \frac{\partial}{\partial \hat{a}^\dagger} \hat{D}(\alpha) = \alpha \hat{D}(\alpha) \\ [\hat{a}^\dagger, \hat{D}(\alpha)] &= -\frac{\partial}{\partial \hat{a}} \hat{D}(\alpha) = \alpha^\dagger \hat{D}(\alpha). \end{aligned}$$

Es folgt hieraus nach Multiplikation von links mit $[\hat{D}(\alpha)]^\dagger$ unter Verwendung von Gl. (11.15):

$$[\hat{D}(\alpha)]^\dagger \circ \hat{a} \circ \hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \hat{1}.$$

Entsprechend zeigt man

$$[\hat{D}(\alpha)]^\dagger \circ \hat{a}^\dagger \circ \hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^\dagger \hat{1}.$$

Dieser Eigenschaft verdankt der unitäre Operator $\hat{D}(\alpha)$ den Namen **Shiftoperator**.

12 Bemerkungen zur mathematischen Struktur der Quantenmechanik

Um das Wirken von linearen Operatoren \hat{A} auf Wellenfunktionen Ψ abstrakt besser zu verstehen, machen wir an dieser Stelle einige Bemerkungen zur **mathematischen Struktur** der Quantenmechanik.

Die Gesamtheit der Wellenfunktionen Ψ eines Teilchens bildet einen **linearen Raum** \mathcal{H} über dem Körper \mathbb{C} der komplexen Zahlen. Dies bedeutet, dass zu je zwei Wellenfunktionen Ψ_I und Ψ_{II} aus \mathcal{H} , und zu zwei Zahlen c_I und c_{II} aus \mathbb{C} , dann auch die Linearkombination $c_I\Psi_I + c_{II}\Psi_{II}$ Element von \mathcal{H} ist. Das ist das **Superpositionsprinzip**. Natürlich ist die Reihenfolge bei der Addition mehrerer Elemente von \mathcal{H} beliebig, d.h. \mathcal{H} ist bzgl. der Addition eine **Abelsche Gruppe**. Es gilt also $\Psi_I + \Psi_{II} = \Psi_{II} + \Psi_I$, und $(\Psi_I + \Psi_{II}) + \Psi_{III} = \Psi_I + (\Psi_{II} + \Psi_{III})$ für $\Psi_I, \Psi_{II}, \Psi_{III} \in \mathcal{H}$. Es gibt ein **Nullelement** $\Theta \in \mathcal{H}$ mit $\Theta + \Psi = \Psi$ für alle $\Psi \in \mathcal{H}$. Zu jedem $\Psi \in \mathcal{H}$ existiert ein inverses Element $(-\Psi)$, mit $\Psi + (-\Psi) = \Theta$. Bezüglich der Multiplikation von Elementen Ψ von \mathcal{H} mit Zahlen c , c_I und c_{II} aus \mathbb{C} gilt das **Assoziativgesetz**, $c_I(c_{II}\Psi) = (c_Ic_{II})\Psi$, und das **Distributivgesetz**, $c(\Psi_I + \Psi_{II}) = c\Psi_I + c\Psi_{II}$ und $(c_I + c_{II})\Psi = c_I\Psi + c_{II}\Psi$. Für $c_{II} = -c_I$ folgt hieraus sofort $0 \cdot \Psi = \Theta$ für alle $\Psi \in \mathcal{H}$, und für $\Psi_I = -\Psi_{II}$ folgt $c \cdot \Theta = \Theta$ für alle Zahlen $c \in \mathbb{C}$.

Die n Elemente $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n \in \mathcal{H}$ heißen **linear abhängig**, wenn es Zahlen $c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{C}$ gibt, die nicht alle zugleich Null sind, mit

$$\sum_{j=1}^n c_j \Psi_j = \Theta. \quad (12.1)$$

Die Elemente $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n \in \mathcal{H}$ heißen **linear unabhängig**, wenn die Relation Gl. (12.1) nur für Zahlen $c_j \in \mathbb{C}$ mit $c_j = 0$ gilt. Existieren in einem linearen Raum \mathcal{H} eine Anzahl D von linear unabhängigen Elementen, während $D + 1$ Elemente immer linear abhängig sind, so heißt D die Dimension von \mathcal{H} . Gibt es abzählbar (oder sogar überabzählbar) viele von einander linear unabhängige Elemente in \mathcal{H} so ist $D = \infty$.

Um Erwartungswerte physikalischer Observablen definieren zu können fehlt noch ein wichtiges Strukturmerkmal, das **innere Produkt**. Je zwei Elementen Ψ_I und

12 Bemerkungen zur mathematischen Struktur der QM

Ψ_{II} aus \mathcal{H} wird eine komplexe Zahl $\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle$, genannt inneres Produkt oder **Skalarprodukt**, mit folgenden Eigenschaften zugeordnet:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle &= \langle \Psi_{II}, \Psi_I \rangle^\dagger & (12.2) \\ \langle \Psi_{III}, c_I \Psi_I + c_{II} \Psi_{II} \rangle &= c_I \langle \Psi_{III}, \Psi_I \rangle + c_{II} \langle \Psi_{III}, \Psi_{II} \rangle \\ \langle \Psi, \Psi \rangle &> 0 \text{ für } \Psi \neq \Theta. \end{aligned}$$

Ein linearer Raum \mathcal{H} mit Skalarprodukt heißt auch **unitärer Raum**. Jedem Element $\Psi \in \mathcal{H}$ werde die reelle Zahl $|\Psi| = \sqrt{\langle \Psi, \Psi \rangle} \geq 0$ als **Norm** zugeordnet. Es ist $\|\Psi\| = 0$ genau für $\Psi = \Theta$.

Für je zwei Elemente Ψ_I und Ψ_{II} aus \mathcal{H} gilt die **Schwarzsche Ungleichung**:

$$|\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle| \leq \|\Psi_I\| \cdot \|\Psi_{II}\|. \quad (12.3)$$

Das ist leicht einzusehen. Für $\Psi_{II} = \Theta$ verschwinden beide Seiten identisch. Für $\Psi_{II} \neq \Theta$ gilt für $c \in \mathbb{C}$ immer

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|\Psi_I + c\Psi_{II}\|^2 = \langle \Psi_I + c\Psi_{II}, \Psi_I + c\Psi_{II} \rangle \\ &= \langle \Psi_I, \Psi_I \rangle + \langle \Psi_I, c\Psi_{II} \rangle + \langle c\Psi_{II}, \Psi_I \rangle + \langle c\Psi_{II}, c\Psi_{II} \rangle \\ &= \langle \Psi_I, \Psi_I \rangle + c \langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle + c^\dagger \langle \Psi_{II}, \Psi_I \rangle + cc^\dagger \langle \Psi_{II}, \Psi_{II} \rangle \\ &= \langle \Psi_I, \Psi_I \rangle + c \langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle + c^\dagger \left\{ \langle \Psi_{II}, \Psi_I \rangle + \underbrace{c \langle \Psi_{II}, \Psi_{II} \rangle}_{>0} \right\}. \end{aligned}$$

Für den speziellen Wert

$$c = -\frac{\langle \Psi_{II}, \Psi_I \rangle}{\langle \Psi_{II}, \Psi_{II} \rangle}$$

verschwindet die Schweifklammer vor der Zahl c^\dagger und es folgt:

$$0 \leq \langle \Psi_I, \Psi_I \rangle - \frac{\langle \Psi_{II}, \Psi_I \rangle}{\langle \Psi_{II}, \Psi_{II} \rangle} \langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle.$$

Das ist gleichbedeutend mit

$$|\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle|^2 \leq \langle \Psi_I, \Psi_I \rangle \cdot \langle \Psi_{II}, \Psi_{II} \rangle.$$

Das Gleichheitszeichen steht nur im Fall $\Psi_I + c\Psi_{II} = \Theta$, d.h. wenn Ψ_I und Ψ_{II} linear abhängig sind.

Für je zwei Elemente Ψ_I und Ψ_{II} aus \mathcal{H} gilt die **Dreiecksungleichung**:

$$\|\Psi_I + \Psi_{II}\| \leq \|\Psi_I\| + \|\Psi_{II}\|. \quad (12.4)$$

Das Gleichheitszeichen wird angenommen, wenn Ψ_I oder Ψ_{II} gleich Θ sind, oder wenn $\Psi_{II} = c \Psi_I$ mit einer reellen Zahl $c > 0$ ist. Das ist leicht einzusehen. Für $\Psi_I + \Psi_{II} = \Theta$ ist die Aussage offensichtlich richtig. Für $\Psi_I + \Psi_{II} \neq \Theta$ gilt

$$\begin{aligned} 0 &< \|\Psi_I + \Psi_{II}\|^2 = \langle \Psi_I + \Psi_{II}, \Psi_I + \Psi_{II} \rangle \\ &= \langle \Psi_I, \Psi_I + \Psi_{II} \rangle + \langle \Psi_{II}, \Psi_I + \Psi_{II} \rangle \\ &\stackrel{(12.3)}{\leq} \|\Psi_I\| \cdot \|\Psi_I + \Psi_{II}\| + \|\Psi_{II}\| \cdot \|\Psi_I + \Psi_{II}\|. \end{aligned}$$

Division durch $\|\Psi_I + \Psi_{II}\|$ führt zur Aussage Gl.(12.4). Für Ψ_I oder Ψ_{II} gleich Θ wird natürlich das Gleichheitszeichen angenommen. Für $\Psi_I \neq \Theta$ und $\Psi_{II} \neq \Theta$ kann das Gleichheitszeichen nur gelten für $\Psi_I + \Psi_{II} = c_I \Psi_I = c_{II} \Psi_{II}$ mit $c_I, c_{II} \in \mathbb{C}$. Die Wahl $c_I = 1$ geht nicht, denn dann wäre $\Psi_{II} = \Theta$. Also ist $\Psi_I = \frac{c_{II}}{c_I} \Psi_{II}$. Das führt auf $|1 + \frac{c_{II}}{c_I}| \leq 1 + |\frac{c_{II}}{c_I}|$. Offensichtlich wird das Gleichheitszeichen angenommen, wenn die Zahl $c \equiv \frac{c_{II}}{c_I}$ reell und positiv ist, $c > 0$.

Zwei Elemente $\Psi_I, \Psi_{II} \in \mathcal{H}$ heißen **orthogonal** zueinander, wenn gilt

$$\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle = 0.$$

Eine Menge $\{\Psi_j\}_{j=0}^\infty$ von abzählbar vielen Elementen $\Psi_j \in \mathcal{H}$ mit der Eigenschaft

$$\langle \Psi_j, \Psi_{j'} \rangle = \delta_{j,j'}$$

heißt **Orthonormalsystem** (ONS). Je endlich viele der Elemente Ψ_j eines ONS sind linear unabhängig, denn aus $\sum_{j'=0}^m c_{j'} \Psi_{j'} = \Theta$ folgt sofort durch Bildung des Skalarprodukts mit einem festen Element Ψ_j die Relation $0 = \langle \Psi_j, \Theta \rangle = \langle \Psi_j, \sum_{j'=0}^m c_{j'} \Psi_{j'} \rangle = \sum_{j'=0}^m c_{j'} \langle \Psi_j, \Psi_{j'} \rangle = c_j$. Eine endliche oder abzählbar unendliche Menge von linear unabhängigen Elementen $\Phi_j \in \mathcal{H}$ kann orthonormiert werden, d.h. man kann durch Bilden geeigneter Linearkombinationen der $\Phi_j \in \mathcal{H}$ eine abzählbare Menge von neuen Elementen Ψ_j herstellen, die wieder ein ONS bilden:

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= \frac{\Phi_0}{\|\Phi_0\|} \\ \Psi_m &= \frac{\Phi_m - \sum_{j=0}^{m-1} \langle \Psi_j, \Phi_m \rangle \Psi_j}{\left\| \Phi_m - \sum_{j=0}^{m-1} \langle \Psi_j, \Phi_m \rangle \Psi_j \right\|} \quad \text{für } m = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Dies ist das **Schmidtsche Orthonormalisierungsverfahren**. Von der Richtigkeit der Aussage überzeugt man sich leicht durch vollständige Induktion. Offenbar ist $\langle \Psi_0, \Psi_1 \rangle = 0$. Es sei $\{\Psi_0, \Psi_1, \dots, \Psi_{k-1}\}$ bereits orthonormalisiert. Dann gilt für $l < k$ und $j < k$ wegen der Annahme $\langle \Psi_l, \Psi_j \rangle = \delta_{l,j}$ auch

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi_l, \Phi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \Psi_j, \Phi_k \rangle \Psi_j \right\rangle &= \langle \Psi_l, \Phi_k \rangle - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \Psi_j, \Phi_k \rangle \underbrace{\langle \Psi_l, \Psi_j \rangle}_{=\delta_{l,j}} \\ &= \langle \Psi_l, \Phi_k \rangle - \langle \Psi_l, \Phi_k \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Mit

$$\Psi_k = \frac{\Phi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \Psi_j, \Phi_k \rangle \Psi_j}{\left\| \Phi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \Psi_j, \Phi_k \rangle \Psi_j \right\|}$$

ist dann auch das Skalarprodukt mit Ψ_l gleich Null, d.h. $\langle \Psi_l, \Psi_k \rangle = 0$ für $l < k$. Damit ist der Schluss von $k - 1$ auf k vollzogen.

Wir geben einige Beispiele für Orthonormalsysteme.

1. Die trigonometrischen Funktionen

$$t_n(\phi) = \exp(in\phi) \\ n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

bilden im unitären Raum $L^2([0, 2\pi])$ der im Intervall $[0, 2\pi]$ quadratintegrierbaren Funktionen ein ONS:

$$\langle t_m, t_{m'} \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \exp[i(m' - m)\phi] = \delta_{m,m'}.$$

2. Die Familie der auf dem Intervall $[0, 1]$ definierten Funktionen

$$w_n(x) = \begin{cases} 2^{\frac{n}{2}} & \text{falls } 2^{-n} < x < 2 \cdot 2^{-n}, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \\ n = 1, 2, 3, \dots$$

bilden im unitären Raum $L^2([0, 1])$ der im Intervall $[0, 1]$ quadratintegrierbaren Funktionen ein ONS:

$$\langle w_m, w_{m'} \rangle = \int_0^1 dx w_m(x) w_{m'}(x) = \delta_{m,m'}.$$

3. Die mit einer *positiven* fest gewählten Gewichtsfunktion $\rho(x)$ gebildeten Funktionen $\sqrt{\rho(x)}x^n$ für $n = 0, 1, 2, \dots$ werden nach dem Schmidtschen Orthonormalisierungsverfahren in ein ONS von Funktionen $s_n(x) = \sqrt{\rho(x)} \cdot p_n(x)$ überführt. Die $p_n(x)$ sind dann Polynome. Man findet für das Intervall $\mathcal{I} = [-1, 1]$ und die Wahl $\rho(x) \equiv 1$ die **Legendre-Polynome**, für das Intervall $\mathcal{I} = [-1, 1]$ und die Wahl $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ die **Tschebyscheffschen Polynome erster Art**, für das Intervall $\mathcal{I} = [0, \infty)$ und $\rho(x) = \exp(-x)$ die **Laguerrischen Polynome**, für das Intervall $\mathcal{I} = (-\infty, \infty)$ und $\rho(x) = \exp(-x^2)$ die **Hermiteischen Polynome**:

$$\langle s_m, s_{m'} \rangle = \int_{\mathcal{I}} dx \rho(x) p_m(x) p_{m'}(x) = \delta_{m,m'}.$$

Wir bilden jetzt Folgen von Elementen Φ_j aus einem unitären Raum \mathcal{H} . Eine Folge $\{\Phi_j\}_{j=0}^{\infty}$ heißt **Cauchy-konvergent**, wenn es zu beliebig klein vorgegebenem $\varepsilon > 0$ eine natürliche Zahl n_ε gibt, so dass $\|\Phi_j - \Phi_{j'}\| < \varepsilon$ für $j, j' > n_\varepsilon$. Der unitäre Raum \mathcal{H} heißt im Sinne der durch das Skalarprodukt induzierten Metrik $\|\Psi_I - \Psi_{II}\|$ **vollständig**, wenn zu jeder Cauchy-konvergenten Folge Ψ_n von Elementen aus \mathcal{H} ein **Grenzelement** $\Psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\Psi_n - \Psi\| \rightarrow 0$ existiert. Ein vollständiger unitärer Raum \mathcal{H} heißt **Hilbert-Raum**.

Nach dem Gesagten bildet die Gesamtheit der (im Lebesgueschen Sinne) quadratintegrierbaren Wellenfunktionen eines Teilchens bzgl. der durch das Skalarprodukt

$$\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi_I^\dagger(\mathbf{r}', t) \Psi_{II}(\mathbf{r}', t)$$

induzierten Norm einen Hilbert-Raum. Dieser wird im folgenden als $L^2(\mathbb{R}^3)$ bezeichnet.

Wir betrachten jetzt **Operatoren** \hat{A} , die Elemente $\Psi \in \mathcal{H}$ in Elemente $\hat{A}\Psi \in \mathcal{H}$ überführen. Sei $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ der Definitionsbereich des Operators \hat{A} . Sei $\hat{A}(\mathcal{D}_{\hat{A}}) = \{\hat{A}\Psi \mid \Psi \in \mathcal{D}_{\hat{A}}\}$ die Gesamtheit aller Bilder des Operators \hat{A} . Wir sagen \hat{A} ist ein Operator auf dem Hilbert-Raum wenn gilt $\hat{A}(\mathcal{D}_{\hat{A}}) \subset \mathcal{H}$. Der Operator \hat{A} heißt **linearer** Operator, wenn gilt

$$\begin{aligned} \hat{A}(c_I \Psi_I + c_{II} \Psi_{II}) &= c_I \hat{A}\Psi_I + c_{II} \hat{A}\Psi_{II} \\ \text{für alle } \Psi_I, \Psi_{II} &\in \mathcal{D}_A \\ \text{für alle } c_I, c_{II} &\in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

Dazu ist zu sagen, dass jede physikalische **Observable** \hat{A} , z.B. der Ort, der Impuls, die Energie oder Drehimpuls eines Teilchens, in der Quantenmechanik ein linearer Operator auf dem Hilbert-Raum entspricht, der einer Wellenfunktion $\Psi \in \mathcal{H}$ eine neue Wellenfunktion $\hat{A}\Psi \in \mathcal{H}$ als Resultat der Anwendung von \hat{A} auf Ψ zuordnet. Der Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle_\Psi$ einer Observablen \hat{A} für ein Teilchen im Zustand Ψ lässt sich dann als das Skalarprodukt der Elemente Ψ und $\hat{A}\Psi$ in \mathcal{H} auffassen:

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{A}\Psi(\mathbf{r}', t).$$

Da die Messung physikalischer Größen nur *reelle Zahlen* als Messwert liefern kann, muss der Erwartungswert einer Observablen in jedem Zustand $\Psi \in \mathcal{H}$ unbedingt eine reelle Zahl sein:

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi^\dagger \stackrel{!}{=} \langle \hat{A} \rangle_\Psi.$$

Das bedeutet es ist zu fordern

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^\dagger \stackrel{!}{=} \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle.$$

12 Bemerkungen zur mathematischen Struktur der QM

Andererseits gilt gemäß der Eigenschaften des Skalarprodukts im Hilbert-Raum \mathcal{H}

$$\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle^\dagger = \langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle.$$

Die Betrachtung führt auf die Forderung, dass Observable \hat{A} lineare Operatoren $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ sind, die der Nebenbedingung

$$\langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle \quad (12.5)$$

für alle $\Psi \in \mathcal{H}$

genügen. Solche Operatoren heißen **hermitesche Operatoren**. Die den physikalischen Messgrößen entsprechenden Observablen der Quantenmechanik sind nach dem Gesagten notwendigerweise hermitesche Operatoren auf dem Hilbert-Raum \mathcal{H} .

Jedem linearen Operator \hat{B} auf dem Hilbert-Raum \mathcal{H} ist über die folgende Relation ein **adjungierter Operator** \hat{B}^\dagger zugeordnet:

$$\langle \Phi, \hat{B}\Psi \rangle = \langle \hat{B}^\dagger\Phi, \Psi \rangle \quad \text{für alle } \Psi, \Phi \in \mathcal{H}.$$

Offensichtlich ist mit \hat{B} auch der adjungierte Operator \hat{B}^\dagger ein linearer Operator auf dem Hilbert-Raum \mathcal{H} :

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}^\dagger(c_I\Phi_I + c_{II}\Phi_{II}), \Psi \rangle &= \langle c_I\Phi_I + c_{II}\Phi_{II}, \hat{B}\Psi \rangle \\ &= c_I^\dagger \langle \Phi_I, \hat{B}\Psi \rangle + c_{II}^\dagger \langle \Phi_{II}, \hat{B}\Psi \rangle \\ &= c_I^\dagger \langle \hat{B}^\dagger\Phi_I, \Psi \rangle + c_{II}^\dagger \langle \hat{B}^\dagger\Phi_{II}, \Psi \rangle \\ &= \langle c_I\hat{B}^\dagger\Phi_I + c_{II}\hat{B}^\dagger\Phi_{II}, \Psi \rangle. \end{aligned}$$

Da die Forderung Gl. (12.5) alle Elemente von \mathcal{H} betrifft gilt insbesondere auch für $\Psi, \Phi \in \mathcal{H}$ und $z \in \mathbb{C}$, dass eine Observable \hat{A} die Bedingung

$$\langle \hat{A}(\Psi + z\Phi), \Psi + z\Phi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Psi + z\Phi, \hat{A}(\Psi + z\Phi) \rangle$$

erfüllt. Unter Beachtung der Regeln für lineare Operatoren und das Skalarprodukt folgt sofort

$$\begin{aligned} &\langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle + z \langle \hat{A}\Psi, \Phi \rangle + z^\dagger \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle + z^\dagger z \langle \hat{A}\Phi, \Phi \rangle \\ &= \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle + z^\dagger \langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle + z \langle \Psi, \hat{A}\Phi \rangle + z^\dagger z \langle \Phi, \hat{A}\Phi \rangle. \end{aligned}$$

Die Forderung Gl. (12.5) impliziert jetzt

$$z \langle \hat{A}\Psi, \Phi \rangle + z^\dagger \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle = z^\dagger \langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle + z \langle \Psi, \hat{A}\Phi \rangle,$$

d.h. es gilt für alle Paare $\Psi, \Phi \in \mathcal{H}$

$$\langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle.$$

Das bedeutet es ist

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

Damit ist gezeigt: ein hermitescher Operator \hat{A} (Observable) ist ein **selbstadjungierter** Operator, und umgekehrt. **Sehr wichtig:** ob ein Operator \hat{A} selbstadjungiert ist, hängt insbesondere auch davon ab, ob der Definitionsbereich $\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger}$ des adjungierten Operators \hat{A}^\dagger mit dem Definitionsbereich $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ des Operators \hat{A} übereinstimmt!

Das folgende Beispiel definiert den Operator \hat{A} zu

$$\hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

auf einem Unterraum $\mathcal{D}_{\hat{A}} \subset L^2([0, 2\pi])$, wobei

$$\mathcal{D}_{\hat{A}} = \left\{ u \in L^2([0, 2\pi]) \mid u(x) \text{ ist differenzierbar} \right\}.$$

Das Skalarprodukt ist definiert zu

$$\langle v, u \rangle = \int_0^{2\pi} dx v^\dagger(x) u(x).$$

Dann erhalten wir für den zu \hat{A} formal adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ die Beziehung

$$\begin{aligned} \langle v, \hat{A}u \rangle - \langle \hat{A}^\dagger v, u \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int_0^{2\pi} dx \left[v^\dagger(x) \frac{du(x)}{dx} + \frac{dv^\dagger(x)}{dx} u(x) \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_0^{2\pi} dx \frac{d}{dx} [v^\dagger(x) u(x)] \\ &= \frac{\hbar}{i} [v^\dagger(x) u(x)]_{x=0}^{x=2\pi} \\ &= \frac{\hbar}{i} [v^\dagger(2\pi) u(2\pi) - v^\dagger(0) u(0)]. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Erfüllen die Funktionen $v(x)$ noch die zusätzliche Bedingung

$$\begin{aligned} v(2\pi) &= 0 \\ v(0) &= 0, \end{aligned}$$

so ist zwar

$$\langle v, \hat{A}u \rangle = \langle \hat{A}^\dagger v, u \rangle,$$

12 Bemerkungen zur mathematischen Struktur der QM

aber in diesem Fall ist jedoch der Definitionsbereich von \hat{A}^\dagger , nämlich

$$\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger} = \left\{ v \in L^2([0, 2\pi]) \mid v(x) \text{ ist differenzierbar und } v(2\pi) = 0 = v(0) \right\},$$

eine echte Teilmenge von $\mathcal{D}_{\hat{A}}$:

$$\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger} \subset \mathcal{D}_{\hat{A}}.$$

Der Operator \hat{A} ist auf $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ somit nicht selbstadjungiert.

Wählen wir stattdessen für den Operator $\hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ als Definitionsbereich periodische Randbedingungen

$$\mathcal{D}_{\hat{A}} = \left\{ u \in L^2([0, 2\pi]) \mid u(x) \text{ ist differenzierbar und } u(2\pi) = u(0) \right\},$$

dann folgt für den zu \hat{A} formal adjungierten Operator $\hat{A}^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, falls der Definitionsbereich des adjungierten Operators zu

$$\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger} = \left\{ v \in L^2([0, 2\pi]) \mid v(x) \text{ ist differenzierbar und } v(2\pi) = v(0) \right\}$$

gewählt wird, dass die Randterme gemäß Gl. (12.6) verschwinden, so dass wiederum gilt

$$\langle v, \hat{A}u \rangle = \langle \hat{A}^\dagger v, u \rangle.$$

In Fall periodischer Randbedingungen ist offensichtlich der Definitionsbereich beider Operatoren identisch, $\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger} \equiv \mathcal{D}_{\hat{A}}$ und der Operator $\hat{A} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = \hat{A}^\dagger$ ist auf $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ selbstadjungiert.

Fazit: eine *formale* Selbstadjungiertheit $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ für sich alleine genommen reicht nicht aus, damit \hat{A} entsprechend der gegebenen Definition selbstadjungiert ist. Erst wenn zusätzlich gilt $\mathcal{D}_{\hat{A}^\dagger} = \mathcal{D}_{\hat{A}}$ ist der Operator \hat{A} auf $\mathcal{D}_{\hat{A}}$ selbstadjungiert. Man muss also achtsam sein!

Hermitesche Operatoren besitzen drei für die Quantenmechanik bedeutende Eigenschaften.

- (A) Die Eigenwerte α_n eines hermiteschen Operators \hat{A} sind reelle Zahlen.
- (B) Eigenzustände Ψ_n und Ψ_m eines hermiteschen Operators \hat{A} zu verschiedenen Eigenwerten $\alpha_n \neq \alpha_m$ sind orthogonal.
- (C) Zwei kommutierende hermitesche Operatoren $\hat{A}_I, \hat{A}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$, die je einen vollständigen Satz von orthonormierten Eigenzuständen $\Psi_{n,I} \in \mathcal{H}$ bzw. $\Psi_{m,II} \in \mathcal{H}$ besitzen, können **simultan** diagonalisiert werden.

Zum Beweis von (A) sei Ψ_n auf Eins normierter Eigenzustand von \hat{A} zum Eigenwert α_n :

$$\hat{A}\Psi_n = \alpha_n\Psi_n. \tag{12.7}$$

Dann gilt für das Skalarprodukt von Ψ_n mit dem Zustand $\hat{A}\Psi_n$ aufgrund des Umstands, dass \hat{A} hermitescher Operator ist:

$$\langle \hat{A}\Psi_n, \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, \hat{A}\Psi_n \rangle.$$

Nach Gl. (12.7) folgt dann

$$\langle \alpha_n \Psi_n, \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, \alpha_n \Psi_n \rangle.$$

Die Rechenregeln für das Skalarprodukt liefern jetzt

$$\begin{aligned} \langle \alpha_n \Psi_n, \Psi_n \rangle &= \alpha_n^\dagger \underbrace{\langle \Psi_n, \Psi_n \rangle}_{=1} = \alpha_n^\dagger \\ \langle \Psi_n, \alpha_n \Psi_n \rangle &= \alpha_n \underbrace{\langle \Psi_n, \Psi_n \rangle}_{=1} = \alpha_n. \end{aligned}$$

Also gilt immer

$$\alpha_n^\dagger = \alpha_n,$$

was zu zeigen war.

Zum Beweis von (B) bilden wir das Skalarprodukt von Ψ_m mit $\hat{A}\Psi_n$:

$$\langle \Psi_m, \hat{A}\Psi_n \rangle = \langle \Psi_m, \alpha_n \Psi_n \rangle = \alpha_n \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle.$$

Andererseits ist \hat{A} hermitescher Operator, d.h.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_m, \hat{A}\Psi_n \rangle &= \langle \hat{A}\Psi_m, \Psi_n \rangle \\ &= \langle \alpha_m \Psi_m, \Psi_n \rangle \\ &= \alpha_m^\dagger \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle \stackrel{(A)}{=} \alpha_m \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle. \end{aligned}$$

Es folgt

$$(\alpha_n - \alpha_m) \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle = 0.$$

Aufgrund der Annahme $\alpha_n \neq \alpha_m$ sind demnach Ψ_n und Ψ_m orthogonal:

$$\langle \Psi_m, \Psi_n \rangle = 0 \text{ für } n \neq m.$$

Für den Beweis von (C) müssen wir etwas Vorarbeit leisten. Das **Produkt** zweier linearer Operatoren auf dem Hilbert-Raum ist definiert zu

$$(\hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I) \Psi = \hat{B}_{II} (\hat{B}_I \Psi).$$

Es wird also erst \hat{B}_I auf $\Psi \in \mathcal{H}$ angewendet, und daran anschließend \hat{B}_{II} auf das Element $(\hat{B}_I \Psi) \in \mathcal{H}$ angewendet, d.h. der Operator \hat{B}_{II} wirkt auf das Bild

12 Bemerkungen zur mathematischen Struktur der QM

$(\hat{B}_I \Psi)$ von Ψ unter der Abbildung \hat{B}_I . Für den zu $\hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I$ adjungierten Operator $(\hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I)^\dagger$ gilt nach dem Gesagten

$$(\hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I)^\dagger = \hat{B}_I^\dagger \circ \hat{B}_{II}^\dagger.$$

Die Gesamtheit aller linearen Operatoren auf \mathcal{H} bildet einen **Ring** $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$. Seien $\hat{B}_I, \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}$. Die Addition „+“ in $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$ und die Multiplikation „ \cdot “ mit Zahlen $c_I, c_{II} \in \mathbb{C}$ ist definiert als

$$\begin{aligned} (c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) \Psi &= c_I \hat{B}_I \Psi + c_{II} \hat{B}_{II} \Psi \\ &= c_{II} \hat{B}_{II} \Psi + c_I \hat{B}_I \Psi \\ &= (c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) \Psi. \end{aligned}$$

Bzgl. der Addition „+“ gibt es ein **Nullelement** $\hat{0} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$, so dass für alle $c \in \mathbb{C}$ und für alle $\hat{B} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ gilt:

$$\begin{aligned} \hat{0} + \hat{B} &= \hat{B} \\ c \cdot \hat{0} &= \hat{0} \\ 0 \cdot \hat{B} &= \hat{0}. \end{aligned}$$

Offensichtlich ist $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$ bzgl. der definierten Relationen „+“ und „ \cdot “ ein linearer Raum.

Für den zum linearen Operator $c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}$ adjungierten Operator $(c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II})^\dagger$ gilt

$$(c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II})^\dagger = c_I^\dagger \cdot \hat{B}_I^\dagger + c_{II}^\dagger \cdot \hat{B}_{II}^\dagger,$$

denn

$$\begin{aligned} \left\langle (c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II})^\dagger \Phi, \Psi \right\rangle &= \left\langle \Phi, (c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) \Psi \right\rangle \\ &= c_I \left\langle \Phi, \hat{B}_I \Psi \right\rangle + c_{II} \left\langle \Phi, \hat{B}_{II} \Psi \right\rangle \\ &= c_I \left\langle \hat{B}_I^\dagger \Phi, \Psi \right\rangle + c_{II} \left\langle \hat{B}_{II}^\dagger \Phi, \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle c_I^\dagger \hat{B}_I^\dagger \Phi, \Psi \right\rangle + \left\langle c_{II}^\dagger \hat{B}_{II}^\dagger \Phi, \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle (c_I^\dagger \cdot \hat{B}_I^\dagger + c_{II}^\dagger \cdot \hat{B}_{II}^\dagger) \Phi, \Psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Bzgl. der Multiplikation „ \circ “ von Operatoren gilt (wie schon bei der Addition „+“ in $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$ und der Multiplikation „ \cdot “ mit Skalaren $c \in \mathbb{C}$), dass mit $\hat{B}_I, \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$

immer $\hat{B}_I \circ \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ und $\hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$. Allerdings ist die Multiplikation „ \circ “ **nicht abelsch**, d.h. es ist möglich, dass

$$\hat{B}_I \circ \hat{B}_{II} \neq \hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I.$$

Es kommt demnach bei der Multiplikation „ \circ “ von Operatoren auf die Reihenfolge an!

Bzgl. der Multiplikation „ \circ “ von Operatoren gibt es ein **Einselement** $\hat{1} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$, so dass für alle $\Psi \in \mathcal{H}$ und für alle $\hat{B} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ gilt:

$$\begin{aligned}\hat{1}\Psi &= \Psi \\ \hat{1} \circ \hat{B} &= \hat{B} \\ \hat{B} \circ \hat{1} &= \hat{B}.\end{aligned}$$

Man nennt $\hat{1}$ auch die **identische Abbildung**. Es gilt für zwei Operatoren $\hat{B}_I, \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ und zwei Zahlen $c_I, c_{II} \in \mathbb{C}$ das Assoziativgesetz

$$(c_I \cdot \hat{B}_I) \circ (c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) = (c_I c_{II}) \cdot (\hat{B}_I \circ \hat{B}_{II}).$$

Es gilt für drei Operatoren $\hat{B}_I, \hat{B}_{II}, \hat{B}_{III} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ und drei Zahlen $c_I, c_{II}, c_{III} \in \mathbb{C}$ das Distributivgesetz:

$$\begin{aligned}(c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) \circ \hat{B}_{III} &= c_I \cdot \hat{B}_I \circ \hat{B}_{III} + c_{II} \cdot \hat{B}_{II} \circ \hat{B}_{III} \\ c_{III} \cdot (c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}) &= (c_{III} c_I) \cdot \hat{B}_I + (c_{III} c_{II}) \cdot \hat{B}_{II}\end{aligned}$$

Nach dem Gesagten gilt insbesondere:

$$\begin{aligned}\hat{0} \circ \hat{B} &= \hat{0} \\ \hat{B} \circ \hat{0} &= \hat{0}.\end{aligned}$$

Der **Kommutator**

$$[\hat{B}_I, \hat{B}_{II}] = \hat{B}_I \circ \hat{B}_{II} - \hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I$$

von zwei Operatoren $\hat{B}_I, \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ ist für die Quantenmechanik eine bedeutsame Konstruktion. Offensichtlich gilt

$$[\hat{B}_I, \hat{B}_{II}] = -[\hat{B}_{II}, \hat{B}_I]$$

und

$$[c_I \cdot \hat{B}_I + c_{II} \cdot \hat{B}_{II}, \hat{B}_{III}] = c_I \cdot [\hat{B}_I, \hat{B}_{III}] + c_{II} \cdot [\hat{B}_{II}, \hat{B}_{III}].$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} \left([\hat{B}_I, \hat{B}_{II}]\right)^\dagger &= \left(\hat{B}_I \circ \hat{B}_{II} - \hat{B}_{II} \circ \hat{B}_I\right)^\dagger = \hat{B}_{II}^\dagger \circ \hat{B}_I^\dagger - \hat{B}_I^\dagger \circ \hat{B}_{II}^\dagger \\ &= [\hat{B}_{II}^\dagger, \hat{B}_I^\dagger] = -[\hat{B}_I^\dagger, \hat{B}_{II}^\dagger]. \end{aligned}$$

Sind $\hat{A}_I, \hat{A}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ hermitesche Operatoren, d.h. $\hat{A}_I = \hat{A}_I^\dagger$ und $\hat{A}_{II} = \hat{A}_{II}^\dagger$, so gilt für den Kommutator

$$\left([\hat{A}_I, \hat{A}_{II}]\right)^\dagger = -[\hat{A}_I, \hat{A}_{II}],$$

d.h. der Kommutator zweier hermitescher Operatoren ist **schiefhermitesch!** Ein mit der imaginären Einheit $i = \sqrt{-1} \in \mathbb{C}$ multiplizierter hermitescher Operator $\hat{A} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ ist ebenfalls schiefhermitesch:

$$(i \cdot \hat{A})^\dagger = (i)^\dagger \cdot \hat{A}^\dagger = -i \cdot \hat{A}.$$

Folglich ist der mit i multiplizierte Kommutator von zwei hermiteschen Operatoren $\hat{A}_I, \hat{A}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ wieder hermitesch:

$$(i \cdot [\hat{A}_I, \hat{A}_{II}])^\dagger = i [\hat{A}_I, \hat{A}_{II}].$$

Für den speziellen Fall $[\hat{B}_I, \hat{B}_{II}] = \hat{0}$ spielt die Reihenfolge bei der Operatormultiplikation für zwei lineare Operatoren $\hat{B}_I, \hat{B}_{II} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ keine Rolle und man sagt, dass \hat{B}_I und \hat{B}_{II} kommutieren.

Nun können wir (C) beweisen. Sei dazu $\Psi_{n,I}$ Eigenzustand von \hat{A}_I zum Eigenwert $\alpha_{n,I}$, und es sei $\Psi_{n,II}$ Eigenzustand von \hat{A}_{II} zum Eigenwert $\alpha_{n,II}$:

$$\begin{aligned} \hat{A}_I \Psi_{n,I} &= \alpha_{n,I} \Psi_{n,I} \\ \hat{A}_{II} \Psi_{n,II} &= \alpha_{n,II} \Psi_{n,II}. \end{aligned}$$

Wir können wegen der angenommenen Vollständigkeit einen fix gewählten Eigenzustand $\Psi_{n,I} \in \mathcal{H}$ nach den Zuständen $\Psi_{m,II}$ entwickeln:

$$\Psi_{n,I} = \sum_m c_{n,m} \Psi_{m,II}.$$

Hat eine Teilmenge Ω_M von Eigenzuständen $\Psi_{m,II}$ von \hat{A}_{II} (zufällig) den gleichen Eigenwert $\alpha_{M,II}$, so fassen wir zusammen:

$$\Phi_{n,M} = \sum_{m \in \Omega_M} c_{n,m} \Psi_{m,II}.$$

Demnach

$$\Psi_{n,I} = \sum_M \Phi_{n,M}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{A}_{II} \Phi_{n,M} &= \sum_{m \in \Omega_M} c_{n,m} \hat{A}_{II} \Psi_{m,II} \\ &= \sum_{m \in \Omega_M} c_{n,m} \alpha_{M,II} \Psi_{m,II} \\ &= \alpha_{M,II} \sum_{m \in \Omega_M} c_{n,m} \Psi_{m,II} \\ &= \alpha_{M,II} \Phi_{n,M}. \end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \hat{A}_{II} \circ (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M} &= (\hat{A}_{II} \circ \hat{A}_I - \alpha_{n,I} \hat{A}_{II}) \Phi_{n,M} \\ &= (\hat{A}_I \circ \hat{A}_{II} - \alpha_{n,I} \hat{A}_{II}) \Phi_{n,M} \\ &= (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \circ \hat{A}_{II} \Phi_{n,M} \\ &= (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \alpha_{M,II} \Phi_{n,M} \\ &= \alpha_{M,II} (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M}, \end{aligned}$$

d.h. es ist $(\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M}$ Eigenzustand von \hat{A}_{II} zum Eigenwert $\alpha_{M,II}$. Da \hat{A}_{II} hermitescher Operator ist, sind Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten $\alpha_{M,II}$ orthogonal! Per constructionem sind alle Eigenwerte $\alpha_{M,II}$ voneinander verschiedene reelle Zahlen. Somit folgt aus

$$\begin{aligned} \Theta &= \hat{A}_{II} \Theta = \hat{A}_{II} [(\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Psi_{n,I}] \\ &= [\hat{A}_{II} \circ (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1})] \Psi_{n,I} \\ &= [\hat{A}_{II} \circ (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1})] \sum_M \Phi_{n,M} \\ &= \sum_M \hat{A}_{II} \circ (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M} \\ &= \sum_M \alpha_{M,II} (\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M} \end{aligned}$$

jetzt notwendig

$$(\hat{A}_I - \alpha_{n,I} \cdot \hat{1}) \Phi_{n,M} = \hat{0}$$

für alle M . Da die Zustände $\Psi_{n,I}$ vollständig sind, sind die Zustände $\Phi_{n,M}$ ebenfalls vollständig. Es gibt demnach ein vollständiges System von Eigenzuständen $\Phi_{n,M}$

mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned}\hat{A}_I \Phi_{n,M} &= \alpha_{n,I} \Phi_{n,M} \\ \hat{A}_{II} \Phi_{n,M} &= \alpha_{n,II} \Phi_{n,M},\end{aligned}$$

was zu zeigen war.

Ein linearer Operator \hat{U} auf dem Hilbert-Raum heißt **unitär**, wenn der zu \hat{U} adjungierte Operator \hat{U}^\dagger der folgenden Bedingung genügt:

$$\hat{U}^\dagger \circ \hat{U} = \hat{1} = \hat{U} \circ \hat{U}^\dagger.$$

Die Relation impliziert

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

und weiter

$$(\hat{U}^\dagger)^\dagger = (\hat{U}^\dagger)^{-1} = (\hat{U}^{-1})^{-1} = \hat{U}.$$

Unitäre Operatoren lassen für alle Paare von Elementen $\Psi, \Phi \in \mathcal{H}$ das Skalarprodukt invariant:

$$\langle \hat{U}\Phi, \hat{U}\Psi \rangle = \langle \Phi, \hat{U}^\dagger \circ \hat{U}\Psi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle.$$

Aufgrund dieser Eigenschaft spielen unitäre Operatoren in der Quantenmechanik eine zentrale Rolle!

Im Ring der Operatoren $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$ können wir Polynome und formale Potenzreihen betrachten. Sei $\hat{B} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$, dann ist auch $\hat{B}^n = \underbrace{\hat{B} \circ \hat{B} \circ \dots \circ \hat{B}}_{n\text{-mal}} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$. Ebenfalls

ist für Zahlen $p_n \in \mathbb{C}$ für $n = 0, 1, \dots, N$ das Polynom N -ten Grades $P_N(\hat{B}) = \sum_{n=0}^N p_n \cdot \hat{B}^n \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$. Für $N \rightarrow \infty$ handelt es sich um eine (formale) Potenzreihe. Das Exponential eines Operators $\hat{B} \in \mathcal{R}[\mathcal{H}]$ ist definiert zu

$$\begin{aligned}\exp(\hat{B}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \hat{B}^n \\ \hat{B}^0 &= \hat{1}.\end{aligned}$$

Wir zeigen jetzt

$$\begin{aligned}
\exp(c_I \cdot \hat{B}) \circ \exp(c_{II} \cdot \hat{B}) &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot (c_I \cdot \hat{B})^n \right) \circ \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot (c_{II} \cdot \hat{B})^n \right) \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^j \frac{1}{j!} \frac{1}{(j-l)!} \cdot (c_I \cdot \hat{B})^l \circ (c_{II} \cdot \hat{B})^{j-l} \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \sum_{l=0}^j \frac{j!}{l!(j-l)!} \cdot (c_I \cdot \hat{B})^l \circ (c_{II} \cdot \hat{B})^{j-l} \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \cdot (c_I \cdot \hat{B} + c_{II} \cdot \hat{B})^j \\
&= \exp(c_I \cdot \hat{B} + c_{II} \cdot \hat{B}).
\end{aligned}$$

Für $c_I = 1$ und $c_{II} = -1$ folgt

$$\begin{aligned}
\exp(\hat{B}) \circ \exp(-\hat{B}) &= \hat{1} \\
[\exp(\hat{B})]^{-1} &= \exp(-\hat{B}).
\end{aligned}$$

Das Exponential eines schiefhermiteschen Operators \hat{C} ist unitär. Wegen

$$\hat{C}^\dagger = -\hat{C}$$

folgt nämlich

$$\begin{aligned}
[\exp(\hat{C})]^\dagger &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \hat{C}^n \right]^\dagger \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot (\hat{C}^n)^\dagger \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot (\hat{C}^\dagger)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot (-\hat{C})^n \\
&= \exp(-\hat{C}) \\
&= [\exp(\hat{C})]^{-1}.
\end{aligned}$$

Der Zeitentwicklungsoperator $\exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t)$ der Quantenmechanik ist unitär, da der Operator $\frac{i}{\hbar} \hat{H}t$ für $t \in \mathbb{R}$ schiefhermitesch ist:

$$\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \right]^\dagger = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \right]^{-1} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right).$$

Die Norm des Zustands

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_A \\ \langle\psi_A, \psi_A\rangle &= 1\end{aligned}$$

ist gleich Eins:

$$\begin{aligned}\|\Psi(t)\|^2 &= \langle\Psi(t), \Psi(t)\rangle \\ &= \left\langle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_A, \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_A \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_A, \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\right]^\dagger \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_A \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_A, \underbrace{\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\right]^{-1} \circ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)}_{=1} \psi_A \right\rangle \\ &= \langle\psi_A, \psi_A\rangle = 1.\end{aligned}$$

Die Betrachtung verdeutlicht die Bedeutung unitärer Operatoren für die Quantenmechanik!

Ferner gilt: Ist \hat{U} unitär und ist \hat{A} hermitesch, so ist $\hat{U} \circ \hat{A} \circ \hat{U}^\dagger$ ebenfalls hermitesch:

$$\left(\hat{U} \circ \hat{A} \circ \hat{U}^\dagger\right)^\dagger = \hat{U} \circ \hat{A} \circ \hat{U}^\dagger.$$

Ebenso zeigt man: das Produkt zweier unitärer Operatoren $\hat{U}_I \circ \hat{U}_{II}$ ist unitär:

$$\begin{aligned}\langle\hat{U}_I \circ \hat{U}_{II}\Phi, \hat{U}_I \circ \hat{U}_{II}\Psi\rangle &= \langle\hat{U}_{II}\Phi, \hat{U}_I^\dagger \circ \hat{U}_I \circ \hat{U}_{II}\Psi\rangle \\ &= \langle\hat{U}_{II}\Phi, \hat{U}_{II}\Psi\rangle \\ &= \langle\Phi, \hat{U}_{II}^\dagger \circ \hat{U}_{II}\Psi\rangle \\ &= \langle\Phi, \Psi\rangle.\end{aligned}$$

13 Drehimpulsoperator in der Quantenmechanik

Schon vor der Formulierung der modernen Quantenmechanik hatte Niels Bohr herausgefunden, dass zur Erklärung der Atomspektren eine Beschränkung des Wertevorrats des klassischen Drehimpulses eines Elektrons auf bestimmte Vielfache des Planckschen Wirkungsquants \hbar zwingend erforderlich ist. Die Quantenmechanik **begründet** und verallgemeinert die Bohrschen Überlegungen und gibt dem **Drehimpulsoperator** in der Quantenmechanik eine gesicherte mathematische Basis mittels der Darstellungstheorie für die **Drehgruppe** $SO(3)$ im Hilbert Raum.

In der Quantenmechanik hat der Drehimpuls eine direkte Beziehung zu räumlichen Drehungen. Eine Drehung $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ ist zunächst einmal eine klassische **Euklidische Symmetrie**, die durch einen Einheitsvektor \mathbf{n} als Richtung der **Drehachse**, einen **Drehwinkel** α um die Achse \mathbf{n} sowie einen **Drehsinn** (z.B. rechte Hand Regel) spezifiziert ist. Ein Vektor \mathbf{r} im euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^3 wird durch eine (aktive) Drehung $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ in einen entsprechenden Vektor \mathbf{r}' *gleicher* Länge überführt, d.h.

$$|\mathbf{r}'|^2 = |\mathbf{r}|^2. \quad (13.1)$$

Dabei bleibt die zu \mathbf{n} parallele Komponente von \mathbf{r} unter der Drehung invariant,

$$\mathbf{r}'_{\parallel} = \mathbf{r}_{\parallel} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n},$$

während die zu \mathbf{n} senkrechte Komponente von \mathbf{r} ,

$$\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_{\parallel}$$

nach der Drehung übergeht in

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'_{\perp} &= \mathbf{r}_{\perp} \cos(\alpha) + \mathbf{n} \wedge \mathbf{r} \sin(\alpha) \\ \mathbf{r}' &= \cos(\alpha) \mathbf{r} + [1 - \cos(\alpha)] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n} + \mathbf{n} \wedge \mathbf{r} \sin(\alpha). \end{aligned}$$

Hier ist

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) = \langle \mathbf{n}, \mathbf{r} \rangle = n_x r_x + n_y r_y + n_z r_z$$

das euklidische Skalarprodukt im Vektorraum \mathbb{R}^3 , und $\mathbf{n} \wedge \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ ist ein Vektor im Sinne des Kreuzprodukts, der bekanntlich sowohl zu \mathbf{n} als auch zu \mathbf{r} orthogonal

13 Drehimpulsoperator in der QM

ist:

$$\begin{aligned}(\mathbf{n} \wedge \mathbf{r})_a &= \varepsilon_{abc} n_b r_c = \mathcal{N}_{ac} r_c \\ \mathcal{N}_{ac} &= \varepsilon_{abc} n_b \\ \mathbf{n} \wedge \mathbf{r} &= \mathcal{N} \mathbf{r}.\end{aligned}$$

Es ist demnach \mathcal{N} eine reelle antisymmetrische 3×3 Matrix:

$$\mathcal{N} = \begin{bmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{bmatrix}. \quad (13.2)$$

Somit lässt sich jede Drehung $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ als eine reelle 3×3 Matrix darstellen, die Vektoren $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ auf Vektoren $\mathbf{r}' \in \mathbb{R}^3$ abbildet:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}' &= \cos(\alpha) \mathbf{r} + [1 - \cos(\alpha)] (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n} + \mathbf{n} \wedge \mathbf{r} \sin(\alpha) \\ &= [\mathbf{1} + \sin(\alpha) \mathcal{N} + [1 - \cos(\alpha)] \mathcal{N} \circ \mathcal{N}] \mathbf{r}\end{aligned} \quad (13.3)$$

$$\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) = \mathbf{1} + \sin(\alpha) \mathcal{N} + [1 - \cos(\alpha)] \mathcal{N} \circ \mathcal{N}.$$

Die in Gl. (13.2) definierte, dem Einheitsvektor \mathbf{n} zugeordnete reelle antisymmetrische 3×3 Matrix \mathcal{N} besitzt die Eigenschaft

$$\begin{aligned}\mathcal{N}^T &= -\mathcal{N} \\ \mathcal{N}^3 &= \mathcal{N} \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{N} = -\mathcal{N} \\ \mathcal{N}^4 &= -\mathcal{N}^2.\end{aligned}$$

Dann kann $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ elegant als Exponentialreihe dargestellt werden:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) &= \mathbf{1} + [1 - \cos(\alpha)] \mathcal{N}^2 + \sin(\alpha) \mathcal{N} \\ &= \mathbf{1} + \underbrace{\sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha^{2m}}{(2m)!} (-)^{m-1} \mathcal{N}^2}_{=1-\cos(\alpha)} + \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2m+1}}{(2m+1)!} (-)^m \mathcal{N}}_{\sin(\alpha)} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2m}}{(2m)!} \mathcal{N}^{2m} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2m+1}}{(2m+1)!} \mathcal{N}^{2m+1} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\alpha^j}{j!} \mathcal{N}^j \\ &= \exp(\alpha \mathcal{N}).\end{aligned} \quad (13.4)$$

Offensichtlich gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n}) &\equiv [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]^T = [\exp(\alpha \mathcal{N})]^T \\ &= \exp(\alpha \mathcal{N}^T) = \exp(-\alpha \mathcal{N}) = [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]^{-1},\end{aligned} \quad (13.5)$$

d.h. $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ ist eine **orthogonale** 3×3 Matrix über dem Körper der reellen Zahlen:

$$\mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n}) \circ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) = \mathbf{1} = \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \circ \mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n}).$$

Das Skalarprodukt und das Vektorprodukt zweier Vektoren $\mathbf{r}_I, \mathbf{r}_{II} \in \mathbb{R}^3$ ist unter Drehungen **invariant**:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_I, \mathbf{r}_{II} \rangle &= \langle \mathbf{r}'_I, \mathbf{r}'_{II} \rangle = \langle \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_I, \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_{II} \rangle & (13.6) \\ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) (\mathbf{r}_I \wedge \mathbf{r}_{II}) &= \mathbf{r}'_I \wedge \mathbf{r}'_{II} = [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_I] \wedge [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_{II}]. \end{aligned}$$

Die Eigenvektoren von $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ lassen sich durch zwei Einheitsvektoren \mathbf{m}_I und \mathbf{m}_{II} darstellen, die beide sowohl zueinander als auch zur Drehachse \mathbf{n} orthogonal sind, wobei $\{\mathbf{n}, \mathbf{m}_I, \mathbf{m}_{II}\}$ ein rechtshändiges orthogonales Dreibein bilden. Es gilt, wie man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}) &= -i(\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}) & (13.7) \\ \mathcal{N}(\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}) &= i(\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}) \\ \mathcal{N}\mathbf{n} &= \mathbf{0} = 0\mathbf{n}. \end{aligned}$$

Damit sind $\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}$, $\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}$ und \mathbf{n} als die Eigenvektoren der Drehmatrix $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ zu den Eigenwerten $-i, i$ und 0 identifiziert. Die Drehmatrix

$$\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) = \exp(\alpha\mathcal{N}) \quad (13.8)$$

hat demnach die Eigenwerte $\{e^{-i\alpha}, e^{i\alpha}, 1\}$ und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) (\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}) &= \exp(\alpha\mathcal{N}) (\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}) = e^{-i\alpha} (\mathbf{m}_I + i\mathbf{m}_{II}) & (13.9) \\ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) (\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}) &= \exp(\alpha\mathcal{N}) (\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}) = e^{i\alpha} (\mathbf{m}_I - i\mathbf{m}_{II}) \\ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{n} &= \exp(\alpha\mathcal{N}) \mathbf{n} = \mathbf{n}. \end{aligned}$$

Die Spur und die Determinante einer Drehmatrix sind folglich gegeben zu:

$$\begin{aligned} \text{tr}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] &= e^{-i\alpha} + e^{i\alpha} + 1 = 1 + 2 \cos(\alpha) & (13.10) \\ -1 &\leq \text{tr}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \leq 3 \\ \det[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] &= e^{-i\alpha} \cdot e^{i\alpha} \cdot 1 = 1. \end{aligned}$$

Die Gesamtheit aller Drehmatrizen $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ bildet die **spezielle orthogonale Gruppe** $SO(3)$. Die Gruppe heißt *speziell*, weil $\det[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] = 1$. Sie ist eine Untergruppe der Gruppe $O(3)$ der orthogonalen Transformationen im euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^3 , die neben den Drehoperationen auch noch Spiegelungen als Elemente enthält.

13 Drehimpulsoperator in der QM

Für jeden Drehwinkel α und jede Drehachse \mathbf{n} mit

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^2 &= (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 \\ 0 &\leq \alpha < \pi \end{aligned}$$

existiert genau ein Element $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ der Drehgruppe $SO(3)$. Für einen Drehwinkel $\alpha = \pi$ sind die Drehungen $\mathcal{R}(\pi, \mathbf{n})$ und $\mathcal{R}(\pi, -\mathbf{n})$ identisch in ihrer Wirkung auf einen Vektor $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$. Die Elemente der Drehgruppe $SO(3)$ entsprechen somit den Punkten einer *Vollkugel* mit Radius π , bei der diametral gegenüberliegende Punkte der *Kugeloberfläche* identifiziert werden. Diese Eigenschaft impliziert, dass die $SO(3)$ **zweifach zusammenhängend** ist. Es gibt in der Tat zwei nicht äquivalente stetige Pfade, um von einem fixen Element $\mathcal{R}(\alpha_A, \mathbf{n}_A)$ zu einem zweiten Element $\mathcal{R}(\alpha_B, \mathbf{n}_B)$ zu gelangen. Der erste Pfad liegt völlig im Inneren der Kugel, der zweite Pfad geht von $\mathcal{R}(\alpha_A, \mathbf{n}_A)$ zunächst zu einem Punkt der Oberfläche und setzt dann am **diametral** gegenüberliegenden Punkt seine Reise zum Ziel $\mathcal{R}(\alpha_B, \mathbf{n}_B)$ fort. Die beiden beschriebenen Pfade lassen sich **nicht** stetig ineinander deformieren!

Drehoperationen $\mathcal{R}(\alpha_I, \mathbf{n})$ und $\mathcal{R}(\alpha_{II}, \mathbf{n})$ um die *gleiche* Drehachse \mathbf{n} kommutieren und bilden eine abelsche Untergruppe. Drehoperationen um *verschiedene* Drehachsen vertauschen in der Regel **nicht**. Die Abb. 13.1 verdeutlicht, dass es z.B. einen Unterschied macht, ob man ein Parallelepiped erst um die z -Achse und anschließend um die y -Achse, oder erst um die y -Achse und dann um die z -Achse jeweils um 90° dreht:

$$\mathcal{R}\left(\frac{\pi}{2}, \mathbf{e}_y\right) \circ \mathcal{R}\left(\frac{\pi}{2}, \mathbf{e}_z\right) \neq \mathcal{R}\left(\frac{\pi}{2}, \mathbf{e}_z\right) \circ \mathcal{R}\left(\frac{\pi}{2}, \mathbf{e}_y\right).$$

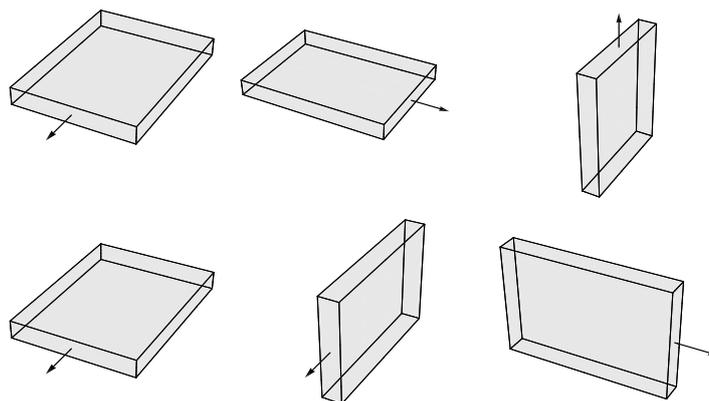


Abbildung 13.1:

Sind zwei unterschiedlich orientierte Drehachsen \mathbf{n} und \mathbf{n}' gegeben, so gibt es eine spezielle Drehoperation \mathcal{S} , die \mathbf{n} in \mathbf{n}' überführt:

$$\begin{aligned}\mathbf{n}' &= \mathcal{S}\mathbf{n} \\ \mathcal{N}' &= \mathcal{S} \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{S}^{-1} \\ \exp(\alpha\mathcal{N}') &= \exp(\mathcal{S} \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{S}^{-1}) \\ &= \mathcal{S} \circ \exp(\alpha\mathcal{N}) \circ \mathcal{S}^{-1}.\end{aligned}$$

Dann gilt für die Drehoperation $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ bzw. für $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}')$ mit einem **fest gewählten** Drehwinkel α um die Drehachse \mathbf{n} bzw. \mathbf{n}' die Relation

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}') &= \mathcal{S} \circ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \circ \mathcal{S}^{-1} \\ \mathcal{S} \circ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) &= \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}') \circ \mathcal{S}.\end{aligned}$$

Jeder orthogonalen Drehoperation $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$, die auf Vektoren \mathbf{r} des anschaulichen euklidischen Vektorraum \mathbb{R}^3 wirkt, wird in der Quantenmechanik ein **unitärer** Operator $\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]$ zugeordnet, der auf den Elementen Ψ (Zuständen) des Hilbert-Raum \mathcal{H} operiert:

$$\Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}_I, \mathbf{r}_{II}, \mathbf{r}'_I, \mathbf{r}'_{II} \in \mathbb{R}^3 \\ \\ \mathbf{r}'_I = \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_I \\ \mathbf{r}'_{II} = \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{r}_{II} \\ \\ \langle \mathbf{r}_I, \mathbf{r}_{II} \rangle \stackrel{\text{Invariante unter Drehung}}{=} \langle \mathbf{r}'_I, \mathbf{r}'_{II} \rangle \\ \\ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \circ \mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n}) = \mathbf{1} = \mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n}) \circ \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \end{array} \right\}$$

$$\Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \Psi_I, \Psi_{II}, \Psi'_I, \Psi'_{II} \in \mathcal{H} \\ \\ \Psi'_I = \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_I \\ \\ \Psi'_{II} = \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{II} \\ \\ \langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle = \langle \Psi'_I, \Psi'_{II} \rangle \\ \\ \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n})] = \hat{\mathbf{1}} = \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}^T(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \end{array} \right\}$$

Die Eigenschaft $\langle \Psi_I, \Psi_{II} \rangle = \langle \Psi'_I, \Psi'_{II} \rangle$ bringt zum Ausdruck, dass sich die Physik nicht ändern darf, wenn man z.B. von einem Koordinatensystem \mathcal{K} mit Basisvektoren $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ zu einem Koordinatensystem \mathcal{K}' übergeht, dessen Basisvektoren \mathbf{e}'_a

13 Drehimpulsoperator in der QM

gegenüber den Basisvektoren \mathbf{e}_a von \mathcal{K} lediglich gedreht wurden: $\mathbf{e}'_a = \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) \mathbf{e}_a$ für $a \in \{x, y, z\}$.

Jede Operation mit Elementen $\mathcal{R}_I, \mathcal{R}_{II}, \mathcal{R}_{III} \in SO(3)$ im Ring der komplexen 3×3 Matrizen besitzt ihre Entsprechung mit Elementen $\mathcal{D}[\mathcal{R}_I], \mathcal{D}[\mathcal{R}_{II}], \mathcal{D}[\mathcal{R}_{III}] \in \mathcal{D}[SO(3)]$ im Ring $\mathcal{R}[\mathcal{H}]$ der auf \mathcal{H} operierenden linearen Operatoren:

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{array}{l} c_I \cdot \mathcal{R}_I + c_{II} \cdot \mathcal{R}_{II} \\ = \mathcal{R}_{III} \end{array} \right\} &\Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} c_I \cdot \mathcal{D}[\mathcal{R}_I] + c_{II} \cdot \mathcal{D}[\mathcal{R}_{II}] \\ = \mathcal{D}[\mathcal{R}_{III}] \end{array} \right\} \\ \{\mathcal{R}_I \circ \mathcal{R}_{II} = \mathcal{R}_{III}\} &\Leftrightarrow \{\mathcal{D}[\mathcal{R}_I] \circ \mathcal{D}[\mathcal{R}_{II}] = \mathcal{D}[\mathcal{R}_{III}]\} \\ \left\{ \begin{array}{l} (\mathcal{R}_I \circ \mathcal{R}_{II}) \circ \mathcal{R}_{III} \\ = \mathcal{R}_I \circ (\mathcal{R}_{II} \circ \mathcal{R}_{III}) \end{array} \right\} &\Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} (\mathcal{D}[\mathcal{R}_I] \circ \mathcal{D}[\mathcal{R}_{II}]) \circ \mathcal{D}[\mathcal{R}_{III}] \\ = \mathcal{D}[\mathcal{R}_I] \circ (\mathcal{D}[\mathcal{R}_{II}] \circ \mathcal{D}[\mathcal{R}_{III}]) \end{array} \right\} \end{aligned}$$

Aufgrund der Überlegungen, die zu Gl. (13.8) führten, lässt sich jede 3×3 Rotationsmatrix $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ darstellen als

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) &= \exp(\alpha \mathcal{N}) \\ \mathcal{N} &= \begin{bmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Wir stellen jetzt \mathcal{N} als Linearkombination von drei linear unabhängigen schiefhermiteschen Matrizen $\mathcal{N}_x, \mathcal{N}_y$ und \mathcal{N}_z dar:

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= n_x \mathcal{N}_x + n_y \mathcal{N}_y + n_z \mathcal{N}_z \\ \mathcal{N}_x &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \mathcal{N}_y &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \mathcal{N}_z &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Die schiefhermiteschen 3×3 Matrizen $\mathcal{N}_x, \mathcal{N}_y$ und \mathcal{N}_z sind **Generatoren von Drehungen**. Sie genügen, wie man leicht nachrechnet, den Vertauschungsregeln:

$$[\mathcal{N}_a, \mathcal{N}_b] = \varepsilon_{abc} \mathcal{N}_c. \quad (13.11)$$

Beispiel:

$$\begin{aligned}
& [\mathcal{N}_x, \mathcal{N}_y] \\
&= \mathcal{N}_x \circ \mathcal{N}_y - \mathcal{N}_y \circ \mathcal{N}_x \\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \mathcal{N}_z.
\end{aligned}$$

Somit gilt

$$\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n}) = \exp[\alpha(n_x \mathcal{N}_x + n_y \mathcal{N}_y + n_z \mathcal{N}_z)]. \quad (13.12)$$

Die gefundene Darstellung für $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ legt es nahe, über die Zuordnung

$$\mathcal{N}_a \rightarrow \frac{1}{i\hbar} \hat{J}_a, \quad a \in \{x, y, z\} \quad (13.13)$$

die auf dem Hilbert-Raum \mathcal{H} operierenden unitären Operator $\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]$ entsprechend als Linearkombination von drei hermiteschen Generatoren $\frac{1}{i\hbar} \hat{J}_a$ darzustellen:

$$\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] = \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \alpha (n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z)\right]. \quad (13.14)$$

Die Operatoren $\frac{1}{i\hbar} \hat{J}_a$ sind **schiefhermitesch** und dimensionslos, anderenfalls könnte $\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]$ ja kein unitärer Operator sein. Die sog. **Drehimpulsoperatoren** \hat{J}_a sind folglich **hermitesch**, $\hat{J}_a = \hat{J}_a^\dagger$, und besitzen die physikalische Dimension einer Wirkung. Damit die Darstellung der Drehmatrizen $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ durch die unitären Operatoren $\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]$ **treu** ist, müssen für die Operatoren $\frac{1}{i\hbar} \hat{J}_a$ die gleichen Vertauschungsregeln Gl. (13.11) gelten wie für die Matrizen \mathcal{N}_a :

$$\left[\frac{1}{i\hbar} \hat{J}_a, \frac{1}{i\hbar} \hat{J}_b\right] = \varepsilon_{abc} \frac{1}{i\hbar} \hat{J}_c. \quad (13.15)$$

Nach Multiplikation von Gl. (13.15) mit $(i\hbar)^2$ auf beiden Seiten folgen die Vertauschungsregeln:

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{J}_c. \quad (13.16)$$

13 Drehimpulsoperator in der QM

Es folgt hieraus für das Quadrat des Drehimpulsoperators, den sog. **Casimir-Operator**,

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad (13.17)$$

die wichtige Eigenschaft

$$[\hat{J}_a, \hat{\mathbf{J}}^2] = \hat{0}. \quad (13.18)$$

Eine Linearkombination von \hat{J}_x , \hat{J}_y und \hat{J}_z der Form

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \sum_{a \in \{x,y,z\}} n_a \hat{J}_a$$

vertauscht folglich für jeden konstanten Vektor \mathbf{n} ebenfalls mit $\hat{\mathbf{J}}^2$:

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{J}}^2] = \hat{0}.$$

Nach den Ausführungen von Kapitel 12 existiert für kommutierende hermitesche Operatoren immer ein vollständiger Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen. Wir wählen jetzt $n_x = 0$, $n_y = 0$, $n_z = 1$ und betrachten *einen* Eigenzustand $\Psi_{j,m} \in \mathcal{H}$ von $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_z mit der Eigenschaft

$$\hat{J}_z \Psi_{j,m} = \hbar m \Psi_{j,m} \quad (13.19)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \Psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1) \Psi_{j,m}$$

$$\langle \Psi_{j,m}, \Psi_{j,m} \rangle = 1. \quad (13.20)$$

Über die Eigenwerte $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ von $\hat{\mathbf{J}}^2$ und $\mu = \hbar m$ zum Zustand $\Psi_{j,m}$ ist vorerst nur bekannt, dass es reelle Zahlen sind, denn \hat{J}_z und $\hat{\mathbf{J}}^2$ sind hermitesche Operatoren. Zudem kann λ als Eigenwert einer Summe von Quadraten von hermiteschen Operatoren nicht negativ sein, d.h. es ist $\lambda \geq 0$.

Wir definieren zwei Operatoren

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad (13.21)$$

und stellen fest:

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_- \quad (13.22)$$

$$\hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+.$$

Es gilt insbesondere:

$$\hat{J}_+ \circ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \cdot \hat{J}_z = \hat{J}^2 - (\hat{J}_z - \hbar \cdot \hat{1}) \circ \hat{J}_z \quad (13.23)$$

$$\hat{J}_- \circ \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \cdot \hat{J}_z = \hat{J}^2 - (\hat{J}_z + \hbar \cdot \hat{1}) \circ \hat{J}_z.$$

Daraus folgt

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \cdot \hat{J}_z. \quad (13.24)$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [J_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] \\ &= \hbar \cdot (i\hat{J}_y \pm \hat{J}_x) \\ &= \pm\hbar \cdot \hat{J}_\pm. \end{aligned} \quad (13.25)$$

Wir finden somit

$$\hat{J}_z \circ \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \circ \hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}) \quad (13.26)$$

und entsprechend:

$$\begin{aligned} \hat{J}_z^2 \circ \hat{J}_\pm &= \hat{J}_z \circ (\hat{J}_z \circ \hat{J}_\pm) \\ &= \hat{J}_z \circ (\hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1})) \\ &= (\hat{J}_z \circ \hat{J}_\pm) \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}) \\ &= (\hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1})) \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}) \\ &= \hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}) \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}) \\ &= \hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1})^2. \end{aligned}$$

Allgemein für $n \in \mathbb{N}$:

$$\hat{J}_z^n \circ \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \circ (\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1})^n. \quad (13.27)$$

Für ein Polynom

$$P(\hat{J}_z) = \sum_{n=0}^N p_n \hat{J}_z^n$$

folgt somit:

$$P(\hat{J}_z) \circ \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \circ P(\hat{J}_z \pm \hbar \cdot \hat{1}). \quad (13.28)$$

Mit der quadratischen Form

$$Q(x, y) = x^2 - (y - \hbar) \cdot y \quad (13.29)$$

gilt nach (13.23)

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \circ \hat{J}_- &= Q(\hat{J}^2, \hat{J}_z) \\ \hat{J}_- \circ \hat{J}_+ &= Q(\hat{J}^2, -\hat{J}_z). \end{aligned} \quad (13.30)$$

13 Drehimpulsoperator in der QM

Wir erhalten dann unter Beachtung von (13.28)

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_+^n \circ \hat{J}_-^n &= \hat{J}_+^{n-1} \circ (\hat{J}_+ \circ \hat{J}_-) \circ \hat{J}_-^{n-1} = \hat{J}_+^{n-1} Q(\hat{J}^2, J_z) \hat{J}_-^{n-1} \\
 &= \hat{J}_+^{n-1} \circ Q(\hat{J}^2, J_z) \circ \hat{J}_- \circ \hat{J}_-^{n-1} = \hat{J}_+^{n-1} \circ \hat{J}_- \circ \hat{Q}(\hat{J}^2, \hat{J}_z - \hbar \hat{1}) \circ \hat{J}_-^{n-1} \\
 &= \hat{J}_+^{n-1} \circ \hat{J}_-^{n-1} \circ Q(\hat{J}^2, \hat{J}_z - \hbar n \cdot \hat{1}).
 \end{aligned} \tag{13.31}$$

Entsprechend zeigen wir

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_-^n \circ \hat{J}_+^n &= \hat{J}_-^{n-1} \circ (\hat{J}_- \circ \hat{J}_+) \circ \hat{J}_+^{n-1} = \hat{J}_-^{n-1} \circ \hat{Q}(\hat{J}^2, -\hat{J}_z) \hat{J}_+^{n-1} \\
 &= \hat{J}_-^{n-1} \circ \hat{J}_+^{n-1} \hat{Q}(\hat{J}^2, -\hat{J}_z - \hbar n \cdot \hat{1}).
 \end{aligned} \tag{13.32}$$

Dies ist eine Rekursion für $\hat{J}_+^n \circ \hat{J}_-^n$ bzw. $\hat{J}_-^n \circ \hat{J}_+^n$ mit der Lösung

$$\hat{J}_+^n \circ \hat{J}_-^n = \prod_{k=1}^n Q(\hat{J}^2, \hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{1}) \tag{13.33}$$

$$\hat{J}_-^n \circ \hat{J}_+^n = \prod_{k=1}^n Q(\hat{J}^2, -\hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{1}). \tag{13.34}$$

Da \hat{J}_z und \hat{J}^2 vertauschen, spielt die Reihenfolge der Faktoren $Q(\hat{J}^2, \pm \hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{1})$ für $k = 1, 2, \dots, n$ keine Rolle.

Die Bestimmung der Eigenwerte von \hat{J}^2 und \hat{J}_z beruht auf einer Überlegung, die schon beim harmonischen Oszillator angewandt wurde. Wir betrachten zuerst den Zustand $\hat{J}_-^n \Psi_{j,m}$. Dann ist

$$\begin{aligned}
 0 &\leq \|\hat{J}_-^n \Psi_{j,m}\|^2 \\
 &= \langle \hat{J}_-^n \Psi_{j,m}, \hat{J}_-^n \Psi_{j,m} \rangle \\
 &= \langle \hat{J}_- \circ \hat{J}_-^{n-1} \Psi_{j,m}, \hat{J}_-^n \Psi_{j,m} \rangle \\
 &= \langle \hat{J}_-^{n-1} \Psi_{j,m}, \hat{J}_-^\dagger \circ \hat{J}_-^n \Psi_{j,m} \rangle \\
 &= \langle \hat{J}_-^{n-1} \Psi_{j,m}, \hat{J}_+ \circ \hat{J}_-^n \Psi_{j,m} \rangle \\
 &\quad \vdots \\
 &= \langle \Psi_{j,m}, \hat{J}_+^n \circ \hat{J}_-^n \Psi_{j,m} \rangle \\
 &= \left\langle \Psi_{j,m}, \prod_{k=1}^n Q(\hat{J}^2, \hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{1}) \Psi_{j,m} \right\rangle.
 \end{aligned} \tag{13.35}$$

Da $\Psi_{j,m}$ gleichzeitig Eigenfunktion von \hat{J}^2 und \hat{J}_z ist, folgt

$$\begin{aligned}
 Q(\hat{J}^2, \hat{J}_z) \Psi_{j,m} &= [\hat{J}^2 - (\hat{J}_z - \hbar \cdot \hat{1}) \circ \hat{J}_z] \Psi_{j,m} \\
 &= \hbar^2 [j(j+1) - (m-1)m] \Psi_{j,m}.
 \end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned}
0 &\leq \|\hat{J}_-^n \Psi_{j,m}\|^2 && (13.36) \\
&= \left\langle \Psi_{j,m}, \prod_{k=1}^n Q(\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{\mathbf{1}}) \Psi_{j,m} \right\rangle \\
&= \left\langle \Psi_{j,m}, \prod_{k=1}^n \hbar^2 [j(j+1) - (m-k-1)(m-k)] \Psi_{j,m} \right\rangle \\
&= \underbrace{\langle \Psi_{j,m}, \Psi_{j,m} \rangle}_{=1} \underbrace{\prod_{k=1}^n \hbar^2 [j(j+1) - (m-k-1)(m-k)]}_{\geq 0}.
\end{aligned}$$

Entsprechend zeigen wir

$$\begin{aligned}
0 &\leq \|\hat{J}_+^n \Psi_{j,m}\|^2 && (13.37) \\
&= \langle \hat{J}_+^n \Psi_{j,m}, \hat{J}_+^n \Psi_{j,m} \rangle \\
&\vdots \\
&= \langle \Psi_{j,m}, \hat{J}_-^n \circ \hat{J}_+^n \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \left\langle \Psi_{j,m}, \prod_{k=1}^n Q(\hat{\mathbf{J}}^2, -\hat{J}_z - \hbar k \cdot \hat{\mathbf{1}}) \Psi_{j,m} \right\rangle \\
&= \left\langle \Psi_{j,m}, \prod_{k=1}^n \hbar^2 [j(j+1) - (m+k+1)(m+k)] \Psi_{j,m} \right\rangle \\
&= \underbrace{\langle \Psi_{j,m}, \Psi_{j,m} \rangle}_{=1} \underbrace{\prod_{k=1}^n \hbar^2 [j(j+1) - (m+k+1)(m+k)]}_{\geq 0}.
\end{aligned}$$

Die Norm von $\hat{J}_\pm^n \Psi_{j,m}$ kann nie eine negative Zahl sein! Folglich muss die wiederholte Anwendung von \hat{J}_- bzw. \hat{J}_+ auf den fest gewählten Zustand $\Psi_{j,m}$ nach einer *endlichen* Anzahl von Schritten terminieren. Es gibt demnach positive ganze Zahlen $k = n_+ \geq 1$ bzw. $k = n_- \geq 1$ für die in den Ausdrücken Gl. (13.36) und Gl. (13.37) das Gleichheitszeichen angenommen wird:

Es gilt zum einen

$$j(j+1) = (m+n_++1)(m+n_+) \quad (13.38)$$

und zum anderen

$$j(j+1) = (-j)(-j-1) = (m-n_- - 1)(m-n_-). \quad (13.39)$$

13 Drehimpulsoperator in der QM

Demnach ist

$$j = m + n_+ \quad (13.40)$$

eine Lösung von (13.38) und

$$-j = m - n_- \quad (13.41)$$

ist eine Lösung von (13.39). Die möglichen Lösungen für j , die beide Terminierungsbedingungen (13.38) und (13.39) erfüllen, sind demnach zu

$$2j = n_+ + n_- \quad (13.42)$$

gegeben, d.h. es ist $2j$ eine **nicht negative ganze Zahl**! Der Wertevorrat der Quantenzahlen j ist gleich der Menge aller Vielfachen von $\frac{1}{2}$, das bedeutet $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$. Nach dem Gesagten kann der Drehimpuls in der Quantenmechanik ein **halbzahliges** Vielfaches von \hbar sein!

Somit folgt aus Gl. (13.40) und (13.41):

$$\begin{aligned} j - m &= n_+ \geq 0 \\ j + m &= n_- \geq 0, \end{aligned} \quad (13.43)$$

d.h. es unterscheidet sich m von j immer um eine **ganze Zahl**, wobei

$$-j \leq m \leq j. \quad (13.44)$$

Es gibt somit zu jeder Quantenzahl $j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots\}$ ein **Multiplett** von $2j + 1$ Quantenzahlen $m \in \{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\}$. Der Wert $m = 0$ kann nur angenommen werden, wenn j ganzzahlig ist!

Der Hilbert-Raum, in welchem der Drehimpuls als hermitescher Operator definiert ist, kann in orthogonale $(2j + 1)$ -dimensionale Unterräume zerlegt werden. Welche der Quantenzahlen j vorkommt, hängt vom betrachteten physikalischen Problem ab.

Unsere Überlegungen zeigen also, dass gilt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \Psi_{j,m} &= C_{j,m}^{(+)} \Psi_{j,m+1} \\ \hat{J}_- \Psi_{j,m} &= C_{j,m}^{(-)} \Psi_{j,m-1}. \end{aligned} \quad (13.45)$$

Insbesondere gilt für die Eckzustände $\Psi_{j,j}$ bzw. $\Psi_{j,-j}$ des Multipletts:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \Psi_{j,j} &= \Theta \\ \hat{J}_- \Psi_{j,-j} &= \Theta. \end{aligned} \quad (13.46)$$

Wir erhalten dann, wenn wir alle Zustände $\Psi_{j,m}$ auf Eins normieren:

$$\begin{aligned}
0 &\leq |C_{j,m}^{(+)}|^2 \\
&= |C_{j,m}^{(+)}|^2 \underbrace{\langle \Psi_{j,m+1}, \Psi_{j,m+1} \rangle}_{=1} \\
&= \langle C_{j,m}^{(+)} \Psi_{j,m+1}, C_{j,m}^{(+)} \Psi_{j,m+1} \rangle \\
&= \langle \hat{J}_+ \Psi_{j,m}, \hat{J}_+ \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, (\hat{J}_+)^{\dagger} \circ \hat{J}_+ \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, \hat{J}_- \circ \hat{J}_+ \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \cdot \hat{J}_z) \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \underbrace{\langle \Psi_{j,m}, \Psi_{j,m} \rangle}_{=1}
\end{aligned}$$

und entsprechend

$$\begin{aligned}
0 &\leq |C_{j,m}^{(-)}|^2 \\
&= |C_{j,m}^{(-)}|^2 \underbrace{\langle \Psi_{j,m-1}, \Psi_{j,m-1} \rangle}_{=1} \\
&= \langle C_{j,m}^{(-)} \Psi_{j,m-1}, C_{j,m}^{(-)} \Psi_{j,m-1} \rangle \\
&= \langle \hat{J}_- \Psi_{j,m}, \hat{J}_- \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, (\hat{J}_-)^{\dagger} \circ \hat{J}_- \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, \hat{J}_+ \circ \hat{J}_- \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \langle \Psi_{j,m}, (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \cdot \hat{J}_z) \Psi_{j,m} \rangle \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m(m-1)] \underbrace{\langle \Psi_{j,m}, \Psi_{j,m} \rangle}_{=1}.
\end{aligned}$$

Also gilt bis auf einen Phasenfaktor, den wir gleich Eins setzen wollen:

$$C_{j,m}^{(\pm)} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}. \quad (13.47)$$

Wir berechnen nun die Matrixelemente $[J_{\pm}^{(j)}]_{m',m}$ der Operatoren \hat{J}_{\pm} im $(2j+1)$ -dimensionalen Unterraum des zur Quantenzahl j zugehörigen Multipletts von

13 Drehimpulsoperator in der QM

Zuständen $\Psi_{j,m}$:

$$\begin{aligned}
 [J_+^{(j)}]_{m',m} &\equiv \langle \Psi_{j',m'}, \hat{J}_+ \Psi_{j,m} \rangle & (13.48) \\
 &= \langle \Psi_{j',m'}, C_{j,m}^{(+)} \Psi_{j,m+1} \rangle \\
 &= C_{j,m}^{(+)} \langle \Psi_{j',m'}, \Psi_{j,m+1} \rangle \\
 &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{j',j} \delta_{m',m+1} \\
 [J_-^{(j)}]_{m',m} &\equiv \langle \Psi_{j',m'}, \hat{J}_- \Psi_{j,m} \rangle \\
 &= \langle \Psi_{j',m'}, C_{j,m}^{(-)} \Psi_{j,m-1} \rangle \\
 &= C_{j,m}^{(-)} \langle \Psi_{j',m'}, \Psi_{j,m-1} \rangle \\
 &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{j',j} \delta_{m',m-1}.
 \end{aligned}$$

Für \hat{J}_z folgt entsprechend:

$$[J_z^{(j)}]_{m',m} = \langle \Psi_{j',m'}, \hat{J}_z \Psi_{j,m} \rangle = \hbar m \delta_{j',j} \delta_{m',m}. \quad (13.49)$$

Die Matrixelemente für die ursprünglichen Drehimpulsoperatoren \hat{J}_x, \hat{J}_y in der Basis $\Psi_{j,m}$ sind nun leicht über die Relation

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_x &= \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) & (13.50) \\
 \hat{J}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-).
 \end{aligned}$$

zu berechnen. Es müssen die Vertauschungsregeln Gl.(13.16) per constructionem auch für die sog. **Spinmatrizen** $[J_a^{(j)}]_{m',m}$ für $a \in \{x, y, z\}$ gelten, was man durch direktes Nachrechnen leicht bestätigt:

$$\sum_{-j \leq m' \leq j} \left([J_a^{(j)}]_{m_1, m'} [J_b^{(j)}]_{m', m_2} - [J_b^{(j)}]_{m_1, m'} [J_a^{(j)}]_{m', m_2} \right) = i \hbar \varepsilon_{abc} [J_c^{(j)}]_{m_1, m_2}.$$

Der **Spin** ist eine rein quantenmechanische Eigenschaft ohne klassische Entsprechung, die einen inneren Freiheitsgrad von Elementarteilchen beschreibt. Wellenfunktionen $\Psi(\mathbf{r}, t)$, wie wir sie bisher als Lösung der Schrödinger-Gleichung kennengelernt haben, sind *skalare* Funktionen, die aus einer einzigen Komponente bestehen, welche sich bei Drehungen des räumlichen Koordinatensystems nicht ändert. Man sagt auch, die von so einer Wellenfunktion beschriebenen Teilchen tragen Spin Null, d.h. $j = 0$. Dies entspricht der trivialen Darstellung: $J_a^{(j=0)} = 0$ für $a \in \{x, y, z\}$.

Schon 1924 führten Otto Stern und Walter Gerlach ihren berühmten Versuch (Nobelpreis 1943) durch, bei dem ein **ladungsneutraler** Teilchenstrahl von Silberatomen durch ein **inhomogenes Magnetfeld** geschickt wurde. Das Experiment ist so aufgebaut, dass die Wechselwirkung der magnetischen Momente der Atome im Strahl mit dem inhomogenen Magnetfeld eine Ablenkung proportional zur z -Komponente des magnetischen Moments der Atome ergibt. Letzteres sollte gemäß der klassischen Vorstellung kontinuierlich verteilte Werte annehmen, d.h. man erwartet eigentlich eine gleichmäßige Aufweitung des Strahls längs der z -Richtung. Im Experiment zeigt sich aber, dass der Strahl im Fall von Silber in **zwei** separate Teilstrahlen nach oben bzw. unten aufspaltet! Heute wissen wir, dass Silberatome effektiv einen Spin- $\frac{1}{2}$ haben, der vom ungepaarten Elektron in der äußeren Schale des Atoms herrührt, sodass das Atom ein effektives magnetisches Dipolmoment besitzt. Ein Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen wie das Elektron kennt aber nur zwei Einstellmöglichkeiten: Spin nach oben bzw. Spin nach unten.

Dem Spezialfall $j = \frac{1}{2}$ kommt in den Anwendungen der Quantenmechanik große Bedeutung zu, denn nicht nur Elektronen, sondern Elementarteilchen wie Proton, Neutron sowie alle Quarks und alle Leptonen sind Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen!

Aus Gl. (13.48) erhalten wir

$$\begin{aligned} \left[J_+^{(\frac{1}{2})} \right]_{m',m} &= \langle \Psi_{\frac{1}{2},m'}, \hat{J}_+ \Psi_{\frac{1}{2},m} \rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}} \\ \left[J_-^{(\frac{1}{2})} \right]_{m',m} &= \langle \Psi_{\frac{1}{2},m'}, \hat{J}_- \Psi_{\frac{1}{2},m} \rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}} \end{aligned}$$

und weiter:

$$\begin{aligned} \left[J_x^{(\frac{1}{2})} \right]_{m',m} &= \langle \Psi_{\frac{1}{2},m'}, \hat{J}_x \Psi_{\frac{1}{2},m} \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}} & (13.51) \\ \left[J_y^{(\frac{1}{2})} \right]_{m',m} &= \langle \Psi_{\frac{1}{2},m'}, \hat{J}_y \Psi_{\frac{1}{2},m} \rangle = \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}} \\ \left[J_z^{(\frac{1}{2})} \right]_{m',m} &= \langle \Psi_{\frac{1}{2},m'}, \hat{J}_z \Psi_{\frac{1}{2},m} \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}_{m',m \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}}. \end{aligned}$$

Der Fall $j = 1$ liefert eine dreidimensionale Matrixdarstellung für Spin-1. Aus

13 Drehimpulsoperator in der QM

Gl. (13.48) und Gl. (13.50) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 [J_x^{(1)}]_{m',m} &= \langle \Psi_{1,m'}, \hat{J}_x \Psi_{1,m} \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{1,0,-1\}} \\
 [J_y^{(1)}]_{m',m} &= \langle \Psi_{1,m'}, \hat{J}_y \Psi_{1,m} \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}_{m',m \in \{1,0,-1\}} \\
 [J_z^{(1)}]_{m',m} &= \langle \Psi_{1,m'}, \hat{J}_z \Psi_{1,m} \rangle = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}_{m',m \in \{1,0,-1\}}.
 \end{aligned} \tag{13.52}$$

Die Darstellungsmatrizen $J_a^{(1)}$ werden in der Kernphysik zur Beschreibung des Deuterons (schwerer Wasserstoffkern mit Spin 1), und in der Quantenoptik zur Beschreibung der Polarisationszustände des Photons verwendet. Wir wollen auf weiterführende Einzelheiten an dieser Stelle nicht eingehen und verweisen auf die Literatur.

Vom Elektron weiß man aus Experimenten, dass es einen intrinsischen Drehimpuls mit **zwei** Einstellmöglichkeiten besitzt (Spin- $\frac{1}{2}$). Wolfgang Pauli erkannte als erster die Eignung der Matrizen

$$\begin{aligned}
 [S_a]_{m',m} &\equiv [J_a^{(\frac{1}{2})}]_{m',m} = \frac{\hbar}{2} [\sigma_a]_{m',m} \\
 a &\in \{x, y, z\}
 \end{aligned} \tag{13.53}$$

zur Beschreibung des **Spin** des Elektrons, als er 1927 die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Elektrons mit einem äußeren Magnetfeld in den Formalismus der Schrödinger-Gleichung einführte.

Die in Gl. (13.51) auftretenden 2×2 Matrizen heißen **Pauli-Spinmatrizen**:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Sie befolgen für $a, b, c \in \{x, y, z\}$ die nützlichen Regeln

$$\begin{aligned}
 \sigma_a \circ \sigma_b &= \delta_{a,b} \sigma_0 + i \varepsilon_{abc} \sigma_c \\
 [\sigma_a, \sigma_b] &= \sigma_a \circ \sigma_b - \sigma_b \circ \sigma_a = 2i \varepsilon_{abc} \sigma_c \\
 \{\sigma_a, \sigma_b\} &= \sigma_a \circ \sigma_b + \sigma_b \circ \sigma_a = 2\delta_{a,b} \sigma_0,
 \end{aligned} \tag{13.54}$$

was leicht nachzurechnen ist. Es gibt einen Isomorphismus zwischen Pauli-Spinmatrizen und dem Zahlkörper der **Quaternionen**, die von W.R. Hamilton im Jahr 1847 eigens zum Zweck der Beschreibung von Drehungen eingeführt wurden.

Die Spinmatrizen $S_a = \frac{\hbar}{2}\sigma_a$ genügen für $a \in \{x, y, z\}$ aufgrund ihrer Eigenschaft, spezielle Darstellungen des Drehimpulsoperators für $j = \frac{1}{2}$ zu sein, den Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} [S_a, S_b] &= i\hbar\varepsilon_{abc}S_c \\ [S_a, S^2] &= 0. \end{aligned} \quad (13.55)$$

Es gilt für Spin- $\frac{1}{2}$:

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \sigma_0. \quad (13.56)$$

Zustände mit Spin- $\frac{1}{2}$ besitzen zwei Einstellmöglichkeiten:

$$\begin{aligned} Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |+\rangle \\ Y_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |-\rangle. \end{aligned} \quad (13.57)$$

Die Zustände $|+\rangle$, $|-\rangle$ sind die Eigenfunktionen von S^2 und S_z , wie man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned} S_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |-\rangle. \end{aligned}$$

Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen wie Elektron, Proton, Neutron besitzen ein **magnetisches Dipolmoment \mathbf{M}** , das proportional zum Spin ist:

$$M_a = \gamma S_a. \quad (13.58)$$

Die Proportionalitätskonstante γ heißt **gyromagnetisches Verhältnis**. Dieses setzt sich aus der Elementarladung $|e|$ und der Masse der Teilchen zusammen:

$$\begin{aligned} \text{Elektron: } \gamma_e &= 2.002319314 \cdot \frac{-|e|\hbar}{2m_e} \\ \text{Proton: } \gamma_p &= 5.5883 \cdot \frac{|e|\hbar}{2m_N} \\ \text{Neutron: } \gamma_n &= -3.8263 \cdot \frac{|e|\hbar}{2m_N}. \end{aligned} \quad (13.59)$$

Für Elektronen stimmt der Messwert mit der theoretischen Vorhersage aus der Quantenelektrodynamik (QED) in **allen** angegebenen Stellen überein!

13 Drehimpulsoperator in der QM

Im äußeren Magnetfeld $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ hat ein magnetischer Dipol \mathbf{M} die Energie

$$-\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}. \quad (13.60)$$

Wolfgang Pauli hat die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung um diesen Term ergänzt und vorgeschlagen, als Hamilton-Operator für ein Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen der Masse m im Potential $V(\mathbf{r})$ eine 2×2 -Matrix zu definieren:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) - \frac{\gamma\hbar}{2} \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) - \frac{\gamma\hbar}{2} B_z(\hat{\mathbf{r}}) & -\frac{\gamma\hbar}{2} [B_x(\hat{\mathbf{r}}) - iB_y(\hat{\mathbf{r}})] \\ -\frac{\gamma\hbar}{2} [B_x(\hat{\mathbf{r}}) + iB_y(\hat{\mathbf{r}})] & \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) + \frac{\gamma\hbar}{2} B_z(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13.61)$$

Die Ortswellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ für ein Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen ist nun eine Linearkombination von $|+\rangle$ und $|-\rangle$, ein sog. Spinor:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \Psi_\uparrow(\mathbf{r}, t) |+\rangle + \Psi_\downarrow(\mathbf{r}, t) |-\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_\uparrow(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_\downarrow(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \\ \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}, t) \langle +| + \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}, t) \langle -| = \left(\Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}, t), \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}, t) \right) \\ \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) &= |\Psi_\uparrow(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_\downarrow(\mathbf{r})|^2. \end{aligned} \quad (13.62)$$

Ausgehend vom Anfangswert $\Psi(\mathbf{r}, t=0)$ wird die Spinor-Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ zu späteren Zeiten als Lösung der Schrödinger-Gleichung bestimmt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) - \frac{\gamma\hbar}{2} \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Dies ist ein 2×2 -System gekoppelter Differentialgleichungen für die Spinorkomponenten $\Psi_\uparrow(\mathbf{r}, t)$ und $\Psi_\downarrow(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_\uparrow(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_\downarrow(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) - \frac{\gamma\hbar}{2} B_z(\hat{\mathbf{r}}) & -\frac{\gamma\hbar}{2} [B_x(\hat{\mathbf{r}}) - iB_y(\hat{\mathbf{r}})] \\ -\frac{\gamma\hbar}{2} [B_x(\hat{\mathbf{r}}) + iB_y(\hat{\mathbf{r}})] & \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_N} + V(\mathbf{r}) + \frac{\gamma\hbar}{2} B_z(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_\uparrow(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_\downarrow(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Pauli-Theorie für ein Elektron mit Spin- $\frac{1}{2}$ ist die *nichtrelativistische* Näherung der exakten relativistischen Theorie des Elektrons, wie sie von Paul Dirac 1927 aufgestellt wurde.

Die Normierungsbedingung für den Spinor $\Psi(\mathbf{r}, t)$ lautet:

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \left(|\Psi_\uparrow(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_\downarrow(\mathbf{r})|^2 \right) = 1.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen (unabhängig vom Spin) am Ort \mathbf{r} im Volumenelement d^3r anzutreffen, ist dann:

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r = \left(|\Psi_\uparrow(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_\downarrow(\mathbf{r})|^2 \right) d^3r.$$

Um die Physik des Spins zu illustrieren, berechnen wir jetzt den Erwartungswert der Magnetisierung $M_a = \gamma S_a$ für ein *ruhendes* Atom im *konstanten homogenen* Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$:

$$\hat{H} = -\frac{\gamma\hbar}{2}\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\frac{\gamma\hbar}{2}B \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Die stationären Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind dann

$$\begin{aligned} \Psi_E(\mathbf{r}, t) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right] (a_+|+\rangle + a_-|-\rangle) \\ &= a_+e^{i\frac{\gamma B}{2}t}|+\rangle + a_-e^{-i\frac{\gamma B}{2}t}|-\rangle = \begin{pmatrix} a_+e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \\ a_-e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Konstanten a_+ und a_- legen die Spin-Polarisation des Teilchens im Anfangszustand zur Zeit $t = 0$ fest, wobei wegen der Normierungsbedingung gilt:

$$|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1.$$

Parametrisieren wir einen generischen Anfangszustand in der Form

$$\begin{aligned} a_+ &= \cos \frac{\alpha}{2} \\ a_- &= \sin \frac{\alpha}{2} \end{aligned}$$

so folgt für den Erwartungswert des Spins in diesem Zustand zu einer späteren Zeit t :

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle_{\Psi_E} &= \langle \Psi_E, S_x \Psi_E \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi_E, \sigma_x \Psi_E \rangle \\ &= \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \\ e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\gamma Bt} + e^{i\gamma Bt} \right) \sin \frac{\alpha}{2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cdot \cos(\gamma Bt). \end{aligned}$$

Ferner

$$\begin{aligned}
 \langle S_y \rangle_{\Psi_E} &= \langle \Psi_E, S_y \Psi_E \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi_E, \sigma_y \Psi_E \rangle \\
 &= \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \begin{pmatrix} -ie^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \\ ie^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \left(-ie^{-i\gamma B t} + ie^{i\gamma B t} \right) \sin \frac{\alpha}{2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \\
 &= -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cdot \sin(\gamma B t),
 \end{aligned}$$

und schließlich:

$$\begin{aligned}
 \langle S_z \rangle_{\Psi_E} &= \langle \Psi_E, S_z \Psi_E \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi_E, \sigma_z \Psi_E \rangle \\
 &= \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{+i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2}, e^{+i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma B}{2}t} \cos \frac{\alpha}{2} \\ -e^{-i\frac{\gamma B}{2}t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \left[\cos^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \right] \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cos \alpha.
 \end{aligned}$$

Demnach führt der Erwartungswert der Magnetisierung

$$\mathbf{M}(t) = \gamma \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle_{\Psi_E} \\ \langle S_y \rangle_{\Psi_E} \\ \langle S_z \rangle_{\Psi_E} \end{pmatrix}$$

eines Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens im homogenen konstanten Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ eine **Präzessionsbewegung** um die Magnetfeldachse \mathbf{e}_z aus. Die zur Magnetfeldrichtung \mathbf{e}_z **orthogonale** Komponente von \mathbf{M} rotiert mit der **Larmor-Frequenz** $\omega_L = \gamma B$ im Uhrzeigersinn um die Magnetfeldachse, während die zur Magnetfeldrichtung \mathbf{e}_z **parallele** Komponente konstant bleibt. Die Länge des Vektors $\mathbf{M}(t)$ ist demnach ebenfalls eine Konstante: $|\mathbf{M}(t)| = \gamma \frac{\hbar}{2} \sqrt{3}$. Anschaulich generiert der rotierende Zeiger $\mathbf{M}(t)$ einen Kegelmantel, wobei $\mathbf{M}(t)$ gegenüber der Magnetfeldrichtung \mathbf{e}_z um den Winkel α verkippt ist. Der Öffnungswinkel 2α des Kegels wird durch die Wahl der Anfangsbedingungen für den Zustand $\Psi_E(\mathbf{r}, t)$ zur Zeit $t = 0$ festgelegt.

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

In der klassischen Mechanik formuliert man für ein System von N Massenpunkten $m^{(n)}$, $n = 1, 2, \dots, N$, die sich zur Zeit t an den Orten $\mathbf{R}^{(n)}(t)$ mit einem Impuls $\mathbf{P}^{(n)}(t)$ befinden, den bekannten Satz, dass die zeitliche Änderung des Gesamt-Bahndrehimpulses

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L}(t) = \sum_{n=1}^N \frac{d}{dt} \mathbf{L}^{(n)}(t) \quad (14.1)$$

gleich der Summe der Drehmomente allein der *äußeren* Kräfte $\mathbf{F}^{(n)}$ ist, die auf die Massenpunkte einwirken:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L}(t) = \sum_{n=1}^N \mathbf{R}^{(n)}(t) \wedge \mathbf{F}^{(n)}. \quad (14.2)$$

Im Drehimpulssatz müssen Drehimpuls und Drehmoment dabei auf denselben **ruhenden** Punkt bezogen werden. Falls das System keinen äußeren Kräften unterworfen ist, $\mathbf{F}^{(n)} = \mathbf{0}$ für $n = 1, 2, \dots, N$, so ist der Gesamt-Bahndrehimpuls eine **Konstante der Bewegung**: $\mathbf{L}(t) = \mathbf{L}(t_0) = \text{const}$, d.h. \mathbf{L} ist zugleich mit der Energie E des Systems eine **Erhaltungsgröße**.

Dem Gesagten ist zu entnehmen, dass der individuelle Bahndrehimpuls des n -ten Teilchens,

$$\mathbf{L}^{(n)}(t) = \mathbf{R}^{(n)}(t) \wedge \mathbf{P}^{(n)}(t), \quad (14.3)$$

sowie das auf das Teilchen einwirkende Drehmoment $\frac{d}{dt} \mathbf{L}^{(n)}(t)$, sich ebenfalls auf denselben *ruhenden* Punkt beziehen müssen.

Zur Darstellung der kartesischen Komponenten des äußeren Produkts zweier Vektoren (Vektorprodukt) verwenden wir im folgenden das sog. Levi-Civita Symbol:

$$\varepsilon_{abc} = \begin{cases} 1 & \text{falls } abc \text{ gerade Permutation von } xyz, \\ -1 & \text{falls } abc \text{ ungerade Permutation von } xyz, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (14.4)$$

Die drei kartesischen Komponenten von $\mathbf{L}^{(n)}(t)$ sind demnach gegeben zu:

$$L_a^{(n)}(t) = \varepsilon_{abc} R_b^{(n)}(t) P_c^{(n)}(t). \quad (14.5)$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Wir verabreden dabei die **Summenkonvention**: doppelt auftretende Indizes $a, b, c \in \{x, y, z\}$ werden stillschweigend über ihren Wertevorrat summiert.

Der Drehimpulssatz in der Formulierung von Gl.(14.2) gilt *nicht*, wenn sich der Bezugspunkt *bewegt*, es sei denn man legt den Bezugspunkt in den Schwerpunkt(!) aller Teilchen:

$$\mathbf{R}^{(S)}(t) = \frac{\sum_{n=1}^N m^{(n)} \mathbf{R}^{(n)}(t)}{\sum_{n=1}^N m^{(n)}}. \quad (14.6)$$

Der Schwerpunktsimpuls $\mathbf{P}^{(S)}(t)$ (Gesamtimpuls) des Systems ist

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{(S)}(t) &= \sum_{n=1}^N \mathbf{P}^{(n)}(t) \\ \mathbf{P}^{(n)}(t) &= m^{(n)} \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(n)}(t). \end{aligned} \quad (14.7)$$

Dieser ist parallel zur Geschwindigkeit $\frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t)$ des Schwerpunktes orientiert:

$$\mathbf{P}^{(S)}(t) \wedge \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t) = \mathbf{0}.$$

In Bezug auf den Schwerpunkt $\mathbf{R}^{(S)}(t)$ gilt für den Gesamt-Bahndrehimpuls der Teilchen im System:

$$\mathbf{L}^{(S)}(t) = \sum_{n=1}^N \left[\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] \wedge \mathbf{P}^{(n)}(t). \quad (14.8)$$

Der Drehimpulssatz lautet dann, wie man leicht nachrechnet:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L}^{(S)}(t) = \sum_{n=1}^N \left[\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] \wedge \mathbf{F}^{(n)}. \quad (14.9)$$

Der Wert des Drehimpulses in Bezug auf den Schwerpunkt $\mathbf{R}^{(S)}(t)$ hängt nur von der Relativbewegung der Massenpunkte bezogen auf den Schwerpunkt ab! Um dies einzusehen verwenden wir die Identität

$$\sum_{n=1}^N m^{(n)} \left[\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] = \mathbf{0},$$

und bilden das äußere Produkt dieses Nullvektors mit der Geschwindigkeit des Schwerpunktes:

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \left(\sum_{n=1}^N m^{(n)} \left[\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] \right) \wedge \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t) \\ &= \sum_{n=1}^N \left[\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] \wedge m^{(n)} \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t). \end{aligned}$$

Dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^{(S)}(t) &= \sum_{n=1}^N [\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t)] \wedge \left[\underbrace{\mathbf{P}^{(n)}(t)}_{=m^{(n)} \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(n)}(t)} - m^{(n)} \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t) \right] \\ &= \sum_{n=1}^N [\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t)] \wedge m^{(n)} \left[\frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(n)}(t) - \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t) \right]. \end{aligned} \quad (14.10)$$

Der auf den Schwerpunkt bezogene Drehimpuls ist nur durch die **relativen Lagekoordinaten** $\mathbf{R}^{(n)}(t) - \mathbf{R}^{(S)}(t)$ und die **relativen Geschwindigkeiten** $\frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(n)}(t) - \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t)$ bestimmt!

Es ist problematisch, den Bahndrehimpuls eines Teilchens in der Quantenmechanik gemäß Gl. (14.3) zu definieren, denn die Impulse $\mathbf{P}^{(n)}$ und die Positionen $\mathbf{R}^{(n)}$ beziehen sich in Gl. (14.3) alle auf ein und denselben *ruhenden* Fixpunkt. Aufgrund der Unbestimmtheitsrelation von Heisenberg für die Schwankungsquadrate von Ort und Impuls ist es aber unmöglich, von ein und demselben Punkt zu verlangen, dass er ruht und zugleich seine Position perfekt bekannt sei. Die Schwierigkeit tritt nicht auf, wenn man mit relativen Größen im **Schwerpunktsystem** arbeitet:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^{(n)} &= \mathbf{R}^{(n)} - \mathbf{R}^{(S)} \\ \mathbf{p}^{(n)} &= m^{(n)} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(n)}(t) - \frac{d}{dt} \mathbf{R}^{(S)}(t) \right). \end{aligned} \quad (14.11)$$

Wir definieren den Bahndrehimpuls des n -ten Teilchens daher zu

$$\mathbf{L}^{(n)} = \mathbf{r}^{(n)} \wedge \mathbf{p}^{(n)}. \quad (14.12)$$

Der Gesamt-Bahndrehimpuls ist dann:

$$\mathbf{L}^{(S)} = \sum_{n=1}^N \mathbf{L}^{(n)}. \quad (14.13)$$

Die Wellenfunktion eines Systems von N (unterscheidbaren!) Teilchen hängt demnach von den individuellen Relativkoordinaten $\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(N)}$ aller Teilchen bezogen auf den Schwerpunkt ab. In der Quantenmechanik ordnen wir den kartesischen Komponenten von „Ort“ $\mathbf{r}^{(n)}$ und „Impuls“ $\mathbf{p}^{(n)}$ des n -ten Teilchens entsprechende hermitesche Operatoren $r_a^{(n)}$ und $p_a^{(n)}$ zu :

$$\begin{aligned} \hat{r}_a^{(n)} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t) &= r_a^{(n)} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t) \\ \hat{p}_a^{(n)} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_a^{(n)}} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t). \end{aligned} \quad (14.14)$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Dann sind die drei kartesischen Komponenten $\hat{L}_a^{(n)}$ des **Bahndrehimpulsoperators** des n -ten Teilchens definiert zu

$$\begin{aligned}\hat{L}_a^{(n)} &= \varepsilon_{abc} \hat{r}_b^{(n)} \circ \hat{p}_c^{(n)} \\ \hat{L}_a^{(n)} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t) &= \varepsilon_{abc} r_b^{(n)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_c^{(n)}} \Psi(\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \dots, \mathbf{r}'^{(n)}, t).\end{aligned}\quad (14.15)$$

Die Operatoren \hat{L}_a sind hermitesch und genügen denselben Vertauschungsregeln wie die abstrakten Drehimpulsoperatoren \hat{J}_a , deren Eigenschaften bereits in Kapitel 13 ausführlich diskutiert wurden. Dies folgt sofort aus den bekannten Vertauschungsregeln für den Orts- und Impulsoperator:

$$\begin{aligned}[\hat{p}_a^{(n)}, \hat{p}_{a'}^{(n')}] &= \hat{0} = [\hat{r}_a^{(n)}, \hat{r}_{a'}^{(n')}] \\ [\hat{p}_a^{(n)}, \hat{r}_{a'}^{(n')}] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{a,a'} \delta_{n,n'} \hat{1}.\end{aligned}$$

Somit gilt:

$$\hat{L}_a^{(n)} \circ \hat{L}_b^{(n')} - \hat{L}_b^{(n')} \circ \hat{L}_a^{(n)} = [\hat{L}_a^{(n)}, \hat{L}_b^{(n')}] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{L}_c^{(n)} \delta_{n,n'}.\quad (14.16)$$

Der Term $\delta_{n,n'}$ bringt zum Ausdruck, dass die zu *verschiedenen* Teilchen gehörigen Orts-, Impuls- und Bahndrehimpulsoperatoren kommutieren sollen!

Wir wollen uns jetzt mit den Eigenschaften nur *eines* Teilchens beschäftigen und lassen deshalb den Index n zur Kennzeichnung der Teilchen fort:

$$\begin{aligned}[\hat{p}_a, \hat{p}_b] &= \hat{0} = [\hat{r}_a, \hat{r}_b] \\ [\hat{p}_a, \hat{r}_b] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{a,b} \hat{1}.\end{aligned}\quad (14.17)$$

Dann gilt für die drei kartesischen Komponenten

$$\hat{L}_a = \varepsilon_{abc} \hat{r}_b \hat{p}_c\quad (14.18)$$

des Bahndrehimpulsoperators eines Teilchens:

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{L}_c.\quad (14.19)$$

Eine Konsequenz der Vertauschungsregeln ist es, dass es in der Quantenmechanik unmöglich ist, die Erwartungswerte aller drei Komponenten \hat{L}_a simultan scharf zu messen, denn nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation gilt für das Produkt der Schwankungsquadrate der Komponenten des Drehimpulsoperators:

$$\begin{aligned}[\Delta_\Psi(\hat{L}_a)]^2 [\Delta_\Psi(\hat{L}_b)]^2 &\geq \left| \left\langle \frac{i}{2} [\hat{L}_a, \hat{L}_b] \right\rangle_\Psi \right|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left| \left\langle \varepsilon_{abc} \hat{L}_c \right\rangle_\Psi \right|^2.\end{aligned}\quad (14.20)$$

Der Erwartungswert des Quadrates des Bahndrehimpulsoperators

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x \circ \hat{L}_x + \hat{L}_y \circ \hat{L}_y + \hat{L}_z \circ \hat{L}_z \quad (14.21)$$

und eine fest gewählte Linearkombination

$$n_x \hat{L}_x + n_y \hat{L}_y + n_z \hat{L}_z$$

können jedoch immer zugleich scharf gemessen werden, denn

$$[\hat{L}_a, \hat{\mathbf{L}}^2] = \hat{0}.$$

Es ist üblich, die z -Richtung auszuzeichnen, d.h. $n_x = 0 = n_y$ und $n_z = 1$.

Die Vertauschungsregeln für die Komponenten \hat{L}_a des Bahndrehimpulsoperators sind mit den Vertauschungsregeln für die Komponenten des abstrakten Drehimpulsoperators \hat{J}_a von Kapitel 13 identisch. Die simultanen Eigenfunktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ der Operatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z lassen sich somit in völliger Analogie zu den in Kapitel 13 vorgestellten Überlegungen und Methoden mittels der Leiteroperatoren \hat{L}_\pm konstruieren:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ &= \hat{r}_y \circ \hat{p}_z - \hat{r}_z \circ \hat{p}_y + i(\hat{r}_z \circ \hat{p}_x - \hat{r}_x \circ \hat{p}_z) \\ &= i\hat{r}_z \circ (\hat{p}_x + i\hat{p}_y) - i(\hat{r}_x + i\hat{r}_y) \circ \hat{p}_z \\ \hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y \\ &= \hat{r}_y \circ \hat{p}_z - \hat{r}_z \circ \hat{p}_y - i(\hat{r}_z \circ \hat{p}_x - \hat{r}_x \circ \hat{p}_z) \\ &= i(\hat{r}_x - i\hat{r}_y) \circ \hat{p}_z - i\hat{r}_z \circ (\hat{p}_x - i\hat{p}_y). \end{aligned}$$

Sei $l \geq 0$ gegeben. Die Eigenfunktion $Y_{l,l}(\mathbf{r})$ mit dem höchst möglichen Gewicht $m = l$ ist dann eine Lösung der beiden Differentialgleichungen **erster** Ordnung:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ Y_{l,l}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \hat{L}_z Y_{l,l}(\mathbf{r}) &= \hbar l Y_{l,l}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (14.22)$$

Wir erhalten

$$Y_{l,l}(\mathbf{r}) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} (r_x + ir_y)^l, \quad (14.23)$$

was leicht nachzurechnen ist.

Oft wird in Lehrbüchern der Quantenmechanik die Ganzzahligkeit von l ausgehend von der nicht richtigen Vorstellung abgeleitet, dass $Y_{l,l}(\mathbf{r})$ eine eindeutige Funktion zu sein hat. Physikalisch ist nämlich nur die schwächere Forderung gegeben, dass $|Y_{l,l}(\mathbf{r})|^2$ eindeutig sein muss! Das bedeutet, es ist $2l = 0, 1, 2, \dots$ eine

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

nichtnegative natürliche Zahl. Wir zeigen jetzt, rein algebraisch, dass halbzahlige Werte l beim *Bahndrehimpuls* auszuschließen sind. Dazu merken wir an, dass gilt:

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_z &= \hat{r}_x \hat{p}_y - \hat{r}_y \hat{p}_x & (14.24) \\
 &= \frac{\hbar}{4ia^2} \left[\left(\hat{r}_x + i \frac{a^2}{\hbar} \hat{p}_y \right)^2 - \left(\hat{r}_x - i \frac{a^2}{\hbar} \hat{p}_y \right)^2 \right] \\
 &\quad + \frac{ia^2}{4\hbar} \left[\left(\hat{p}_x + i \frac{\hbar}{a^2} \hat{r}_y \right)^2 - \left(\hat{p}_x - i \frac{\hbar}{a^2} \hat{r}_y \right)^2 \right] \\
 &= \left[\frac{\hbar}{4ia^2} \left(\hat{r}_x + i \frac{a^2}{\hbar} \hat{p}_y \right)^2 + \frac{ia^2}{4\hbar} \left(\hat{p}_x + i \frac{\hbar}{a^2} \hat{r}_y \right)^2 \right] \\
 &\quad - \left[\frac{\hbar}{4ia^2} \left(\hat{r}_x - i \frac{a^2}{\hbar} \hat{p}_y \right)^2 + \frac{ia^2}{4\hbar} \left(\hat{p}_x - i \frac{\hbar}{a^2} \hat{r}_y \right)^2 \right],
 \end{aligned}$$

wobei a eine beliebig gewählte *konstante* Länge ist. Die Operatoren

$$\begin{aligned}
 \hat{Q}_\pm &= \frac{1}{\sqrt{2i}} \left(\hat{r}_x \pm i \frac{a^2}{\hbar} \hat{p}_y \right) & (14.25) \\
 \hat{P}_\pm &= \sqrt{\frac{i}{2}} \left(\hat{p}_x \pm i \frac{\hbar}{a^2} \hat{r}_y \right)
 \end{aligned}$$

genügen den Vertauschungsregeln für Orts- und Impulsoperatoren, wie man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned}
 [\hat{Q}_\pm, \hat{Q}_\pm] &= \hat{0} = [\hat{P}_\pm, \hat{P}_\pm] \\
 [\hat{P}_+, \hat{Q}_+] &= \frac{\hbar}{i} \hat{1} = [\hat{P}_-, \hat{Q}_-] \\
 [\hat{P}_+, \hat{Q}_-] &= \hat{0} = [\hat{P}_-, \hat{Q}_+].
 \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_z &= \hat{r}_x \hat{p}_y - \hat{r}_y \hat{p}_x & (14.26) \\
 &= \left(\frac{\hbar}{2a^2} \hat{Q}_+^2 + \frac{a^2}{2\hbar} \hat{P}_+^2 \right) - \left(\frac{\hbar}{2a^2} \hat{Q}_-^2 + \frac{a^2}{2\hbar} \hat{P}_-^2 \right) \\
 &= \frac{1}{\omega} (\hat{H}_+ - \hat{H}_-).
 \end{aligned}$$

Hier ist

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_\pm &= \frac{a^2 \omega}{2\hbar} \hat{P}_\pm^2 + \frac{\hbar \omega}{2a^2} \hat{Q}_\pm^2 \\
 &\equiv \frac{\hat{P}_\pm^2}{2M} + \frac{M \omega^2}{2} \hat{Q}_\pm^2
 \end{aligned}$$

formal gesehen der Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillator mit Kreisfrequenz ω und Masse $M = \frac{\hbar}{\omega a^2}$. Dies bedeutet für die Eigenwerte E_{\pm} von \hat{H}_{\pm} :

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \hbar\omega \left(n_{\pm} + \frac{1}{2} \right) \\ n_{\pm} &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Offensichtlich vertauscht nun \hat{H}_+ mit \hat{H}_- , sowie $\hat{H}_+ - \hat{H}_-$ mit \hat{L}_z , d.h. alle drei Operatoren können simultan diagonalisiert werden. Demnach sind die Eigenwerte m von \hat{L}_z gegeben als Differenz *natürlicher* Zahlen:

$$\hbar m = \hbar(n_+ - n_-).$$

Die Quantenzahlen l, m der Bahn-Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z haben gemäß unserer Ausführungen einen **ganzzahligen** Wertevorrat:

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, \dots \\ -l &\leq m \leq l. \end{aligned}$$

Dass die Eigenwerte l des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}_a nur ganzzahlige, aber **nicht halbzahlige** Werte annehmen können, liegt an der Symmetrie

$$\hat{r}_a \circ \hat{L}_a = \hat{0}.$$

Diese Symmetrie gilt i.a. **nicht** für den in Kapitel 13 behandelten allgemeinen (abstrakten) Drehimpulsoperator eines Teilchens. Dieser kann sich z.B. aus dem Bahndrehimpuls \hat{L}_a und dem Spin \hat{S}_a des Teilchens zusammensetzen:

$$\hat{J}_a = \hat{L}_a + \hat{S}_a.$$

Aus Gl. (14.23) folgen nun die übrigen simultanen Eigenfunktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z durch fortgesetztes Anwenden des Operators \hat{L}_- auf den Zustand $Y_{l,l}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \hat{L}_-^{l-m} Y_{l,l}(\mathbf{r}) \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ -l &\leq m \leq l. \end{aligned}$$

Insbesondere ist

$$\hat{L}_{\pm} Y_{l,m}(\mathbf{r}) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{l,m \pm 1}(\mathbf{r}). \quad (14.27)$$

Es gilt, wie man leicht nachrechnet,

$$\begin{aligned} \hat{L}_z Y_{l,m}(\mathbf{r}') &= \hbar m Y_{l,m}(\mathbf{r}') \\ \hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m}(\mathbf{r}') &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (14.28)$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

wobei die Eigenfunktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ gegeben sind zu

$$Y_{l,m}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} (r_x + ir_y)^{n+m} (r_x - ir_y)^n r_z^{l-m-2n}}{2^{2n+m} (n+m)! n! (l-m-2n)!}. \quad (14.29)$$

Die Summe erstreckt sich über *endlich viele* Terme, denn die analytische Fortsetzung der Fakultät auf die negativen Zahlen erfüllt $\frac{1}{j!} = 0$ für $j \in \{-1, -2, -3, \dots\}$.

Der Tabelle sind für $l = 0, 1, 2$ die entsprechenden Ausdrücke für $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ zu entnehmen.

l	m	$\sqrt{4\pi} \cdot Y_{l,m}(\mathbf{r})$
0	0	1
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{2}} (r_x + ir_y)$
1	0	$\sqrt{3} r_z$
2	± 2	$\sqrt{\frac{15}{8}} (r_x + ir_y)^2$
2	± 1	$\mp \sqrt{\frac{15}{2}} (r_x + ir_y) r_z$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{4}} (2r_z^2 - r_x^2 - r_y^2)$

Wir können aus Gl. (14.29) sofort das Transformationsverhalten von $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ bzgl. einer **Inversion** $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ablesen:

$$Y_{l,m}(-\mathbf{r}) = (-1)^l Y_{l,m}(\mathbf{r}). \quad (14.30)$$

Die **Parität** von $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ ist demnach gerade oder ungerade, je nachdem, ob l eine gerade oder ungerade natürliche Zahl ist.

Unter komplexer Konjugation gilt:

$$Y_{l,m}^\dagger(\mathbf{r}) = (-1)^m Y_{l,-m}(\mathbf{r}), \quad (14.31)$$

denn

$$\begin{aligned} Y_{l,m}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} (r_x - ir_y)^{n+m} (r_x + ir_y)^n r_z^{l-m-2n}}{2^{2n+m} (n+m)! n! (l-m-2n)!} \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n'} (r_x - ir_y)^{n'} (r_x + ir_y)^{n'-m} r_z^{l+m-2n'}}{2^{2n'-m} (n')! (n'-m)! (l+m-2n')} \\ &= (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n'-m} (r_x + ir_y)^{n'-m} (r_x - ir_y)^{n'} r_z^{l+m-2n'}}{2^{2n'-m} (n'-m)! (n')! (l+m-2n')} \\ &= (-1)^m \\ &\times \left[\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} (r_x + ir_y)^{n+m} (r_x - ir_y)^n r_z^{l-m-2n}}{2^{2n+m} (n+m)! n! (l-m-2n)!} \right]_{m \rightarrow -m} \\ &= (-1)^m Y_{l,-m}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Wählen wir Kugelkoordinaten, z.B.

$$\begin{aligned}
 r_x &= \cos \varphi \sin \vartheta & (14.32) \\
 r_y &= \sin \varphi \sin \vartheta \\
 r_z &= \cos \vartheta \\
 0 &\leq \vartheta \leq \pi \\
 0 &\leq \varphi \leq 2\pi \\
 r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 &= 1,
 \end{aligned}$$

so erhalten wir

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (l+m)!(l-m)! \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^{n+m} (\sin \vartheta)^{2n+m} (\cos \vartheta)^{l-m-2n}}{2^{2n+m} (n+m)! n! (l-m-2n)!}. \quad (14.33)$$

Dies sind die auf Eins normierten sog. **Kugelflächenfunktionen**. Sie bilden auf der Einheitskugel

$$r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 = 1$$

ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta Y_{l_1, m_1}^\dagger(\vartheta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\vartheta, \varphi) &= \delta_{l_1, l_2} \delta_{m_1, m_2} & (14.34) \\
 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) Y_{l', m'}^\dagger(\vartheta', \varphi') &= \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta').
 \end{aligned}$$

Jede auf der Einheitskugel definierte Funktion $F(\vartheta, \varphi)$ kann in eine Reihe nach den Basisfunktionen $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ entwickelt werden:

$$F(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l F_{l,m} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (14.35)$$

Die Funktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ in Gl. (14.29) sind homogene Polynome in den drei Variablen r_x, r_y, r_z vom Grad l , d.h. für eine Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt:

$$Y_{l,m}(\lambda \mathbf{r}) = \lambda^l Y_{l,m}(\mathbf{r}).$$

Hieraus folgt sofort

$$(\mathbf{r} \cdot \nabla) Y_{l,m}(\mathbf{r}) = l Y_{l,m}(\mathbf{r}), \quad (14.36)$$

also

$$(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) Y_{l,m}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r} \cdot \nabla) Y_{l,m}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} l Y_{l,m}(\mathbf{r}). \quad (14.37)$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Wir zeigen jetzt, dass die Funktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ Lösungen der dreidimensionalen Laplace Gleichung sind:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 Y_{l,m}(\mathbf{r}) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_z^2} \right) Y_{l,m}(\mathbf{r}) = 0. \quad (14.38)$$

Um das einzusehen, ist es nützlich, den Operator $\hat{\mathbf{L}}^2$, das Quadrat des Bahndrehimpulsoperators eines Teilchens, äquivalent umzuformen. Eine elementare Rechnung, die wir zu Übungszwecken ausführlich dokumentieren, liefert unter Verwendung der kanonischen Kommutatorregeln (14.17) für Orts- und Impulsoperator, der Darstellung der kartesischen Komponenten des Bahndrehimpulsoperators (14.18) und der Identität

$$\varepsilon_{bca}\varepsilon_{ade} = \delta_{b,d}\delta_{c,e} - \delta_{b,e}\delta_{c,d}, \quad (14.39)$$

(wobei die Summenkonvention zu beachten ist, nach der über doppelt auftretende Indizes summiert wird):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 &= \hat{L}_a \circ \hat{L}_a \\ &= \varepsilon_{abc}\varepsilon_{ade}\hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_d \circ \hat{p}_e \\ &= \varepsilon_{bca}\varepsilon_{ade}\hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_d \circ \hat{p}_e \\ &= (\delta_{b,d}\delta_{c,e} - \delta_{b,e}\delta_{c,d})\hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_d \circ \hat{p}_e \\ &= \hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_b \circ \hat{p}_c - \hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_c \circ \hat{p}_b \\ &= \hat{r}_b \circ (\hat{r}_b \circ \hat{p}_c + [\hat{p}_c, \hat{r}_b])\hat{p}_c - \hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ (\hat{p}_b \circ \hat{r}_c + [\hat{r}_c, \hat{p}_b]) \\ &= \hat{r}_b \circ \left(\hat{r}_b \circ \hat{p}_c + \frac{\hbar}{i}\delta_{c,b} \right) \hat{p}_c - \hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \left(\hat{p}_b \circ \hat{r}_c - \frac{\hbar}{i}\delta_{b,c} \right) \\ &= \hat{r}_b \circ \hat{r}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{p}_c + \frac{\hbar}{i}\hat{r}_b \circ \hat{p}_b - \hat{r}_b \circ \hat{p}_b \circ \hat{p}_c \circ \hat{r}_c + \frac{\hbar}{i}\hat{r}_b \circ \hat{p}_b \\ &= \hat{r}_b^2 \circ \hat{p}_c^2 + 2\frac{\hbar}{i}\hat{r}_b \circ \hat{p}_b - \hat{r}_b \circ \hat{p}_b \left(\hat{r}_c \circ \hat{p}_c + \frac{\hbar}{i}\underbrace{\delta_{c,c}}_{=3} \right) \\ &= \hat{r}_b^2 \circ \hat{p}_c^2 - \hat{r}_b \circ \hat{p}_b \circ \hat{r}_c \circ \hat{p}_c - \frac{\hbar}{i}\hat{r}_b \circ \hat{p}_b. \end{aligned}$$

Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}^2 &= \hat{r}_x^2 + \hat{r}_y^2 + \hat{r}_z^2 \equiv \hat{r}_b^2 \\ \hat{\mathbf{p}}^2 &= \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \equiv \hat{p}_c^2 \\ \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} &= \hat{r}_x \circ \hat{p}_x + \hat{r}_y \circ \hat{p}_y + \hat{r}_z \circ \hat{p}_z \equiv \hat{r}_b \circ \hat{p}_b \end{aligned} \quad (14.40)$$

lautet das Ergebnis der durchgeführten Umformung in kompakter Notation:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{r}}^2 \circ \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - \frac{\hbar}{i}\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (14.41)$$

Die Formel drückt die rotationsinvariante Größe $\hat{\mathbf{L}}^2$ durch die rotationsinvarianten Skalare $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, $\hat{\mathbf{r}}^2$ und $\hat{\mathbf{p}}^2$ aus. Die Identität lässt sich umformen zu:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{\hat{\mathbf{r}}^2} \circ \left[(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{L}}^2 \right]. \quad (14.42)$$

Die Wirkung von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und von $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ auf die Funktionen $Y_{l,m}(\mathbf{r})$ kennen wir schon aus Gl. (14.37) und Gl. (14.28). Damit folgt ($\mathbf{r} \neq \mathbf{0}$):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 Y_{l,m}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\hat{\mathbf{r}}^2} \circ \left[(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{L}}^2 \right] Y_{l,m}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{\hat{\mathbf{r}}^2} \circ \left[\left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 l^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 l + \hbar^2 l(l+1) \right] Y_{l,m}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar^2}{\hat{\mathbf{r}}^2} \circ [-l^2 - l + l(l+1)] Y_{l,m}(\mathbf{r}) \\ &= 0, \end{aligned}$$

was zu zeigen war!

In Kugelkoordinaten entspricht dem Operator

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{r}_x \circ \hat{p}_x + \hat{r}_y \circ \hat{p}_y + \hat{r}_z \circ \hat{p}_z$$

die **Richtungsableitung**

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} r \circ \frac{\partial}{\partial r}. \quad (14.43)$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \circ \left[\left(r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right) \circ \left(r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{r^2} \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (14.44) \\ &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \circ \left[r \circ \left(\frac{\partial}{\partial r} \circ r \right) \circ \frac{\partial}{\partial r} + r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \circ \left[r \circ \left(\underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial r}, r \right]}_{=1} + r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right) \circ \frac{\partial}{\partial r} + r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{r^2} \circ \left[r^2 \circ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \circ \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \circ \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \circ \hat{\mathbf{L}}^2. \end{aligned}$$

Diese Formel ist nützlich für Probleme mit Kugelsymmetrie, z.B. wenn sich ein Teilchen unter dem Einfluss einer Zentralkraft bewegt.

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Ist nun $\hat{\Sigma}$ ein beliebiger, aus den Koordinaten \hat{r}_c und Impulsen \hat{p}_c eines Teilchens gebildeter **Skalar**, so kommutiert $\hat{\Sigma}$ mit allen Komponenten \hat{L}_b des Bahndrehimpulses:

$$[\hat{\Sigma}, \hat{L}_b] = \hat{0}. \quad (14.45)$$

Wir zeigen die Behauptung zunächst für die drei elementaren Skalare:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 &= \hat{p}_a \circ \hat{p}_a \\ \hat{\mathbf{r}}^2 &= \hat{r}_a \circ \hat{r}_a \\ \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} &= \hat{r}_a \circ \hat{p}_a \end{aligned} \quad (14.46)$$

(Summenkonvention bzgl. Index $a \in \{x, y, z\}$ beachten!). Gilt die Behauptung für diese drei Skalare, dann gilt sie auch für jede Funktion (Potenzreihe) $\hat{\Sigma} = \Sigma(\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{r}}^2, \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ dieser drei Skalare. Eine elementare Rechnung liefert:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{r}_x] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_x] = -\frac{\hbar}{i} \hat{r}_y \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_x \hat{r}_x] &= -2\frac{\hbar}{i} \hat{r}_y \circ \hat{r}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_y] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_y] = \frac{\hbar}{i} \hat{r}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_y \hat{r}_y] &= 2\frac{\hbar}{i} \hat{r}_y \circ \hat{r}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_z] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_z] = \hat{0} \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_z \hat{r}_z] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_z] = \hat{0}. \end{aligned}$$

Durch Addition folgt

$$[\hat{L}_z, \hat{r}_a \circ \hat{r}_a] = \hat{0}$$

und durch zyklisches Vertauschen:

$$[\hat{L}_b, \hat{r}_a \circ \hat{r}_a] = \hat{0}.$$

In völliger Analogie zur eben angestellten Betrachtung erhält man:

$$[\hat{L}_b, \hat{p}_a \circ \hat{p}_a] = \hat{0}.$$

Schließlich betrachten wir:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{r}_x \circ \hat{p}_x] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_x \circ \hat{p}_x] \\
&= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{r}_x \circ \hat{p}_x] - [\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_x \circ \hat{p}_x] \\
&= \begin{cases} \underbrace{[\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{r}_x] \circ \hat{p}_x}_{=\hat{0}} + \hat{r}_x \circ [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{p}_x] \\ - [\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_x] \circ \hat{p}_x - \hat{r}_x \circ \underbrace{[\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{p}_x]}_{=\hat{0}} \end{cases} \\
&= -\frac{\hbar}{i} (\hat{r}_x \circ \hat{p}_y + \hat{r}_y \circ \hat{p}_x) \\
[\hat{L}_z, \hat{r}_y \circ \hat{p}_y] &= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y - \hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_y \circ \hat{p}_y] \\
&= [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{r}_y \circ \hat{p}_y] - [\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_y \circ \hat{p}_y] \\
&= \begin{cases} [\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{r}_y] \circ \hat{p}_y + \hat{r}_y \circ \underbrace{[\hat{r}_x \circ \hat{p}_y, \hat{p}_y]}_{=\hat{0}} \\ - \underbrace{[\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{r}_y] \circ \hat{p}_y}_{=\hat{0}} - \hat{r}_y \circ [\hat{r}_y \circ \hat{p}_x, \hat{p}_y] \end{cases} \\
&= \frac{\hbar}{i} (\hat{r}_x \circ \hat{p}_y + \hat{r}_y \circ \hat{p}_x) \\
[\hat{L}_z, \hat{r}_z \circ \hat{p}_z] &= \hat{0}.
\end{aligned}$$

Durch Addition folgt (Summenkonvention!)

$$[\hat{L}_z, \hat{r}_a \circ \hat{p}_a] = 0$$

und durch zyklisches Vertauschen:

$$[\hat{L}_b, \hat{r}_a \circ \hat{p}_a] = 0.$$

Die Behauptung gilt somit für alle aus den Skalaren in Gl. (14.46) zusammengesetzten Funktionen.

Ist V_a ein beliebiger, aus den Koordinaten \hat{r}_c und Impulsen \hat{p}_c der Teilchen gebildeter **Vektor**, so gilt für den Kommutator mit allen Komponenten \hat{L}_b des Bahndrehimpulses die Kommutatorrelation:

$$[\hat{L}_a, \hat{V}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{V}_c. \quad (14.47)$$

Um den Beweis zu führen betrachten wir zunächst den Spezialfall $\hat{V}_a = \hat{r}_a$. Dann

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

erhalten wir

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{r}_x] &= -\frac{\hbar}{i} \hat{r}_y = i\hbar \hat{r}_y \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_y] &= \frac{\hbar}{i} \hat{r}_x = -i\hbar \hat{r}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_z] &= \hat{0}. \end{aligned}$$

Folglich ist

$$[\hat{L}_z, \hat{r}_b] = i\hbar \varepsilon_{zbc} \hat{r}_c.$$

Zyklisches Vertauschen liefert dann

$$[\hat{L}_a, \hat{r}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{r}_c, \quad (14.48)$$

d.h. die Behauptung stimmt für $\hat{V}_a = \hat{r}_a$. Eine völlig analoge Betrachtung zeigt, dass die Behauptung auch für die Wahl $\hat{V}_a = \hat{p}_a$ gültig ist:

$$[\hat{L}_a, \hat{p}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{p}_c. \quad (14.49)$$

Sind nun $\hat{\Sigma}_I$, $\hat{\Sigma}_{II}$ und $\hat{\Sigma}_{III}$ aus \hat{p}_a und \hat{r}_a gebildete Skalare, so gilt die Behauptung auch für den Vektor

$$\hat{V}_b = \hat{\Sigma}_I \circ \hat{r}_b + \hat{\Sigma}_{II} \circ \hat{p}_b + \hat{\Sigma}_{III} \circ \hat{L}_b. \quad (14.50)$$

Also:

$$[\hat{L}_a, \hat{\Sigma}_I \circ \hat{r}_b + \hat{\Sigma}_{II} \circ \hat{p}_b + \hat{\Sigma}_{III} \circ \hat{L}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} (\hat{\Sigma}_I \circ \hat{r}_c + \hat{\Sigma}_{II} \circ \hat{p}_c + \hat{\Sigma}_{III} \circ \hat{L}_c).$$

Sind $\hat{V}_b^{(1)}$ und $\hat{V}_b^{(2)}$ beides Vektoren der in Gl. (14.50) angegebenen Form, so ist noch der Fall $\hat{V} = \hat{V}^{(1)} \wedge \hat{V}^{(2)}$ zu diskutieren. Mit $\hat{V}_a = \varepsilon_{abc} \hat{V}_b^{(1)} \circ \hat{V}_c^{(2)}$ zeigt man leicht:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{V}_x] &= [\hat{L}_z, \hat{V}_y^{(1)} \circ \hat{V}_z^{(2)} - \hat{V}_z^{(1)} \circ \hat{V}_y^{(2)}] \\ &= \left(\begin{array}{l} \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_y^{(1)}] \circ \hat{V}_z^{(2)} + \hat{V}_y^{(1)} \circ [\hat{L}_z, \hat{V}_z^{(2)}]}_{= \hat{0}} \\ - \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_z^{(1)}] \circ \hat{V}_y^{(2)} - \hat{V}_z^{(1)} \circ [\hat{L}_z, \hat{V}_y^{(2)}]}_{= i\hbar \varepsilon_{zyx} \hat{V}_x^{(2)}} \end{array} \right) \\ &= i\hbar (\hat{V}_z^{(1)} \circ \hat{V}_x^{(2)} - \hat{V}_x^{(1)} \circ \hat{V}_z^{(2)}) \\ &= i\hbar \hat{V}_y. \end{aligned}$$

Ebenso folgt

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{V}_y] &= [\hat{L}_z, \hat{V}_z^{(1)} \circ \hat{V}_x^{(2)} - \hat{V}_x^{(1)} \circ \hat{V}_z^{(2)}] \\
&= \left(\begin{array}{l} \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_z^{(1)}]}_{=\hat{0}} \circ \hat{V}_x^{(2)} + \hat{V}_z^{(1)} \circ \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_x^{(2)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zxy}\hat{V}_y^{(2)}} \\ - \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_x^{(1)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zxy}\hat{V}_y^{(1)}} \circ \hat{V}_z^{(2)} - \hat{V}_x^{(1)} \circ \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_z^{(2)}]}_{=\hat{0}} \end{array} \right) \\
&= i\hbar (\hat{V}_z^{(1)} \circ \hat{V}_y^{(2)} - \hat{V}_y^{(1)} \circ \hat{V}_z^{(2)}) \\
&= -i\hbar\hat{V}_x
\end{aligned}$$

und natürlich

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{V}_z] &= [\hat{L}_z, \hat{V}_x^{(1)} \circ \hat{V}_y^{(2)} - \hat{V}_y^{(1)} \circ \hat{V}_x^{(2)}] \\
&= \left(\begin{array}{l} \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_x^{(1)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zxy}\hat{V}_y^{(1)}\hat{V}_y^{(2)}} \circ \hat{V}_y^{(2)} + \hat{V}_x^{(1)} \circ \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_y^{(2)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zyx}\hat{V}_x^{(2)}} \\ - \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_y^{(1)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zyx}\hat{V}_x^{(1)}} \circ \hat{V}_x^{(2)} - \hat{V}_y^{(1)} \circ \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{V}_x^{(2)}]}_{=i\hbar\varepsilon_{zxy}\hat{V}_y^{(2)}} \end{array} \right) \\
&= i\hbar (\hat{V}_y^{(1)} \circ \hat{V}_y^{(2)} - \hat{V}_x^{(1)} \circ \hat{V}_x^{(2)} + \hat{V}_x^{(1)} \circ \hat{V}_x^{(2)} - \hat{V}_y^{(1)} \circ \hat{V}_y^{(2)}) \\
&= \hat{0}.
\end{aligned}$$

Eine zum Fall $[\hat{L}_z, \hat{V}_b]$ völlig analoge Rechnung liefert:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_y, \hat{V}_b] &= i\hbar\varepsilon_{ybc}\hat{V}_c \\
[\hat{L}_x, \hat{V}_b] &= i\hbar\varepsilon_{xbc}\hat{V}_c.
\end{aligned}$$

Die Richtigkeit der eingangs aufgestellten Behauptung Gl. (14.47) ist damit gezeigt.

Die hergeleiteten Vertauschungsregeln sind sehr nützlich, um die sog. Auswahlregeln für die Erwartungswerte des elektrischen Dipolmomentes herzuleiten. Sei $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ ein Satz gebundener Zustände eines Hamilton-Operators \hat{H} mit Kugelsymmetrie.

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar m\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\
\hat{\mathbf{L}}^2\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Die Wechselwirkung von Licht mit einem am Atom gebundenen Elektron wird in

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

führender Ordnung der Störungsrechnung durch die Matrixelemente des elektrischen Dipolmomentes $\hat{d}_a = |e| \hat{r}_a$ beschrieben:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_a \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle &= \int d^3 r' \psi_{n_1 l_1 m_1}^\dagger(\mathbf{r}') r'_a \psi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{r}') \\ a &\in \{x, y, z\}. \end{aligned}$$

Aus dem Gesagten folgt

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{r}_x] &= i\hbar \hat{r}_y \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_y] &= -i\hbar \hat{r}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{r}_z] &= \hat{0}. \end{aligned}$$

Somit ist

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{L}_z, \hat{r}_z] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, (\hat{L}_z \circ \hat{r}_z - \hat{r}_z \circ \hat{L}_z) \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \langle \hat{L}_z^\dagger \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z (\hat{L}_z \psi_{n_2 l_2 m_2}) \rangle \\ &\stackrel{\hat{L}_z^\dagger = \hat{L}_z}{=} \langle \hat{L}_z \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z (\hat{L}_z \psi_{n_2 l_2 m_2}) \rangle \\ &= \hbar (m_1 - m_2) \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle. \end{aligned}$$

Das Matrixelement $\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_z \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle$ ist somit für $m_1 \neq m_2$ gleich Null. Ebenso zeigen wir

$$\begin{aligned} &i\hbar \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_y \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{L}_z, \hat{r}_x] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \hbar (m_1 - m_2) \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_x \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle. \end{aligned}$$

Damit ist die kartesische y -Komponente des Dipolmomentes durch die entsprechende x -Komponente ausgedrückt. Schließlich folgt noch

$$\begin{aligned} &-i\hbar \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_x \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{L}_z, \hat{r}_y] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ &= \hbar (m_1 - m_2) \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_y \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \end{aligned}$$

Dies impliziert durch Einsetzen der vorherigen Formel:

$$\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_x \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle = (m_1 - m_2)^2 \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_x \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle.$$

Folglich ist entweder

$$\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_x \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle = 0 = \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_y \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle$$

oder es ist

$$m_1 - m_2 = \pm 1.$$

Damit ist die Gültigkeit der folgenden Auswahlregel für die Nebenquantenzahlen m_1 und m_2 abgeleitet:

$$\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_a \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle = 0 \text{ falls } m_1 - m_2 \notin \{-1, 0, 1\}. \quad (14.51)$$

Wir leiten jetzt noch die entsprechende Auswahlregel für die Drehimpulsquantenzahlen l_1 und l_2 her. Ausgehend von der Identität Gl. (14.47) zeigen wir

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] &= [\hat{L}_a \circ \hat{L}_a, \hat{r}_b] \\ &= [\hat{L}_a, \hat{r}_b] \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ [\hat{L}_a, \hat{r}_b] \\ &= i\hbar \varepsilon_{abc} (\hat{r}_c \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{r}_c). \end{aligned}$$

(Summenkonvention!) Somit dürfen wir nun folgern:

$$\begin{aligned} &[\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] \\ &= i\hbar \varepsilon_{abc} [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_c \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{r}_c] \\ &= i\hbar \varepsilon_{abc} ([\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_c] \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_c]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{abc} \cdot i\hbar \varepsilon_{gcf} \left(\begin{array}{l} (\hat{r}_f \circ \hat{L}_g + \hat{L}_g \circ \hat{r}_f) \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ (\hat{r}_f \circ \hat{L}_g + \hat{L}_g \circ \hat{r}_f) \end{array} \right) \\ &= -\hbar^2 \varepsilon_{abc} \varepsilon_{gcf} \left(\begin{array}{l} \hat{r}_f \circ \hat{L}_g \circ \hat{L}_a + \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_g + \hat{L}_a \circ \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \end{array} \right) \\ &= +\hbar^2 \underbrace{\varepsilon_{abc} \varepsilon_{cgf}}_{\equiv \delta_{a,g} \delta_{b,f} - \delta_{a,f} \delta_{b,g}} \left(\begin{array}{l} \hat{r}_f \circ \hat{L}_g \circ \hat{L}_a + \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_g + \hat{L}_a \circ \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \end{array} \right) \\ &= \hbar^2 (\delta_{a,g} \delta_{b,f} - \delta_{a,f} \delta_{b,g}) \left(\begin{array}{l} \hat{r}_f \circ \hat{L}_g \circ \hat{L}_a + \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ \hat{r}_f \circ \hat{L}_g + \hat{L}_a \circ \hat{L}_g \circ \hat{r}_f \end{array} \right) \\ &= \hbar^2 \left(\begin{array}{l} \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ - \hat{r}_a \circ \hat{L}_b \circ \hat{L}_a - \hat{L}_b \circ \hat{r}_a \circ \hat{L}_a \\ - \hat{L}_a \circ \hat{r}_a \circ \hat{L}_b - \hat{L}_a \circ \hat{L}_b \circ \hat{r}_a \end{array} \right). \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \hat{r}_a \circ \hat{L}_a &= \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{0} \\ \hat{L}_a \circ \hat{r}_a &= \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \hat{0}. \end{aligned}$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Also folgt

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] = \hbar^2 \begin{pmatrix} \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ - \hat{r}_a \circ \hat{L}_b \circ \hat{L}_a - \hat{L}_a \circ \hat{L}_b \circ \hat{r}_a \end{pmatrix}.$$

Umformen ergibt:

$$\begin{aligned} \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \circ \hat{L}_a &= \left([\hat{L}_a, \hat{r}_b] + \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \right) \circ \hat{L}_a \\ &= \left(i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{r}_c + \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \right) \circ \hat{L}_a \\ &= \hat{L}_a \circ \left(\hat{L}_a \circ \hat{r}_b - [\hat{L}_a, \hat{r}_b] \right) \\ &= \hat{L}_a \circ \left(\hat{L}_a \circ \hat{r}_b - i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{r}_c \right) \end{aligned}$$

$$\hat{L}_b \circ \hat{L}_a = -[\hat{L}_a, \hat{L}_b] + \hat{L}_a \circ \hat{L}_b$$

$$\hat{L}_a \circ \hat{L}_b = \hat{L}_b \circ \hat{L}_a + [\hat{L}_a, \hat{L}_b]$$

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] &= \hbar^2 \begin{pmatrix} \hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + (i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{r}_c + \hat{r}_b \circ \hat{L}_a) \circ \hat{L}_a \\ + \hat{L}_a \circ (\hat{L}_a \circ \hat{r}_b - i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{r}_c) + \hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ - \hat{r}_a \circ (-[\hat{L}_a, \hat{L}_b] + \hat{L}_a \circ \hat{L}_b) \\ - (\hat{L}_b \circ \hat{L}_a + [\hat{L}_a, \hat{L}_b]) \circ \hat{r}_a \end{pmatrix} \\ &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2\hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + i\hbar\varepsilon_{abc}(\hat{r}_c \circ \hat{L}_a - \hat{L}_a \circ \hat{r}_c) + 2\hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ + \hat{r}_a \circ [\hat{L}_a, \hat{L}_b] - [\hat{L}_a, \hat{L}_b] \circ \hat{r}_a \end{pmatrix} \\ &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2\hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + i\hbar\varepsilon_{abc}(\hat{r}_c \circ \hat{L}_a - \hat{L}_a \circ \hat{r}_c) + 2\hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ + i\hbar\varepsilon_{abc}(\hat{r}_a \circ \hat{L}_c - \hat{L}_c \circ \hat{r}_a) \end{pmatrix} \\ &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2\hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + 2\hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b \\ + i\hbar\varepsilon_{abc}(\hat{r}_c \circ \hat{L}_a - \hat{L}_a \circ \hat{r}_c) \\ + i\hbar\varepsilon_{c'ba'}(\hat{r}_{c'} \circ \hat{L}_{a'} - \hat{L}_{a'} \circ \hat{r}_{c'}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der Term in der dritten Zeile hebt sich gegen den betreffenden Term in der zweiten Zeile weg, denn

$$\varepsilon_{cba} = -\varepsilon_{bca} = \varepsilon_{bac} = -\varepsilon_{abc}.$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] &= 2\hbar^2 (\hat{r}_b \circ \hat{L}_a \circ \hat{L}_a + \hat{L}_a \circ \hat{L}_a \circ \hat{r}_b) \\ &= 2\hbar^2 (\hat{r}_b \circ \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 \circ \hat{r}_b). \end{aligned} \quad (14.52)$$

Damit erhalten wir einerseits:

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{\mathbf{L}}^2 \circ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \langle \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] (\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_2 l_2 m_2}) \rangle \\
&= \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)] \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)] \left(\begin{array}{c} \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{\mathbf{L}}^2 \circ \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \circ \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \end{array} \right) \\
&= \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)] \left(\begin{array}{c} \langle \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\ - \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \circ (\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_2 l_2 m_2}) \rangle \end{array} \right) \\
&= \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)] \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)] \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \hbar^4 [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)]^2 \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle.
\end{aligned}$$

Andererseits gilt

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, [\hat{\mathbf{L}}^2, [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{r}_b]] \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= 2\hbar^2 \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, (\hat{r}_b \circ \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 \circ \hat{r}_b) \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= 2\hbar^2 \left(\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b (\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_2 l_2 m_2}) \rangle + \langle \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \right) \\
&= 2\hbar^4 [l_2(l_2 + 1) + l_1(l_1 + 1)] \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle.
\end{aligned}$$

Beide Aussagen zusammen genommen führen auf:

$$\hbar^4 \left\{ \begin{array}{c} [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)]^2 \\ -2[l_2(l_2 + 1) + l_1(l_1 + 1)] \end{array} \right\} \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle = 0.$$

Es gilt die Identität:

$$\begin{aligned}
l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1) &= (l_1 + l_2 + 1)(l_1 - l_2) \\
2[l_2(l_2 + 1) + l_1(l_1 + 1)] &= (l_1 + l_2 + 1)^2 + (l_1 - l_2)^2 - 1.
\end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \hbar^4 \left\{ \begin{array}{c} [l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)]^2 \\ -2[l_2(l_2 + 1) + l_1(l_1 + 1)] \end{array} \right\} \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \hbar^4 \left\{ \begin{array}{c} (l_1 + l_2 + 1)^2 (l_1 - l_2)^2 \\ -(l_1 + l_2 + 1)^2 - (l_1 - l_2)^2 + 1 \end{array} \right\} \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \\
&= \hbar^4 [1 - (l_1 + l_2 + 1)^2] [1 - (l_1 - l_2)^2] \langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle.
\end{aligned}$$

14 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Für $l_1 = 0 = l_2$ verschwindet das Matrixelement,

$$\langle \psi_{n_1, l_1=0, m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2, l_2=0, m_2} \rangle = 0,$$

wie unschwer mittels einer Symmetrie-Überlegung gezeigt wird. Ist das Matrixelement ungleich Null, $\langle \psi_{n_1 l_1 m_1}, \hat{r}_b \psi_{n_2 l_2 m_2} \rangle \neq 0$ und $l_1 + l_2 \geq 1$ so folgt:

$$l_1 - l_2 = \pm 1. \tag{14.53}$$

Die hergeleitete Auswahlregel erklärt z.B., warum der $2s$ -Zustand des Elektrons im Wasserstoffatom, wenn er erst einmal besetzt ist, aufgrund der Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld nicht ohne weiteres in den $1s$ -Zustand zerfallen kann.

15 Das Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist das mikroskopische Pendant des Kepler-Problems der Planetenbewegung in der klassischen Astronomie. Es handelt sich beim Wasserstoffatom um ein Zweiteilchensystem, bestehend aus einem positiv geladenem Proton (Ladung $+|e|$, Masse M_p) am Ort \mathbf{R}_p und einem negativ geladenem Elektron (Ladung $-|e|$, Masse M_e) am Ort \mathbf{R}_e . Der Hamilton-Operator des Systems setzt sich aus der Summe der kinetischen Energie von Proton und Elektron sowie der Coulomb-Energie zusammen:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}_p^2}{2M_p} + \frac{\mathbf{P}_e^2}{2M_e} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_e|}. \quad (15.1)$$

Ein Maß für die Stärke der elektrostatischen Kraft zwischen den beiden Elementarladungen ist dabei die dimensionslose Feinstrukturkonstante α :

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|e|^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137.036} \\ \hbar c &= 1973 \text{ [eV} \cdot 10^{-10} \text{ m]} \\ \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} &= \alpha \cdot \hbar c = 14.4 \text{ [eV} \cdot 10^{-10} \text{ m]}. \end{aligned} \quad (15.2)$$

Die kanonischen Vertauschungsregeln für Orts- und Impuls-Operator der beiden Teilchen lauten

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{t,a}, \hat{P}_{t',a'}] &= 0 = [\hat{R}_{t,a}, \hat{R}_{t',a'}] \\ [\hat{P}_{t,a}, \hat{R}_{t',a'}] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{t,t'} \delta_{a,a'} \\ t, t' &\in \{p, e\} \\ a, a' &\in \{x, y, z\}. \end{aligned} \quad (15.3)$$

Wie beim klassischen Zweikörperproblem führt die Einführung von Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zu einer Vereinfachung:

$$\begin{aligned} \hat{R}_a &= \frac{M_p \hat{R}_{p,a} + M_e \hat{R}_{e,a}}{M_p + M_e} \\ \hat{r}_a &= \hat{R}_{e,a} - \hat{R}_{p,a} \end{aligned} \quad (15.4)$$

$$\begin{aligned}\hat{P}_a &= \hat{P}_{e,a} + \hat{P}_{p,a} \\ \hat{p}_a &= \frac{M_p \hat{P}_{e,a} - M_e \hat{P}_{p,a}}{M_p + M_e}.\end{aligned}$$

Ein Wechsel der Koordinaten und Impulse zu neuen Koordinaten und Impulsen, so dass die Vertauschungsregeln erhalten bleiben, nennt man eine *kanonische Transformation*. Es gilt, wie man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned}[\hat{R}_a, \hat{R}_{a'}] &= \hat{0} = [\hat{P}_a, \hat{P}_{a'}] \\ [\hat{P}_a, \hat{R}_{a'}] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{a,a'} \\ [\hat{r}_a, \hat{r}_{a'}] &= \hat{0} = [\hat{p}_a, \hat{p}_{a'}] \\ [\hat{p}_a, \hat{r}_{a'}] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{a,a'} \\ [\hat{R}_a, \hat{r}_{a'}] &= \hat{0} = [\hat{P}_a, \hat{p}_{a'}] \\ [\hat{P}_a, \hat{r}_{a'}] &= \hat{0} = [\hat{R}_a, \hat{p}_{a'}].\end{aligned}\tag{15.5}$$

Demnach stellt die Einführung von Relativ- und Schwerpunktskoordinaten eine kanonische Transformation dar.

Ausgedrückt durch die neuen Koordinaten lautet der Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|}.\tag{15.6}$$

Hier ist M die Gesamtmasse und μ die reduzierte Masse:

$$\begin{aligned}M &= M_p + M_e \\ \frac{1}{\mu} &= \frac{1}{M_p} + \frac{1}{M_e}.\end{aligned}\tag{15.7}$$

Offensichtlich ist die Schwerpunktsbewegung von der Relativbewegung entkoppelt, da \hat{H} zwar von \mathbf{P} , aber nicht von \mathbf{R} abhängig ist.

Wir sind an gebundenen Zuständen interessiert. Zu dem Zweck lösen wir das Schrödinger-Eigenwertproblem für ein (fiktives) Teilchen der Masse μ und Ladung $-|e|$ im Kraftfeld einer im Ursprung $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ ruhenden positiven Ladung $+|e|$:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|}\right) \psi_E(\mathbf{r}) &= E\psi_E(\mathbf{r}) \\ \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \psi_E^\dagger(\mathbf{r}') \psi_E(\mathbf{r}') &= 1.\end{aligned}\tag{15.8}$$

Die Energie E bezieht sich hier auf die *relative* Bewegung der beiden Teilchen im Schwerpunktskoordinatensystem.

Der Hamilton-Operator des Problems,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|}, \quad (15.9)$$

hängt nur vom Quadrat $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ des Impulsoperators, und von den kartesischen Teilchenkoordinaten r_x, r_y, r_z nur mittelbar über den euklidischen Abstand $|\mathbf{r}| = \sqrt{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2}$ zum Ursprung ab. Es handelt sich demnach bei \hat{H} um einen Skalar, so dass aufgrund der Überlegungen von Kapitel 14 der Bahndrehimpuls eine Erhaltungsgröße ist:

$$[\hat{H}, \hat{L}_a] = \hat{0}. \quad (15.10)$$

Hieraus folgt sofort

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_a \circ \hat{L}_a] = \hat{0}$$

Summenkonvention!

Da die hermiteschen Operatoren \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z alle miteinander vertauschen existiert nach den Ausführungen von Kapitel 12 ein vollständiges System von Funktionen $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$, die simultan Eigenfunktionen der Operatoren \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z sind:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= E\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{L}}^2\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\ \hat{L}_z\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar m \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\ l &= 0, 1, 2, \dots \\ -l &\leq m \leq l. \end{aligned}$$

Da \hat{H} noch mit $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ vertauscht gilt auch

$$\hat{H} \circ \hat{L}_\pm \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \hat{L}_\pm \circ \hat{H} \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = E \hat{L}_\pm \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}).$$

Nach dem Gesagten ist mit $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ auch die Funktion

$$\hat{L}_\pm \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{n,l,m \pm 1}(\mathbf{r})$$

eine Eigenfunktion von \hat{H} zum gleichen Eigenwert E . Wir können nun \hat{L}_\pm solange anwenden, bis alle Zustände des Multipletts ausgeschöpft sind. Damit ist klar, dass alle $2l+1$ Zustände $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ des zur Bahndrehimpulsquantenzahl l gehörigen

15 Das Wasserstoffatom

Multipletts die gleiche Energie $E = E_{n,l}$ besitzen! Der Energie-Eigenwert $E_{n,l}$ zum Hamilton-Operator \hat{H} ist nach dem Gesagten unabhängig von der Drehimpuls-Quantenzahl m , der Zustand $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ ist $(2l + 1)$ -fach entartet!

Bei Einführung von Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned}x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\z &= r \cos \vartheta\end{aligned}$$

lässt sich der Hamilton-Operator umschreiben zu

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}. \quad (15.11)$$

Die entsprechenden Umformungen für den Operator $\hat{\mathbf{p}}^2$ wurden bereits in Kapitel 14 vorgestellt.

Also folgt

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + 1 \right] + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\&= \left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} + \left[\frac{\partial}{\partial r}, r \right] \right) + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\&= \left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \right) + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\&= \left(\frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \circ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \circ r \right) \circ \left(\frac{1}{r} \circ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \circ r \right) + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\&= \frac{1}{r} \left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{2\mu} \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) [r\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})].\end{aligned}$$

Der Operator

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

heißt auch radialer Impuls-Operator. Wie man leicht zeigt genügen die Operatoren \hat{p}_r und \hat{r} der Vertauschungsregel:

$$[\hat{p}_r, \hat{r}] = \frac{\hbar}{i} \hat{1}.$$

Wir definieren jetzt

$$\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} U_{n,l}(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \quad (15.12)$$

und erhalten unter Berücksichtigung der Relation

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

für die Radialfunktion $U_{n,l}(r)$ die folgende Differentialgleichung:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E_{n,l} \right] U_{n,l}(r) = 0. \quad (15.13)$$

Die Normierungsbedingung für die radialen Eigenfunktionen $U_{n,l}(r)$ folgt unmittelbar aus der ursprünglichen Normierungsbedingung:

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 r' |\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}')|^2 & (15.14) \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi d\vartheta' \sin \vartheta' \int_0^\infty dr' r'^2 \left| \frac{1}{r'} U_{n,l}(r') Y_{l,m}(\vartheta', \varphi') \right|^2 \\ &= \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi d\vartheta' \sin \vartheta' |Y_{l,m}(\vartheta', \varphi')|^2}_{=1} \int_0^\infty dr' |U_{n,l}(r')|^2 \\ &= \int_0^\infty dr' |U_{n,l}(r')|^2. \end{aligned}$$

Es ist zweckmäßig mit dimensionlosen Größen zu arbeiten. Dazu definieren wir

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \frac{r}{a_0} & (15.15) \\ \bar{E}_{n,l} &= \frac{E_{n,l}}{E_0} \\ U_{n,l}(r) &= U_{n,l}(\bar{r} \cdot a_0) = \frac{u_{n,l}(\bar{r})}{\sqrt{a_0}}. \end{aligned}$$

Es folgt nach einigen elementaren Umformungen:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} - 2 \left(\frac{\mu}{\hbar^2} a_0 \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{\bar{r}} - 2 \left(\frac{\mu}{\hbar^2} a_0^2 E_0 \right) \bar{E}_{n,l} \right] u_{n,l}(\bar{r}) = 0.$$

Somit liegt es nahe zu definieren

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{a_0^2} \simeq 27.212 \text{ [eV]} & (15.16) \\ a_0 &= \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0}} = \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{\alpha \hbar c} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{\mu c} \simeq 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ [m]}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} - \frac{2}{\bar{r}} - 2\bar{E}_{n,l} \right] u_{n,l}(\bar{r}) = 0. \quad (15.17)$$

Für $\bar{r} \gg 1$ ist

$$u_{n,l}(\bar{r}) \propto \exp\left(\pm \sqrt{-2\bar{E}_{n,l}} \cdot \bar{r}\right). \quad (15.18)$$

Da wir gebundene Zustände suchen ist notwendig $\bar{E}_{n,l} < 0$. Normierbar ist aber nur die Lösung mit dem Minuszeichen im Exponenten. Wir schreiben dann

$$u_{n,l}(\bar{r}) = \exp\left(-\sqrt{-2\bar{E}_{n,l}} \cdot \bar{r}\right) \cdot f_{n,l}(\bar{r}) \quad (15.19)$$

und finden durch Einsetzen in Gl. (15.17):

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} + 2\sqrt{-2\bar{E}_{n,l}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} - \frac{2}{\bar{r}} \right] f_{n,l}(\bar{r}) = 0. \quad (15.20)$$

Da wir normierbare Lösungen $u_{n,l}(\bar{r})$ suchen darf $f_{n,l}(\bar{r})$ für großen Abstand zum Schwerpunkt, $\bar{r} \gg 1$, nicht stärker anwachsen als eine Potenz von \bar{r} :

$$\begin{aligned} f_{n,l}(\bar{r}) &\propto \bar{r}^n \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (15.21)$$

Einsetzen ergibt für $\bar{r} \gg 1$:

$$\left[\underbrace{\frac{l(l+1) - n(n-1)}{\bar{r}}}_{\rightarrow 0 \text{ für } \bar{r} \rightarrow \infty} + \left(2n\sqrt{-2\bar{E}_{n,l}}\right) - 2 \right] \bar{r}^{n-1} = 0.$$

Die Forderung kann nur erfüllt werden wenn gilt

$$\begin{aligned} \bar{E}_{n,l} &= -\frac{1}{2n^2} \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (15.22)$$

Dies ist die **Balmer**-Formel (eigentlich $\bar{E}_{n=2,l} - \bar{E}_{n \geq 3,l}$), wie sie 1885 zur Erklärung der sichtbaren Spektrallinien von atomarem Wasserstoff (rot, blaugrün, 4×violett, 2×ultraviolett) empirisch gefunden wurden. Die Formel (15.22) für die Energie der im Wasserstoffatom gebundenen Elektronen wurde erstmalig von Niels Bohr im Jahr 1913 aus seinem Atommodell hergeleitet. Die Zahlen $n = 1, 2, 3, \dots$ heißen Hauptquantenzahlen. Die Energie des Grundzustands ist $\bar{E}_{1,0} = -\frac{1}{2}$, das entspricht -13.6 [eV]. Offensichtlich hängt beim Wasserstoffatom der Eigenwert $\bar{E}_{n,l}$ nicht von der Drehimpulsquantenzahl l ab, es liegt ein hoher Entartungsgrad vor!

Einsetzen von Gl. (15.22) in Gl. (15.20) liefert dann

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} + \frac{2}{n} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} - \frac{2}{\bar{r}} \right] f_{n,l}(\bar{r}) = 0. \quad (15.23)$$

Die Normierungsbedingung Gl. (15.14) führt auf

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr' |U_{n,l}(r')|^2 \\ &= \int_0^\infty d\bar{r} |u_{n,l}(\bar{r})|^2 \\ &= \int_0^\infty d\bar{r} \exp\left(-2\sqrt{-2E} \cdot \bar{r}\right) \cdot |f_{n,l}(\bar{r})|^2 \\ &= \int_0^\infty d\bar{r} \bar{r}^2 \exp\left(-2\sqrt{-2E} \cdot \bar{r}\right) \cdot \left| \frac{f_{n,l}(\bar{r})}{\bar{r}} \right|^2. \end{aligned} \quad (15.24)$$

Folglich muss die Funktion $\left| \frac{f_{n,l}(\bar{r})}{\bar{r}} \right|^2$ für $\bar{r} \rightarrow 0$ beschränkt sein, d.h. $f_{n,l}(\bar{r}) \rightarrow 0$ für $\bar{r} \rightarrow 0$. Da zugleich die Funktion $f_{n,l}(\bar{r})$ für großen Abstand $\bar{r} \gg 1$ nur wie eine Potenz anwachsen darf, ist die zulässige Lösung der Differentialgleichung (15.23) somit eine Potenzreihe von \bar{r} , wobei der dominante Term in der Reihe für $f_{n,l}(\bar{r})$ für kleinen Abstand $\bar{r} \ll 1$ proportional zu \bar{r}^{l+1} und für großen Abstand $\bar{r} \gg 1$ proportional zu \bar{r}^n variiert. Damit ist klar, dass $f_{n,l}(\bar{r})$ ein *Polynom* der Variablen \bar{r} sein muss, und zwar mit niedrigster Potenz \bar{r}^{l+1} und höchster Potenz \bar{r}^n :

$$\begin{aligned} f_{n,l}(\bar{r}) &= \sum_{j=l+1}^n C_j(n,l) \bar{r}^j \\ l &\leq n-1. \end{aligned} \quad (15.25)$$

Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (15.23) lautet

$$f_{n,l}(\bar{r}) = (2\bar{r})^{l+1} F\left(-n+l+1, 2l+2; \frac{2\bar{r}}{n}\right) \quad (15.26)$$

Hier ist

$$F(a, c; z) = 1 + \frac{a}{c}z + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots \quad (15.27)$$

die sog. konfluente hypergeometrische Reihe. Diese ist eine Lösung der **Kummer-schen** Differentialgleichung:

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (c-z) \frac{d}{dz} - a \right] F(a, c; z) = 0. \quad (15.28)$$

15 Das Wasserstoffatom

Im vorliegenden Fall ist $c = 2l + 2 > 0$, $a = -n + l + 1 \leq 0$, d.h. die Reihe ist endlich, sie bricht nach endlich vielen Reihengliedern ab! Damit sind die Koeffizienten $C_j(n, l)$ in dem Polynom Gl. (15.25) explizit berechnet.

Nach dem Gesagten lautet die auf Eins normierte Lösung für die Radialfunktion $u_{n,l}(\bar{r})$ der Eigenfunktion des Wasserstoffatoms zum Energie-Eigenwert

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2n^2} E_0 \quad (15.29)$$

nummehr:

$$u_{n,l}(\bar{r}) = \frac{1}{n(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \exp\left(-\frac{\bar{r}}{n}\right) \left(\frac{2\bar{r}}{n}\right)^{l+1} F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2\bar{r}}{n}\right)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (15.30)$$

In der Tabelle sind für $n = 1, 2, 3, 4$ und die jeweils möglichen l -Werte die entsprechenden expliziten Ausdrücke für die Radialfunktionen des Wasserstoffatoms zusammengestellt:

Quantenzahlen	Zustand	radiale Wellenfunktion
$n = 1, l = 0$	1s	$2\bar{r} \exp(-\bar{r})$
$n = 2, l = 0$	2s	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\bar{r} - \frac{\bar{r}^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{2}\right)$
$n = 2, l = 1$	2p	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \bar{r}^2 \exp\left(-\frac{\bar{r}}{2}\right)$
$n = 3, l = 0$	3s	$\frac{2}{3\sqrt{3}} \left(\bar{r} - \frac{2\bar{r}^2}{3} + \frac{2\bar{r}^3}{27}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{3}\right)$
$n = 3, l = 1$	3p	$\frac{2}{27} \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\bar{r}^2 - \frac{\bar{r}^3}{6}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{3}\right)$
$n = 3, l = 2$	3d	$\frac{4}{81\sqrt{30}} \bar{r}^3 \exp\left(-\frac{\bar{r}}{3}\right)$
$n = 4, l = 0$	4s	$\frac{1}{4} \left(\bar{r} - \frac{3\bar{r}^2}{4} + \frac{\bar{r}^3}{8} - \frac{\bar{r}^4}{192}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{4}\right)$
$n = 4, l = 1$	4p	$\frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} \left(\bar{r}^2 - \frac{\bar{r}^3}{4} + \frac{\bar{r}^4}{80}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{4}\right)$
$n = 4, l = 2$	4d	$\frac{1}{64\sqrt{5}} \left(\bar{r}^3 - \frac{\bar{r}^4}{12}\right) \exp\left(-\frac{\bar{r}}{4}\right)$
$n = 4, l = 3$	4f	$\frac{1}{768\sqrt{35}} \bar{r}^4 \exp\left(-\frac{\bar{r}}{4}\right)$

Es verschieben sich wegen der Abhängigkeit $\propto \exp\left(-\frac{\bar{r}}{n}\right)$ der radialen Wellenfunktion $u_{n,l}(\bar{r})$ die Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten des Elektrons mit wachsender Hauptquantenzahl n nach außen. Mit wachsender Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ bei festgehaltenem n nimmt zugleich die Anzahl der Knotenflächen der Wellenfunktion ab. Die vermeintlich anschauliche Vorstellung von quantisierten Kreisbahnen (oder Ellipsen), auf denen das Elektron sich

gemäß dem Bohrschen Atommodell aufhalten soll, wird durch die dargelegte exakte Lösung des quantenmechanischen Schrödinger-Eigenwertproblems offensichtlich widerlegt!

Zu jedem Wert der Drehimpulsquantenzahl $l \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ gibt es $2l+1$ Werte der magnetischen Quantenzahl $m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$. Damit berechnet sich der Entartungsgrad eines Eigenzustands $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ zum Eigenwert E_n zu

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (15.31)$$

Tatsächlich ist die Entartung im Wasserstoff um den Faktor **Vier** (!) größer, da der Spin des Elektrons und der Spin des Protons **je** zwei Einstellmöglichkeiten, „up“ und „down“, besitzen. Relativistische Effekte und kleine magnetische Wechselwirkungseffekte zwischen Elektron und Proton führen zu einer teilweisen Aufhebung dieser Entartung (Feinstruktur und Hyperfeinstruktur). Als Folge der („zufälligen“) Entartung des Wasserstoffatoms haben Zustände mit gerader Parität, z.B. das $2s$ -Orbital $\psi_{2,0,0}(\mathbf{r})$, und Zustände mit ungerader Parität, z.B. die drei p -Orbitale $\psi_{2,1,m}(\mathbf{r})$, die gleiche Energie, in dem Fall $E_2 = -\frac{1}{8}E_0$.

Die angegebene Lösung der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms beschreibt auch die gebundenen Zustände von positiv geladenen, zum Wasserstoffatom ähnlichen Ionen. Diese bestehen aus einem Elektron und einem Z -fach positiv geladenem Atomkern der Masse M_K . In dem Fall ist in der Lösung Gl. (15.30) für das Wasserstoffatom zu substituieren:

$$\begin{aligned} M_p &\rightarrow M_K & (15.32) \\ \frac{1}{\mu} &\rightarrow \frac{1}{M_K} + \frac{1}{M_e} \\ |e|^2 &\rightarrow Z|e|^2. \end{aligned}$$

Entsprechend skaliert für ein zum Wasserstoffatom ähnliches Ion die Energie E_0 und der Bohrsche Radius a_0 gemäß:

$$\begin{aligned} E_0 &\rightarrow Z^2 E_0 & (15.33) \\ a_0 &\rightarrow \frac{a_0}{Z}. \end{aligned}$$

Bei Berücksichtigung des Spinfreiheitsgrades des Elektrons wird die („zufällige“) vierfache Entartung des Wasserstoffspektrums partiell aufgehoben. Die Klassifizierung der Eigenzustände des gebundenen Elektrons erfolgt dann durch eine Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$ und durch die Quantenzahlen $j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\}$ des Gesamtdrehimpulsoperators $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Die hieraus resultierende Aufspaltung, z.B. des $2p$ -Niveaus in ein $2p_{\frac{1}{2}}$ - und ein $2p_{\frac{3}{2}}$ -Niveau, ist um den Faktor $\alpha^2 = (\frac{1}{137.036})^2 \simeq$

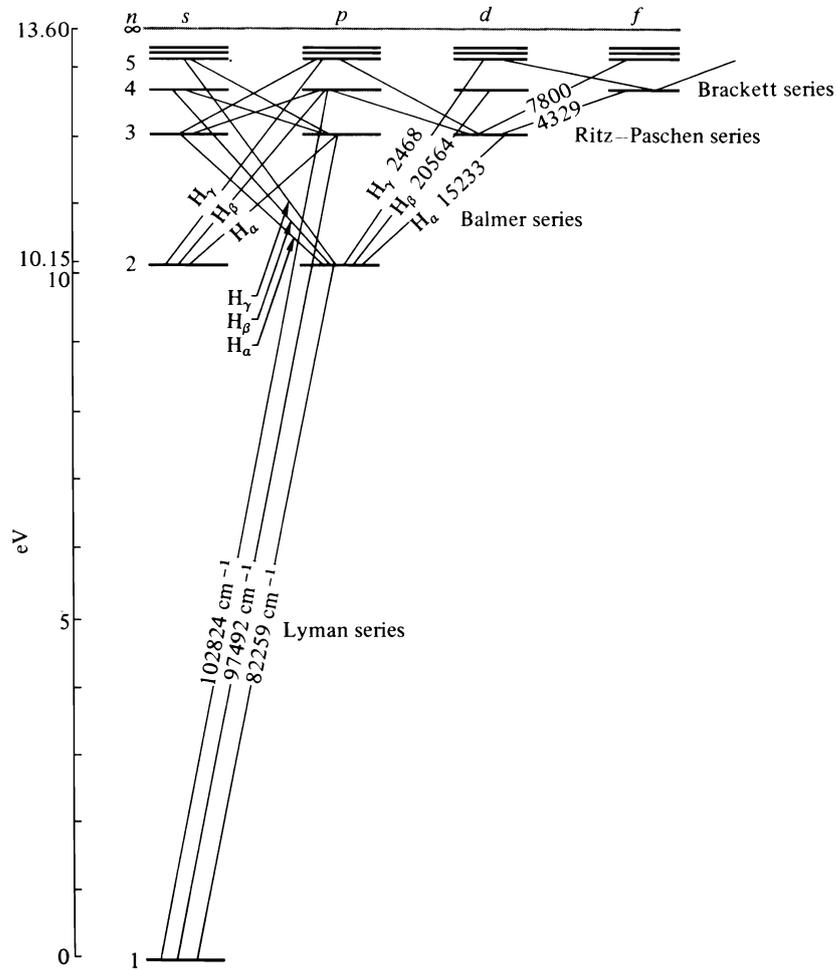


FIGURE 5-2 The energy levels of the hydrogen atom according to Schrödinger's theory.

Abbildung 15.1: Abbildung entnommen aus „Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure“ von Masataka Mizushima (W.A. Benjamin Inc., New York 1970)

5.3×10^{-5} gegenüber der Energieskala E_0 des Wasserstoffatoms reduziert:

$$E_{n,j} = -\frac{E_0}{2n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right].$$

Dies ist die sog. **Feinaufspaltung**. Die Formel beschreibt die führende relativistischen Korrektur zum Spektrum des Wasserstoffatoms wie sie auch aus der exakten **Dirac-Gleichung** folgt.

Die Energieniveaus der Feinaufspaltung sind mit Blick auf den Spinfreiheitsgrad des Protons immer noch zweifach entartet. Erst bei Berücksichtigung der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung von Proton-Spin und Elektron-Spin spaltet der vierfach entartete $1s$ -Grundzustand des Wasserstoffatoms auf in einen energetisch tiefer liegenden Singlet-Grundzustand und drei energetisch höher liegende (entartete) Triplet-Zustände. Diese sog. **Hyperfeinaufspaltung** des $1s$ -Grundzustands ist beim Wasserstoffatom von der Größenordnung $\frac{M_e}{M_p} \alpha^2$.

Beim Übergang vom (leicht angeregten) $1s$ -Triplet-Zustand ($F = 1$) in den $1s$ -Singlet-Grundzustand ($F = 0$) wird ein langwelliges Photon mit einer Energie 5.88×10^{-6} [eV] entsprechend einer Frequenz von 1.42 [GHz] emittiert. Dieser Übergang ist die Ursache der bekannten 21 [cm]-Linie, die in der Radioastronomie zur Identifikation von Wasserstoff im interstellaren Raum dient.

16 Variationsrechnung, die Feynman-Hellmann-Regel und der Virialsatz in der Quantenmechanik

Sei \hat{H} ein hermitescher Operator mit diskretem Spektrum:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) &= E_n\psi_n(\mathbf{r}) \\ E_n &\in \mathbb{R} \\ E_0 &\leq E_n \\ n &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ \langle \psi_n, \psi_m \rangle &= \delta_{n,m} \\ \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^\dagger(\mathbf{r}') &= \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}').\end{aligned}$$

Wir betrachten das Funktional

$$\begin{aligned}\mathcal{E}[\Psi] &= \frac{\langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \langle \hat{H} \rangle_\Psi \\ \Psi &\in \mathcal{H}.\end{aligned}\tag{16.1}$$

Offensichtlich ist

$$\mathcal{E}[\psi_n] = E_n.\tag{16.2}$$

Wir betrachten eine Variation der Form

$$\begin{aligned}\Psi_n(\lambda) &= \psi_n + \lambda\phi \\ \lambda &\in \mathbb{R} \\ \phi &\in \mathcal{H},\end{aligned}$$

in Ortsdarstellung $\Psi_n(\mathbf{r}; \lambda) = \psi_n(\mathbf{r}) + \lambda\phi(\mathbf{r})$. Dann gilt

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{E}[\Psi_n(\lambda)] = 0.\tag{16.3}$$

Der Beweis wird durch Einsetzen geführt:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}[\Psi_n(\lambda)] &= \frac{\langle \psi_n + \lambda\phi, \hat{H}(\psi_n + \lambda\phi) \rangle}{\langle \psi_n + \lambda\phi, \psi_n + \lambda\phi \rangle} \\ &= \frac{\langle \psi_n, \hat{H}\psi_n \rangle + \langle \psi_n, \hat{H}\lambda\phi \rangle + \langle \lambda\phi, \hat{H}\psi_n \rangle + \langle \lambda\phi, \hat{H}\lambda\phi \rangle}{\langle \psi_n, \psi_n \rangle + \langle \psi_n, \lambda\phi \rangle + \langle \lambda\phi, \psi_n \rangle + \langle \lambda\phi, \lambda\phi \rangle},\end{aligned}$$

mit $\langle \psi_n, \psi_n \rangle = 1$ folgt

$$= \frac{E_n + \lambda \langle \psi_n, \hat{H}\phi \rangle + \lambda \langle \phi, \hat{H}\psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \hat{H}\phi \rangle}{1 + \lambda \langle \psi_n, \phi \rangle + \lambda \langle \phi, \psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \phi \rangle}$$

und wegen $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ gilt:

$$\begin{aligned}&= \frac{E_n + \lambda \langle \hat{H}\psi_n, \phi \rangle + \lambda \langle \phi, \hat{H}\psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \hat{H}\phi \rangle}{1 + \lambda \langle \psi_n, \phi \rangle + \lambda \langle \phi, \psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \phi \rangle} \\ &= \frac{E_n + \lambda E_n \langle \psi_n, \phi \rangle + \lambda E_n \langle \phi, \psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \hat{H}\phi \rangle}{1 + \lambda \langle \psi_n, \phi \rangle + \lambda \langle \phi, \psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \phi \rangle}.\end{aligned}$$

Folglich gilt:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}[\Psi_n(\lambda)] &= E_n + \lambda^2 \cdot \frac{\langle \phi, \hat{H}\phi \rangle - E_n \langle \phi, \phi \rangle}{1 + \lambda \langle \psi_n, \phi \rangle + \lambda \langle \phi, \psi_n \rangle + \lambda^2 \langle \phi, \phi \rangle} \\ &= E_n + \mathcal{O}(\lambda^2).\end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass eine Änderung *erster* Ordnung der Eigenfunktion eine Änderung *zweiter* Ordnung im zugeordneten Eigenwert nach sich zieht.

Wir betrachten jetzt einen nach unten beschränkten Hamilton-Operator \hat{H} , dessen Eigenwerte E_n der Größe nach angeordnet sind:

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$$

Dann gilt mit

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(\mathbf{r}) \\ c_n &= \langle \psi_n, \Psi \rangle \\ \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) &= E_n \psi_n(\mathbf{r}) \\ \langle \psi_n, \psi_m \rangle &= \delta_{n,m}\end{aligned}$$

die Beziehung:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}[\Psi] &= \frac{\langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \\
 &= \frac{\langle \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \hat{H} \sum_{m=0}^{\infty} c_m \psi_m \rangle}{\langle \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \sum_{m=0}^{\infty} c_m \psi_m \rangle} \\
 &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger \sum_{m=0}^{\infty} c_m \langle \psi_n, E_m \psi_m \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger \sum_{m=0}^{\infty} c_m \langle \psi_n, \psi_m \rangle} \\
 &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger c_n E_n}{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger c_n} \geq \frac{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger c_n E_0}{\sum_{n=0}^{\infty} c_n^\dagger c_n} \\
 &\geq E_0.
 \end{aligned}$$

Für jeden beliebigen Zustand $\Psi \in \mathcal{H}$ liefert die Zahl $\mathcal{E}[\Psi]$ somit eine *obere* Schranke für die Energie E_0 des Grundzustands:

$$E_0 \leq \mathcal{E}[\Psi].$$

Hängt der gewählte Zustand Ψ noch analytisch von einem Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$ ab, $\Psi = \psi(\lambda)$, so kann eine optimale obere Schranke \mathcal{E}_0 für die Grundzustandsenergie E_0 durch die Forderung

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_0 &= \min_{\lambda \in \mathbb{R}} \mathcal{E}[\psi(\lambda)] \\
 E_0 &\leq \mathcal{E}_0
 \end{aligned}$$

ermittelt werden. Eine notwendige Bedingung hierfür ist

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{E}[\psi(\lambda)] \stackrel{!}{=} 0.$$

In der Theoretischen Chemie sind Variationsrechnungen zur Bestimmung des Grundzustands von Molekülen, bei denen der Ansatz Ψ für die Wellenfunktion von mehreren hundert Parametern λ_j abhängig sein kann, Routine.

In den Anwendungen kommt es oft vor, dass auch der Hamilton-Operator von einem oder mehreren Parametern λ abhängt:

$$\hat{H} = \hat{H}(\lambda).$$

Dann sind die Eigenwerte und die Eigenfunktionen von $\hat{H}(\lambda)$ ebenfalls vom Parameter λ abhängig:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(\lambda) \psi_n(\mathbf{r}; \lambda) &= E_n(\lambda) \psi_n(\mathbf{r}; \lambda) \\
 E_n(\lambda) &= \langle \psi_n(\lambda), \hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda) \rangle \\
 \langle \psi_n(\lambda), \psi_n(\lambda) \rangle &= 1.
 \end{aligned}$$

Also folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_n(\lambda), \psi_n(\lambda) \rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda), \psi_n(\lambda) \right\rangle + \left\langle \psi_n(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda) \right\rangle. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} E_n(\lambda) &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_n(\lambda), \hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda) \rangle \\ &= \begin{cases} \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda), \hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda) \right\rangle \\ + \left\langle \psi_n(\lambda), \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \right] \psi_n(\lambda) \right\rangle \\ + \left\langle \psi_n(\lambda), \hat{H}(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda) \right\rangle \end{cases} \\ \stackrel{\hat{H}=\hat{H}^\dagger}{=} & \begin{cases} \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda), \hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda) \right\rangle \\ + \left\langle \psi_n(\lambda), \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \right] \psi_n(\lambda) \right\rangle \\ + \left\langle \hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda) \right\rangle \end{cases} \\ &= \begin{cases} E_n(\lambda) \underbrace{\left(\left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda), \psi_n(\lambda) \right\rangle + \left\langle \psi_n(\lambda), \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi_n(\lambda) \right\rangle \right)}_{=0} \\ + \underbrace{\left\langle \psi_n(\lambda), \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \right] \psi_n(\lambda) \right\rangle}_{=\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \rangle_{\psi_n(\lambda)}} \end{cases} \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \right\rangle_{\psi_n(\lambda)} \end{aligned}$$

Dieser Zusammenhang ist in der Quantenmechanik als die **Regel von Feynman-Hellmann** bekannt:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} E_n(\lambda) = \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H}(\lambda) \right\rangle_{\psi_n(\lambda)}. \quad (16.4)$$

Beim Wasserstoffatom setzt sich der Hamilton-Operator additiv aus zwei Anteilen zusammen:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}.$$

Dabei ist \hat{K} der Operator der kinetischen Energie und \hat{V} ist der Operator, der dem Coulomb-Potential zugeordnet ist:

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \\ \hat{V} &= -\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|}. \end{aligned}$$

Der Hamilton-Operator hängt im vorliegenden Fall von zwei Parametern ab: $\lambda \in \{\mu, |e|\}$. Da wir die Eigenwerte E_n des Wasserstoffatoms analytisch explizit als Formel berechnet haben, können wir auch die Ableitung von E_n nach dem gewünschten Parameter λ explizit berechnen:

$$E_n(\lambda) = -\frac{E_0(\lambda)}{2n^2}$$

$$E_0(\lambda) = \frac{\mu}{\hbar^2} \left(\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2.$$

Also folgt z.B.:

$$|e| \frac{\partial}{\partial |e|} E_n(\lambda) = -\frac{\left(|e| \frac{\partial}{\partial |e|} E_0 \right)}{2n^2} = -\frac{2E_0}{n^2}.$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned} |e| \frac{\partial}{\partial |e|} E_n(\lambda) &= \left\langle |e| \frac{\partial}{\partial |e|} \hat{H}(\lambda) \right\rangle_{\psi_n(\lambda)} \\ &= \left\langle |e| \frac{\partial}{\partial |e|} (\hat{K} + \hat{V}) \right\rangle_{\psi_n(\lambda)} \\ &= \left\langle |e| \frac{\partial}{\partial |e|} \left(-\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|} \right) \right\rangle_{\psi_n(\lambda)} \\ &= 2 \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n(\lambda)}. \end{aligned}$$

Damit folgt sofort für *jeden(!)* Eigenzustand $\psi_n = \psi_n(\lambda)$ des Wasserstoffatoms der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n} &= -\frac{E_0(\lambda)}{n^2} \\ &= 2 \langle \hat{H}(\lambda) \rangle_{\psi_n} \\ &= 2 \langle \hat{K} + \hat{V} \rangle_{\psi_n}. \end{aligned}$$

Somit

$$\langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} = -\frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n} = -\langle \hat{H}(\lambda) \rangle_{\psi_n}. \quad (16.5)$$

Diese Aussage können wir auch aus dem zuvor diskutierten Variationsprinzip ganz allgemein ableiten. Dazu betrachten wir jetzt einen auf Eins normierten Ei-

genzustand $\psi_n(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{K} + \hat{V} \\ \hat{K} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \\ \hat{V} &= C_\kappa |\mathbf{r}|^\kappa \\ \kappa &\in \mathbb{Z}.\end{aligned}\tag{16.6}$$

Der Fall des Wasserstoffatoms ist darin für $\kappa = -1$ als Spezialfall enthalten. Der Fall $\kappa = 2$ beschreibt den isotropen Harmonischen Oszillator in $D = 3$ räumlichen Dimensionen.

Wir betrachten eine Skalentransformation

$$\hat{\mathbf{r}} \rightarrow (1 + \lambda) \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}'.\tag{16.7}$$

Damit die Kanonischen Vertauschungsregeln von Ort und Impuls auch nach der Skalentransformation gelten ist zu fordern

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{1}{1 + \lambda} \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}'.\tag{16.8}$$

Das Normierungsintegral

$$\int d^3r |\psi_n(\mathbf{r})|^2 = 1$$

eines Eigenzustands $\psi_n(\mathbf{r})$ von \hat{H} ist unter einer Skalentransformation invariant. Dazu berechnen wir die Jacobi-Determinante zu

$$\frac{\partial(r_1, r_2, r_3)}{\partial(r'_1, r'_2, r'_3)} = \frac{1}{(1 + \lambda)^3}$$

und erhalten:

$$\begin{aligned}1 &= \int d^3r |\psi_n(\mathbf{r})|^2 = \int d^3r' \frac{\partial(r_1, r_2, r_3)}{\partial(r'_1, r'_2, r'_3)} \left| \psi_n\left(\frac{1}{1 + \lambda} \mathbf{r}'\right) \right|^2 \\ &= \int d^3r' \frac{1}{(1 + \lambda)^3} \left| \psi_n\left(\frac{1}{1 + \lambda} \mathbf{r}'\right) \right|^2 \\ &= \int d^3r' \left| \frac{1}{(1 + \lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n\left(\frac{1}{1 + \lambda} \mathbf{r}'\right) \right|^2 \\ &= \int d^3r' |\Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda)|^2.\end{aligned}$$

Demnach transformiert sich $\psi_n(\mathbf{r})$ unter der Skalentransformation Gl. (16.7) in eine benachbarte Funktion $\Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda)$ gemäß

$$\psi_n(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{1}{(1 + \lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n\left(\frac{1}{1 + \lambda} \mathbf{r}'\right) \equiv \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda),$$

wobei das Normierungsintegral den Wert Eins behält! Für infinitesimal kleines λ folgt

$$\Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) = \psi_n(\mathbf{r}') - \lambda \cdot \left[\frac{3}{2} \psi_n(\mathbf{r}') + \mathbf{r}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \psi_n(\mathbf{r}') \right] + o(\lambda^2).$$

Da $\psi_n(\mathbf{r})$ ein Eigenzustand des Hamilton-Operators Gl. (16.6) ist, gilt aufgrund von Gl. (16.3) notwendig

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} = 0, \quad (16.9)$$

d.h. in der ersten Ordnung bzgl. des Parameters λ müssen sich die Änderungen der Erwartungswerte der Operatoren \hat{K} und \hat{V} gegenseitig zu Null kompensieren:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{K} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} = - \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda)}. \quad (16.10)$$

Wir berechnen nun die Änderung des Erwartungswertes der kinetischen Energie unter der Skalentransformation Gl. (16.7):

$$\begin{aligned} \langle \hat{K} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2\mu} \right] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) \left[\frac{1}{(1+\lambda)^2} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \right] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= \frac{1}{1+2\lambda+\lambda^2} \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda). \end{aligned}$$

Aber es gilt exakt:

$$\begin{aligned} &\int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \right) \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= \int d^3 r \frac{\partial(r'_1, r'_2, r'_3)}{\partial(r_1, r_2, r_3)} \Psi_n^\dagger[(1+\lambda)\mathbf{r}; \lambda] \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \right) \Psi_n^\dagger[(1+\lambda)\mathbf{r}; \lambda] \\ &= \int d^3 r (1+\lambda)^3 \left[\frac{1}{(1+\lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n^\dagger(\mathbf{r}) \right] \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \right) \left[\frac{1}{(1+\lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n(\mathbf{r}) \right] \\ &= \int d^3 r \psi_n^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \right) \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \langle \hat{K} \rangle_{\Psi_n(\lambda=0)} \\ &= \langle \hat{K} \rangle_{\psi_n}. \end{aligned}$$

Demnach nimmt die kinetische Energie ab, wenn die Längenskala größer wird:

$$\begin{aligned} \langle \hat{K} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= \frac{1}{1+2\lambda+\lambda^2} \langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} \quad (16.11) \\ \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{K} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= -2 \langle \hat{K} \rangle_{\psi_n}. \end{aligned}$$

Entsprechend überlegen wir:

$$\begin{aligned}\langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) [C_\kappa |\mathbf{r}'|^\kappa] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) [C_\kappa |(1+\lambda)\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= (1+\lambda)^\kappa \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) [C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda).\end{aligned}$$

Nun gilt exakt:

$$\begin{aligned}& \int d^3 r' \Psi_n^\dagger(\mathbf{r}'; \lambda) [C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \Psi_n(\mathbf{r}'; \lambda) \\ &= \int d^3 r \frac{\partial(r'_1, r'_2, r'_3)}{\partial(r_1, r_2, r_3)} \Psi_n^\dagger[(1+\lambda)\mathbf{r}; \lambda] [C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \Psi_n[(1+\lambda)\mathbf{r}; \lambda] \\ &= \int d^3 r (1+\lambda)^3 \left[\frac{1}{(1+\lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n^\dagger(\mathbf{r}) \right] [C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \left[\frac{1}{(1+\lambda)^{\frac{3}{2}}} \psi_n(\mathbf{r}) \right] \\ &= \int d^3 r \psi_n^\dagger(\mathbf{r}) [C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa] \psi_n(\mathbf{r}) \\ &= \langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda=0)} \\ &= \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n}.\end{aligned}$$

Damit ändert sich im vorliegenden Fall die potentielle Energie bei einer Skalentransformation Gl. (16.7) gemäß

$$\begin{aligned}\langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= (1+\lambda)^\kappa \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n} \\ \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} &= \kappa \cdot \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n}.\end{aligned}$$

Somit schließen wir aus der Eigenschaft

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{K} + \hat{V} \rangle_{\Psi_n(\lambda)} = 0$$

nunmehr

$$\langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} = \frac{\kappa}{2} \cdot \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n}. \quad (16.12)$$

Dieses aus der Stationaritätseigenschaft Gl. (16.3) folgende Resultat für den zeitunabhängigen Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{K} + \hat{V} \\ \hat{K} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} \\ \hat{V} &= C_\kappa |\mathbf{r}|^\kappa\end{aligned}$$

steht in einem engen Zusammenhang mit dem sog. Virialsatz in der Analytischen Mechanik.

Dazu betrachten wir den Erwartungswert der zeitlichen Ableitung des Produktes von Ort und Impuls, dem sog. Virial $\hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t)$, genommen über einem stationären Zustand ψ_n von \hat{H} , also $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$.

Im Heisenberg-Bild (siehe Kapitel 8) ist

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}}_H(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathbf{r}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ \hat{\mathbf{p}}_H(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathbf{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ \frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}_H(t) &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}_H(t)] = \frac{\hat{\mathbf{p}}_H(t)}{\mu} \\ \frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}_H(t) &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}_H(t)] = -\kappa C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}_H(t)|^{\kappa-2} \hat{\mathbf{r}}_H(t).\end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[\hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t)] &= \left[\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}}_H(t) \right] \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t) + \hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \left[\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}}_H(t) \right] \quad (16.13) \\ &= -\kappa C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}_H(t)|^{\kappa-2} \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t) + \hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}_H(t)}{\mu} \\ &= -\kappa C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}_H(t)|^\kappa + \frac{[\hat{\mathbf{p}}_H(t)]^2}{\mu} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \left(-\kappa C_\kappa |\hat{\mathbf{r}}|^\kappa + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{\mu} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} (-\kappa\hat{V} + 2\hat{K}) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.\end{aligned}$$

Andererseits ist

$$\frac{d}{dt}[\hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t)] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_H(t)]. \quad (16.14)$$

Damit gilt für den Erwartungswert der zeitlichen Ableitung des Virials, genommen über einem stationären (!) Zustand ψ_n des Hamilton-Operators \hat{H} , die (eigentlich triviale!) Aussage:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \rangle_{\psi_n} &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t)] \rangle_{\psi_n} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi_n, \hat{H} \circ \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \psi_n \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi_n, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \circ \hat{H} \psi_n \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \hat{H} \psi_n, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \psi_n \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi_n, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \hat{H} \psi_n \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} E_n \{ \langle \psi_n, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \psi_n \rangle - \langle \psi_n, \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \psi_n \rangle \} \\ &= 0.\end{aligned}$$

Vergleichen liefert

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{r}}_H(t) \cdot \hat{\mathbf{p}}_H(t) \rangle_{\psi_n} \\
 &= \left\langle e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \left(-\kappa \hat{V} + 2\hat{K} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \right\rangle_{\psi_n} \\
 &= \left\langle -\kappa \hat{V} + 2\hat{K} \right\rangle_{\psi_n}.
 \end{aligned}$$

Also folgt wieder

$$\langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} = \frac{\kappa}{2} \cdot \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n},$$

d.h. es gilt der Virialsatz der Quantenmechanik:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle_{\psi_n} &= \langle \hat{K} + \hat{V} \rangle_{\psi_n} & (16.15) \\
 &= \frac{\kappa + 2}{2} \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n} \\
 &= \frac{\kappa + 2}{\kappa} \langle \hat{K} \rangle_{\psi_n}.
 \end{aligned}$$

Der Virialsatz der klassischen Mechanik macht entsprechende Aussagen für die *zeitlichen Mittelwerte* der Größen K und V im Phasenraum (siehe „Scriptum zur Analytischen Mechanik, Kapitel 7“).

Für den Harmonischen Oszillator, $\kappa = 2$, ist dann

$$\langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} = \frac{1}{2} \langle \hat{H} \rangle_{\psi_n} = \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n}.$$

Für das Kepler-Problem bzw. das Wasserstoffatom, $\kappa = -1$, ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{K} \rangle_{\psi_n} &= -\langle \hat{H} \rangle_{\psi_n} & (16.16) \\
 \langle \hat{V} \rangle_{\psi_n} &= 2 \langle \hat{H} \rangle_{\psi_n}.
 \end{aligned}$$

Die letztere Aussage bestätigt das bereits mit der Regel von Feynman-Hellmann hergeleitete Resultat von Gl. (16.16).

Der Virialsatz der Quantenmechanik lässt sich verallgemeinern. Sei \hat{H} Hamilton-Operator eines Systems. Sei ψ_n Eigenzustand von \hat{H} zum Eigenwert E_n :

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n.$$

Sei \hat{A} ein beliebiger Operator. Dann gilt, dass der Erwartungswert des Kommutators von \hat{H} mit \hat{A} genommen über einem Eigenzustand ψ_n von \hat{H} identisch Null

ist:

$$\begin{aligned}
0 &= (E_n - E_n) \langle \psi_n, \hat{A} \psi_n \rangle \\
&= \langle \psi_n, (E_n \hat{A} - \hat{A} E_n) \psi_n \rangle \\
&= \langle \psi_n, (\hat{H} \circ \hat{A} - \hat{A} \circ \hat{H}) \psi_n \rangle \\
&= \langle \psi_n, [\hat{H}, \hat{A}] \psi_n \rangle \\
&= \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_{\psi_n}.
\end{aligned}$$

Im Heisenberg-Bild ist

$$\hat{A}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \circ \hat{A} \circ e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t},$$

woraus sofort folgt:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}_H(t) \rangle_{\psi_n} = \left\langle \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) \right\rangle_{\psi_n} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}_H(t)] \rangle_{\psi_n} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle_{\psi_n} = 0.$$

Wir betrachten jetzt den Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms in Kugelkoordinaten (siehe Kapitel 15):

$$\hat{H}(l) = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu \hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}}, \quad (16.17)$$

wobei

$$\begin{aligned}
\hat{p}_r &= \frac{1}{\hat{r}} \circ \frac{\hbar}{i} \partial_r \circ \hat{r} = \frac{\hbar}{i} \left(\partial_r + \frac{1}{\hat{r}} \right) = \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{1}{\hat{r}} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}} \frac{1}{\hat{r}} \right)}_{\hat{p}_r = \hat{p}_r^\dagger} \\
[\hat{p}_r, \hat{r}] &= \frac{\hbar}{i} \hat{1}.
\end{aligned}$$

Wir betrachten für ganzzahliges $\kappa \in \mathbb{Z}$ den Operator

$$\hat{A} = \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r.$$

Der Fall $\kappa = 1$ entspricht gerade dem im vorherigen Abschnitt betrachteten „Virial“. Der Operator \hat{A} ist dann ein „verallgemeinertes Virial“.

Nach dem Gesagten gilt jetzt für einen Eigenzustand $\psi_{n,l,m}$ des Wasserstoffatoms

$$0 = \langle [\hat{H}(l), \hat{A}] \rangle_{\psi_{n,l,m}} = \langle [\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] \rangle_{\psi_{n,l,m}}.$$

Wir berechnen unschwer

$$[\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] = [\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa] \circ \hat{p}_r + \hat{r}^\kappa \circ [\hat{H}(l), \hat{p}_r]$$

und weiter:

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}(l), \hat{p}_r] &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu \hat{r}^3} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}^2} \right) \\
 [\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa] &= \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu}, \hat{r}^\kappa \right] \\
 &= \frac{1}{2\mu} ([\hat{p}_r, \hat{r}^\kappa] \circ \hat{p}_r + \hat{p}_r \circ [\hat{p}_r, \hat{r}^\kappa]) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\kappa}{2\mu} (\hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{p}_r + \hat{p}_r \circ \hat{r}^{\kappa-1}) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\kappa}{2\mu} (2\hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{p}_r + [\hat{p}_r, \hat{r}^{\kappa-1}]) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\kappa}{2\mu} \left(2\hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{p}_r + \frac{\hbar}{i} (\kappa-1) \hat{r}^{\kappa-2} \right).
 \end{aligned}$$

Also folgt weiter:

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &\frac{\kappa}{2\mu} \left(2\hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{p}_r + \frac{\hbar}{i} (\kappa-1) \hat{r}^{\kappa-2} \right) \circ \hat{p}_r \\ &+ \hat{r}^\kappa \circ \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu \hat{r}^3} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}^2} \right) \end{aligned} \right\} \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &\frac{\kappa}{\mu} \hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{p}_r^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\kappa(\kappa-1)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-2} \circ \hat{p}_r \\ &+ \hat{r}^{\kappa-1} \circ \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu \hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} \right) \end{aligned} \right\}.
 \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt noch den Kommutator

$$[\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\kappa-1}{2\mu} \left(2\hat{r}^{\kappa-2} \circ \hat{p}_r + \frac{\hbar}{i} (\kappa-2) \hat{r}^{\kappa-3} \right).$$

Der Ausdruck lehrt uns, dass wir den Operator $\frac{\hbar}{i} \frac{\kappa(\kappa-1)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-2} \circ \hat{p}_r$ umschreiben können zu

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\kappa(\kappa-1)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-2} \circ \hat{p}_r = \frac{\kappa}{2} \left(\begin{aligned} &[\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] \\ &- \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{(\kappa-1)(\kappa-2)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-3} \end{aligned} \right),$$

d.h. wir erhalten:

$$[\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] = \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa \hat{r}^{\kappa-1} \circ \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\kappa}{2} \left(\begin{aligned} &[\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] \\ &- \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{(\kappa-1)(\kappa-2)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-3} \end{aligned} \right) \\ &+ \hat{r}^{\kappa-1} \circ \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu \hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} \right) \end{aligned} \right\}.$$

Zum Schluss formen wir um:

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} = \hat{H}(l) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu \hat{r}^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}}.$$

Dann erhalten wir durch Einsetzen die Operator-Identität:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa \hat{r}^{\kappa-1} \circ \left(\hat{H}(l) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{\hat{r}^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} \right) \\ &+ \frac{\kappa}{2} \left(\begin{aligned} &[\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] \\ &- \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{(\kappa-1)(\kappa-2)}{2\mu} \hat{r}^{\kappa-3} \end{aligned} \right) \\ &+ \hat{r}^{\kappa-1} \circ \left(\frac{\hbar^2}{\mu} \frac{l(l+1)}{\hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} \right) \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa \hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{H}(l) - \frac{\hbar^2}{\mu} \kappa l(l+1) \hat{r}^{\kappa-3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 2\kappa \hat{r}^{\kappa-2} \\ &+ \frac{\kappa}{2} [\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\kappa(\kappa-1)(\kappa-2)}{2} \hat{r}^{\kappa-3} \\ &+ \frac{\hbar^2}{\mu} l(l+1) \hat{r}^{\kappa-3} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \hat{r}^{\kappa-2} \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa \hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{H}(l) + \frac{\kappa}{2} [\hat{H}(l), \hat{r}^{\kappa-1}] \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} (2\kappa - 1) \hat{r}^{\kappa-2} \\ &+ \frac{\hbar^2}{\mu} (\kappa - 1) \left[\frac{\kappa(\kappa-2)}{4} - l(l+1) \right] \hat{r}^{\kappa-3} \end{aligned} \right\}.
\end{aligned}$$

Mit Hilfe dieser Identität lassen sich die Erwartungswerte der Momente von \hat{r} über einem Eigenzustand $\psi_{n,l,m}$ des Wasserstoffatoms unmittelbar rekursiv bestimmen:

$$\begin{aligned}
0 &= \left\langle [\hat{H}(l), \hat{r}^\kappa \circ \hat{p}_r] \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa \left\langle \hat{r}^{\kappa-1} \circ \hat{H} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} + \frac{\kappa}{2} \underbrace{\left\langle [\hat{H}, \hat{r}^{\kappa-1}] \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}}_{=0} \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} (2\kappa - 1) \left\langle \hat{r}^{\kappa-2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{\mu} (\kappa - 1) \left[\frac{\kappa(\kappa-2)}{4} - l(l+1) \right] \left\langle \hat{r}^{\kappa-3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ \begin{aligned} &2\kappa E_n \left\langle \hat{r}^{\kappa-1} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} (2\kappa - 1) \left\langle \hat{r}^{\kappa-2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{\mu} (\kappa - 1) \left[\frac{\kappa(\kappa-2)}{4} - l(l+1) \right] \left\langle \hat{r}^{\kappa-3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \end{aligned} \right\}.
\end{aligned}$$

Dies ist eine Rekursionsformel zur Berechnung der Erwartungswerte $\langle \hat{r}^{\kappa-1} \rangle_{\psi_{n,l,m}}$ des Wasserstoffatoms:

$$\left\{ \begin{aligned} &2\kappa E_n \left\langle \hat{r}^{\kappa-1} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} (2\kappa - 1) \left\langle \hat{r}^{\kappa-2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{\mu} (\kappa - 1) \left[\frac{\kappa(\kappa-2)}{4} - l(l+1) \right] \left\langle \hat{r}^{\kappa-3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \end{aligned} \right\} = 0.$$

Für $\kappa = 1$ folgt

$$0 = 2E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}},$$

also:

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} = -\frac{2E_n}{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}} = \frac{1}{n^2} \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{n^2} \frac{1}{a_0}. \quad (16.18)$$

Für $\kappa = 2$ folgt

$$0 = 4E_n \cdot \langle \hat{r} \rangle_{\psi_{n,l,m}} + \frac{\hbar^2}{\mu} [-l(l+1)] \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} + 3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0},$$

also

$$\begin{aligned} \langle \hat{r} \rangle_{\psi_{n,l,m}} &= \frac{-1}{4E_n} \left[\frac{\hbar^2}{\mu} [-l(l+1)] \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} + 3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \quad (16.19) \\ &= \frac{-1}{4E_n} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[3 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \\ &= \frac{1}{2 \left(\frac{\mu}{\hbar^2} \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \right)} [3n^2 - l(l+1)] \\ &= \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)] \\ &= a_0 n^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{2n^2} \right). \end{aligned}$$

Für $\kappa = 3$ folgt

$$0 = 6E_n \langle \hat{r}^2 \rangle_{\psi_{n,l,m}} + \frac{\hbar^2}{\mu} 2 \left[\frac{3}{4} - l(l+1) \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 5 \langle \hat{r} \rangle_{\psi_{n,l,m}},$$

also

$$\begin{aligned} \langle \hat{r}^2 \rangle_{\psi_{n,l,m}} &= -\frac{1}{6E_n} \frac{\hbar^2}{\mu} \left[2 \left[\frac{3}{4} - l(l+1) \right] + \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 5 \langle \hat{r} \rangle_{\psi_{n,l,m}} \right] \quad (16.20) \\ &= \frac{n^2}{3E_0} \frac{\hbar^2}{\mu} \left[2 \left[\frac{3}{4} - l(l+1) \right] + \frac{5}{2} [3n^2 - l(l+1)] \right] \\ &= \frac{n^2}{6} a_0^2 [3 - 9l(l+1) + 15n^2] \\ &= a_0^2 n^4 \left[\frac{5}{2} + \frac{1 - 3l(l+1)}{2n^2} \right]. \end{aligned}$$

Offensichtlich ist die Ausdehnung der Orbitale $n = 1, 2, 3, \dots$ beim Wasserstoffatom proportional zu $a_0 n^2$.

Wir untersuchen jetzt absteigende Werte von κ . Für $\kappa = 0$ folgt (die Formel ergibt nur Sinn für $l \neq 0$):

$$0 = \frac{\hbar^2}{\mu} l(l+1) \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}. \quad (16.21)$$

Wir sehen, dass wir die Serie nicht zu negativen Werten von κ fortsetzen können, ohne den Erwartungswert $\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \rangle_{\psi_{n,l,m}}$ zu kennen. Die fehlende Information kann zum

Glück mittels der Regel von Feynman-Hellmann gefunden werden! Die Hauptquantenzahl beim Wasserstoffatom lässt sich nämlich aufgrund der Entartung für fest gewählten Bahndrehimpuls $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$ schreiben als

$$\begin{aligned} n &= n_r + l + 1 \\ n_r &= 0, 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (16.22)$$

d.h. es gilt die Bohrsche Formel:

$$E_n = -\frac{E_0}{2(n_r + l + 1)^2}.$$

Die Regel von Feynman-Hellmann liefert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial l} E_n &= \frac{E_0}{(n_r + l + 1)^3} = \left\langle \frac{\partial}{\partial l} \hat{H}(l) \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu \hat{r}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} \right) \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &= \left\langle \frac{\hbar^2 2l+1}{2\mu \hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu} \left(l + \frac{1}{2} \right) \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}. \end{aligned}$$

Wir erhalten so

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} &= \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \frac{\frac{\mu}{\hbar^2} E_0}{(n_r + l + 1)^3} \\ &= \frac{1}{a_0^2} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \frac{1}{n^3}. \end{aligned}$$

Einsetzen in Gl. (16.21) liefert jetzt sofort:

$$\begin{aligned} l &\neq 0 \\ \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} &= \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{l(l+1)} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} \\ &= \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{l(l+1)} \frac{1}{\left(l + \frac{1}{2}\right) n^3}. \end{aligned}$$

Die Erwartungswerte

$$\left\langle \hat{r}^{\kappa-1} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}} = \int d^3r' \psi_{n,l,m}^\dagger(\mathbf{r}') (r')^{\kappa-1} \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}')$$

16 Variationsrechnung, die Feynman-Hellmann-Regel und der Virialsatz in der QM

können nach dem Gesagten für alle $\kappa \in \mathbb{Z}$ bestimmt werden, u.z. ohne die komplizierten Formeln für die Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}')$ des Wasserstoffatoms explizit einzusetzen und die entsprechenden Integrale direkt zu berechnen!

Die folgende Tabelle listet einige für die Anwendungen wichtige Erwartungswerte $\langle \hat{r}^{\kappa-1} \rangle_{\psi_{n,l,m}}$ auf:

Erwartungswert	explizite Formel
$\langle \hat{r} \rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$a_0 n^2 \left[\frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{2n^2} \right]$
$\langle \hat{r}^2 \rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$a_0^2 n^4 \left[\frac{5}{2} + \frac{1-3l(l+1)}{2n^2} \right]$
$\left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$\frac{1}{a_0} \frac{1}{n^2}$
$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$\frac{1}{a_0^2} \frac{1}{n^3} \frac{1}{l+\frac{1}{2}}$
$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$\frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3} \frac{1}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})} ; l > 0$
$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^4} \right\rangle_{\psi_{n,l,m}}$	$\frac{1}{a_0^4} \frac{1}{n^5} \frac{3n^2 - l(l+1)}{2(l+\frac{3}{2})(l+1)(l+\frac{1}{2})l(l-\frac{1}{2})} ; l > 0$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der Quantenmechanik mit Anwendungen

Wir betrachten ein physikalisches System S , das wir in zwei komplementäre Untersysteme S_I und S_{II} mit Drehimpulsquantenzahl j_I und j_{II} bzgl. der gleichen Drehachse zerlegen. Dann stellt sich insbesondere die Frage, welchen Wertevorrat die Drehimpulsquantenzahl j des Gesamt-Drehimpulsoperators

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\ [\hat{J}_a, \hat{J}_b] &= i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{J}_c \\ a, b &\in \{x, y, z\} \\ \hat{J}_a &= \hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}\end{aligned}$$

besitzt, wenn die Werte für j_I und j_{II} fest gewählt sind. Die Antwort $j = j_I + j_{II}$ ist zwar korrekt, aber sie beschreibt, wie wir jetzt zeigen werden, nicht den allgemeinen Fall.

Da für jedes der beiden disjunkten Subsysteme S_Λ gilt

$$\begin{aligned}\Lambda &\in \{I, II\} \\ \hat{J}_\Lambda^2 &= \hat{J}_{\Lambda,x}^2 + \hat{J}_{\Lambda,y}^2 + \hat{J}_{\Lambda,z}^2 \\ [\hat{J}_{\Lambda,a}, \hat{J}_{\Lambda,b}] &= i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{J}_{\Lambda,c} \\ a, b &\in \{x, y, z\},\end{aligned}$$

existiert gemäß der Resultate von Kapitel 13 für jede vorgegebene Drehimpulsquantenzahl $j_\Lambda \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$ des Subsystems S_Λ ein Multiplett von diskreten Eigenzuständen $\psi_{j_\Lambda, m_\Lambda}$, die einen $(2j_\Lambda + 1)$ -dimensionalen Hilbert-Raum \mathcal{H}_{j_Λ} aufspannen:

$$\begin{aligned}\psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} &\in \mathcal{H}_{j_\Lambda} \\ \hat{J}_\Lambda^2 \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} &= \hbar^2 j_\Lambda (j_\Lambda + 1) \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} \\ \hat{J}_{\Lambda, z} \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} &= \hbar m \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} \\ \hat{J}_{\Lambda, \pm} &= \hat{J}_{\Lambda, x} \pm i \hat{J}_{\Lambda, y} \\ \hat{J}_{\Lambda, \pm} \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} &= \hbar \sqrt{j_\Lambda (j_\Lambda + 1) - m_\Lambda (m_\Lambda \pm 1)} \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda \pm 1}.\end{aligned}$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Der Wertevorrat der Eigenwerte m_Λ ist auf das Intervall $-j_\Lambda \leq m_\Lambda \leq j_\Lambda$ eingeschränkt:

$$m_\Lambda \in \{-j_\Lambda, -j_\Lambda + 1, -j_\Lambda + 2, \dots, j_\Lambda - 1, j_\Lambda\}.$$

Die Tensorprodukte $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ bilden eine orthonormierte vollständige Basis im Hilbertraum $\mathcal{H}_{j_I, j_{II}} = \mathcal{H}_{j_I} \otimes \mathcal{H}_{j_{II}}$:

$$\begin{aligned} \sum_{m_I=-j_I}^{j_I} \sum_{m_{II}=-j_{II}}^{j_{II}} [\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}] [\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}]^\dagger &= \hat{1}_I \otimes \hat{1}_{II} \\ \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \rangle & \\ = \langle \psi_{j_I, m_I}, \psi_{j_I, m'_I} \rangle \langle \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_{II}, m'_{II}} \rangle &= \delta_{m_I, m'_I} \delta_{m_{II}, m'_{II}}. \end{aligned}$$

Für ein abgeschlossenes isotropes System $S = S_I \cup S_{II}$, $S_I \cap S_{II} = \emptyset$ wird der Hamilton-Operator \hat{H} des Systems in der Regel mit allen drei kartesischen Komponenten des Gesamt-Drehimpulsoperators \hat{J}_a vertauschen, jedoch nicht mit den Komponenten der individuellen Drehimpulsoperatoren $\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,b}$, die voneinander unabhängig in den betreffenden Untersystemen S_I bzw. S_{II} operieren:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II}, \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,b}] &= \hat{0} \\ a, b &\in \{x, y, z\}. \end{aligned}$$

Man überzeugt sich leicht davon, dass die drei kartesischen Komponenten \hat{J}_a des Gesamt-Drehimpulsoperators sowohl mit \hat{J}^2 als auch mit den Quadraten $\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2$ vertauschen:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_a, \hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}] &= \left\{ \begin{aligned} &(\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}) \circ (\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}) \\ &- (\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}) \circ (\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}) \end{aligned} \right\} \\ &= \left\{ \begin{aligned} &(\hat{J}_{I,a} \circ \hat{J}_I^2) \otimes (\hat{1}_{II} \circ \hat{1}_{II}) + (\hat{1}_I \circ \hat{J}_I^2) \otimes (\hat{J}_{II,a} \circ \hat{1}_{II}) \\ &- (\hat{J}_I^2 \circ \hat{J}_{I,a}) \otimes (\hat{1}_{II} \circ \hat{1}_{II}) - (\hat{J}_I^2 \circ \hat{1}_I) \otimes (\hat{1}_{II} \circ \hat{J}_{II,a}) \end{aligned} \right\} \\ &= (\hat{J}_{I,a} \circ \hat{J}_I^2 - \hat{J}_I^2 \circ \hat{J}_{I,a}) \otimes \hat{1}_{II} + \hat{0} \\ &= [\hat{J}_{I,a}, \hat{J}_I^2] \otimes \hat{1}_{II} \\ &= \hat{0}_I \otimes \hat{1}_{II} \\ &= \hat{0} \\ [\hat{J}_a, \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2] &= \left\{ \begin{aligned} &(\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}) \circ (\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2) \\ &- (\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2) \circ (\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}) \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \hat{J}_{I,a} \otimes \hat{J}_{II}^2 + \hat{1}_I \otimes (\hat{J}_{II,a} \circ \hat{J}_{II}^2 - \hat{J}_{II}^2 \circ \hat{J}_{II,a}) - \hat{J}_{I,a} \otimes \hat{J}_{II}^2 \\
&= \hat{1}_I \otimes [\hat{J}_{II,a}, \hat{J}_{II}^2] \\
&= \hat{1}_I \otimes \hat{0}_{II} \\
&= \hat{0}.
\end{aligned}$$

Dann kommutiert auch der Operator \hat{J}_a^2 mit $\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2$:

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}, \hat{J}_a^2] &= [\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}, \hat{J}_a] \circ \hat{J}_a + \hat{J}_a \circ [\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}, \hat{J}_a] = \hat{0} \\
[\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2, \hat{J}_a^2] &= [\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2, \hat{J}_a] \circ \hat{J}_a + \hat{J}_a \circ [\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2, \hat{J}_a] = \hat{0}.
\end{aligned}$$

Somit ist gezeigt:

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}, \hat{J}^2] &= [\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}, \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2] = \hat{0} \\
[\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2, \hat{J}^2] &= [\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2, \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2] = \hat{0}.
\end{aligned}$$

Da die vier hermiteschen Operatoren \hat{J}^2 , \hat{J}_z , $\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2$ nun alle miteinander kommutieren, können sie auch *simultan* diagonalisiert werden, d.h. gemäß der Überlegungen von Kapitel 12 existiert ein vollständiger Satz von Eigenzuständen $\Psi_{(j_I j_{II}) j m} \in \mathcal{H}_{j_I} \otimes \mathcal{H}_{j_{II}}$ mit der Eigenschaft:

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 \Psi_{(j_I j_{II}) j m} &= \hbar^2 j(j+1) \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \\
\hat{J}_z \Psi_{(j_I j_{II}) j m} &= \hbar m \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \\
(\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}) \Psi_{(j_I j_{II}) j m} &= \hbar^2 j_I(j_I+1) \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \\
(\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2) \Psi_{(j_I j_{II}) j m} &= \hbar^2 j_{II}(j_{II}+1) \Psi_{(j_I j_{II}) j m}.
\end{aligned}$$

Dieses System der Eigenfunktionen $\Psi_{(j_I j_{II}) j m}$ bildet ebenfalls ein orthonormiertes Basissystem für den Hilbert-Raum $\mathcal{H}_{j_I} \otimes \mathcal{H}_{j_{II}}$ des Gesamtsystems:

$$\begin{aligned}
\sum_{j,m} \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \Psi_{(j_I j_{II}) j m}^\dagger &= \hat{1}_I \otimes \hat{1}_{II} \\
\langle \Psi_{(j_I j_{II}) j m}, \Psi_{(j_I j_{II}) j' m'} \rangle &= \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}.
\end{aligned}$$

Wir können daher jeden der Eigenzustände $\Psi_{(j_I j_{II}) j m}$ als Linearkombination der Produktzustände $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ darstellen:

$$\Psi_{(j_I j_{II}) j m} = \sum_{m_I = -j_I}^{j_I} \sum_{m_{II} = -j_{II}}^{j_{II}} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}.$$

Umgekehrt gilt:

$$\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} = \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j [C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j}]^\dagger \Psi_{(j_I j_{II}) j m}.$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Die (noch zu bestimmenden!) Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \rangle \\ [C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j}]^\dagger &= \langle \Psi_{(j_I j_{II}) j m}, \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \rangle \end{aligned}$$

heißen **Clebsch-Gordan-Koeffizienten**. Sie sind dann und nur dann ungleich Null, wenn gilt

$$\begin{aligned} m &= m_I + m_{II} \\ j &\in \{|j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II}\}. \end{aligned}$$

Der erste Teil der Behauptung ist leicht einzusehen:

$$\begin{aligned} m C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \hat{J}_z \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \rangle \\ &= \langle \hat{J}_z \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \rangle \\ &= (m_I + m_{II}) \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \rangle \\ &= (m_I + m_{II}) C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j}. \end{aligned}$$

Demnach gilt

$$\Psi_{(j_I j_{II}) j m} = \sum_{m_I = -j_I}^{j_I} \sum_{m_{II} = -j_{II}}^{j_{II}} \delta_{m, m_I + m_{II}} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}.$$

Offensichtlich ist der Produktzustand $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ simultaner Eigenzustand der kommutierenden Operatoren \hat{J}_z , $\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2$:

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} &= \hbar (m_I + m_{II}) \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \\ (\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}) \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} &= \hbar^2 j_I(j_I + 1) \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \\ (\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2) \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} &= \hbar^2 j_{II}(j_{II} + 1) \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}. \end{aligned}$$

Der Zustand $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ ist im allgemeinen aber *kein* Eigenzustand von \hat{J}^2 .

Um dies einzusehen formen wir um:

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 &= \sum_{a \in \{x,y,z\}} \left(\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a} \right) \left(\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a} \right) \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \sum_{a \in \{x,y,z\}} \left(\hat{J}_{I,a}^2 \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}^2 \right) \\ + 2\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{J}_{II,z} \\ + \left(\hat{J}_{I,x} + i\hat{J}_{I,y} \right) \otimes \left(\hat{J}_{II,x} - i\hat{J}_{II,y} \right) \\ + \left(\hat{J}_{I,x} - i\hat{J}_{I,y} \right) \otimes \left(\hat{J}_{II,x} + i\hat{J}_{II,y} \right) \end{array} \right\} \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2 \\ + 2\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{J}_{II,z} \\ + \hat{J}_{I,+} \otimes \hat{J}_{II,-} + \hat{J}_{I,-} \otimes \hat{J}_{II,+} \end{array} \right\}.
\end{aligned}$$

Es folgt:

$$\begin{aligned}
&\hat{J}^2 \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \\
&= \left(\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2 + 2\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{J}_{II,z} + \hat{J}_{I,+} \otimes \hat{J}_{II,-} + \hat{J}_{I,-} \otimes \hat{J}_{II,+} \right) \\
&\quad \times \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \\
&= \hbar^2 \left\{ [j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2m_I m_{II}] \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \right. \\
&\quad + \sqrt{j_I(j_I + 1) - m_I(m_I + 1)} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - m_{II}(m_{II} - 1)} \\
&\quad \quad \times \psi_{j_I, m_I+1} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}-1} \\
&\quad + \sqrt{j_I(j_I + 1) - m_I(m_I - 1)} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - m_{II}(m_{II} + 1)} \\
&\quad \quad \left. \times \psi_{j_I, m_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}+1} \right\}.
\end{aligned}$$

Die rechte Seite der Gleichung ist eine Linearkombination der Basiszustände $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ sowie $\psi_{j_I, m_I+1} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}-1}$ und $\psi_{j_I, m_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}+1}$. Also ist ein Produktzustand $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ i.a. kein Eigenzustand von \hat{J}^2 .

Es gibt aber eine Ausnahme, den Spezialfall $m_I = j_I$ und $m_{II} = j_{II}$. Der betreffende Produktzustand $\psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}}$ ist in der Tat simultaner Eigenzustand von \hat{J}^2 und \hat{J}_z mit entsprechenden Drehimpulsquantenzahlen $j = j_I + j_{II} = m$:

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} &= \hbar^2 [j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I j_{II}] \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
&= \hbar^2 (j_I + j_{II})(j_I + j_{II} + 1) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}}.
\end{aligned}$$

Man sieht leicht ein, dass der spezielle Produktzustand $\psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}}$ durch den Aufsteige-Operator

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+}$$

vernichtet wird:

$$\hat{J}_+ \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} = \hat{0}.$$

Somit ist ein gemeinsamer Eigenzustand der Operatoren \hat{J}^2 , \hat{J}_z , $\hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2$ zum größtmöglichen Wert der Quantenzahlen j und m gegeben zu

$$\begin{aligned} j &= j_I + j_{II} = m \\ \Psi_{(j_I j_{II}) j_I + j_{II}, j_I + j_{II}} &= \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}}. \end{aligned}$$

Die übrigen Mitglieder $\Psi_{(j_I j_{II}) j, m}$ des zugehörigen Multipletts werden (in Analogie zu den Überlegungen von Kapitel 13) durch wiederholtes Anwenden des Absteige-Operators

$$\hat{J}_- = \hat{J}_{I,-} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,-}$$

generiert:

$$\begin{aligned} \Psi_{(j_I j_{II}) j, m} &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} (\hat{J}_-)^{j-m} \Psi_{(j_I j_{II}) j, j} \quad (17.1) \\ m &\in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}. \end{aligned}$$

Entsprechend ist der Drehimpuls-Eigenzustand $\Psi_{(j_I j_{II}) j, j-1}$ des Multipletts mit dem *zweitgrößten* Wert für die Quantenzahl m gegeben zu:

$$\begin{aligned} j &= j_I + j_{II} \\ m &= j - 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{(j_I j_{II}) j, j-1} &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{(2j_I + 2j_{II} - 1)!}{(2j_I + 2j_{II})!}} \hat{J}_- \Psi_{(j_I j_{II}) j, j} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{1}{2j_I + 2j_{II}}} (\hat{J}_{I,-} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,-}) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{1}{2(j_I + j_{II})}} \left(\begin{aligned} &\hbar \sqrt{j_I(j_I + 1) - j_I(j_I - 1)} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\ &+ \hbar \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - j_{II}(j_{II} - 1)} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \end{aligned} \right) \\ &= \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} + \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1}. \end{aligned}$$

Dieser Zustand ist nun orthogonal zum Zustand

$$\Phi_{(j_I j_{II})} = \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1},$$

was wir jetzt zeigen wollen:

$$\begin{aligned}
j &= j_I + j_{II} \\
&\langle \Phi_{(j_I j_{II})}, \Psi_{(j_I j_{II})j, j-1} \rangle \\
&= \left\langle \left(\begin{array}{c} \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\ -\sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\ +\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \end{array} \right) \right\rangle \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\sqrt{j_{II} j_I} - \sqrt{j_I j_{II}}}{j_I + j_{II}} \right) \langle \psi_{j_I, j_I-1}, \psi_{j_I, j_I-1} \rangle \langle \psi_{j_{II}, j_{II}}, \psi_{j_{II}, j_{II}} \rangle \\ + \frac{j_{II}}{j_I + j_{II}} \underbrace{\langle \psi_{j_I, j_I-1}, \psi_{j_I, j_I} \rangle}_{=0} \langle \psi_{j_{II}, j_{II}}, \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \rangle \\ - \frac{j_I}{j_I + j_{II}} \langle \psi_{j_I, j_I}, \psi_{j_I, j_I-1} \rangle \underbrace{\langle \psi_{j_{II}, j_{II}-1}, \psi_{j_{II}, j_{II}} \rangle}_{=0} \end{array} \right\} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_+ \Phi_{(j_I j_{II})} \\
&= (\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+}) \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right) \\
&= \hbar \left(\begin{array}{c} \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \sqrt{j_I(j_I + 1) - (j_I - 1)j_I} \\ -\sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - (j_{II} - 1)j_{II}} \end{array} \right) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
&= \hbar \left(\sqrt{\frac{2j_{II}j_I}{j_I + j_{II}}} - \sqrt{\frac{2j_I j_{II}}{j_I + j_{II}}} \right) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
&= 0,
\end{aligned}$$

und weiter:

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_z \Phi_{(j_I j_{II})} \\
&= (\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,z}) \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \hbar(j_I - 1 + j_{II}) \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
 &\quad - \hbar(j_I + j_{II} - 1) \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \\
 &= \hbar(j_I + j_{II} - 1) \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right) \\
 &= \hbar(j_I + j_{II} - 1) \Phi_{(j_I j_{II})}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\hat{J}^2 \Phi_{(j_I j_{II})} \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \hat{J}_I^2 \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II}^2 + 2\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{J}_{II,z} \\ \quad + \hat{J}_{I,+} \otimes \hat{J}_{II,-} \\ \quad + \hat{J}_{I,-} \otimes \hat{J}_{II,+} \end{array} \right\} \left(\begin{array}{l} \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\ -\sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \end{array} \right) \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \left[(j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2(j_I - 1)j_{II}) \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{j_I(j_I + 1) - (j_I - 1)j_I} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - j_{II}(j_{II} - 1)} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right] \\
 &\quad - \hbar^2 \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \left[(j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I(j_{II} - 1)) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{j_I(j_I + 1) - j_I(j_I - 1)} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - (j_{II} - 1)j_{II}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right] \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \left[(j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2(j_I - 1)j_{II}) \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2j_I} \sqrt{2j_{II}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right] \\
 &\quad - \hbar^2 \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \left[(j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I(j_{II} - 1)) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2j_I} \sqrt{2j_{II}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right] \\
 &= \hbar^2 [j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I j_{II}] \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right) \\
 &\quad - 2\hbar^2 \left[\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} j_{II} + \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \sqrt{j_I j_{II}} \right] \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
 &\quad + 2\hbar^2 \left[\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \sqrt{j_I j_{II}} + \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} j_I \right] \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \hbar^2 [j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I j_{II}] \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right) \\
&\quad - 2\hbar^2 \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} (j_{II} + j_I) \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} \\
&\quad + 2\hbar^2 \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} (j_I + j_{II}) \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \\
&= \hbar^2 [j_I(j_I + 1) + j_{II}(j_{II} + 1) + 2j_I j_{II} - 2(j_{II} + j_I)] \\
&\quad \times \left(\sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1} \right) \\
&= \hbar^2 [j_I(j_I - 1) + j_{II}(j_{II} - 1) + 2j_I j_{II}] \Phi_{(j_I j_{II})} \\
&= \hbar^2 (j_I + j_{II} - 1)(j_I + j_{II}) \Phi_{(j_I j_{II})} \\
&= \hbar^2 j(j + 1) \Phi_{(j_I j_{II})}, \text{ wobei } j = j_I + j_{II} - 1.
\end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass der Zustand

$$\begin{aligned}
\Psi_{(j_I j_{II}) j_I + j_{II} - 1, j_I + j_{II} - 1} &\equiv \Phi_{(j_I j_{II})} \\
&= \sqrt{\frac{j_{II}}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I-1} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}} - \sqrt{\frac{j_I}{j_I + j_{II}}} \psi_{j_I, j_I} \otimes \psi_{j_{II}, j_{II}-1}
\end{aligned}$$

ein Eigenzustand zu \hat{J}^2 und \hat{J}_z mit einer um Eins kleineren Quantenzahl $j = j_I + j_{II} - 1$ und mit Quantenzahl $m = j = j_I + j_{II} - 1$ ist. Die Mitglieder zu diesem neuen Multiplett werden wieder wie in Gleichung (17.1) durch wiederholtes Anwenden des Absteige-Operators \hat{J}_- konstruiert. Das beschriebene Verfahren, \hat{J}_- einmal auf den Eckzustand anwenden und den dazu orthogonalen Zustand zu suchen, lässt sich so lange wiederholen, bis das Verfahren schließlich beim kleinsten möglichen Wert $j = |j_I - j_{II}|$ abbricht: Es bezeichne \mathcal{OR} die Operation des Orthogonalisierens. Dann finden wir folgende graphische Darstellung des Vorgangs:

$$\begin{array}{ccccc}
 \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II},j_I+j_{II}} & & & & \\
 \hat{J}_- \downarrow & & & & \\
 \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II},j_I+j_{II}-1} & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-1,j_I+j_{II}-1} & & & \\
 \hat{J}_- \downarrow & \hat{J}_- \downarrow & & & \\
 \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II},j_I+j_{II}-2} & \xrightarrow{\mathcal{O}\mathcal{R}} \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-1,j_I+j_{II}-2} & \xrightarrow{\mathcal{O}\mathcal{R}} & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-2,j_I+j_{II}-2} & \xrightarrow{\mathcal{O}\mathcal{R}} \\
 \vdots & \hat{J}_- \downarrow & & \hat{J}_- \downarrow & \\
 \hat{J}_- \downarrow & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-1,j_I+j_{II}-3} & & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-2,j_I+j_{II}-3} & \\
 \vdots & \vdots & & \vdots & \\
 \hat{J}_- \downarrow & \hat{J}_- \downarrow & & \hat{J}_- \downarrow & \\
 \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II},-(j_I+j_{II})} & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-1,-(j_I+j_{II}-1)} & & \Psi_{(j_I j_{II})j_I+j_{II}-2,-(j_I+j_{II}-2)} &
 \end{array}$$

Insgesamt gibt es $(2j_I + 1)(2j_{II} + 1)$ verschiedene Produktzustände $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ zu konstant gewählten Drehimpulsquantenzahlen j_I und j_{II} . Die Entartung eines Eigenzustands $\Psi_{(j_I j_{II})j, m}$ ist gleich der Anzahl der Paare (m_I, m_{II}) , welche die Nebenbedingung $m = m_I + m_{II}$ erfüllen.

Es gibt einen eleganten Weg, den Wertevorrat der Quantenzahlen j zum Gesamtdrehimpuls \hat{J}_a für konstant gewählte Werte j_I und j_{II} zu bestimmen. Dazu betrachten wir die Spur

$$\begin{aligned}
 \text{tr} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_z \right) \right] &= \text{tr} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \left(\hat{J}_{I,z} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,z} \right) \right) \right] \\
 &= \text{tr} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{I,z} \right) \otimes \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{II,z} \right) \right] \\
 &= \text{tr}_I \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{I,z} \right) \right] \cdot \text{tr}_{II} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{II,z} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Nun bilden für $-j_I \leq m_I \leq j_I$ die Zustände ψ_{j_I, m_I} ein vollständiges orthonormiertes Basissystem im Unterraum \mathcal{H}_I , d.h. es folgt:

$$\begin{aligned}
 \text{tr}_I \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{I,z} \right) \right] &= \sum_{m_I=-j_I}^{j_I} \left\langle \psi_{j_I, m_I}, \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{I,z} \right) \psi_{j_I, m_I} \right\rangle \\
 &= \sum_{m_I=-j_I}^{j_I} \langle \psi_{j_I, m_I}, \exp(im_I \varphi) \psi_{j_I, m_I} \rangle \\
 &= \sum_{m_I=-j_I}^{j_I} e^{im_I \varphi} \\
 &= \frac{e^{i(j_I+1)\varphi} - e^{-ij_I \varphi}}{e^{i\varphi} - 1} \\
 &= \frac{\sin \left[\left(j_I + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)},
 \end{aligned}$$

und entsprechend:

$$\mathrm{tr}_{II} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{II,z} \right) \right] = \frac{\sin \left[\left(j_{II} + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)}.$$

Jetzt unter der Annahme $j_{II} \leq j_I$:

$$\begin{aligned} & \mathrm{tr} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_z \right) \right] \\ = & \mathrm{tr}_I \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{I,z} \right) \right] \cdot \mathrm{tr}_{II} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_{II,z} \right) \right] \\ = & \frac{\sin \left[\left(j_I + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)} \frac{\sin \left[\left(j_{II} + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)} \\ = & \frac{\cos \left[\left(j_I - j_{II} \right) \varphi \right] - \cos \left[\left(j_I + j_{II} - 1 \right) \varphi \right]}{2 \left[\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \right]^2} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \frac{\cos (j\varphi) - \cos [(j+1)\varphi]}{2 \left[\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \right]^2} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \frac{\cos \left[\left(\left(j + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \right) \varphi \right] - \cos \left[\left(\left(j + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{2 \left[\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \right]^2} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \frac{\begin{cases} \cos \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \cos \left(\frac{1}{2} \varphi \right) + \sin \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \\ - \cos \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \cos \left(\frac{1}{2} \varphi \right) + \sin \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \end{cases}}{2 \left[\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \right]^2} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \frac{2 \sin \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)}{2 \left[\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right) \right]^2} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \frac{\sin \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]}{\sin \left(\frac{1}{2} \varphi \right)} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j e^{im\varphi} \\ = & \sum_{j=j_I-j_{II}}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(j_I j_{II})j,m}, \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_z \right) \Psi_{(j_I j_{II})j,m} \right\rangle \\ = & \mathrm{tr} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{J}_z \right) \right]. \end{aligned}$$

Somit ist manifest:

$$\sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j e^{im\varphi} = \left(\sum_{m_I=-j_I}^{j_I} e^{im_I\varphi} \right) \left(\sum_{m_{II}=-j_{II}}^{j_{II}} e^{im_{II}\varphi} \right).$$

Insbesondere zeigen unsere Überlegungen, dass der Wertevorrat der Quantenzahl j für fest gewählte Drehimpuls-Quantenzahlen j_I und j_{II} nach unten und nach oben begrenzt ist:

$$j \in \{|j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II} - 1, j_I + j_{II}\}.$$

Dies ist die sog. Dreiecksregel. Im Grenzfall $\varphi \rightarrow 0$ ergibt sich jetzt:

$$\sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j 1 = \left(\sum_{m_I=-j_I}^{j_I} 1 \right) \left(\sum_{m_{II}=-j_{II}}^{j_{II}} 1 \right),$$

also:

$$\sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} (2j+1) = (2j_I+1)(2j_{II}+1).$$

Nach dem Gesagten gilt für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\begin{aligned} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= 0 \\ \text{für } j &\notin \{|j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II} - 1, j_I + j_{II}\} \\ \text{oder } m &\neq m_I + m_{II}. \end{aligned}$$

Aufgrund der Orthonormalität und Vollständigkeit der Eigenzustände $\Psi_{(j_I j_{II})j,m}$ für $j \in \{|j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II} - 1, j_I + j_{II}\}$ und $-j \leq m \leq j$ sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j}$ bei geeigneter Wahl der Phase der Basisfunktionen $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ nichts anderes als die Elemente

$$[\hat{C}]_{jm; m_I m_{II}} = C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j}$$

einer *reellen, orthogonalen* Matrix \hat{C} der Dimension $[(2j_I+1)(2j_{II}+1)] \times [(2j_I+1)(2j_{II}+1)]$, die im Hilbert-Raum $\mathcal{H}_{j_I, j_{II}} = \mathcal{H}_{j_I} \otimes \mathcal{H}_{j_{II}}$ den Basiswechsel von den $(2j_I+1)(2j_{II}+1)$ Produktzuständen $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ zu den $(2j_I+1)(2j_{II}+1)$ Eigenzuständen $\Psi_{(j_I j_{II})j,m}$ von \hat{J}^2 und \hat{J}_z beschreibt:

$$\begin{aligned} \hat{C} \circ \hat{J}_a \circ \hat{C}^T &= \hat{C} \circ (\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}) \circ \hat{C}^T \\ &= \begin{pmatrix} \hat{J}_a^{(j_I+j_{II})} & \hat{0} & \dots & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{J}_a^{(j_I+j_{II}-1)} & \dots & \hat{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{0} & \hat{0} & \dots & \hat{J}_a^{(j_I-j_{II})} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Matrizen $\hat{J}_{I,a}$, $\hat{J}_{II,a}$ bzw. $\hat{J}_a^{(j_I+j_{II})}$ sind bereits in Kapitel 13 als spezielle Matrixelemente des Drehimpuls-Operators eingeführt worden. Das Indexpaar (j, m) nummeriert dabei die Zeilen, das Indexpaar (m_I, m_{II}) die Spalten der Matrix \hat{C} :

$$\begin{aligned} [\hat{C}]_{jm; m_I m_{II}} &= C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} & (17.2) \\ (j, m) &: j = j_I + j_{II}, \dots, |j_I - j_{II}|; \quad m = j, j-1, \dots, -j \\ (m_I, m_{II}) &: m_I = j_I, j_I-1, \dots, -j_I; \quad m_{II} = j_{II}, j_{II}-1, \dots, -j_{II}. \end{aligned}$$

Aus der Orthogonalität und der Vollständigkeit der Zustände $\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}$ bzw. der Zustände $\Psi_{(j_I j_{II}) j, m}$ folgt sofort:

$$\begin{aligned} \sum_{j, m} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} C_{m'_I m'_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= \delta_{m_I, m'_I} \delta_{m_{II}, m'_{II}} & (17.3) \\ \sum_{m_I, m_{II}} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} C_{m_I m_{II} m'}^{j_I j_{II} j'} &= \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}. \end{aligned}$$

Es besteht dabei die Symmetrie:

$$\begin{aligned} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= (-)^{j_I + j_{II} - j} C_{-m_I, -m_{II}, -m}^{j_I j_{II} j} & (17.4) \\ C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= (-)^{j_I + j_{II} - j} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \\ C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= (-)^{j_{II} + m_{II}} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_I+1}} C_{-m_{II} m m_I}^{j_{II} j_I j}. \end{aligned}$$

Insbesondere gilt:

$$\begin{aligned} C_{m_I 0 m_I}^{j_I 0 j_I} &= 1 & (17.5) \\ C_{m_I, -m_I, 0}^{j_I, j_I, j_I} &= (-1)^{j_I - m_I} \frac{1}{\sqrt{2j_I + 1}}. \end{aligned}$$

Wir erinnern an die Resultate von Kapitel 13, wo wir das Transformationsverhalten von Zuständen im Hilbert-Raum unter Drehungen $\mathcal{R} = \mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ um eine Achse \mathbf{n} mit Drehwinkel α durch die folgenden unitären Operatoren beschrieben hatten:

$$\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] = \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \alpha (n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z) \right]. \quad (17.6)$$

Ein Eigenzustand $\Psi_{(j_I j_{II}) j, m}$ von \hat{J}^2 und \hat{J}_z besitzt demnach das Transformationsverhalten:

$$\begin{aligned} \Psi_{(j_I j_{II}) j, m} &\rightarrow \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{(j_I j_{II}) j, m} = \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] \Psi_{(j_I j_{II}) j, m'} & (17.7) \\ \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] &= \langle \Psi_{(j_I j_{II}) j, m'} | \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] | \Psi_{(j_I j_{II}) j, m} \rangle. \end{aligned}$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Für die Darstellungsmatrizen $\mathcal{D}_{m',m}^{(j)}[\mathcal{R}] = \mathcal{D}_{m',m}^{(j)}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]$ gelten die folgenden Orthogonalitätsrelationen:

$$\begin{aligned} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha'}{2} \sin^2\left(\frac{\alpha'}{2}\right) \mathcal{D}_{m'_I, m_I}^{(j_I)}[\mathcal{R}(\alpha', \mathbf{n}')] \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})}[\mathcal{R}(\alpha', \mathbf{n}')] \\ = \frac{2\pi^2}{2j_I + 1} \delta_{j_I, j_{II}} \delta_{m'_I, m'_{II}} \delta_{m_I, m_{II}}. \end{aligned} \quad (17.8)$$

Hier bezeichnet $d\Omega_{\mathbf{n}'}$ ein differentielles Flächenelement am Punkt \mathbf{n}' auf der Einheitskugel $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$, also für eine Parametrisierung von \mathbf{n}' mit Kugelkoordinaten, $n'_x = \cos\varphi' \sin\vartheta'$, $n'_y = \sin\varphi' \sin\vartheta'$, $n'_z = \cos\vartheta'$, ist $d\Omega_{\mathbf{n}'} = d\varphi' d\vartheta' \sin\vartheta'$, wobei $0 \leq \varphi' \leq 2\pi$, $0 \leq \vartheta' \leq \pi$.

Nach dem Gesagten transformieren sich jetzt die Eigenzustände $\psi_{j_\Lambda, m_\Lambda}$ von \hat{J}_Λ^2 und $\hat{J}_{\Lambda, z}$ für $\Lambda \in \{I, II\}$ wie folgt:

$$\begin{aligned} \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} &\rightarrow \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} = \sum_{m'_\Lambda = -j_\Lambda}^{j_\Lambda} \mathcal{D}_{m'_\Lambda, m_\Lambda}^{(j_\Lambda)}[\mathcal{R}] \psi_{j_\Lambda, m'_\Lambda} \\ \mathcal{D}_{m'_\Lambda, m_\Lambda}^{(j_\Lambda)}[\mathcal{R}] &= \langle \psi_{j_\Lambda, m'_\Lambda}, \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_\Lambda, m_\Lambda} \rangle. \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\hat{J}_a = \hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a}$$

und somit:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] &= \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\alpha(n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z)\right] \\ &= \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\alpha \sum_{a \in \{x,y,z\}} n_a (\hat{J}_{I,a} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,a})\right] \\ &= \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\alpha \sum_{a \in \{x,y,z\}} n_a \hat{J}_{I,a}\right] \otimes \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\alpha \sum_{a \in \{x,y,z\}} n_a \hat{J}_{II,a}\right] \\ &= \hat{\mathcal{D}}_I[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \otimes \hat{\mathcal{D}}_{II}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]. \end{aligned}$$

Dies impliziert

$$\begin{aligned} &\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \quad (17.9) \\ &= (\hat{\mathcal{D}}_I[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \otimes \hat{\mathcal{D}}_{II}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]) (\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}) \\ &= (\hat{\mathcal{D}}_I[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_I, m_I}) \otimes (\hat{\mathcal{D}}_{II}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_{II}, m_{II}}) \\ &= \left(\sum_{m'_I = -j_I}^{j_I} \mathcal{D}_{m'_I, m_I}^{(j_I)}[\mathcal{R}] \psi_{j_I, m'_I} \right) \otimes \left(\sum_{m'_{II} = -j_{II}}^{j_{II}} \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})}[\mathcal{R}] \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right) \\ &= \sum_{m'_I = -j_I}^{j_I} \sum_{m'_{II} = -j_{II}}^{j_{II}} \mathcal{D}_{m'_I, m_I}^{(j_I)}[\mathcal{R}] \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})}[\mathcal{R}] \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}}. \end{aligned}$$

Andererseits ist

$$\psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} = \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \Psi_{(j_I j_{II}) j m}$$

und es folgt

$$\begin{aligned} & \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{(j_I j_{II}) j m} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] \Psi_{(j_I j_{II}) j, m'} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] \sum_{m'_I=-j_I}^{j_I} \sum_{m'_{II}=-j_{II}}^{j_{II}} C_{m'_I m'_{II} m'}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \\ &\stackrel{(17.9)}{=} \sum_{m'_I=-j_I}^{j_I} \sum_{m'_{II}=-j_{II}}^{j_{II}} \mathcal{D}_{m'_I, m_I}^{(j_I)}[\mathcal{R}] \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})}[\mathcal{R}] \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}}. \end{aligned}$$

Es folgt die sog. Clebsch-Gordan-Reihe:

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}_{m'_I, m_I}^{(j_I)}[\mathcal{R}] \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})}[\mathcal{R}] \tag{17.10} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] C_{m'_I m'_{II} m'}^{j_I j_{II} j} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \sum_{m=-j}^j \delta_{m_I+m_{II}, m} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}[\mathcal{R}] \delta_{m'_I+m'_{II}, m'} C_{m'_I m'_{II} m'}^{j_I j_{II} j} \\ &= \sum_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} C_{m_I m_{II}, m_I+m_{II}}^{j_I j_{II} j} C_{m'_I m'_{II}, m'_I+m'_{II}}^{j_I j_{II} j} \mathcal{D}_{m'_I+m'_{II}, m_I+m_{II}}^{(j)}[\mathcal{R}]. \end{aligned}$$

Das ist unter Verwendung der Relationen Gl. (17.3) gleichbedeutend mit

$$\begin{aligned} & \hat{C} \circ [\hat{\mathcal{D}}^{(j_I)} \otimes \hat{\mathcal{D}}^{(j_{II})}] \circ \hat{C}^T \\ &= \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{D}}^{(j_I+j_{II})} & \hat{0} & \dots & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\mathcal{D}}^{(j_I+j_{II}-1)} & \dots & \hat{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{0} & \hat{0} & \dots & \hat{\mathcal{D}}^{(|j_I-j_{II}|)} \end{pmatrix} \\ &= \bigoplus_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \hat{\mathcal{D}}^{(j)}. \end{aligned}$$

Demnach kann das Tensorprodukt der Hilbert-Räume \mathcal{H}_{j_I} und $\mathcal{H}_{j_{II}}$ in eine direkte Summe von zueinander orthogonalen Räumen \mathcal{H}_j zerlegt werden, die sämtlich für sich genommen invariant unter Drehungen $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ bzgl. ein und derselben Drehachse \mathbf{n} sind:

$$\mathcal{H}_{j_I, j_{II}} = \mathcal{H}_{j_I} \otimes \mathcal{H}_{j_{II}} = \bigoplus_{j=|j_I-j_{II}|}^{j_I+j_{II}} \mathcal{H}_j = \mathcal{H}_{|j_I-j_{II}|} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_{j_I+j_{II}}. \quad (17.11)$$

Wir geben noch eine nützliche Formel für das Integral eines Produkts von *drei* Darstellungsmatrizen an:

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha'}{2} \sin^2 \left(\frac{\alpha'}{2} \right) \\ & \quad \times \left(\mathcal{D}_{m', m}^{(j)} [\mathcal{R}(\alpha', \mathbf{n}')] \right)^\dagger \mathcal{D}_{m', m_I}^{(j_I)} [\mathcal{R}(\alpha', \mathbf{n}')] \mathcal{D}_{m'_{II}, m_{II}}^{(j_{II})} [\mathcal{R}(\alpha', \mathbf{n}')] \\ & = \frac{2\pi^2}{2j+1} C_{m'_I m'_{II} m'}^{j_I j_{II} j} C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \\ & \quad j_I, j_{II}, j \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \right\} \\ & \quad j \in \{ |j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II} \}. \end{aligned} \quad (17.12)$$

17.1 Explizite Formel für Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Man kann eine explizite Formel für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten herleiten. Dazu betrachten wir für $j \in \{ |j_I - j_{II}|, |j_I - j_{II}| + 1, \dots, j_I + j_{II} \}$ die Zustände mit maximaler Quantenzahl $m = j$:

$$\Psi_{(j_I, j_{II})j, j} = \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}},$$

$$\begin{aligned} \Theta & = \hat{J}_+ \Psi_{(j_I, j_{II})j, j} \\ & = \left(\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+} \right) \sum_{m'_I, m'_{II}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \\ & = \hbar \sum_{m'_I, m'_{II}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \left[\begin{array}{l} \sqrt{j_I(j_I+1) - m'_I(m'_I+1)} \psi_{j_I, m'_I+1} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \\ + \sqrt{j_{II}(j_{II}+1) - m'_{II}(m'_{II}+1)} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}+1} \end{array} \right]. \end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
 0 &= \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \hat{J}_+ \Psi_{(j_I, j_{II})j, j} \rangle \\
 &= \hbar \sum_{m'_I, m'_{II}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \left[\sqrt{j_I(j_I + 1) - m'_I(m'_I + 1)} \right. \\
 &\quad \times \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_I, m'_I+1} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \rangle \\
 &\quad \left. + \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - m'_{II}(m'_{II} + 1)} \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}+1} \rangle \right] \\
 &= \hbar \sum_{m'_I, m'_{II}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \left[\sqrt{j_I(j_I + 1) - m'_I(m'_I + 1)} \delta_{m_I, m'_I+1} \delta_{m_{II}, m'_{II}} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - m'_{II}(m'_{II} + 1)} \delta_{m_I, m'_I} \delta_{m_{II}, m'_{II}+1} \right] \\
 &= \hbar C_{m_I-1, m_{II}, j}^{j_I j_{II} j} \sqrt{j_I(j_I + 1) - (m_I - 1) m_I} \\
 &\quad + \hbar C_{m_I, m_{II}-1, j}^{j_I j_{II} j} \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - (m_{II} - 1) m_{II}}.
 \end{aligned}$$

Die ist eine zweigliedrige Rekursionsrelation für den speziellen Clebsch-Gordan Koeffizienten $C_{m_I, m_{II}, j}^{j_I j_{II} j}$ mit der Lösung:

$$C_{m_I, m_{II}, j}^{j_I j_{II} j} = \delta_{m_I + m_{II}, j} (-1)^{j_I - m_I} \sqrt{\frac{(j_I + m_I)! (j_{II} + m_{II})!}{(j_I - m_I)! (j_{II} - m_{II})!}} \cdot c.$$

Die Konstante c ist unabhängig von m_I und m_{II} :

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{m_I-1, m_{II}, j}^{j_I j_{II} j}}{C_{m_I, m_{II}-1, j}^{j_I j_{II} j}} &= -\sqrt{\frac{j_{II}(j_{II} + 1) - (m_{II} - 1) m_{II}}{j_I(j_I + 1) - (m_I - 1) m_I}} \\
 &= \frac{\delta_{m_I-1+m_{II}, j} (-1)^{j_I - m_I + 1} \sqrt{\frac{(j_I + m_I - 1)! (j_{II} + m_{II})!}{(j_I - m_I + 1)! (j_{II} - m_{II})!}} \cdot c}{\delta_{m_I + m_{II} - 1, j} (-1)^{j_I - m_I} \sqrt{\frac{(j_I + m_I)! (j_{II} + m_{II} - 1)!}{(j_I - m_I)! (j_{II} - m_{II} + 1)!}} \cdot c} \\
 &= -\sqrt{\frac{(j_I + m_I - 1)! (j_{II} + m_{II})! (j_I - m_I)! (j_{II} - m_{II} + 1)!}{(j_I - m_I + 1)! (j_{II} - m_{II})! (j_I + m_I)! (j_{II} + m_{II} - 1)!}} \\
 &= -\sqrt{\frac{(j_{II} + m_{II}) (j_{II} - m_{II} + 1)}{(j_I - m_I + 1) (j_I + m_I)}} \\
 &= -\sqrt{\frac{(j_{II} + m_{II}) (j_{II} - m_{II} + 1)}{(j_I - m_I + 1) (j_I + m_I)}} \\
 &= -\sqrt{\frac{j_{II}(j_{II} + 1) - (m_{II} - 1) m_{II}}{j_I(j_I + 1) - (m_I - 1) m_I}}.
 \end{aligned}$$

Die Konstante c lässt sich leicht aus der Normierungsbedingung bestimmen:

$$\begin{aligned}
 1 &= \langle \Psi_{(j_I, j_{II})j, j}, \Psi_{(j_I, j_{II})j, j} \rangle \\
 &= \left\langle \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}}, \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle \\
 &= \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \langle \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}}, \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \rangle \\
 &= \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \delta_{m'_I, m'_I} \delta_{m'_{II}, m'_{II}} \\
 &= \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} [C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j}]^2.
 \end{aligned}$$

Also folgt:

$$\begin{aligned}
 1 &= \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} [C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j}]^2 \\
 &= \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} \frac{(j_I + m'_I)! (j_{II} + m'_{II})!}{(j_I - m'_I)! (j_{II} - m'_{II})!} \cdot c^2 \\
 &= \frac{(j + j_I + j_{II} + 1)! (j + j_I - j_{II})! (j + j_{II} - j_I)!}{(2j + 1)! (j_I + j_{II} - j)!} c^2.
 \end{aligned}$$

Damit ist die Konstante c bestimmt:

$$c = \sqrt{\frac{(2j + 1)! (j_I + j_{II} - j)!}{(j + j_I + j_{II} + 1)! (j + j_I - j_{II})! (j + j_{II} - j_I)!}}.$$

Es folgt das Resultat:

$$\begin{aligned}
 &C_{m_I, m_{II}, j}^{j_I j_{II} j} \\
 &= \delta_{m_I + m_{II}, j} (-1)^{j_I - m_I} \sqrt{\frac{(j_I + m_I)! (j_{II} + m_{II})!}{(j_I - m_I)! (j_{II} - m_{II})!}} \cdot c \\
 &= \delta_{m_I + m_{II}, j} (-1)^{j_I - m_I} \sqrt{\frac{(j_I + m_I)! (j_{II} + m_{II})!}{(j_I - m_I)! (j_{II} - m_{II})!}} \\
 &\quad \times \sqrt{\frac{(2j + 1)! (j_I + j_{II} - j)!}{(j + j_I + j_{II} + 1)! (j + j_I - j_{II})! (j + j_{II} - j_I)!}}.
 \end{aligned}$$

Spezialfall:

$$\begin{aligned}
 C_{0,j,j}^{1,j,j} &= (-1)^{1-j} \sqrt{\frac{(1)!(j+j)!}{(1)!(j-j)!}} \sqrt{\frac{(2j+1)!(1+j-j)!}{(j+1+j+1)!(j+1-j)!(j+j-1)!}} \\
 &= (-1)^{1-j} \sqrt{\frac{(2j)!(2j+1)!}{(2j+2)!(2j-1)!}} \\
 &= (-1)^{1-j} \sqrt{\frac{2j}{2j+2}} \\
 &= (-1)^{1-j} \sqrt{\frac{j}{j+1}}.
 \end{aligned}$$

Desweiteren folgt nun für $m \in \{j, j-1, \dots, -j\}$ aus der definierenden Gleichung

$$\Psi_{(j_I, j_{II})j, m} = \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = m}} C_{m'_I m'_{II} m}^{j_I j_{II} j} \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}}$$

die Relation

$$\begin{aligned}
 C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= \langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I, j_{II})j, m} \rangle \\
 &= \left\langle \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} (\hat{J}_-)^{j-m} \Psi_{(j_I j_{II})j, j} \right\rangle \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left\langle (\hat{J}_+)^{j-m} \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I j_{II})j, j} \right\rangle \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \\
 &\quad \times \left\langle \left(\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+} \right)^{j-m} \psi_{j_I, m_I} \otimes \psi_{j_{II}, m_{II}}, \Psi_{(j_I j_{II})j, j} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Da die Operatoren $\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II}$ und $\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+}$ vertauschen dürfen wir den Binomialsatz anwenden:

$$\left(\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} + \hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+} \right)^{j-m} = \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \left(\hat{J}_{I,+} \otimes \hat{1}_{II} \right)^n \left(\hat{1}_I \otimes \hat{J}_{II,+} \right)^{j-m-n}.$$

Es ergibt sich hieraus die folgende Darstellung

$$\begin{aligned}
 &C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \\
 &\quad \times \left\langle \left(\hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I} \right) \otimes \left(\hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}} \right), \Psi_{(j_I j_{II})j, j} \right\rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \\
 &\quad \times \left\langle \left(\hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I} \right) \otimes \left(\hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}} \right), \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \\
 &\quad \times \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \left\langle \left(\hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I} \right) \otimes \left(\hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}} \right), \psi_{j_I, m'_I} \otimes \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle \\
 &= \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \\
 &\quad \times \sum_{\substack{m'_I, m'_{II} \\ m'_I + m'_{II} = j}} C_{m'_I m'_{II} j}^{j_I j_{II} j} \left\langle \hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I}, \psi_{j_I, m'_I} \right\rangle \left\langle \hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle \\
 &= \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{1}{\hbar}\right)^{j-m} \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \sum_{n=0}^{j-m} \binom{j-m}{n} \\ \quad \times \sum_{m'_I, m'_{II}} \delta_{m'_I + m'_{II}, j} (-1)^{j_I - m_I} \\ \quad \times \sqrt{\frac{(j_I + m'_I)!(j_{II} + m'_{II})!}{(j_I - m'_I)!(j_{II} - m'_{II})!}} \sqrt{\frac{(2j+1)!(j_I + j_{II} - j)!}{(j + j_I + j_{II} + 1)!(j + j_I - j_{II})!(j + j_{II} - j_I)!}} \\ \quad \times \left\langle \hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I}, \psi_{j_I, m'_I} \right\rangle \left\langle \hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle \end{array} \right\}.
 \end{aligned}$$

Die verbleibenden Matrixelemente können rekursiv berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \hat{J}_{I,+}^n \psi_{j_I, m_I}, \psi_{j_I, m'_I} \right\rangle &= \left\langle \psi_{j_I, m_I}, \hat{J}_{I,-}^n \psi_{j_I, m'_I} \right\rangle \\
 \left\langle \hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m_{II}}, \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle &= \left\langle \psi_{j_{II}, m_{II}}, \hat{J}_{II,+}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m'_{II}} \right\rangle,
 \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_{I,-}^n \psi_{j_I, m'_I} &= \hbar \sqrt{j_I(j_I + 1) - m'_I(m'_I - 1)} \hat{J}_{I,-}^{n-1} \psi_{j_I, m'_I - 1} \\
 \hat{J}_{II,-}^{j-m-n} \psi_{j_{II}, m'_{II}} &= \hbar \sqrt{j_{II}(j_{II} + 1) - m'_{II}(m'_{II} - 1)} \hat{J}_{II,-}^{j-m-n-1} \psi_{j_{II}, m'_{II} - 1}.
 \end{aligned}$$

Als Endergebnis folgt nach (einer Reihe elementarer) Umformungen die folgende

nach Racah benannte explizite Formel für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

$$\begin{aligned}
 C_{m_I m_{II} m}^{j_I j_{II} j} &= \delta_{m_I + m_{II}, m} \\
 &\times \sqrt{\frac{(2j+1)(j-m)!(j+m)!(j_I + j_{II} - j)!(j_I - m_I)!(j_{II} - m_{II})!}{(j_I + j_{II} + j + 1)!(j + j_I - j_{II})!(j + j_{II} - j_I)!(j_I + m_I)!(j_{II} + m_{II})!}} \\
 &\times \sum_n (-1)^{j_I - m_I + n} \frac{(j_I + m_I + n)!}{n!(j - m - n)!(j_I - m_I - n)!} \frac{(j_{II} + j - m_I - n)!}{(j_{II} - j + m_I + n)!}.
 \end{aligned} \tag{17.13}$$

Die Reihe über die Zahlen n erstreckt sich nur über *endlich* viele Glieder, da

$$\frac{1}{k!} = \frac{1}{\Gamma(k+1)} = 0 \text{ für } k \in (-1) \cdot \mathbb{N} \equiv \{-1, -2, -3, \dots\}.$$

17.2 Wigner-Eckart-Theorem

Es kommt bei den Anwendungen der Quantenmechanik oft vor, dass ein oder mehrere hermitesche Operatoren \hat{K}_a untereinander und zugleich mit den Operatoren \hat{J}_z und \hat{J}^2 vertauschen. In dem Fall existiert ein vollständiges System von Eigenfunktionen $\Psi_{(\kappa)jm}$ mit der Eigenschaft:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}^2 \Psi_{(\kappa)jm} &= \hbar^2 j(j+1) \Psi_{(\kappa)jm} \\
 \hat{J}_z \Psi_{(\kappa)jm} &= \hbar m \Psi_{(\kappa)jm} \\
 \hat{K}_a \Psi_{(\kappa)jm} &= \hbar \kappa_a \Psi_{(\kappa)jm} \\
 \langle \Psi_{(\kappa)jm}, \Psi_{(\kappa')j'm'} \rangle &= \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \\
 \sum_{\kappa'', j'', m''} \Psi_{(\kappa'')j'', m''} \otimes [\Psi_{(\kappa'')j'', m''}]^\dagger &= \hat{1}.
 \end{aligned} \tag{17.14}$$

Wir betrachten für $J \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$ eine Gesamtheit von $2J+1$ Operatoren $\hat{T}_{J,M}$, wobei $-J \leq M \leq J$. Das besondere dabei ist, dass sich die Operatoren $\hat{T}_{J,M}$ unter Drehoperationen

$$\hat{D}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] = \exp\left[\frac{1}{i\hbar} \alpha (n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z)\right]$$

auf dem Hilbert-Raum genau so wie die Drehimpuls-Eigenzustände $\Psi_{(\kappa)jm}$ nur *untereinander* linear transformieren:

$$\begin{aligned}
 \hat{D}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{(\kappa)jm} &= \sum_{m'=-j}^j \mathcal{D}_{m',m}^{(j)}[\mathcal{R}] \Psi_{(\kappa)jm'} \\
 \hat{D}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J,M} \circ \hat{D}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] &= \sum_{M'=-J}^J \mathcal{D}_{M',M}^{(J)}[\mathcal{R}] \hat{T}_{J,M'}.
 \end{aligned}$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Eine solche Gesamtheit von $2J + 1$ Operatoren $\hat{T}_{J,M}$ nennt man einen **Tensoroperator** der Stufe J .

Zum Beispiel bilden die sog. sphärischen Komponenten eines Operators $\hat{\mathbf{A}}$ mit kartesischen Komponenten $\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z$ einen Tensoroperator $\hat{T}_{1,M}^{(A)} = \hat{A}_M$ der Stufe $J = 1$:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{1,1}^{(A)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{A}_x + i\hat{A}_y) = \hat{A}_1 \\ \hat{T}_{1,0}^{(A)} &= \hat{A}_z = \hat{A}_0 \\ \hat{T}_{1,-1}^{(A)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{A}_x - i\hat{A}_y) = \hat{A}_{-1},\end{aligned}$$

Mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J}$ lässt sich aus zwei gegebenen Tensoroperatoren $\hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)}$ der Stufe J_I und $\hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)}$ der Stufe J_{II} eine Gesamtheit neuer Tensoroperatoren $\hat{T}_{J, M}^{(A, B)}$ der Stufe J koppeln:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{J, M}^{(A, B)} &= \sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)} \\ J &\in \{|J_I - J_{II}|, |J_I - J_{II}| + 1, \dots, J_I + J_{II}\} \\ M &\in \{-J, -J + 1, \dots, J - 1, J\}.\end{aligned}$$

In der Tat ist $\hat{T}_{J, M}$ ein Tensoroperator der Stufe J , denn

$$\begin{aligned}&\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J, M}^{(A, B)} \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \\ &= \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \left(\sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)} \right) \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \\ &= \sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)} \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \\ &= \sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \left(\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \right) \\ &\quad \times \left(\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)} \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \right) \\ &= \sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \left(\sum_{M'_I = -J_I}^{J_I} \mathcal{D}_{M'_I, M_I}^{(J_I)}[\mathcal{R}] \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \right) \circ \left(\sum_{M'_{II} = -J_{II}}^{J_{II}} \mathcal{D}_{M'_{II}, M_{II}}^{(J_{II})}[\mathcal{R}] \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)} \right) \\ &= \sum_{M'_I, M'_{II}} \left(\sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I M_{II} M}^{J_I J_{II} J} \mathcal{D}_{M'_I, M_I}^{(J_I)}[\mathcal{R}] \mathcal{D}_{M'_{II}, M_{II}}^{(J_{II})}[\mathcal{R}] \right) \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)} \\ &= \sum_{M'_I, M'_{II}} \left(C_{M'_I, M'_{II}, M'_I + M'_{II}}^{J_I J_{II} J} \mathcal{D}_{M'_I + M'_{II}, M}^{(J)}[\mathcal{R}] \right) \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{M'_I, M'_{II}} \left(\sum_{M'=-J}^J \delta_{M', M'_I + M'_{II}} C_{M'_I, M'_{II}, M'}^{J_I J_{II} J} \mathcal{D}_{M', M}^{(J)}[\mathcal{R}] \right) \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)} \\
 &= \sum_{M'=-J}^J \mathcal{D}_{M', M}^{(J)}[\mathcal{R}] \sum_{M'_I, M'_{II}} \delta_{M', M'_I + M'_{II}} C_{M'_I, M'_{II}, M'}^{J_I J_{II} J} \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)} \\
 &= \sum_{M'=-J}^J \mathcal{D}_{M', M}^{(J)}[\mathcal{R}] \underbrace{\sum_{M'_I, M'_{II}} C_{M'_I, M'_{II}, M'}^{J_I J_{II} J} \hat{T}_{J_I, M'_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(B)}}_{=\hat{T}_{J, M'}} \\
 &= \sum_{M'=-J}^J \mathcal{D}_{M', M}^{(J)}[\mathcal{R}] \hat{T}_{J, M'}^{(A, B)},
 \end{aligned}$$

was zu zeigen war. Beim Beweis wurde nicht verwendet, dass die Operatoren $\hat{T}_{J_I, M'_I}^{(a)}$ und $\hat{T}_{J_{II}, M'_{II}}^{(b)}$ kommutieren!

Im Spezialfall $J_I = J_{II}$ lässt sich durch das beschriebene Verfahren insbesondere ein rotationsinvarianter *skalärer* Operator konstruieren:

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_{0,0}^{(A, B)} &= \sum_{M_I, M_{II}} C_{M_I, M_{II}, 0}^{J_I J_{II} 0} \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_{II}, M_{II}}^{(B)} \quad (17.15) \\
 &= \sum_{M_I} \underbrace{C_{M_I, -M_I, 0}^{J_I J_I 0}}_{\equiv \frac{(-1)^{J_I - M_I}}{\sqrt{2J_I + 1}}} \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_I, -M_I}^{(B)} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2J_I + 1}} \sum_{M_I} (-1)^{J_I - M_I} \hat{T}_{J_I, M_I}^{(A)} \circ \hat{T}_{J_I, -M_I}^{(B)}.
 \end{aligned}$$

In den Anwendungen der Quantenmechanik auf Probleme der Atom-, Kern- und Molekülphysik spielen Matrixelemente von Tensoroperatoren eine wichtige Rolle. Wir betrachten jetzt die folgende (triviale) Identität:

$$\begin{aligned}
 &\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m_A}, \hat{T}_{J, M} \Psi_{(\kappa_B)j_B m_B} \rangle \\
 &= \langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m_A}, \\
 &\quad \underbrace{\hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]}_{=\hat{1}} \circ \hat{T}_{J, M} \circ \underbrace{\hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]}_{=\hat{1}} \Psi_{(\kappa_B)j_B m_B} \rangle \\
 &= \langle \hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{(\kappa_A)j_A m_A}, \\
 &\quad (\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \circ \hat{T}_{J, M} \circ \hat{\mathcal{D}}^\dagger[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})]) (\hat{\mathcal{D}}[\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \Psi_{(\kappa_B)j_B m_B}) \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left\langle \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \mathcal{D}_{m'_A, m_A}^{(j_A)} [\mathcal{R}] \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \right. \\
 &\quad \left. \left(\sum_{M'=-J}^J \mathcal{D}_{M', M}^{(J)} [\mathcal{R}] \hat{T}_{J, M'} \right) \left(\sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} \mathcal{D}_{m'_B, m_B}^{(j_B)} [\mathcal{R}] \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right) \right\rangle \\
 &= \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \sum_{M'=-J}^J \sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} \left(\mathcal{D}_{m'_A, m_A}^{(j_A)} [\mathcal{R}] \right)^\dagger \mathcal{D}_{M', M}^{(J)} [\mathcal{R}] \mathcal{D}_{m'_B, m_B}^{(j_B)} [\mathcal{R}] \\
 &\quad \times \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Wir verwenden jetzt die aus der Clebsch-Gordan-Reihe (17.10) folgende Formel Gl. (17.12) zur Berechnung des Integrals über ein dreifaches Produkt von Darstellungsmatrizen und erhalten, da die linke Seite der Gleichung nicht von den Parametern α und \mathbf{n} der Drehmatrix $\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})$ abhängt:

$$\begin{aligned}
 &\left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \int d\Omega_{\mathbf{n}} \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2} \sin^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \int d\Omega_{\mathbf{n}} \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2} \sin^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \\
 &\quad \times \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \sum_{M'=-J}^J \sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} \left(\mathcal{D}_{m'_A, m_A}^{(j_A)} [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \right)^\dagger \mathcal{D}_{M', M}^{(J)} [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \mathcal{D}_{m'_B, m_B}^{(j_B)} [\mathcal{R}(\alpha, \mathbf{n})] \\
 &\quad \times \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \sum_{M'=-J}^J \sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} \frac{2\pi^2}{2j_A + 1} C_{M', m'_B, m'_A}^{J, j_B, j_A} C_{M, m_B, m_A}^{J, j_B, j_A} \\
 &\quad \times \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle \\
 &= C_{M, m_B, m_A}^{J, j_B, j_A} \frac{1}{2j_A + 1} \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \sum_{M'=-J}^J \sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} C_{M', m'_B, m'_A}^{J, j_B, j_A} \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J, M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle \\
 &\equiv C_{M, m_B, m_A}^{J, j_B, j_A} \cdot T_{(\kappa_A)j_A, (\kappa_B)j_B}^{(J)}.
 \end{aligned}$$

Die von den Quantenzahlen m'_A , M' und m'_B *unabhängige* (!) Größe $T_{(\kappa_A)j_A, (\kappa_B)j_B}^{(J)}$ ist das sog. **reduzierte Matrixelement**, welche der Gesamtheit der Tensorope-

ratoren $\hat{T}_{J,M}$ für $-J \leq M \leq J$ als eine gewichtete Summe zugeordnet ist:

$$T_{(\kappa_A)j_A,(\kappa_B)j_B}^{(J)} = \frac{1}{2j_A + 1} \sum_{M'=-J}^J \sum_{m'_A=-j_A}^{j_A} \sum_{m'_B=-j_B}^{j_B} C_{M',m'_B,m'_A}^{J,j_B,j_A} \quad (17.16)$$

$$\times \left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m'_A}, \hat{T}_{J,M'} \Psi_{(\kappa_B)j_B m'_B} \right\rangle.$$

Die gefundene Faktorisierung des Matrixelementes eines Tensoroperators in einen „geometrischen“ Faktor $C_{M',m'_B,m'_A}^{J,j_B,j_A}$ und einen „dynamischen“ Faktor $T_{(\kappa_A)j_A,(\kappa_B)j_B}^{(J)}$ ist gerade die Aussage des **Wigner-Eckart-Theorems**:

$$\left\langle \Psi_{(\kappa_A)j_A m_A}, \hat{T}_{J,M} \Psi_{(\kappa_B)j_B m_B} \right\rangle = C_{M,m_B,m_A}^{J,j_B,j_A} \cdot T_{(\kappa_A)j_A,(\kappa_B)j_B}^{(J)}. \quad (17.17)$$

Aus den kartesischen Komponenten \hat{V}_a eines Vektoroperators $\hat{\mathbf{V}}$ konstruieren wir (wie schon gezeigt) einen Tensoroperator $\hat{T}_{1,M}^{(V)}$ erster Stufe:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{1,1}^{(V)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_x + i\hat{V}_y) \\ \hat{T}_{1,0}^{(V)} &= \hat{V}_z \\ \hat{T}_{1,-1}^{(V)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_x - i\hat{V}_y). \end{aligned}$$

Entsprechend ordnen wir dem Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{J}}$ selbst ebenfalls einen Tensoroperator $\hat{T}_{1,M}^{(J)}$ erster Stufe zu. Allgemein gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{T}_{1,M}^{(J)}]^\dagger &= (-1)^M \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \\ -1 &\leq M \leq 1. \end{aligned}$$

Wie bereits gezeigt, ist der folgende Tensoroperator nullter Stufe ein Skalar:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{0,0}^{(J,V)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_M (-1)^{1-M} \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} (\hat{J}_x + i\hat{J}_y) \circ (\hat{V}_x - i\hat{V}_y) \\ -\hat{J}_z \circ \hat{V}_z \\ -\frac{1}{2} (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) \circ (\hat{V}_x + i\hat{V}_y) \end{bmatrix} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} [\hat{J}_x \circ \hat{V}_x + \hat{J}_y \circ \hat{V}_y + \hat{J}_z \circ \hat{V}_z] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a \end{aligned}$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Was lässt sich über das Matrixelement eines Tensoroperators nullter Stufe $\hat{T}_{0,0}^{(J,V)}$ aussagen? Das Wigner-Eckart-Theorem liefert

$$\begin{aligned} & \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a \right) \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{0,0}^{(J,V)} \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle \\ &= C_{0,m',m}^{0,j',j} \cdot [T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j'}^{(0)}. \end{aligned}$$

Das reduzierte Matrixelement $[T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j'}^{(0)}$ ist (per definitionem) von den Quantenzahlen m_B und m_A *unabhängig*. Der spezielle Wert des Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$C_{0,m',m}^{0,j',j} = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}$$

besagt jetzt, dass wir uns auf den Fall $j' = j$ und $m' = m$ beschränken dürfen:

$$\left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{0,0}^{(J,V)} \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \cdot [T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)}.$$

Es folgt dann:

$$\begin{aligned} & [T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)} \\ &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{0,0}^{(J,V)} \Psi_{(\kappa')jm} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_M (-1)^{1-M} \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \right) \Psi_{(\kappa')jm} \right\rangle. \end{aligned}$$

Wir schieben nun eine Darstellung der Eins im Hilbert-Raum ein:

$$\hat{1} = \sum_{\kappa'', j'', m''} \Psi_{(\kappa'')j'', m''} \otimes [\Psi_{(\kappa'')j'', m''}]^\dagger.$$

Es folgt durch Einsetzen:

$$\begin{aligned} & [T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)} \\ &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\ & \quad \times \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \left(\sum_{\kappa'', j'', m''} \Psi_{(\kappa'')j'', m''} \otimes [\Psi_{(\kappa'')j'', m''}]^\dagger \right) \circ \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')jm} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\ & \quad \times \sum_{\kappa'', j'', m''} \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa'')j'', m''} \right\rangle \left\langle \Psi_{(\kappa'')j'', m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')jm} \right\rangle. \end{aligned}$$

Der spezielle Operator $\hat{T}_{1,M}^{(J)}$ bewirkt (als ein dem Drehimpulsoperator \hat{J}_a zugeordneter Tensoroperator erster Stufe), dass die Anwendung von $\hat{T}_{1,M}^{(J)}$ auf den Zustand $\Psi_{(\kappa'')j'',m''}$ nur eine Linearkombination der Basisfunktionen $\Psi_{(\kappa')j',m''}$ zu verschiedenem Index m'' generieren kann, denn es ist:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{1,1}^{(J)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_+ \\ \hat{T}_{1,0}^{(J)} &= \hat{J}_z \\ \hat{T}_{1,-1}^{(J)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_-\end{aligned}$$

Das Skalarprodukt $\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa'')j'',m''} \rangle$ ist daher identisch Null für $j'' \neq j$ und $\kappa'' \neq \kappa$:

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa'')j'',m''} \rangle = \delta_{\kappa,\kappa''} \delta_{j,j''} \langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \rangle.$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}[T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)} &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\ &\times \sum_{m''=-j}^j \langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \rangle \langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')j,m} \rangle.\end{aligned}$$

Die beiden verbleibenden Skalarprodukte können mit dem Wigner-Eckart-Theorem ausgerechnet werden. Zuerst erhalten wir:

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \rangle = C_{M,m'',m}^{1,j,j} \cdot T_{(\kappa)j,(\kappa)j}^{(J)}.$$

Nun ist das reduzierte Matrixelement $T_{(\kappa)j,(\kappa)j}^{(J)}$ unabhängig von den Quantenzahlen m, m'' und M , d. h. wir dürfen insbesondere wählen: $M = 0$ und $m = m'' = j$. Dann folgt

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,j}, \hat{T}_{1,0}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,j} \rangle = C_{0,j,j}^{1,j,j} \cdot T_{(\kappa)j,(\kappa)j}^{(J)}.$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{(\kappa)j,j}, \hat{T}_{1,0}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,j} \rangle &= \langle \Psi_{(\kappa)j,j}, \hat{J}_z \Psi_{(\kappa)j,j} \rangle = \hbar j \\ C_{0,j,j}^{1,j,j} &= (-1)^{1-j} \sqrt{\frac{j}{j+1}}.\end{aligned}$$

Es resultiert eine explizite Formel für das *reduzierte* Matrixelement des speziellen

Tensoroperators erster Stufe $\hat{T}_{1,M}^{(J)}$:

$$\begin{aligned} T_{(\kappa)j,(\kappa)j}^{(J)} &= \frac{\langle \Psi_{(\kappa)j,j}, \hat{T}_{1,0}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,j} \rangle}{C_{0,j,j}^{1,j,j}} \\ &= \frac{\hbar j}{(-1)^{1-j} \sqrt{\frac{j}{j+1}}} \\ &= (-1)^{j-1} \hbar \sqrt{j(j+1)}. \end{aligned}$$

Damit ist jetzt gezeigt:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa'')j'',m''} \rangle &= \delta_{\kappa,\kappa''} \delta_{j,j''} \langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \rangle \quad (17.18) \\ &= \delta_{\kappa,\kappa''} \delta_{j,j''} C_{M,m'',m}^{1,j,j} \cdot T_{(\kappa)j,(\kappa)j}^{(J)} \\ &= \delta_{\kappa,\kappa''} \delta_{j,j''} C_{M,m'',m}^{1,j,j} \cdot (-1)^{j-1} \hbar \sqrt{j(j+1)}. \end{aligned}$$

Wir erhalten als nächstes für den dem Vektor \hat{V}_a zugeordneten Tensor erster Stufe $\hat{T}_{1,-M}^{(V)}$:

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')j,m} \rangle = C_{-M,m,m''}^{1,j,j} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}.$$

Wir verwenden jetzt Gl. (17.18) und erhalten mit der Indextransformation

$$(M, m'', m) \rightarrow (-M, m, m'')$$

die Relation

$$C_{-M,m,m''}^{1,j,j} = (-1)^{1-j} \frac{\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}}. \quad (17.19)$$

Einsetzen liefert:

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')j,m} \rangle = (-1)^{1-j} \frac{\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}.$$

Es folgt für das reduzierte Matrixelement $[T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)}$ des skalaren Operators $\hat{T}_{0,0}^{(J,V)}$:

$$\begin{aligned} &[T^{(J,V)}]_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(0)} \\ &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\ &\quad \times \sum_{m''=-j}^j \langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \rangle \langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')j,m} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\
 &\quad \times \sum_{m''=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m''} \right\rangle \frac{\left\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle}{\hbar\sqrt{j(j+1)}} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)} \\
 &= \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \sum_M \frac{(-1)^{1-M}}{\sqrt{3}} \\
 &\quad \times \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \underbrace{\sum_{m''=-j}^j \left(\Psi_{(\kappa)j,m''} \otimes \Psi_{(\kappa)j,m''}^\dagger \right)}_{\hat{1}} \circ \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar\sqrt{j(j+1)}} \\
 &= \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_M (-1)^{1-M} \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \right) \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar\sqrt{j(j+1)}} \\
 &= \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{T}_{0,0}^{(J,J)} \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar\sqrt{j(j+1)}}.
 \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_{0,0}^{(J,J)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_M (-1)^{1-M} \hat{T}_{1,M}^{(J)} \circ \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{J}_a \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \hat{J}^2.
 \end{aligned}$$

Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 &\left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a \right) \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle \\
 &= \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{T}_{0,0}^{(J,V)} \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle \\
 &= \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \cdot [T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(J,V)}]^{(0)} \\
 &= \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \cdot \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{J}_a \right) \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar\sqrt{j(j+1)}} \\
 &= \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \cdot \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{J}^2 \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar\sqrt{j(j+1)}}.
 \end{aligned}$$

Mit Gl. (17.14) folgt

$$\left\langle \Psi_{(\kappa)j,m}, \hat{J}^2 \Psi_{(\kappa)j,m} \right\rangle = \hbar^2 j(j+1)$$

und wir erhalten

$$\begin{aligned}
 & \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \langle \Psi_{(\kappa)jm}, \hat{J}^2 \Psi_{(\kappa'')j''m} \rangle \\
 = & \hbar^2 j(j+1) \frac{(-1)^{1-j}}{2j+1} \sum_{m=-j}^j \underbrace{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \Psi_{(\kappa)jm} \rangle}_{=1} \\
 = & \hbar^2 j(j+1) (-1)^{1-j}.
 \end{aligned}$$

Damit ist jetzt gezeigt:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \Psi_{(\kappa)jm}, \left(\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a \right) \Psi_{(\kappa')j'm'} \right\rangle \\
 = & \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} (-1)^{1-j} \cdot \hbar^2 j(j+1) \frac{T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \\
 = & \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} (-1)^{1-j} \cdot \hbar \sqrt{j(j+1)} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)}.
 \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass der Erwartungswert $\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')j'm'} \rangle$ in der Tat unabhängig von der Quantenzahl m ist!

Umgekehrt folgt jetzt eine Darstellung für das reduzierte Matrixelement:

$$(-1)^{1-j} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)} = \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')jm} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}}.$$

Nach dem Gesagten ist:

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi_{(\kappa)jm''}, \hat{T}_{1,-M}^{(V)} \Psi_{(\kappa')jm} \rangle \\
 = & C_{-M,m,m''}^{1,j,j} T_{(\kappa)j,(\kappa')j}^{(V)} \\
 = & C_{-M,m,m''}^{1,j,j} (-1)^{1-j} \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')jm} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \\
 \stackrel{(17.19)}{=} & \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm''}, \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)jm} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')jm} \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \\
 = & \langle \Psi_{(\kappa)jm''}, \hat{T}_{1,-M}^{(J)} \Psi_{(\kappa)jm} \rangle \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')jm} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)}.
 \end{aligned}$$

Die Tensorkomponenten $\hat{T}_{1,-M}^{(V)}$ und $\hat{T}_{1,-M}^{(J)}$ sind Linearkombinationen der kartesi-

schen Komponenten \hat{V}_b und \hat{J}_b . Damit ist der sog. **Projektionssatz** bewiesen:

$$\langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{V}_b \Psi_{(\kappa')j,m} \rangle = \langle \Psi_{(\kappa)j,m''}, \hat{J}_b \Psi_{(\kappa)j,m} \rangle \frac{\langle \Psi_{(\kappa)jm}, (\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a) \Psi_{(\kappa')jm} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)}$$

$$a, b \in \{x, y, z\}.$$

Da das Matricelement des Skalars $\sum_a \hat{J}_a \circ \hat{V}_a$ unabhängig von den Quantenzahlen m ist, kann formuliert werden: für fix gewählte Zustände $\Psi_{(\kappa')j,m}$ und $\Psi_{(\kappa)j,m''}$ (mit gleicher Drehimpulsquantenzahl j) ist das Matricelement eines beliebigen Vektoroperators \hat{V}_b mit diesen Zuständen proportional zum entsprechenden Matricelement des Drehimpulsoperators \hat{J}_b .

17.3 Landè-Faktor

Wir betrachten Atome mit Kernspin Null. Dann ist der Gesamtdrehimpuls \hat{J}_a die Summe aus Bahndrehimpuls \hat{L}_a und Spin \hat{S}_a der Atom-Elektronen:

$$\hat{J}_a = \hat{L}_a \otimes 1 + \hat{1} \otimes \hat{S}_a.$$

Das magnetische Moment des Atoms ist dann gegeben zu

$$\hat{\mu}_a = \frac{-|e|\hbar}{2m_e} (g_L \hat{L}_a \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_a).$$

Für schwache Felder $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ ist der Hamilton-Operator gegeben zu

$$\hat{H}(B) = \hat{H}_0 - \omega_L (g_L \hat{L}_z \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_z)$$

$$\omega_L = \frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} \cdot B \quad (\text{Larmor-Frequenz})$$

$$\mu_{\text{Bohr}} = \frac{\hbar |e|\hbar}{2m_e} \quad (\text{Bohr-Magneton}).$$

Bei abgeschaltetem Magnetfeld ($B = 0$) ist das System invariant unter Rotationen, d.h. es vertauscht \hat{H}_0 zugleich mit den Operatoren $\hat{L}^2 \otimes 1$, $\hat{1} \otimes \hat{S}^2$, \hat{J}^2 und \hat{J}_z :

$$\hat{L}^2 = \sum_a \hat{L}_a \circ \hat{L}_a$$

$$\hat{S}^2 = \sum_a \hat{S}_a \circ \hat{S}_a$$

$$\hat{J}^2 = \sum_a \hat{J}_a \circ \hat{J}_a.$$

17 Kopplung von Drehimpulsen in der QM mit Anwendungen

Es existiert dann ein Basissystem von gemeinsamen Eigenzuständen $\Psi_{(E_0ls)jm}$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 \Psi_{(E_0ls)jm} &= E_0 \Psi_{(E_0ls)jm} \\ (\hat{L}^2 \otimes 1) \Psi_{(E_0ls)jm} &= \hbar^2 l(l+1) \Psi_{(E_0ls)jm} \\ (\hat{1} \otimes \hat{S}^2) \Psi_{(E_0ls)jm} &= \hbar^2 s(s+1) \Psi_{(E_0ls)jm} \\ \hat{J}^2 \Psi_{(E_0ls)jm} &= \hbar^2 j(j+1) \Psi_{(E_0ls)jm} \\ \hat{J}_z \Psi_{(E_0ls)jm} &= \hbar m \Psi_{(E_0ls)jm}.\end{aligned}$$

Wegen $[\hat{H}_0, \hat{J}_z] = 0$ besitzen alle $2j+1$ Zustände $\Psi_{(E_0ls)jm}$ mit $-j \leq m \leq j$ die gleiche Energie E_0 .

Ein schwaches äußeres Magnetfeld \mathbf{B} beeinflusst die Energieniveaus der Elektronen im Atom, in dem es Entartungen aufhebt und ein Multiplett äquidistanter Energieniveaus erzeugt, wobei die Differenz der Energieniveaus proportional zu $|\mathbf{B}|$ ist.

Um die Aufspaltung abzuschätzen entwickeln wir nach Taylor und verwenden das Theorem von Feynman-Hellmann:

$$\begin{aligned}E(B) &= E_0 + \left[\frac{\partial E(B)}{\partial B} \right]_{B=0} \cdot B + o(B^2) \\ \left[\frac{\partial E(B)}{\partial B} \right]_{B=0} &= \lim_{B \rightarrow 0} \left\langle \frac{\partial}{\partial B} \hat{H}(B) \right\rangle_{\Psi} \\ &= -\frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} \left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \left(g_L \hat{L}_z \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_z \right) \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle.\end{aligned}$$

Die Anwendung des Projektionssatzes liefert

$$\begin{aligned}& \left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \left(g_L \hat{L}_z \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_z \right) \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \hat{J}_z \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle \frac{\left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \sum_a \hat{J}_a \circ \left(g_L \hat{L}_a \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_a \right) \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \\ &= \frac{\hbar m}{\hbar^2 j(j+1)} \left[\begin{array}{l} g_L \left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \sum_a \hat{J}_a \circ \left(\hat{L}_a \otimes \hat{1} \right) \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle \\ + g_S \left\langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \sum_a \hat{J}_a \circ \left(\hat{1} \otimes \hat{S}_a \right) \Psi_{(E_0ls)jm} \right\rangle \end{array} \right].\end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned}
& \sum_a \hat{J}_a \circ (\hat{L}_a \otimes \hat{1}) \\
&= \sum_a (\hat{L}_a \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_a) \circ (\hat{L}_a \otimes \hat{1}) \\
&= \sum_a (\hat{L}_a \otimes \hat{1}) \circ (\hat{L}_a \otimes \hat{1}) + \sum_a (\hat{1} \otimes \hat{S}_a) \circ (\hat{L}_a \otimes \hat{1}) \\
&= \left(\sum_a \hat{L}_a^2 \right) \otimes \hat{1} + \sum_a (\hat{L}_a \otimes \hat{S}_a) \\
&= \sum_a \hat{L}_a^2 \otimes \hat{1} + \frac{1}{2} \sum_a (\hat{J}_a^2 - \hat{L}_a^2 \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2) \\
&= \frac{1}{2} \sum_a (\hat{J}_a^2 + \hat{L}_a^2 \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2) \\
&= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 + \hat{L}^2 \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{S}^2),
\end{aligned}$$

und ebenso:

$$\begin{aligned}
& \sum_a \hat{J}_a \circ (\hat{1} \otimes \hat{S}_a) \\
&= \sum_a (\hat{L}_a \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_a) \circ (\hat{1} \otimes \hat{S}_a) \\
&= \sum_a (\hat{L}_a \otimes \hat{S}_a) + \sum_a \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_a (\hat{J}_a^2 - \hat{L}_a^2 \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2) + \sum_a \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_a (\hat{J}_a^2 - \hat{L}_a^2 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_a^2) \\
&= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}^2).
\end{aligned}$$

Dann folgt jetzt

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi_{(E_0ls)jm}, (g_L \hat{L}_z \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_z) \Psi_{(E_0ls)jm} \rangle \\
 &= \frac{\hbar m}{\hbar^2 j(j+1)} \left[\begin{aligned} & g_L \langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \frac{1}{2} (\hat{J}^2 + \hat{L}^2 \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{S}^2) \Psi_{(E_0ls)jm} \rangle \\ & + g_S \langle \Psi_{(E_0ls)jm}, \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}^2) \Psi_{(E_0ls)jm} \rangle \end{aligned} \right] \\
 &= \frac{\hbar m}{\hbar^2 j(j+1)} \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} g_L [j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)] \\ + g_S [j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)] \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar m}{j(j+1)} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (g_L + g_S) j(j+1) \\ + (g_L - g_S) [l(l+1) - s(s+1)] \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Es folgt für den Fall der sog. *LS*-Kopplung das Resultat:

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi_{(E_0ls)jm}, (g_L \hat{L}_z \otimes 1 + g_S \hat{1} \otimes \hat{S}_z) \Psi_{(E_0ls)jm} \rangle \\
 &= \frac{\hbar m}{2} \left[(g_L + g_S) + (g_L - g_S) \frac{l(l+1) - s(s+1)}{j(j+1)} \right].
 \end{aligned}$$

In guter Näherung ist $g_L = 1$ und $g_S = 2$. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned}
 E_m(B) &= E_0 + \left[\frac{\partial E(B)}{\partial B} \right]_{B=0} \cdot B \\
 &= E_0 - \frac{\mu_{\text{Bohr}} \hbar m}{\hbar} \frac{1}{2} \left[3 - \frac{l(l+1) - s(s+1)}{j(j+1)} \right] \cdot B \\
 &= E_0 - m \cdot \left[\frac{3}{2} - \frac{l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} \right] \hbar \omega_L.
 \end{aligned}$$

Für kleine Magnetfelder wird demnach die Entartung vollständig aufgehoben. Es gibt $2j + 1$ äquidistante Energieniveaus, die zu den verschiedenen Eigenwerten m von \hat{J}_z gehören. Dies ist der Zeeman-Effekt. Der Term

$$g_{\text{eff}} = \frac{3}{2} - \frac{l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)}$$

heißt **Landè-Faktor**.

18 Elastische Streutheorie

Ein wichtiges Anwendungsgebiet der Quantenmechanik ist die Analyse von Streuexperimenten. Fundamentale Erkenntnisse über die Struktur und den Aufbau der Materie verdanken wir der Untersuchung von Kollisionen zwischen Protonen, Neutronen und Elektronen. Man spricht von **elastischer Streuung** wenn die inneren Freiheitsgrade der stoßenden Teilchen nicht angeregt werden und die Summe der kinetischen Energien der stoßenden Teilchen vor und nach der Kollision eine Konstante ist. Man spricht hingegen von **inelastischer Streuung**, wenn innere Freiheitsgrade angeregt werden, z.B. kann ein Atom beim Stoß mit einem hochenergetischen Elektron ionisiert werden. Im folgenden diskutieren wir nur die elastische Streuung.

Wir betrachten jetzt eine Teilchenquelle, die einen Strahl identisch präparierter, nicht wechselwirkender Teilchen der Masse m_Q mit konstantem Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ und konstanter kinetischer Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_Q} > 0$ produziert. In großem Abstand zur Teilchenquelle befindet sich bei einem Streuexperiment typischerweise ein **Target**, das wir uns der Einfachheit halber vor dem Stoß als ein ruhendes, punktförmiges Teilchen der Masse m_T vorstellen wollen. Verwendet man Relativ- und Schwerpunktskoordinaten, und arbeitet man mit der reduzierten Masse $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_Q} + \frac{1}{m_T}$, dann sieht es so aus, als würde ein Teilchen der Masse μ im Abstand $|\mathbf{r}|$ zum Schwerpunkt mit einem dort befindlichen unendlich schweren Teilchen über ein Potential $V(\mathbf{r})$ wechselwirken. Bei der Auswertung eines realen Streuexperimentes ist natürlich die Koordinatentransformation vom Schwerpunktsystem in das Laborsystem zu berücksichtigen!

Mit Hilfe von Detektoren, die (außerhalb des Strahls der einfallenden Teilchen) in großer Entfernung R_D zum Streuzentrum aufgestellt sind, wird dann registriert, mit welcher Häufigkeit Teilchen, die mit Energie E auf das Target auftreffen, in verschiedene Richtungen \mathbf{n}' in ein Raumwinkelement $R_D^2 d\Omega_{\mathbf{n}'}$ gestreut werden. Bei elastischer Streuung der Teilchen treten durch die Oberfläche einer Kugel mit Radius R_D , in deren Mittelpunkt sich das Streuzentrum befindet, pro Zeiteinheit gleich viele Teilchen mit Energie E aus wie zuvor hinein geflogen sind, d.h. insgesamt ist der über die Kugeloberfläche integrierte Teilchenfluss gleich Null, da **Teilchenzahlerhaltung** gilt.

Wir nehmen ferner an, dass das Wechselwirkungspotential $V(\mathbf{r})$ zwischen dem (jetzt als ruhend, punktförmig und unendlich schwer angenommenen) Target und

einem Teilchen im Strahl nur eine endlich große Reichweite R_c besitzt,

$$V(\mathbf{r}) = 0 \text{ für } |\mathbf{r}| > R_c,$$

und dass sich die Teilchenquelle und die Detektoren beide weit außerhalb der Reichweite R_c des Potentials befinden.

Unser Ziel ist die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(\mathbf{r}, t)$ eines Teilchens, das am Target elastisch gestreut wurde. Wir wollen das Streuproblem aber nicht in seiner zeitlichen Entwicklung für ein einzelnes Wellenpaket beschreiben, sondern ein einfacheres stationäres Problem behandeln. Zu dem Zweck suchen wir eine spezielle Lösung der Schrödinger-Gleichung

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}),$$

die in großem Abstand $kr \gg kR_c$ vom Target am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ die folgende asymptotische Form haben soll:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left[\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) + \psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right] e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (18.1)$$

Demnach sind $\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ und $\psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r})$ Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \quad (18.2)$$

wobei $\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude der einlaufenden Teilchen im Strahl mit vorgegebenem Impuls $\mathbf{p} = \hbar k\mathbf{n}$ ist, und $\psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r})$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die gestreuten Teilchen mit Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ bezeichnet. Beide Größen sind in großem Abstand zum Streuzentrum Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung für ein *kräftefreies* Teilchen:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi_E^{(0)}(\mathbf{r}) = E\psi_E^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (18.3)$$

Die Teilchen im Strahl mit Flugrichtung $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$ werden demnach vor dem Eintreten in die Wechselwirkungszone $r \leq R_c$ durch eine ebene Welle repräsentiert:

$$\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = A \exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \quad (18.4)$$

$$\hbar k = \sqrt{2\mu E}.$$

Da wir einen Strahl konstanten Querschnitts betrachten, und wir die Detektoren zum Nachweis der gestreuten Teilchen außerhalb des Strahlkegels aufstellen wollen, gilt insbesondere am Ort des Detektors $\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = 0$.

Die auslaufenden Teilchen sind in großer Entfernung zum Streuzentrum, außerhalb der Reichweite des Potentials, ebenfalls Lösungen der kräftefreien Schrödinger-Gleichung mit Energie E , die wir jetzt am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ als eine richtungsmodulierte nach außen propagierende **Kugelwelle** beschreiben:

$$\begin{aligned}\psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) &= Af(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{1}{r} \exp(ikr) & (18.5) \\ \hbar k &= \sqrt{2\mu E} \\ \mathbf{r} &= r\mathbf{n}' \\ n'_x &= \cos\varphi' \sin\vartheta' \\ n'_y &= \sin\varphi' \sin\vartheta' \\ n'_z &= \cos\vartheta'.\end{aligned}$$

In der Tat lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung für ein kräftefreies Teilchen in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{2\mu}\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2}\right)\psi_E^{(0)}(\mathbf{r}) &= E\psi_E^{(0)}(\mathbf{r}) & (18.6) \\ \hat{p}_r &= \frac{1}{\hat{r}} \circ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \circ \hat{r}.\end{aligned}$$

Für $kr \gg 1$ ist der Beitrag der Zentrifugalbarriere vernachlässigbar klein und man sieht, dass eine Funktion der Gestalt

$$\psi_E^{(0)}(\mathbf{r}) = f(\vartheta, \varphi) \frac{u_E^{(0)}(r)}{r}$$

eine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen in Kugelkoordinaten mit \mathbf{n} als Polarachse darstellt, falls die Radialfunktion $u_E^{(0)}(r)$ der folgenden Differentialgleichung genügt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_E^{(0)}(r) = E u_E^{(0)}(r).$$

Die allgemeine Lösung ist für $kr \gg 1$ eine Superposition ebener Wellen in $D = 1$ Dimensionen:

$$\begin{aligned}u_E^{(0)}(r) &= A_+ \exp(ikr) + A_- \exp(-ikr) \\ \hbar k &= \sqrt{2\mu E}.\end{aligned}$$

Da wir auslaufende Teilchen beschreiben wollen, ist zu fordern:

$$A_- = 0.$$

Ferner setzen wir $A_+ = A$, da pro Zeiteinheit die Anzahl der auslaufenden Teilchen proportional zu der Anzahl der einlaufenden Teilchen ist.

In großem Abstand zum Streuzentrum am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ ergibt sich so das stationäre Bild der Überlagerung einer homogenen **einlaufenden ebenen Welle** mit Propagationsrichtung \mathbf{n} mit einer *richtungsmodulierten* **auslaufenden Kugelwelle**:

$$\begin{aligned}\psi_E(\mathbf{r}) &= A \left[\exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) + f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{1}{r} \exp(ikr) \right] \\ \hbar k &= \sqrt{2\mu E}.\end{aligned}\quad (18.7)$$

Anders als bei der Berechnung von Energie-Eigenfunktionen ist beim stationären (elastischen) Streuproblem die Energie E vorgegeben, denn die Teilchenquelle liefert einen Strahl mit konstanter Energie E . Da der Streuprozess als elastisch angenommen ist gilt Energieerhaltung, d.h. die auslaufenden Teilchen haben die gleiche Energie E wie die einlaufenden Teilchen. Die von den Einheitsvektoren \mathbf{n} und \mathbf{n}' abhängige Größe $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ mit der physikalischen Dimension einer Länge heißt **Streuamplitude**.

Charakteristische Merkmale für den von der Quelle erzeugten Teilchenstrom sind die Dichte und die Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \frac{\hbar k}{\mu} \mathbf{n}$ der einlaufenden Teilchen. Die Teilchendichte der *einlaufenden* Teilchen am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ ist gegeben zu

$$\rho^{(\text{in})} = [\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})]^\dagger \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = |A|^2,$$

die zugeordnete Teilchenstromdichte ist:

$$\mathbf{j}^{(\text{in})} = \frac{\hbar}{\mu} \text{Im} \left[[\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})]^\dagger \nabla \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) \right] = \frac{\hbar k}{\mu} \mathbf{n} |A|^2 = \mathbf{v} \rho^{(\text{in})}.$$

In der Zeit dt fliegt demnach durch eine Querschnittsfläche F mit Flächennormale \mathbf{n} eine Anzahl

$$dN^{(\text{in})} = \frac{\hbar k}{\mu} |A|^2 (F dt)$$

von Teilchen im Strahl auf das Target zu. Die Dimension der Wahrscheinlichkeitsamplitude $|A|$ ist $[L^{-\frac{3}{2}}]$, wobei L eine charakteristische Länge bezeichnet.

In der gleichen Zeit dt wird im stationären Fall nun eine Anzahl $dN^{(\text{out})}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ der einlaufenden Teilchen in das Raumwinkelelement $d\Omega_{\mathbf{n}'}$ am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ gestreut. Diese ist gleich der Anzahl $dN^{(\text{out})}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ der in der Zeit dt am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ in radialer Richtung \mathbf{n}' auslaufenden Teilchen:

$$dN^{(\text{out})}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \mathbf{j}^{(\text{out})} \cdot \mathbf{n}' r^2 d\Omega_{\mathbf{n}'} \cdot dt.$$

Unter der Annahme $kr \gg 1$ folgt jetzt:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{(\text{out})} \cdot \mathbf{n}' &= \frac{\hbar}{\mu} \text{Im} \left\{ \left[\psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right]^\dagger (\nabla \cdot \mathbf{n}') \psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right\} \\ &= \frac{\hbar}{\mu} \text{Im} \left[\left[\psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \frac{\partial}{\partial r} \psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \frac{\hbar k}{\mu} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \frac{1}{r^2} |A|^2 + \mathcal{O} \left[\frac{1}{(kr)^3} \right]. \end{aligned}$$

Also folgt für $\frac{dN^{(\text{out})}}{dt}$, wie es sein muss, für $kr \gg 1$ ein vom Abstand r unabhängiger Ausdruck:

$$\frac{dN^{(\text{out})}}{dt} = \frac{\hbar k}{\mu} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 |A|^2 d\Omega_{\mathbf{n}'}$$

Der Quotient

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \frac{\frac{dN^{(\text{out})}(\mathbf{n}, \mathbf{n}')}{dt d\Omega_{\mathbf{n}'}}}{\frac{dN^{(\text{in})}}{dt dF}} = \frac{\frac{\hbar k}{\mu} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 |A|^2 d\Omega_{\mathbf{n}'}}{\frac{\hbar k}{\mu} |A|^2} = |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \quad (18.8)$$

heißt dabei **differentieller Wirkungsquerschnitt**. Er hat die physikalische Dimension einer Fläche und ist gleich dem Absolutquadrat der Streuamplitude. Integration über alle Raumwinkelelemente $d\Omega_{\mathbf{n}'} = d\varphi' d\vartheta' \sin \vartheta'$ ergibt per definitionem den sog. **totalen Wirkungsquerschnitt**:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega_{\mathbf{n}'} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2. \quad (18.9)$$

Wir prüfen jetzt die eingangs erwähnte Erhaltung der Teilchenzahl. Dazu berechnen wir unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung für die Gesamtwellenfunktion:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r\mathbf{n}' \\ \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_E(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i} \nabla \left[\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) + \psi_E^{(\text{out})}(\mathbf{r}) \right] \\ &= A \left[\hbar k \mathbf{n} \exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) + \hbar k \mathbf{n}' f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{1}{r} \exp(ikr) \right] + \mathcal{O} \left[\frac{A\hbar k}{(kr)^2} \right]. \end{aligned}$$

Es folgt dann für die **gesamte** Teilchenstromdichte $\mathbf{j}_E(\mathbf{r})$ für $kr \gg 1$ unter Vernachlässigung von kleinen Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O} \left[\frac{|A|^2 \frac{\hbar k}{\mu}}{(kr)^3} \right]$ der Ausdruck:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{\mu} \text{Im} \left[\psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi_E(\mathbf{r}) \right] \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} + \mathbf{n}' \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \\ + (\mathbf{n} + \mathbf{n}') \frac{1}{2r} \left[f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{ikr(1-\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')} + f^\dagger(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{-ikr(1-\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')} \right] \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Mittels der Identitäten (Beweis siehe Übungsaufgaben)

$$e^{i(kr)\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} \stackrel{kr \gg 1}{\approx} 2\pi i \cdot \left[\delta^{(2)}(\mathbf{n} + \mathbf{n}') \frac{e^{-ikr}}{kr} - \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{kr} \right] \quad (18.10)$$

$$e^{-i(kr)\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} = \left[e^{i(kr)\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'} \right]^\dagger$$

erhalten wir jetzt für $kr \gg 1$:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) = & |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \left\{ \mathbf{n} + \mathbf{n}' \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \right. \\ & + (\mathbf{n} + \mathbf{n}') \frac{1}{2r} \left[f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{ikr} 2\pi i \left(-\delta^{(2)}(\mathbf{n} + \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{kr} + \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \frac{e^{-ikr}}{kr} \right) \right. \\ & \left. \left. + f^\dagger(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{-ikr} 2\pi i \left(\delta^{(2)}(\mathbf{n} + \mathbf{n}') \frac{e^{-ikr}}{kr} - \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{kr} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Unter Beachtung von

$$\begin{aligned} (\mathbf{n} + \mathbf{n}') \delta^{(2)}(\mathbf{n} + \mathbf{n}') &= \mathbf{0} \\ (\mathbf{n} + \mathbf{n}') \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') &= 2\mathbf{n} \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \end{aligned}$$

resultiert nunmehr:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r\mathbf{n}' \\ \mathbf{k} &= k\mathbf{n} \\ \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) &= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} + \mathbf{n}' \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \\ + \mathbf{n}' \frac{1}{r} \left[\begin{array}{l} [f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{ikr}] 2\pi i \frac{e^{-ikr}}{kr} \\ - [f^\dagger(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{-ikr}] 2\pi i \frac{e^{ikr}}{kr} \end{array} \right] \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \end{array} \right\} \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} + \mathbf{n}' \frac{1}{r^2} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \\ - \mathbf{n}' \frac{4\pi}{kr} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{r} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \right] \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

In großem Abstand zum Streuzentrum, $r > R_c$ und $kr \gg 1$, setzt sich demnach die Teilchenstromdichte $\mathbf{j}_E(\mathbf{r})$ nicht aus zwei sondern aus *drei* Beiträgen zusammen. Der erste Term beschreibt die einlaufenden Teilchen, der zweite Term stellt den Fluss der gestreuten Teilchen dar, der dritte Term beschreibt die *Interferenz* zwischen einlaufenden und auslaufenden Teilchen, wobei das *negative(!)* Vorzeichen den Teilchenfluss der einlaufenden Teilchen abschwächt, so dass insgesamt (wie wir jetzt zeigen) die Erhaltung der Teilchenzahl beim Streuvorgang gewährleistet ist.

Teilchenzahlerhaltung wird im stationären Fall durch die Identität

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) = 0$$

zum Ausdruck gebracht. Integration über eine Kugel mit Radius $R \gg R_c$, wobei auf der Kugeloberfläche gilt $\mathbf{r}' = R\mathbf{n}'$, liefert jetzt:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{|\mathbf{r}'| \leq R} d^3 r' \operatorname{div} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}') \\ &\stackrel{\text{Gauß}}{=} R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \mathbf{j}_E(R\mathbf{n}') \cdot \mathbf{n}' \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' + \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}' \frac{1}{R^2} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \\ - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' \frac{4\pi}{kR} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{R} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \right] \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Für einen fest gewählten Richtungsvektor \mathbf{n} ist:

$$\int d\Omega_{\mathbf{n}'} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' = 0.$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}' &= 1 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \\ \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' \frac{4\pi}{kR} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{R} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \right] \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') &= \frac{4\pi}{kR} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{R} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}) \right]. \end{aligned}$$

Damit folgt jetzt aufgrund der Teilchenzahlerhaltung:

$$0 = \int_{|\mathbf{r}'| \leq R} d^3 r' \operatorname{div} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}') = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} \left(-\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} [f(\mathbf{n}, \mathbf{n})] + \int d\Omega_{\mathbf{n}'} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \right).$$

Der sich hieraus ergebende Zusammenhang

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} [f(\mathbf{n}, \mathbf{n})] = \int d\Omega_{\mathbf{n}'} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 = \sigma_{\text{tot}} \quad (18.11)$$

heißt das **Optische Theorem**. Es ist bemerkenswert, dass eine Observable der Quantenmechanik, nämlich der totale Wirkungsquerschnitt, hier *linear* von der Streuamplitude $f(\mathbf{n}, \mathbf{n})$ in Vorwärtsrichtung ($\mathbf{n}' = \mathbf{n}$) abhängt!

18.1 Streuphasen

Für den Spezialfall eines radialsymmetrischen Streupotentials $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$ kommutiert der Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \\ &\stackrel{\text{Kugelkoordinaten}}{=} \frac{1}{2\mu} \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r) \end{aligned}$$

mit dem Bahn-Drehimpulsoperator

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}.$$

Dann bilden die Operatoren \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z ein vollständiges System kommutierender hermitescher Operatoren. Also existieren simultane Eigenfunktionen $\psi_{E,l,m}(\mathbf{r})$ mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) &= E\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{L}}^2\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) \\ \hat{L}_z\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) &= \hbar m\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) \\ l &\in \{0, 1, 2, \dots\} \\ m &\in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}.\end{aligned}$$

In Kugelkoordinaten ist das Problem, die stationäre Schrödinger-Gleichung zu lösen, separabel:

$$\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{u_{E,l}(r)}{r} \cdot Y_{l,m}(\vartheta, \varphi).$$

Dann löst $u_{E,l}(r)$ die radiale Differentialgleichung

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{E,l}(r) &= E u_{E,l}(r) \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\end{aligned}\quad (18.12)$$

mit der Randbedingung

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}(r) = 0. \quad (18.13)$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie des Problems dürfen wir o.B.d.A. annehmen, dass die einlaufende ebene Welle entlang der Richtung $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$ propagiert:

$$\begin{aligned}\psi^{(in)}(\mathbf{r}) &= A \exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \\ &= A \exp(ikz) \\ &\stackrel{\text{Kugelkoordinaten}}{=} A \exp(ikr \cos \vartheta).\end{aligned}$$

Eine allgemeine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten kann somit aufgrund der Eigenschaft der Axialsymmetrie um die Richtung \mathbf{n} des Strahls der einlaufenden Teilchen für ein radialsymmetrisches Potential $V(r)$ als unendliche Reihe der folgenden Form dargestellt werden:

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0).$$

Das Problem besteht darin, zu vorgegebener Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ die Entwicklungskoeffizienten $c_{E,l}$ derart zu bestimmen, dass in großem Abstand zum Target gilt

$$\psi_E(\mathbf{r}) \xrightarrow{kr \gg 1} A \left[\exp(ikr \cos \vartheta) + f(\vartheta) \frac{1}{r} \exp(ikr) \right].$$

Die einlaufende ebene Welle $\psi^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ ist Lösung der kräftefreien stationären Schrödinger-Gleichung (18.3). Somit existiert in Kugelkoordinaten die Darstellung

$$\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = A \exp(ikr \cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_{E,l}^{(\text{in})} \frac{u_{E,l}^{(\text{in})}(r)}{r} \cdot Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0), \quad (18.14)$$

wobei jetzt $u_{E,l}^{(\text{in})}(r)$ die Lösung der radialen kräftefreien stationären Schrödinger-Gleichung (18.6) zur Randbedingung

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}^{(\text{in})}(r) = 0 \quad (18.15)$$

ist.

Sehen wir zunächst von Randbedingungen ab, so ist die allgemeine Lösung der radialen kräftefreien stationären Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u_{E,l}^{(0)}(r) = E u_{E,l}^{(0)}(r) \quad (18.16)$$

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

exakt durch eine Zylinderfunktion mit *halbzahligem* Index darstellbar

$$u_{E,l}^{(0)}(r) = \sqrt{kr} Z_{l+\frac{1}{2}}(kr).$$

Nun sind die **Bessel-Funktionen**

$$J_\nu(s) = \left(\frac{s}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\nu + n + 1)} \left(\frac{s}{2}\right)^n \quad (18.17)$$

$$|\arg(s)| < \pi$$

und die **Neumann-Funktionen**

$$N_\nu(s) = \frac{\cos(\nu\pi) J_\nu(s) - J_{-\nu}(s)}{\sin(\nu\pi)} \quad (18.18)$$

für nicht ganzzahlige Werte ν in der Tat linear unabhängige Lösungen der Differentialgleichung der Zylinderfunktionen:

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d}{ds} + \left(1 - \frac{\nu^2}{s^2}\right) \right] Z_\nu(s) = 0.$$

Also gilt

$$Z_\nu(s) = aJ_\nu(s) + bN_\nu(s).$$

Die Koeffizienten a und b sind dabei an die gestellten Randbedingungen anzupassen. Für $|s| \gg 1$ gilt die asymptotische Darstellung:

$$\begin{aligned} J_\nu(s) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi s}} \cos\left(s - \frac{\pi}{2}\nu - \frac{\pi}{4}\right) \\ N_\nu(s) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi s}} \sin\left(s - \frac{\pi}{2}\nu - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (18.19)$$

Da die **Neumann-Funktionen** für $r \rightarrow 0$ singular sind, muss zur Erfüllung der Randbedingung Gl. (18.15) für die Lösung $u_{E,l}^{(\text{in})}(r)$ gefordert werden, dass der Koeffizient b gleich Null ist:

$$u_{E,l}^{(\text{in})}(r) = \sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr).$$

Wir setzen hier o.B.d.A. $a = 1$, da wir bereits entsprechende Koeffizienten $a_{E,l}^{(\text{in})}$ in der Reihenentwicklung (18.14) vorhalten.

Es ist zweckmäßig, in der obigen Reihe (18.14) für $\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ die Kugelflächenfunktion $Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0)$ durch **Legendre-Polynome** $P_l(\cos \vartheta)$ auszudrücken:

$$Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta).$$

Von den Kugelflächenfunktion $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ übernehmen die Legendre-Polynome entsprechende Orthonormalitätsrelationen:

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'}. \quad (18.20)$$

Somit folgt aus Gl. (18.14) auf einer Kugel mit Radius $R > R_c$ am Ort $\mathbf{r}' = R\mathbf{n}'$ die Darstellung:

$$\begin{aligned} a_{E,l}^{(\text{in})} u_{E,l}^{(\text{in})}(R) &= R \cdot \int d\Omega_{\mathbf{n}'} Y_{l,0}^\dagger(\vartheta', \varphi') \psi_E^{\text{in}}(\mathbf{r}') \\ &= R \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi d\vartheta' \sin(\vartheta') Y_{l,0}^\dagger(\vartheta', \varphi') A \exp(ikR \cos \vartheta') \\ &= 2\pi R \cdot \int_0^\pi d\vartheta' \sin(\vartheta') Y_{l,0}^\dagger(\vartheta', \varphi' = 0) A \exp(ikR \cos \vartheta') \\ &= 2\pi \frac{A}{ik} \int_0^\pi d\vartheta' Y_{l,0}^\dagger(\vartheta', \varphi' = 0) \cdot (-1) \frac{\partial}{\partial \vartheta'} \exp(ikR \cos \vartheta'). \end{aligned} \quad (18.21)$$

Im Grenzfall $kR \gg 1$ formen wir diesen Ausdruck nun um zu

$$\begin{aligned}
 & \stackrel{\text{p.I.}}{=} \\
 & = 2\pi \frac{A}{ik} \left\{ \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta' \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta'} Y_{l,0}^\dagger(\vartheta', \varphi' = 0) \right] \exp(ikR \cos \vartheta')}_{\stackrel{kR \gg 1}{\approx} \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right)} \right\} \\
 & \stackrel{kR \gg 1}{\approx} 2\pi \frac{A}{ik} \left[-Y_{l,0}^\dagger(\pi, 0) \exp(-ikR) + Y_{l,0}^\dagger(0, 0) \exp(+ikR) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right).
 \end{aligned}$$

Die Ergebnisse von Kapitel 14 ergeben:

$$\begin{aligned}
 Y_{l,0}^\dagger(\pi, 0) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (-1)^l \\
 Y_{l,0}^\dagger(0, 0) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}.
 \end{aligned}$$

Also folgt

$$a_{E,l}^{(\text{in})} u_{E,l}^{(\text{in})}(R) \stackrel{kR \gg 1}{\approx} 2\pi \frac{A}{ik} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \left[\exp(ikR) - (-1)^l \exp(-ikR) \right].$$

Nun gilt

$$\begin{aligned}
 & \exp(ikR) - (-1)^l \exp(-ikR) \\
 &= \exp(ikR) - e^{i\pi l} \exp(-ikR) \\
 &= e^{i\frac{\pi}{2}l} \cdot \left\{ \exp\left[i\left(kR - \frac{\pi}{2}l\right)\right] - \exp\left[-i\left(kR - \frac{\pi}{2}l\right)\right] \right\} \\
 &= i^l \cdot (2i) \cdot \sin\left(kR - \frac{\pi}{2}l\right).
 \end{aligned}$$

Somit erhalten wir einerseits:

$$\begin{aligned}
 a_{E,l}^{(\text{in})} u_{E,l}^{(\text{in})}(R) & \stackrel{kR \gg 1}{\approx} 2\pi \frac{A}{ik} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} i^l \cdot (2i) \cdot \sin\left(kR - \frac{\pi}{2}l\right) \quad (18.22) \\
 &= A \frac{4\pi}{k} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} i^l \sin\left(kR - \frac{\pi}{2}l\right).
 \end{aligned}$$

Andererseits folgt für $kr \gg 1$ aus Gl. (18.19) für Bessel-Funktionen mit einem *halbzahligen* Index $\nu = l + \frac{1}{2}$ die asymptotische Entwicklung:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \stackrel{kr \gg 1}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right),$$

d.h. es gilt auch:

$$a_{E,l}^{(\text{in})} u_{E,l}^{(\text{in})}(R) = a_{E,l}^{(\text{in})} \sqrt{kR} J_{l+\frac{1}{2}}(kR) \stackrel{kr \gg 1}{\approx} a_{E,l}^{(\text{in})} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right). \quad (18.23)$$

Vergleich von Gl. (18.22) und Gl. (18.23) zeigt, dass sich der Term $\sin(kR - l\frac{\pi}{2})$ auf beiden Seiten weghebt, so dass wir eine explizite Formel für die Entwicklungskoeffizienten $a_{E,l}^{(\text{in})}$ erhalten:

$$a_{E,l}^{(\text{in})} = \frac{A}{k} \cdot 2\pi \sqrt{\frac{2l+1}{2}} i^l.$$

Nach dem Gesagten ist

$$\begin{aligned} \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) &= A \exp(ikr \cos \vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} a_{E,l}^{(\text{in})} \frac{u_{E,l}^{(\text{in})}(r)}{r} \cdot Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A}{k} \cdot 2\pi \sqrt{\frac{2l+1}{2}} i^l \frac{\sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{r} \cdot Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0) \\ &= A \cdot \sum_{l=0}^{\infty} 2\pi \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{2}} i^l \frac{\sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{kr} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Damit ist jetzt die folgende Identität bewiesen:

$$\exp(ikr \cos \vartheta) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr). \quad (18.24)$$

Zugleich erhalten wir unter Verwendung von Gl. (18.20) hieraus eine Integraldarstellung für Besselfunktionen mit halbzahligen Index:

$$\sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) = \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}l}}{2} \int_0^\pi d\vartheta' \sin(\vartheta') P_l(\cos \vartheta') \exp(ikr \cos \vartheta'). \quad (18.25)$$

Die allgemeine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung ist für den Fall, dass die einlaufenden Teilchen entlang der z -Achse mit Amplitude $A = 1$ einlaufen, und das Streupotential $V(r)$ radialsymmetrisch ist, gegeben zu

$$\begin{aligned} \psi_E(\mathbf{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} \cdot Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Zwar ist $u_{E,l}(r)$ im Außengebiet $r > R_c$ ebenfalls eine Lösung der kräftefreien Differentialgleichung, aber in der Wechselwirkungszone $r \leq R_c$ wird die Lösung $u_{E,l}(r)$ durch das Potential $V(r)$ beeinflusst. Deshalb ist im Außengebiet $r > R$ die *allgemeine* exakte Lösung der Differentialgleichung eine Linearkombination von Zylinderfunktionen:

$$c_{E,l} \cdot u_{E,l}(r) = \sqrt{kr} \left[a_{E,l} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + b_{E,l} \cdot N_{l+\frac{1}{2}}(kr) \right]. \quad (18.26)$$

Die bei $r = 0$ vorhandene Singularität der Zylinderfunktion $N_{l+\frac{1}{2}}(kr)$ wirft jetzt keine Probleme auf, da die Formel nur im Außengebiet $r > R_c$ zum Einsatz kommt. Im Innengebiet $0 < r < R_c$ muss die radiale Differentialgleichung (18.12) in Gegenwart des Potentials $V(r)$ mit der Randbedingung $\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}(r) = 0$ noch gelöst werden, was in der Regel nur durch den Einsatz numerischer Verfahren möglich ist. Stetigkeit von $u_{E,l}(r)$ und der ersten Ableitung $\frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}(r)$ bei $r = R_c$ liefert dann für jeden Wert $l = 0, 1, 2, \dots$ jeweils zwei Bestimmungsgleichungen für die unbekanntenen Koeffizienten $a_{E,l}$ und $b_{E,l}$.

Asymptotisch folgt für $r > R_c$ und zugleich $kr \gg 1$:

$$\begin{aligned} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) &\stackrel{kr \gg 1}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \\ N_{l+\frac{1}{2}}(kr) &\stackrel{kr \gg 1}{\sim} -\sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right). \end{aligned}$$

Also folgt für großen Abstand zum Streuzentrum

$$c_{E,l} u_{E,l}(r) \stackrel{kr \gg 1}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[a_{E,l} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \right].$$

Wir überzeugen uns jetzt davon, dass die Koeffizienten $a_{E,l}$ und $b_{E,l}$ reelle Zahlen sind. Dazu betrachten wir den Gesamt-Teilchenfluss durch die Oberfläche einer Kugel mit Radius $R \gg R_c$ und nehmen an, dass gilt $kR \gg 1$. Mit $\mathbf{r}' = R\mathbf{n}'$ auf der Kugeloberfläche mit Normalenvektor \mathbf{n}' in radialer Richtung folgt jetzt:

$$\begin{aligned} &R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \mathbf{j}_E \cdot \mathbf{n}' \\ &= R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \frac{\hbar}{\mu} \operatorname{Im} \left\{ [\psi_E(\mathbf{r})]^\dagger (\nabla' \cdot \mathbf{n}') \psi_E(\mathbf{r}) \right\} \\ &= \operatorname{Im} R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \frac{\hbar}{\mu} [\psi_E(R\mathbf{n}')]^\dagger \frac{\partial}{\partial R} \psi_E(R\mathbf{n}') \\ &= \operatorname{Im} R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \frac{\hbar}{\mu} \left[\sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l}^\dagger \frac{u_{E,l}^\dagger(R)}{R} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\vartheta) \right] \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial R} \left[\sum_{l'=0}^{\infty} c_{E,l'} \frac{u_{E,l'}(R)}{R} \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} P_{l'}(\cos\vartheta) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\hbar}{\mu} \sum_{l,l'} c_{E,l}^\dagger c_{E,l'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} \underbrace{\int d\Omega_{\mathbf{n}'} P_l(\cos\vartheta) P_{l'}(\cos\vartheta)}_{=2\pi \cdot \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'}} \\
 &\quad \times \operatorname{Im} \left\{ R^2 \frac{u_{E,l}^\dagger(R)}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{u_{E,l'}(R)}{R} \right) \right\} \\
 &= \frac{\hbar}{\mu} \sum_{l=0}^{\infty} |c_{E,l}|^2 \operatorname{Im} \left\{ R^2 \frac{u_{E,l}^\dagger(R)}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{u_{E,l}(R)}{R} \right) \right\} \\
 &= \frac{\hbar}{\mu} \sum_{l=0}^{\infty} \operatorname{Im} \left\{ R \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[a_{E,l}^\dagger \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l}^\dagger \cos\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \right] \right. \\
 &\quad \left. \times \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}}}{R} \left[a_{E,l} \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l} \cos\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \right] \right) \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right) \\
 &= \frac{\hbar k}{\mu \pi} \sum_{l=0}^{\infty} \operatorname{Im} \left\{ \begin{array}{l} \left[a_{E,l}^\dagger \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l}^\dagger \cos\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \right] \\ \times \left[a_{E,l} \cos\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) + b_{E,l} \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \right] \end{array} \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right) \\
 &= \frac{\hbar k}{\mu \pi} \sum_{l=0}^{\infty} \operatorname{Im} \left\{ \begin{array}{l} \left(a_{E,l}^\dagger a_{E,l} - b_{E,l}^\dagger b_{E,l} \right) \sin\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \\ + a_{E,l}^\dagger b_{E,l} \sin^2\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l}^\dagger a_{E,l} \cos^2\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \end{array} \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right) \\
 &= \frac{\hbar k}{\mu \pi} \sum_{l=0}^{\infty} \operatorname{Im} \left\{ a_{E,l}^\dagger b_{E,l} \sin^2\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) - b_{E,l}^\dagger a_{E,l} \cos^2\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right) \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kR}\right).
 \end{aligned}$$

Sei jetzt

$$\begin{aligned}
 a_{E,l} &= |a_{E,l}| e^{i\alpha_{E,l}} \\
 b_{E,l} &= |b_{E,l}| e^{i\beta_{E,l}}.
 \end{aligned}$$

Dann ist

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Im} \left(a_{E,l}^\dagger b_{E,l} \right) &= |a_{E,l}| |b_{E,l}| \sin(\beta_{E,l} - \alpha_{E,l}) \\
 \operatorname{Im} \left(b_{E,l}^\dagger a_{E,l} \right) &= -|a_{E,l}| |b_{E,l}| \sin(\beta_{E,l} - \alpha_{E,l})
 \end{aligned}$$

und es folgt für $\frac{R}{R_c} \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
 & R^2 \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \mathbf{j}_E \cdot \mathbf{n}' \\
 = & \frac{\hbar k}{\mu} \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} |a_{E,l}| |b_{E,l}| \sin(\beta_{E,l} - \alpha_{E,l}) \left[\sin^2 \left(kR - l\frac{\pi}{2} \right) + \cos^2 \left(kR - l\frac{\pi}{2} \right) \right] \\
 = & \frac{\hbar k}{\mu} \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} |a_{E,l}| |b_{E,l}| \sin(\beta_{E,l} - \alpha_{E,l}) \\
 = & \int d^3r' \operatorname{div} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}') \\
 \stackrel{!}{=} & 0 \text{ (Teilchenzahlerhaltung)}.
 \end{aligned}$$

Somit gilt notwendig

$$\beta_{E,l} = \alpha_{E,l}, \quad (18.27)$$

d.h. wir dürfen die Amplituden $a_{E,l}$ und $b_{E,l}$ nach Abspaltung eines gemeinsamen Phasenfaktors $e^{i\alpha_{E,l}}$ als reelle Zahlen ansehen!

Mit

$$\begin{aligned}
 a_{E,l} &= c_{E,l} \cos \delta_{E,l} \\
 b_{E,l} &= -c_{E,l} \sin \delta_{E,l} \\
 c_{E,l} &= e^{i\alpha_{E,l}} \sqrt{|a_{E,l}|^2 + |b_{E,l}|^2}
 \end{aligned}$$

folgt dann

$$\begin{aligned}
 u_{E,l}(r) &\stackrel{kr \gg 1}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\frac{a_{E,l}}{c_{E,l}} \sin \left(kr - l\frac{\pi}{2} \right) - \frac{b_{E,l}}{c_{E,l}} \cos \left(kr - l\frac{\pi}{2} \right) \right] \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l \right).
 \end{aligned} \quad (18.28)$$

Das asymptotische Verhalten der *exakten* radialen Wellenfunktion $u_{E,l}(r)$ ist für $kr \gg 1$ demnach vollständig durch die sog. **Streuphasen** δ_l charakterisiert:

$$\tan(\delta_{E,l}) = -\frac{b_{E,l}}{a_{E,l}}.$$

Wie wir gezeigt haben, sind aufgrund der Teilchenzahlerhaltung alle Streuphasen $\delta_{E,l}$ notwendig reelle Zahlen!

Die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung ist für den Fall, dass die einlaufenden Teilchen entlang der z -Achse mit Amplitude $A = 1$ einlaufen, und

das Streupotential $V(r)$ radialsymmetrisch ist, in großem Abstand zum Target gegeben zu

$$\begin{aligned}\psi_E(\mathbf{r}) &\stackrel{kr \gg 1}{=} \exp(ikr \cos \vartheta) + f(\vartheta) \frac{1}{r} \exp(ikr) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} \cdot Y_{l,0}(\vartheta, \varphi = 0) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta).\end{aligned}$$

Um jetzt die Streuamplitude $f(\vartheta)$ durch die Streuphasen δ_l auszudrücken, lösen wir nach dem Streuterm auf und erhalten:

$$\begin{aligned}& f(\vartheta) \frac{1}{r} \exp(ikr) \stackrel{kr \gg 1}{=} \psi_E(\mathbf{r}) - \exp(ikr \cos \vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} c_{E,l} \frac{u_{E,l}(r)}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta) \\ -\sqrt{\frac{\pi}{2kr}} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \end{array} \right\} \\ &\stackrel{kr \gg 1}{=} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} \frac{c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta) \\ -\sqrt{\frac{\pi}{2kr}} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin(kr - l\frac{\pi}{2}) \end{array} \right\} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} \frac{c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}}}{r} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{\exp[i(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})] - \exp[-i(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})]}{2i} \\ -\frac{1}{kr} (2l+1) \exp(i\frac{\pi}{2}l) \cdot \frac{\exp[i(kr - l\frac{\pi}{2})] - \exp[-i(kr - l\frac{\pi}{2})]}{2i} \end{array} \right\} P_l(\cos \vartheta) \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \exp(ikr) \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{\exp[i(-l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})]}{2i} \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \exp(i\frac{\pi}{2}l) \cdot \frac{\exp[i(-l\frac{\pi}{2})]}{2i} \end{array} \right\} P_l(\cos \vartheta) \\ -\frac{1}{r} \exp(-ikr) \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{\exp[-i(-l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})]}{2i} \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \exp(i\frac{\pi}{2}l) \cdot \frac{\exp[-i(-l\frac{\pi}{2})]}{2i} \end{array} \right\} P_l(\cos \vartheta) \end{array} \right\} \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \exp(ikr) \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \exp[i(-l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l})] \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \end{array} \right\} \frac{1}{2i} P_l(\cos \vartheta) \\ -\frac{1}{r} \exp(-ikr) \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \exp[-i\delta_{E,l}] \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \exp(i\frac{\pi}{2}l) \end{array} \right\} \frac{\exp(i\frac{\pi}{2}l)}{2i} P_l(\cos \vartheta). \end{array} \right. \quad (18.29)\end{aligned}$$

Da es bei stationärer elastischer Streuung nur eine auslaufende Kugelwelle $\frac{1}{r} \exp(ikr)$ geben darf, ist zu fordern, dass im obigen Ausdruck der Koeffizient der *einlaufenden* Kugelwelle $\frac{1}{r} \exp(-ikr)$ unbedingt gleich Null ist! Dies ergibt eine Bedingungslei-

chung für die Streuphasen $e^{-i\delta_l}$:

$$c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \exp\left(-i\frac{\pi}{2}l\right) \exp[-i\delta_{E,l}] = \frac{1}{k} (2l+1).$$

Es ergibt sich somit der folgende Zusammenhang zwischen Streuamplitude $f(\vartheta)$ und den Streuphasen δ_l für $l = 0, 1, 2, 3, \dots$:

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{c} c_{E,l} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \exp\left[i\left(-l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l}\right)\right] \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \end{array} \right\} \frac{1}{2i} P_l(\cos \vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \begin{array}{c} \frac{1}{k} (2l+1) \exp(2i\delta_{E,l}) \\ -\frac{1}{k} (2l+1) \end{array} \right\} \frac{1}{2i} P_l(\cos \vartheta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \frac{\exp(2i\delta_{E,l}) - 1}{2i} \right\} \frac{1}{k} (2l+1) P_l(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Also

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \left(e^{i\delta_{E,l}} \sin \delta_{E,l} \right) (2l+1) P_l(\cos \vartheta). \quad (18.30)$$

Verschwinden die Streuphasen $\delta_{E,l}$, so findet keine Streuung statt, die einlaufende (stationäre) ebene Welle bleibt dann unverändert so wie sie ist.

Der hergeleitete Ausdruck für $f(\vartheta)$ ändert sich nicht, wenn wir substituieren:

$$\delta_{E,l} \rightarrow \delta_{E,l} + \pi.$$

Somit sind Effekte der Streuung in der Quantenmechanik periodisch mit der Periode π , nicht mit der Periode 2π , was man hätte vermuten können!

Für den totalen Streuquerschnitt folgt jetzt unter Verwendung der Orthonormalitätsrelation Gl. (18.20)

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &= 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) |f(\vartheta)|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_{E,l}). \end{aligned}$$

Jede Partialwelle $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ liefert also höchstens den Beitrag $\frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$. Dieser maximale Wert wird für $\delta_l = (n_l + \frac{1}{2})\pi$ angenommen, wobei $n_l \in \mathbb{Z}$.

Man überzeugt sich leicht, dass der hergeleitete Ausdruck für σ_{tot} in Übereinstimmung mit dem optischen Theorem Gl. (18.11) ist:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &= \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\vartheta = 0) \\ &= \frac{4\pi}{k} \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \text{Im} \left(e^{i\delta_{E,l}} \sin \delta_{E,l} \right) (2l+1) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_{E,l}). \end{aligned}$$

Die Methode der Partialwellen ist besonders nützlich bei Potentialen mit kleiner Reichweite. In dem Fall spielt nur der Term mit $l = 0$, die sog. s -Welle, eine Rolle! Um dies zu zeigen, betrachten wir die radiale stationäre Schrödinger-Gleichung (18.12) einmal mit und einmal ohne Potential:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - E + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{E,l}(r) = 0 \quad (18.31)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}(r) = 0$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - E + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u_{E,l}^{(0)}(r) = 0 \quad (18.32)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}^{(0)}(r) = 0.$$

Wie schon erwähnt besitzt die kräftefreie radiale stationäre Schrödinger-Gleichung zur Randbedingung $\lim_{r \rightarrow 0} u_{E,l}^{(0)}(r) = 0$ die exakte Lösung

$$u_{E,l}^{(0)}(r) = \sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \quad (18.33)$$

$$\hbar k = \sqrt{2\mu E}.$$

Die erste Differentialgleichung (18.31) multiplizieren wir mit $u_{E,l}^{(0)}(r)$, die zweite Differentialgleichung (18.32) mit $u_{E,l}(r)$ und subtrahieren beide Ergebnisse:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[u_{E,l}^{(0)}(r) \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}(r) - u_{E,l}(r) \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}^{(0)}(r) \right] = \frac{2\mu}{\hbar^2} u_{E,l}^{(0)}(r) V(r) u_{E,l}(r).$$

Integration von $r = 0$ bis $r = R$ liefert jetzt unter Beachtung der Randbedingungen bei $r = 0$

$$u_{E,l}^{(0)}(R) \lim_{r \rightarrow R} \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}(r) - u_{E,l}(R) \lim_{r \rightarrow R} \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}^{(0)}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^R dr u_{E,l}^{(0)}(r) V(r) u_{E,l}(r).$$

Für große Abstände $kR \gg 1$ dürfen wir die bereits hergeleitete asymptotische Lösung verwenden:

$$u_{E,l}(R) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kR - l\frac{\pi}{2} + \delta_{E,l} \right)$$

$$u_{E,l}^{(0)}(R) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kR - l\frac{\pi}{2} \right).$$

Es gilt dann für $kR \gg 1$:

$$\begin{aligned}
 & u_{E,l}^{(0)}(R) \lim_{r \rightarrow R} \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}(r) - u_{E,l}(R) \lim_{r \rightarrow R} \frac{\partial}{\partial r} u_{E,l}^{(0)}(r) \\
 &= \frac{2k}{\pi} \left[\sin \left(kR - l \frac{\pi}{2} \right) \cos \left(kR - l \frac{\pi}{2} + \delta_{E,l} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \sin \left(kR - l \frac{\pi}{2} + \delta_{E,l} \right) \cos \left(kR - l \frac{\pi}{2} \right) \right] \\
 &= \frac{2k}{\pi} \sin \left[\left(kR - l \frac{\pi}{2} \right) - \left(kR - l \frac{\pi}{2} + \delta_{E,l} \right) \right] \\
 &= -\frac{2k}{\pi} \sin(\delta_{E,l}).
 \end{aligned}$$

Hieraus folgt, wenn wir noch für $u_{E,l}^{(0)}(r)$ die exakte Darstellung Gl. (18.33) einsetzen:

$$\frac{2k}{\pi} \sin(\delta_{E,l}) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) V(r) u_{E,l}(r).$$

Aufgrund unserer Annahme, dass das Potential eine endliche Reichweite haben soll, folgt jetzt der Ausdruck:

$$k \sin(\delta_{E,l}) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{\pi}{2} \int_0^{R_c} dr \sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) V(r) u_{E,l}(r).$$

Offensichtlich ist $\delta_{E,l}$ eine *positive* oder *negative* reelle Zahl, je nachdem es sich um ein *attraktives* Potential, $V(r) < 0$, oder ein *repulsives* Potential, $V(r) > 0$, handelt.

Zur Abschätzung der Größenordnung der Streuphasen $\delta_{E,l}$ setzen wir unter dem Integralzeichen

$$u_{E,l}(r) \rightarrow u_{E,l}^{(0)}(r) = \sqrt{kr} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$$

und erhalten

$$\sin(\delta_{E,l}) \simeq -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{\pi}{2} \int_0^{R_c} dr r \left[J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \right]^2 V(r).$$

Einsetzen der Reihenentwicklung der Besselfunktionen liefert

$$\sin(\delta_{E,l}) \simeq -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{(kR_c)^{2l+1}}{[1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)]^2} \int_0^{R_c} dr r \cdot \left(\frac{r}{R_c} \right)^{2l+1} V(r).$$

Die Streuphasen $\delta_{E,l}$ sind demnach *ungerade* Funktionen des Parameters $k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$. Mit wachsendem l nehmen die Streuphasen für $kR_c \ll 1$ sehr rasch ab. Die Bedingung $kR_c \ll 1$ entspricht dabei der Streuung *langsamer* Teilchen. Bei der Streuung niederenergetischer, langsamer Teilchen in einem Potential $V(r)$ mit endlicher Reichweite spielen demnach nur *s-Wellen* ($l = 0$) eine Rolle. Der differentielle Streuquerschnitt für *s-Wellenstreuung* ist unabhängig vom Streuwinkel!

Das Ergebnis ist anschaulich, denn ein schwaches kurzreichweitiges Potential $V(r)$ wird für $l > 0$ überall von der Zentrifugalbarriere $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ dominiert, d.h. alle Streuphasen $\delta_{E,l}$ sind in dem Fall für $l > 0$ klein! Das Potential $V(r)$ kann dann nur bei nicht vorhandener Zentrifugalbarriere, also für $l = 0$, einen merklichen Effekt haben, d.h. nur die Streuphase $\delta_{E,0}$ für s -Wellenstreuung ($l = 0$) ist dann wichtig!

18.2 Die Stationäre Schrödinger-Gleichung als Integralgleichung

Die sog. **retardierte Greensche Funktion**

$$G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|} \exp(i\sqrt{\varepsilon}|\mathbf{r} - \mathbf{s}|)$$

$$\text{Im } \varepsilon > 0$$

ist in der oberen Halbebene $\text{Im } \varepsilon > 0$ der komplexen ε -Ebene eine **analytische Funktion** der komplexen Variablen ε . Die Funktion $G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon)$ ist eine Lösung der speziellen inhomogenen partiellen Differentialgleichung

$$\left(\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \varepsilon\right) G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon) = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{s}).$$

Die Funktion $G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon)$ beschreibt also im Grenzfall, dass man sich in der komplexen ε -Ebene der reellen Achse von oben nähert,

$$\varepsilon \rightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2} E + i0^+,$$

eine *auslaufende* Kugelwelle mit dem Punkt \mathbf{s} als Mittelpunkt.

Wir schreiben jetzt Gl. (18.2) um zu

$$\left(\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\right) \psi_E(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \psi_E(\mathbf{r}).$$

Mit Hilfe der retardierten Greenschen Funktion erhalten wir dann die folgende **Integralgleichung**:

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3 s G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon) \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}). \quad (18.34)$$

Dabei ist jetzt $\psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r})$ die allgemeine Lösung der kräftefreien stationären Schrödinger-Gleichung für das einlaufende Teilchen:

$$\left(\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\right) \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) = 0.$$

18.2 Die Stationäre Schrödinger-Gleichung als Integralgleichung

Angenommen das Potential $V(\mathbf{s})$ ist in der Region $|\mathbf{s}| > R_c$ derart klein, dass die Beiträge zum Integral aus dieser Region vernachlässigbar sind. Dann gilt, wenn \mathbf{r}' ein Punkt innerhalb dieser Region ist, und \mathbf{r} ein Punkt weit außerhalb:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &= \sqrt{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'} \\ &= |\mathbf{r}| \sqrt{1 + \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}}} \\ &\simeq |\mathbf{r}| - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}|}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir in führender Ordnung für den Fall $|\mathbf{r}| \gg R_c$:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|} \exp(i\sqrt{\varepsilon} |\mathbf{r} - \mathbf{s}|) \simeq \frac{e^{i\sqrt{\varepsilon}r}}{r} e^{-i\sqrt{\varepsilon} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}}{r}}.$$

Die gefundene Formel bestätigt am Ort $\mathbf{r} = r\mathbf{n}'$ für die allgemeine Lösung der Integralgleichung unser stationäres Bild der Überlagerung einer homogenen **einlaufenden ebenen Welle** mit Propagationsrichtung \mathbf{n} ,

$$\begin{aligned} \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) &= e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} \\ \mathbf{r} &= r\mathbf{n}', \end{aligned}$$

mit einer *richtungsmodulierten auslaufenden Kugelwelle*:

$$\begin{aligned} \psi_E(\mathbf{r}) &= \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3s G^{(\text{ret})}(\mathbf{r}, \mathbf{s}; \varepsilon) \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}) \\ &= e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{s}| \leq R_c} d^3s \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|} \exp(i\sqrt{\varepsilon} |\mathbf{r} - \mathbf{s}|) \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}) \\ &\stackrel{k|\mathbf{r}| \gg 1}{\simeq} e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{s}| \leq R_c} d^3s \frac{e^{i\sqrt{\varepsilon}r}}{r} e^{-i\sqrt{\varepsilon} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}}{r}} \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}) \\ &= e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{i\sqrt{\varepsilon}r}}{r} \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{s}| \leq R_c} d^3s e^{-i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n}' \cdot \mathbf{s}} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}) \\ &= e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} + f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{e^{i\sqrt{\varepsilon}r}}{r}, \end{aligned}$$

wobei exakt gilt:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_{|\mathbf{s}| \leq R_c} d^3s e^{-i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n}' \cdot \mathbf{s}} V(\mathbf{s}) \psi_E(\mathbf{s}).$$

In der **Bornschen Näherung** wird die Integralgleichung näherungsweise gelöst, indem unter dem Integralzeichen

$$\psi_E(\mathbf{s}) \rightarrow \psi_E^{(\text{in})}(\mathbf{s}) = e^{i\sqrt{\varepsilon} \mathbf{n} \cdot \mathbf{s}}$$

substituiert wird. Dann folgt die Streuamplitude in Bornscher Näherung zu

$$f_B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3s e^{-ik(\mathbf{n}'-\mathbf{n})\cdot\mathbf{s}} V(\mathbf{s}) \quad (18.35)$$

$$k = \sqrt{\varepsilon} = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

Variiert das Potential auf der Skala $|\mathbf{s}| \simeq \frac{2\pi}{|k(\mathbf{n}'-\mathbf{n})|}$ nur schwach, dann wird im Hochenergie-Limes $kR_c \gg 1$ der Beitrag zum Integral aufgrund des stark oszillierenden Integranden klein, d.h. die Bornsche Näherung wird in dem Fall eine hohe Genauigkeit aufweisen. Im entgegengesetzten Fall niedriger Energie E der einlaufenden Teilchen muss für die Gültigkeit der Bornschen Näherung vorausgesetzt werden, dass das Potential $V(\mathbf{s})$ nur ein schwaches Streuvermögen besitzt, d.h. $|V(\mathbf{s})| \ll E$.

Der Impuls der einlaufenden Teilchen ist

$$\mathbf{p} = \hbar k \mathbf{n},$$

während

$$\mathbf{p}' = \hbar k \mathbf{n}'$$

der Impuls der in Richtung \mathbf{n}' auslaufenden Teilchen ist. Demnach ist die Streuamplitude in der Bornschen Näherung für ein radialsymmetrisches Potential $V(\mathbf{s}) = V(|\mathbf{s}|)$ nur noch eine Funktion des Impulsübertrags $\hbar\kappa = |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$ der Teilchen beim Streuvorgang:

$$\begin{aligned} |\mathbf{p} - \mathbf{p}'| &= \hbar k \sqrt{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}' - 2\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'} & (18.36) \\ &= \hbar k \sqrt{2(1 - \cos \vartheta)} \\ &= 2\hbar k \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \\ &= \hbar\kappa. \end{aligned}$$

Es folgt, wenn wir Kugelkoordinaten verwenden, und dabei die Polarachse parallel zum Vektor $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ orientieren:

$$f_B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = f_B(\kappa) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{\kappa} \int_0^\infty ds s V(s) \sin(\kappa s). \quad (18.37)$$

Offensichtlich verschwindet der Imaginärteil:

$$\text{Im } f_B(\kappa) = 0,$$

d.h. die Bornsche Näherung verletzt das Optische Theorem!

18.3 Coulomb-Streuung

Das Coulomb-Potential, z.B. zwischen einem Teilchen mit Ladung $\pm |e|$ und einem Z -fach geladenem Atomkern, entzieht sich unseren bisherigen Methoden, da es von langreichweitiger Natur ist. Wir führen deshalb einen „cutoff“-Parameter $\lambda > 0$ ein, der das Potential bei großem Abstand $|\mathbf{r}| \gg \lambda$ zum Streuzentrum genügend schnell klein macht:

$$V(\mathbf{r}; \lambda) = \frac{\pm Z |e|^2 e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{\lambda}}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|}.$$

Dieses sog. Yukawa-Potential fällt für $|\mathbf{r}| \gg \lambda$ derart rasch ab, dass man hoffen darf, dass unsere bisherigen Berechnungsmethoden zur Behandlung von elastischen Streuproblemen endlicher Reichweite des Potentials wirksam sind. Am Ende der Rechnung betrachten wir dann den Limes $\lambda \rightarrow 0$ und zeigen, dass das Ergebnis auch für das Coulomb-Potential physikalisch sinnvoll ist. Bei Problemen der Festkörperphysik (Abschirmung von Ionen im Metall) bzw. der Kernphysik (Meson-Austausch) ist das Yukawa-Potential schon für sich genommen ein Modell-Potential von erheblicher Bedeutung.

In der Bornschen Näherung resultiert für die Streuamplitude des Yukawa-Potentials eine Funktion des Streuwinkels ϑ und der Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ der einfallenden Teilchen:

$$\begin{aligned} f_B(\kappa) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{\kappa} \int_0^\infty ds s \frac{\pm Z |e|^2 e^{-\frac{|s|}{\lambda}}}{4\pi\epsilon_0 |s|} \sin(\kappa s) \\ &= -\frac{2\mu \pm Z |e|^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa} \int_0^\infty ds e^{-\frac{s}{\lambda}} \sin(\kappa s) \\ &= -\frac{2\mu \pm Z |e|^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa} \operatorname{Im} \int_0^\infty ds e^{(-\frac{1}{\lambda} + i\kappa)s} \\ &= \frac{2\mu \pm Z |e|^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa} \operatorname{Im} \frac{1}{-\frac{1}{\lambda} + i\kappa} \\ &= -\frac{2\mu \pm Z |e|^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\kappa^2 + \frac{1}{\lambda^2}} \\ &= -\frac{\pm Z |e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{4E \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\lambda^2}}. \end{aligned}$$

Im Limes $\lambda \rightarrow \infty$ hängt das Ergebnis für die Streuamplitude $f_B(\kappa)$ nicht mehr vom Planckschen Wirkungsquantum \hbar ab! Es folgt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt des Coulomb-Potentials im Rahmen der Bornschen Näherung

die schon aus der klassischen Mechanik bekannte **Rutherford-Formel**:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(\kappa)|^2 = \left(\frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{16E^2 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}. \quad (18.38)$$

Die *exakte* Behandlung der elastischen Streuung eines geladenen Teilchens im Coulomb-Potential ist mathematisch anspruchsvoll, sodass wir sie hier nicht behandeln wollen (siehe z.B. Band 3 des Lehrbuchs der Theoretischen Physik von L.D. Landau & E.M. Lifschitz, „Quantenmechanik“, Akademie-Verlag Berlin, 1979). Wichtig für uns ist an dieser Stelle, dass die exakte Rechnung als Ergebnis für den differentiellen Wirkungsquerschnitt die klassische Rutherford-Formel liefert! Man könnte sagen, das Ergebnis unserer Rechnung ist besser als die Herleitung, die ja im Rahmen der Bornschen Näherung erfolgte. Allerdings ist die Streuamplitude in der exakten Rechnung, in Übereinstimmung mit dem optischen Theorem, eine komplexe Größe, mit einer vom Planckschen Wirkungsquantum \hbar und vom Logarithmus des Abstands zum Streuzentrum abhängigen Phasenfunktion. Bei der Berechnung des Absolutbetrags der exakten Streuamplitude kommt es auf diesen Phasenfaktor aber nicht an, sofern wir uns nur mit **unterscheidbaren** Teilchen befassen!

Wir werden später noch eine Variante der **Rutherford-Streuung**, die sog. **Mott-Streuung**, besprechen. Diese beschreibt die Streuung **ununterscheidbarer** geladener Teilchen, z.B. zwischen zwei Protonen oder zwei Elektronen, wobei die komplexe Streuamplitude, wie sie aus der exakten Behandlung des Coulomb-Potentials resultiert, die im Experiment beobachteten Oszillationen des differentiellen Wirkungsquerschnitts in allen Einzelheiten quantitativ zu erklären vermag!

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

Wir betrachten eine Anzahl N von **ununterscheidbaren** Teilchen der Masse μ , mit Ladung $Z|e|$ und Spin s , die miteinander wechselwirken. In der nicht relativistischen Physik sind die Geschwindigkeiten der einzelnen Teilchen relativ zum Laborsystem gegenüber der Lichtgeschwindigkeit c kleine Größen, also $|\frac{\mathbf{p}^{(j)}}{\mu}| \ll c$. Dies bedeutet, dass man mit einem Hamilton-Operator \hat{H} arbeiten darf, der im einfachsten Fall (wenn kein äußeres Magnetfeld anliegt) nur von den Positionen $\mathbf{r}^{(j)}$ und den Impulsen $\mathbf{p}^{(j)} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}^{(j)}}$ aller Teilchen des Systems abhängt:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}^{(j)}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^N V(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)}).$$

Der erste Term ist die gesamte kinetische Energie der Teilchen, der zweite Term ist die gesamte potentielle Energie der Wechselwirkung, die wir hier als eine Zwei-Teilchen-Wechselwirkung beschreiben:

$$V(\hat{\mathbf{r}}^{(j)}, \hat{\mathbf{r}}^{(k)}) = V(\hat{\mathbf{r}}^{(k)}, \hat{\mathbf{r}}^{(j)}).$$

Wie man sofort einsieht, ist der Hamilton-Operator des betrachteten wechselwirkenden N -Teilchen Systems invariant bzgl. einer Vertauschung der Koordinaten, $(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)}) \rightarrow (\mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{r}^{(j)})$, und bzgl. einer Vertauschung der Impulse, $(\hat{\mathbf{p}}^{(j)}, \hat{\mathbf{p}}^{(k)}) \rightarrow (\hat{\mathbf{p}}^{(k)}, \hat{\mathbf{p}}^{(j)})$, des j -ten Teilchens mit dem k -ten Teilchen.

Sei nun $\hat{\mathbb{P}}_{j,k}$ ein Operator mit der folgenden Wirkung: das Teilchen mit der Nummer j am Ort $\mathbf{r}^{(j)}$ wird mit dem Teilchen mit der Nummer k am Ort $\mathbf{r}^{(k)}$ vertauscht. Dann gilt nach dem Gesagten für alle Paare $j, k \in \{1, 2, \dots, N\}$:

$$\hat{\mathbb{P}}_{j,k} \circ \hat{H} = \hat{H} \circ \hat{\mathbb{P}}_{j,k}.$$

Da die Teilchen als gleichartig angenommen sind, haben sie natürlich alle die gleiche Masse μ , die gleiche Ladung $Z|e|$, und den gleichen Spin $s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$. Die einzelnen Teilchen des Systems können sich bzgl. des Spin noch bzgl. der Quantenzahl $m^{(j)} \in \{-s, -s+1, \dots, s-1, s\}$ unterscheiden.

Demnach existiert eine Basis von Funktionen

$$\Psi_{E,\pi_{j,k}}(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}; \mathbf{r}^{(2)}, m^{(2)}; \dots; \mathbf{r}^{(N)}, m^{(N)}) \equiv \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, N),$$

die simultane Eigenfunktionen der hermiteschen Operatoren \hat{H} und $\hat{\mathbb{P}}_{j,k}$ sind:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) &= E\Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \\ \hat{\mathbb{P}}_{j,k}\Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) &= \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, k, \dots, j, \dots, N) \\ &= \pi_{j,k}\Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N). \end{aligned}$$

Natürlich ist die ursprüngliche Konfiguration bei zweimaliger Anwendung von $\hat{\mathbb{P}}_{j,k}$ auf den Zustand $\Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N)$ wieder hergestellt! Demnach muss gelten:

$$\begin{aligned} &\hat{\mathbb{P}}_{j,k} \circ \hat{\mathbb{P}}_{j,k} \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \\ &= \hat{\mathbb{P}}_{j,k} \circ [\pi_{j,k} \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N)] \\ &= (\pi_{j,k})^2 \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \\ &\stackrel{!}{=} \Psi_{E,\pi_{j,k}}(1, 2, \dots, j, \dots, k, \dots, N), \end{aligned}$$

d.h. der Vertauschungsoperator $\hat{\mathbb{P}}_{j,k}$ hat nur zwei mögliche Eigenwerte:

$$\pi_{j,k} \in \{-1, +1\}.$$

Bei unserem „Beweis“ haben wir stillschweigend eine **eindimensionale** Darstellung angenommen! Es gibt aber auch mehrdimensionale Darstellungen der Permutationsgruppe. Die entsprechenden „Teilchen“ genügen einer sog. **Para-Statistik**.

Die Eigenfunktionen $\Psi_{E,+}(1, 2, \dots, N)$ zum Eigenwert $\pi_{j,k} = 1$ heißen **symmetrische** Funktionen, die Eigenfunktionen $\Psi_{E,-}(1, 2, \dots, N)$ zum Eigenwert $\pi_{j,k} = -1$ heißen **antisymmetrische** Funktionen. Da \hat{H} und $\hat{\mathbb{P}}_{j,k}$ vertauschen, bleibt bei der zeitlichen Entwicklung eines durch den Hamilton-Operator \hat{H} beschriebenen Systems eine zur Zeit $t = 0$ symmetrische Funktionen symmetrisch, und eine zur Zeit $t = 0$ antisymmetrische Funktionen bleibt antisymmetrisch:

$$\Psi_{\pm}(1, 2, \dots, N; t) = \sum_{E'} c_{E',\pm} \Psi_{E',\pm}(1, 2, \dots, N) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E' t\right).$$

Die möglichen Zustände des Systems werden also nur durch solche Linearkombinationen dargestellt, die die Symmetrie-Eigenschaften bei Teilchenaustausch $(j, k) \rightarrow (k, j)$ nicht verändern. Die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion eines Systems unter Teilchenaustausch $(j, k) \rightarrow (k, j)$ können auch durch das Einwirken äußerer Kräfte nie verändert werden!

Antisymmetrische Wellenfunktionen werden zur Beschreibung von (einfachen oder zusammengesetzten) Teilchen mit einer **halbzahliger** Spin-Quantenzahl $s \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$, symmetrische Wellenfunktionen werden zur Beschreibung von (einfachen oder zusammengesetzten) Teilchen mit einer **ganzzahliger** Spin-Quantenzahl $s \in \{0, 1, 2, \dots\}$ verwendet. Teilchen mit antisymmetrischer Wellenfunktion heißen **Fermionen**, Teilchen mit symmetrischer Wellenfunktion heißen **Bosonen**. In der Natur kommen nur Bosonen oder Fermionen vor, was eine experimentelle Tatsache ist!

Wir betrachten jetzt ein System von zwei gleichartigen Teilchen. Sei $\Psi(1, 2; t)$ eine Lösung der Zweiteilchen-Schrödinger-Gleichung:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \Psi(1, 2; t) = 0.$$

Dann ist $\Psi(2, 1; t) = \hat{\mathbb{P}}_{1,2} \Psi(1, 2; t)$ eine zweite Lösung. Die speziellen Lösungen $\Psi_{\pm}(1, 2; t)$ mit den erforderlichen Symmetrie-Eigenschaften zur Beschreibung von Bosonen oder Fermionen sind dann gegeben zu

$$\Psi_{\pm}(1, 2; t) = \mathcal{N}_{\pm} \cdot (\Psi(1, 2; t) \pm \Psi(2, 1; t)).$$

Das beschriebene Verfahren zur Symmetrisierung bzw. zur Antisymmetrisierung einer Wellenfunktionen von zwei Teilchen kann für ein System bestehend aus $N \geq 2$ gleichartigen Teilchen verallgemeinert werden. Sei $\Psi(1, 2, \dots, N; t)$ eine Lösung der N -Teilchen Schrödinger-Gleichung:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \Psi(1, 2, \dots, N; t) = 0.$$

Dann sind insgesamt $N!$ verschiedene Vertauschungen von $(1, 2, \dots, N)$ nach $(\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(N))$ möglich, wobei $\pi \in S_N$ eine Permutation, also ein Element der symmetrischen Gruppe S_N von N Objekten ist.

Beispiel: für $N = 3$ existieren insgesamt $N! = 3! = 6$ verschiedene Permutationen von drei Objekten 1, 2, 3:

$$\begin{aligned} (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_0} (1, 2, 3) \\ (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_1} (2, 1, 3) \\ (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_2} (3, 2, 1) \\ (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_3} (1, 3, 2) \\ (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_4} (3, 1, 2) \\ (1, 2, 3) &\xrightarrow{\pi_5} (2, 3, 1). \end{aligned}$$

Also ist die symmetrische Gruppe der Permutationen von drei Objekten gegeben zu

$$S_3 = \{\pi_0, \pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4, \pi_5\}.$$

Das Bild der Zahlen 1, 2, 3 unter der Permutation π_1 ist gemäß unserer Zuordnung gegeben zu

$$\begin{aligned}\pi_1(1) &= 2 \\ \pi_1(2) &= 1 \\ \pi_1(3) &= 3.\end{aligned}$$

Für ein System mit einer Anzahl N gleichartiger Teilchen ist die Linearkombination

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N; t) = \mathcal{N}_A \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) \Psi[\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(N); t]$$

die **antisymmetrische** Lösung, die Linearkombination

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N; t) = \mathcal{N}_S \sum_{\pi \in S_N} \Psi[\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(N); t]$$

ist die **symmetrische** Lösung der N -Teilchen Schrödinger-Gleichung. Die Summation läuft über alle $N!$ verschiedenen Permutationen $\pi \in S_N$ der symmetrischen Gruppe S_N von N Objekten. Die Zahl $\text{sign}(\pi)$ ist gleich Eins, wenn die Permutation π durch eine *gerade* Anzahl von Zweivertauschungen erzeugt wird, sie ist gleich minus Eins, wenn die Permutation π durch eine *ungerade* Anzahl von Zweivertauschungen erzeugt wird.

Wie schon in der Quantenmechanik eines einzelnen Teilchens nehmen die stationären Wellenfunktionen

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; E) &= E\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; E) \\ \zeta &\in \{A, S\}\end{aligned}$$

eines Vielteilchensystems bei der Beschreibung der zeitlichen Entwicklung des Systems eine Schlüsselrolle ein:

$$\begin{aligned}\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; t) &= \sum_E C_\zeta(E) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; E) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \\ \zeta &\in \{A, S\}.\end{aligned}$$

Ist der Anfangszustand $\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; t=0)$ bekannt, so sind die Entwicklungskoeffizienten $C_\zeta(E)$ gegeben zu:

$$\begin{aligned}& C_\zeta(E) \\ &= \sum_{\substack{m^{(1)}, m^{(2)}, \dots, m^{(N)} \\ -s \leq m^{(j)} \leq s}} \int_{\text{Vol}} d^3r_1 \int_{\text{Vol}} d^3r_2 \cdots \int_{\text{Vol}} d^3r_N \\ &\quad \times \Psi_\zeta^\dagger(1, 2, \dots, N; E) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; t=0) \\ &= \left\langle \Psi_\zeta(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; E), \Psi_\zeta(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; t=0) \right\rangle.\end{aligned}$$

19.1 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Oft ist es möglich, Systeme aus gleichartigen Teilchen als schwach wechselwirkendes Gas zu beschreiben. In dem Fall liegt es nahe, die Zustände des N -Teilchensystems als Linearkombination von Produkten von symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten **Einteilchen**-Wellenfunktionen darzustellen. Die folgenden aus einem Satz $\{\psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N}\}$ von linear unabhängigen (nicht notwendig ortho-normierten) Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_{k_j}(j) \equiv \psi_{k_j}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)})$ konstruierten antisymmetrisierten bzw. symmetrisierten N -Teilchen-Wellenfunktionen

$$\begin{aligned} & \Psi_A(1, 2, \dots, N; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) \psi_{k_1}[\pi(1)] \cdot \psi_{k_2}[\pi(2)] \cdots \psi_{k_N}[\pi(N)] \end{aligned} \quad (19.1)$$

bzw.

$$\begin{aligned} & \Psi_S(1, 2, \dots, N; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} \psi_{k_1}[\pi(1)] \cdot \psi_{k_2}[\pi(2)] \cdots \psi_{k_N}[\pi(N)], \end{aligned} \quad (19.2)$$

stellen entsprechende linear unabhängige Basiselemente im Hilbert-Raum der antisymmetrischen bzw. symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen dar. Aufgrund der Identität

$$\begin{aligned} & \psi_{k_1}[\pi(1)] \cdot \psi_{k_2}[\pi(2)] \cdots \psi_{k_N}[\pi(N)] \\ &= \psi_{k_{\pi^{-1}(1)}}(1) \cdot \psi_{k_{\pi^{-1}(2)}}(2) \cdots \psi_{k_{\pi^{-1}(N)}}(N), \end{aligned}$$

die lediglich eine Umstellung der Reihenfolge der Faktoren gemäß der zu π inversen Permutation $\pi' = \pi^{-1}$ beinhaltet, folgt jetzt:

$$\begin{aligned} & \Psi_A(1, 2, \dots, N; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N}) \\ & \stackrel{\pi' \equiv \pi^{-1}}{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi' \in S_N} \text{sign}(\pi') \psi_{k_{\pi'(1)}}(1) \cdot \psi_{k_{\pi'(2)}}(2) \cdots \psi_{k_{\pi'(N)}}(N), \end{aligned} \quad (19.3)$$

bzw.

$$\begin{aligned} & \Psi_S(1, 2, \dots, N; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N}) \\ & \stackrel{\pi' \equiv \pi^{-1}}{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi' \in S_N} \psi_{k_{\pi'(1)}}(1) \cdot \psi_{k_{\pi'(2)}}(2) \cdots \psi_{k_{\pi'(N)}}(N). \end{aligned} \quad (19.4)$$

Von besonderer Bedeutung ist das Skalarprodukt zweier derart aus Einteilchen-Wellenfunktionen zusammengesetzten N -Teilchen-Wellenfunktionen. Klar, das Skalarprodukt einer antisymmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktion mit einer symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktion ist identisch Null. Das Skalarprodukt zweier

solcher antisymmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen ergibt dagegen:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \Psi_A \left(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; \phi_{q_1}, \phi_{q_2}, \dots, \phi_{q_N} \right), \Psi_A \left(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N} \right) \right\rangle \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi, \hat{\pi} \in S_N} \text{sign}(\hat{\pi}) \text{sign}(\pi) \left\langle \phi_{q_{\hat{\pi}(1)}}(\bar{1}) \cdots \phi_{q_{\hat{\pi}(N)}}(\bar{N}), \psi_{k_{\pi(1)}}(\bar{1}) \cdots \psi_{k_{\pi(N)}}(\bar{N}) \right\rangle \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi, \hat{\pi} \in S_N} \text{sign}(\hat{\pi} \circ \pi) \\
 & \quad \times \left\langle \phi_{q_{\hat{\pi}(1)}}(\bar{1}), \psi_{k_{\pi(1)}}(\bar{1}) \right\rangle \left\langle \phi_{q_{\hat{\pi}(2)}}(\bar{2}), \psi_{k_{\pi(2)}}(\bar{2}) \right\rangle \cdots \left\langle \phi_{q_{\hat{\pi}(N)}}(\bar{N}), \psi_{k_{\pi(N)}}(\bar{N}) \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Wir summieren für festgehaltenes $\hat{\pi} \in S_N$ über alle Permutationen

$$\pi' = \pi \circ \hat{\pi}^{-1} \in S_N$$

und erhalten mit

$$\text{sign}(\pi \circ \hat{\pi}) = \text{sign}(\pi \circ \hat{\pi}^{-1}) = \text{sign}(\pi')$$

nummehr

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{N!} \underbrace{\sum_{\pi \in S_N} \sum_{\pi' \in S_N}}_{=1} \text{sign}(\pi') \\
 & \quad \times \left\langle \phi_{q_1}(\bar{1}), \psi_{k_{\pi'(1)}}(\bar{1}) \right\rangle \cdot \left\langle \phi_{q_2}(\bar{2}), \psi_{k_{\pi'(2)}}(\bar{2}) \right\rangle \cdots \left\langle \phi_{q_N}(\bar{N}), \psi_{k_{\pi'(N)}}(\bar{N}) \right\rangle \\
 &= \sum_{\pi' \in S_N} \text{sign}(\pi') \\
 & \quad \times \left\langle \phi_{q_1}(\bar{1}), \psi_{k_{\pi'(1)}}(\bar{1}) \right\rangle \cdot \left\langle \phi_{q_2}(\bar{2}), \psi_{k_{\pi'(2)}}(\bar{2}) \right\rangle \cdots \left\langle \phi_{q_N}(\bar{N}), \psi_{k_{\pi'(N)}}(\bar{N}) \right\rangle \\
 &= \det(\mathcal{M}).
 \end{aligned}$$

Demnach ist das Skalarprodukt zweier *antisymmetrischer* N -Teilchen-Basisfunktionen gleich der **Determinante** (sog. Slater-Determinante) der $N \times N$ Matrix \mathcal{M} mit Matrixelementen

$$\begin{aligned}
 [\mathcal{M}]_{a,b} &= \left\langle \phi_{q_a}(\bar{1}), \psi_{k_b}(\bar{1}) \right\rangle \\
 &= \sum_{-s \leq m^{(1)} \leq s} \int_{\text{Vol}} d^3 r^{(1)} \phi_{q_a}^\dagger(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}) \psi_{k_b}(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}),
 \end{aligned}$$

die aus allen individuellen Skalarprodukten der Einteilchen-Wellenfunktionen aufgebaut ist.

Im *symmetrischen* Fall lautet das entsprechende Ergebnis:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \Psi_S \left(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; \phi_{q_1}, \phi_{q_2}, \dots, \phi_{q_N} \right), \Psi_S \left(\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}; \psi_{k_1}, \psi_{k_2}, \dots, \psi_{k_N} \right) \right\rangle \\
 &= \sum_{\pi' \in S_N} \left\langle \phi_{q_1}(\bar{1}), \psi_{k_{\pi'(1)}}(\bar{1}) \right\rangle \cdot \left\langle \phi_{q_2}(\bar{2}), \psi_{k_{\pi'(2)}}(\bar{2}) \right\rangle \cdots \left\langle \phi_{q_N}(\bar{N}), \psi_{k_{\pi'(N)}}(\bar{N}) \right\rangle \\
 &= \text{perm}(\mathcal{M}).
 \end{aligned}$$

An die Stelle der Determinante tritt im symmetrischen Fall die sog. **Permanente!**

Besondere Bedeutung kommt bei konkreten Berechnungen dem Problem zu, eine allgemeine symmetrische bzw. antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktion $\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; E)$ nach einem vollständigen System von symmetrischen bzw. antisymmetrischen Basisfunktionen des N -Teilchen Hilbertraums zu entwickeln.

Dazu betrachten wir ein vollständiges orthonormales System von **Einteilchen-Wellenfunktionen** $\{\psi_\nu(\mathbf{r}, m)\}_{\nu \in \mathcal{I}}$ mit $\mathbf{r} \in \text{Vol}$, $-s \leq m \leq s$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\nu(\bar{1}), \psi_{\nu'}(\bar{1}) \rangle &= \sum_{-s \leq m^{(1)} \leq s} \int_{\text{Vol}} d^3r^{(1)} \psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}) = \delta_{\nu, \nu'} \\ \sum_{\nu \in \mathcal{I}} \psi_\nu(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}) \psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}'^{(1)}, m'^{(1)}) &= \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}'^{(1)}) \delta_{m^{(1)}, m'^{(1)}} \\ \hat{H}^{(1)} \psi_\nu(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}) &= E_\nu^{(1)} \psi_\nu(\mathbf{r}^{(1)}, m^{(1)}). \end{aligned}$$

Der Index $\nu \in \mathcal{I}$ dient der Abzählung der verschiedenen Zustände. Beim Wasserstoffatom ist z.B. $\psi_\nu(\mathbf{r}) = \psi_{n,l,m}(r_x, r_y, r_z)$, d.h. ν ist ein Multi-Index. Wir können aber stets einen Multi-Index ν als einen eindimensionalen Index α umschreiben, so dass der Index α nacheinander beginnend mit Eins die natürlichen Zahlen $1, 2, 3, \dots$ durchläuft. Wir können die Zustände $\psi_{\alpha_1}, \psi_{\alpha_2}, \dots, \psi_{\alpha_N}$ dann derart anordnen, dass gilt $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_N$.

Ein geeignetes vollständiges (und *orthonormales*) Basissystem für symmetrische N -Teilchen-Wellenfunktionen, also Bosonen, ist dann gegeben zu

$$\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_N \quad (19.5)$$

$$\begin{aligned} &\Psi_B(1, 2, \dots, n_{\alpha_1} + \dots + n_{\alpha_N}; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_N}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_{\alpha_1}! n_{\alpha_2}! \dots n_{\alpha_N}!}} \\ &\times \Psi_S \left(\underbrace{\psi_{\alpha_1}, \psi_{\alpha_1}, \dots, \psi_{\alpha_1}}_{n_{\alpha_1}\text{-mal}}, \underbrace{\psi_{\alpha_2}, \psi_{\alpha_2}, \dots, \psi_{\alpha_2}}_{n_{\alpha_2}\text{-mal}}, \dots, \underbrace{\psi_{\alpha_N}, \psi_{\alpha_N}, \dots, \psi_{\alpha_N}}_{n_{\alpha_N}\text{-mal}} \right). \end{aligned}$$

Hier zählt die Zahl $n_{\alpha_j} = 0, 1, 2, 3, \dots$ ab, wie oft der Einteilchenzustand ψ_{α_j} in der Folge $\psi_{\alpha_1}, \psi_{\alpha_2}, \dots, \psi_{\alpha_N}$ von Einteilchenzuständen vorkommt. Man nennt n_{α_j} auch **Besetzungszahl** des Zustands ψ_{α_j} .

Das entsprechende vollständige (orthonormale) Basissystem für antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktionen ist gegeben zu

$$\begin{aligned} &\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N \quad (19.6) \\ &\Psi_F(1, 2, \dots, n_{\alpha_1} + \dots + n_{\alpha_N}; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_N}) \\ &= \Psi_A(1, 2, \dots, n_{\alpha_1} + \dots + n_{\alpha_N}; \psi_{\alpha_1}, \psi_{\alpha_2}, \dots, \psi_{\alpha_N}) \\ &n_{\alpha_j} \in \{0, 1\}. \end{aligned}$$

Für antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktionen, also Fermionen, ist die Besetzungszahl n_{α_j} eines Zustands ψ_{α_j} entweder gleich Eins oder gleich Null, $n_{\alpha_j} \in \{0, 1\}$, anderenfalls verschwindet der Basiszustand identisch.

Die Vollständigkeitsrelation im Hilbert-Raum der symmetrischen bzw. antisymmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen lautet (es ist vorteilhaft, auf die Restriktion $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N$ für Fermionen bzw. $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_N$ für Bosonen zu verzichten):

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{S, A\} \\ &\frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \Psi_{\zeta}^{\dagger}(1', \dots, N'; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &= \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}'^{(1)}) \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}'^{(2)}) \dots \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(N)} - \mathbf{r}'^{(N)}) \\ &\quad \times \delta_{m^{(1)}, m'(1)} \delta_{m^{(2)}, m'(2)} \dots \delta_{m^{(N)}, m'(N)}. \end{aligned}$$

Hier überstreichen die Variablen $\mathbf{r}^{(j)}$ und $\mathbf{r}'^{(j)}$ sowie $m^{(j)}$ und $m'^{(j)}$ den Wertevorrat für die Koordinaten des j -ten Teilchens.

Es gilt für symmetrische wie antisymmetrische N -Teilchen-Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{S, A\} \\ &\Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}) \\ &= \sum_{\substack{m^{(1)}, m^{(2)}, \dots, m^{(N)} \\ -s \leq m^{(j)} \leq s}} \int_{\text{Vol}} d^3 r'_1 \dots \int_{\text{Vol}} d^3 r'_N \\ &\quad \times \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}'^{(1)}) \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}'^{(2)}) \dots \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(N)} - \mathbf{r}'^{(N)}) \\ &\quad \times \delta_{m^{(1)}, m'(1)} \delta_{m^{(2)}, m'(2)} \dots \delta_{m^{(N)}, m'(N)} \\ &\quad \times \Psi_{\zeta}(1', \dots, N'; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}) \\ &= \sum_{\substack{m^{(1)}, m^{(2)}, \dots, m^{(N)} \\ -s \leq m^{(j)} \leq s}} \int_{\text{Vol}} d^3 r'_1 \dots \int_{\text{Vol}} d^3 r'_N \\ &\quad \times \frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \Psi_{\zeta}^{\dagger}(1', \dots, N'; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &\quad \times \Psi_{\zeta}(1', 2', \dots, N'; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &\quad \times \sum_{\substack{m^{(1)}, m^{(2)}, \dots, m^{(N)} \\ -s \leq m^{(j)} \leq s}} \int_{\text{Vol}} d^3 r'_1 \dots \int_{\text{Vol}} d^3 r'_N \\ &\quad \times \Psi_{\zeta}^{\dagger}(1', \dots, N'; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \Psi_{\zeta}(1', 2', \dots, N'; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\
 &\quad \times \langle \Psi_\zeta(1', \dots, N'; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}), \Psi_\zeta(1', 2', \dots, N'; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}) \rangle \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\
 &\quad \times \sum_{\pi \in S_N} \delta_\zeta(\pi) \underbrace{\langle \psi_{\nu_1}(\bar{1}), \psi_{\lambda_{\pi(1)}}(\bar{1}) \rangle}_{=\delta_{\nu_1, \lambda_{\pi(1)}}} \cdot \underbrace{\langle \psi_{\nu_2}(\bar{2}), \psi_{\lambda_{\pi(2)}}(\bar{2}) \rangle}_{=\delta_{\nu_2, \lambda_{\pi(2)}}} \cdots \underbrace{\langle \psi_{\nu_N}(\bar{N}), \psi_{\lambda_{\pi(N)}}(\bar{N}) \rangle}_{=\delta_{\nu_N, \lambda_{\pi(N)}}} \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \delta_\zeta(\pi) \Psi_\zeta\left(1, 2, \dots, N; \psi_{\lambda_{\pi(1)}}, \psi_{\lambda_{\pi(2)}}, \dots, \psi_{\lambda_{\pi(N)}}\right) \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \delta_\zeta(\pi) \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi' \in S_N} \delta_\zeta(\pi') \psi_{\lambda_{\pi' \circ \pi(1)}}(1) \cdot \psi_{\lambda_{\pi' \circ \pi(2)}}(2) \cdots \psi_{\lambda_{\pi' \circ \pi(N)}}(N),
 \end{aligned}$$

verwende $\pi'' = \pi' \circ \pi$ für π fest gewählt,

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N!}}}_{=1} \sum_{\pi'' \in S_N} \delta_\zeta(\pi'') \psi_{\lambda_{\pi''(1)}}(1) \cdot \psi_{\lambda_{\pi''(2)}}(2) \cdots \psi_{\lambda_{\pi''(N)}}(N) \\
 &= \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_N}).
 \end{aligned}$$

Hier ist für $\pi \in S_N$ definiert:

$$\begin{aligned}
 \zeta &\in \{S, A\} \\
 \delta_A(\pi) &= \text{sign}(\pi) \\
 \delta_S(\pi) &= 1.
 \end{aligned}$$

Oft ist es zweckmäßig, die Zahl der Teilchen eines Systems nicht beginnend mit $N = 1, 2, 3, \dots$ abzuzählen, sondern beginnend mit **Null** zu zählen. Der Spezialfall $N = 0$ ist der Zustand ganz ohne Teilchen. Die zugeordnete Wellenfunktion $\Psi_\zeta(N = 0) = \Psi_{\text{Vac}}$ nennt man **Vakuum-Wellenfunktion**, ein (von Null verschiedener!) Skalar, dem wir den Wert Eins zuordnen wollen.

Für jede Zahl $N = 0, 1, 2, \dots$ existiert somit ein Hilbert-Raum $\mathcal{H}^{(N)}$ zur Beschreibung eines Systems von N gleichartigen Teilchen. Bei vielen physikalischen Prozessen ist die Teilchenzahl nicht erhalten, d.h. Teilchen werden „erzeugt“ oder „vernichtet“. Um solche Vorgänge (z.B. bei chemischen Reaktionen, bei inelastischen Streuprozessen, usw.) zu beschreiben, wird ein viel größerer Hilbert-Raum, der sog. **Fock-Raum** $\mathcal{H}_{\text{Fock}}$, benötigt, der aus allen Hilbert-Räumen $\mathcal{H}^{(N)}$ für Teilchenzahlen $N = 0, 1, 2, \dots$ als **orthogonale Summe** zusammengesetzt ist:

$$\mathcal{H}_{\text{Fock}} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(N)}.$$

Zustände mit verschiedener Teilchenzahl werden im Fock-Raum als orthogonal angesehen.

Zwei Zustände $\Psi_\zeta, \Phi_\zeta \in \mathcal{H}_{\text{Fock}}$ besitzen demnach eine Darstellung der Form

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{A, S\} \\ \Psi_\zeta &= \Psi_\zeta^{(0)} + \Psi_\zeta^{(1)} + \Psi_\zeta^{(2)} + \dots + \Psi_\zeta^{(N-1)} + \Psi_\zeta^{(N)} + \Psi_\zeta^{(N+1)} + \dots \\ \Phi_\zeta &= \Phi_\zeta^{(0)} + \Phi_\zeta^{(1)} + \Phi_\zeta^{(2)} + \dots + \Phi_\zeta^{(N-1)} + \Phi_\zeta^{(N)} + \Phi_\zeta^{(N+1)} + \dots \\ \Phi_\zeta^{(n)}, \Psi_\zeta^{(n)} &\in \mathcal{H}^{(n)} \text{ für } n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1, N, N+1, \dots \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt im Fock-Raum $\mathcal{H}_{\text{Fock}}$ ist dabei definiert als Summe der Skalarprodukte der Komponenten in den jeweiligen N -Teilchen Hilbert-Räumen $\mathcal{H}^{(N)}$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_\zeta^{(N)}, \Psi_{\zeta'}^{(N')} \rangle &= 0 \text{ für } N \neq N' \text{ oder } \zeta \neq \zeta' \\ \langle \Phi_\zeta, \Psi_\zeta \rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \langle \Phi_\zeta^{(N)}, \Psi_\zeta^{(N)} \rangle. \end{aligned}$$

Die Vollständigkeitsrelation im Fock-Raum lautet:

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{S, A\} \\ &\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N \in \mathcal{I}} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \Psi_\zeta^\dagger(1', \dots, N'; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}'^{(1)}) \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}'^{(2)}) \dots \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(N)} - \mathbf{r}'^{(N)}) \\ &\quad \times \delta_{m^{(1)}, m'^{(1)}} \delta_{m^{(2)}, m'^{(2)}} \dots \delta_{m^{(N)}, m'^{(N)}} \\ &= \hat{1}_{\text{Fock}}. \end{aligned}$$

Wir definieren nun einen sog. **Erzeugungs-Operator**. Sei $\phi \in \mathcal{H}^{(1)}$ ein Einteilchenzustand und $\Psi_\zeta(1, \dots, N; \psi_{\alpha_1}, \dots, \psi_{\alpha_N}) \in \mathcal{H}^{(N)}$ ein N -Teilchenzustand. Der Erzeugungs-Operator $\hat{a}^\dagger(\phi)$ für den Zustand $\phi \in \mathcal{H}^{(1)}$ ist eine lineare Abbildung $\mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N+1)}$:

$$\hat{a}^\dagger(\phi) \Psi_\zeta(1, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) = \Psi_\zeta(1, \dots, N, N+1; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi). \quad (19.7)$$

Man sagt, es wird ein Teilchen im Zustand $\phi(N+1)$ **erzeugt**. Insbesondere gilt für den Vakuumzustand $N=0$:

$$\hat{a}^\dagger(\phi) \Psi_{\text{Vac}} = \Psi_\zeta(1; \phi) \equiv \phi(1).$$

Den zu $\hat{a}^\dagger(\phi)$ adjungierten Operator

$$[\hat{a}^\dagger(\phi)]^\dagger \equiv \hat{a}(\phi) \quad (19.8)$$

nennt man **Vernichtungs-Operator**. Dies soll durch die folgende Betrachtung klar werden. Wir wählen einen beliebigen $(N-1)$ -Teilchenzustand $\Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}})$ und berechnen das Skalarprodukt mit dem Zustand, auf den der Vernichtungs-Operator angewendet wurde, $\hat{a}(\phi) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N})$:

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{S, A\} \\ &\langle \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}), \hat{a}(\phi) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \rangle \\ &= \langle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}), \hat{a}^\dagger(\phi) \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}) \rangle^* \\ &= \langle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}), \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\lambda_1}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}, \phi) \rangle^* \\ &= \left(\left\| \begin{array}{ccccc} \langle \psi_{\nu_1}, \psi_{\lambda_1} \rangle & \langle \psi_{\nu_1}, \psi_{\lambda_2} \rangle & \cdots & \langle \psi_{\nu_1}, \psi_{\lambda_{N-1}} \rangle & \langle \psi_{\nu_1}, \phi \rangle \\ \langle \psi_{\nu_2}, \psi_{\lambda_1} \rangle & \langle \psi_{\nu_2}, \psi_{\lambda_2} \rangle & \cdots & \langle \psi_{\nu_2}, \psi_{\lambda_{N-1}} \rangle & \langle \psi_{\nu_2}, \phi \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \psi_{\nu_N}, \psi_{\lambda_1} \rangle & \langle \psi_{\nu_N}, \psi_{\lambda_2} \rangle & \cdots & \langle \psi_{\nu_N}, \psi_{\lambda_{N-1}} \rangle & \langle \psi_{\nu_N}, \phi \rangle \end{array} \right\|_\zeta \right)^*, \end{aligned}$$

wobei wir unter $\|\mathcal{M}\|_\zeta$ im symmetrischen Fall $\zeta = S$ die Permanente, im antisymmetrischen Fall $\zeta = A$ die Determinante der Matrix \mathcal{M} verstehen wollen:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{M}\|_\zeta &= \begin{cases} \det \mathcal{M} & \text{falls } \zeta = A, \\ \text{perm } \mathcal{M} & \text{falls } \zeta = S, \end{cases} \\ \delta_\zeta &= \begin{cases} -1 & \text{falls } \zeta = A, \\ +1 & \text{falls } \zeta = S. \end{cases} \end{aligned}$$

Die Entwicklung nach den Minoren der **letzten** Spalte ergibt (das Symbol $\Omega(\cdot)$ bedeutet, dass dieser Faktor bei der Summation auszulassen ist):

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \psi_{\nu_j}, \phi \rangle^* \\ &\quad \times \left\| \begin{array}{ccc} \langle \psi_{\nu_1}(\bar{1}), \psi_{\lambda_1}(\bar{1}) \rangle & \cdots & \langle \psi_{\nu_1}(\overline{N-1}), \psi_{\lambda_{N-1}}(\overline{N-1}) \rangle \\ \vdots & \Omega(\psi_{\nu_j}) & \vdots \\ \langle \psi_{\nu_N}(\bar{1}), \psi_{\lambda_1}(\bar{1}) \rangle & \cdots & \langle \psi_{\nu_N}(\overline{N-1}), \psi_{\lambda_{N-1}}(\overline{N-1}) \rangle \end{array} \right\|_\zeta^* \\ &= \langle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N-1; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \Omega(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}), \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}) \rangle \\ &= \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi, \psi_{\nu_j} \rangle \langle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N-1; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \Omega(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}), \\ &\quad \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}) \rangle^* \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi, \psi_{\nu_j} \rangle \langle \Psi_\zeta (1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}}), \\
 &\quad \Psi_\zeta (1, 2, \dots, N-1; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}) \rangle.
 \end{aligned}$$

Da der $(N-1)$ -Teilchenzustand $\Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}, \dots, \psi_{\lambda_{N-1}})$ beliebig gewählt werden darf, folgt somit:

$$\begin{aligned}
 \zeta &\in \{S, A\} \\
 \hat{a}(\phi) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) & \quad (19.9) \\
 &= \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi, \psi_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N-1; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}).
 \end{aligned}$$

Die Anwendung des Vernichtungs-Operators $\hat{a}(\phi)$ auf eine N -Teilchen-Wellenfunktion $\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N})$ liefert demnach eine Linearkombination von $(N-1)$ -Teilchen-Wellenfunktionen, bei denen jeweils der Einteilchenzustand ψ_{ν_j} nicht vorkommt. Der Vernichtungs-Operator $\hat{a}(\phi)$ ist offensichtlich eine lineare Abbildung $\mathcal{H}^{(N)} \rightarrow \mathcal{H}^{(N-1)}$. Man sagt, es wird ein Teilchen **vernichtet**.

Wir untersuchen jetzt den interessanten Fall, dass wir in einem N -Teilchen-System, bestehend aus Bosonen bzw. Fermionen, zuerst ein Teilchen im Zustand ϕ_I erzeugen, und danach ein Teilchen im Zustand ϕ_{II} vernichten:

$$\begin{aligned}
 &\hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) & (19.10) \\
 &= \hat{a}(\phi_{II}) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N, N+1; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I) \\
 &= \begin{cases} \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N+1-j} \langle \phi_{II}, \psi_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I) \\ \quad + \underbrace{(\delta_\zeta)^{N+1-(N+1)}}_{=1} \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \underbrace{\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\phi_I), \dots, \psi_{\nu_N})}_{\equiv \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N})} \end{cases} \\
 &= \begin{cases} \delta_\zeta \cdot \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi_{II}, \psi_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I) \\ \quad + \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}), \end{cases}
 \end{aligned}$$

wie zuvor bedeutet $\mathbf{\Omega}(\cdot)$, dass dieser Faktor auszulassen ist. Umgekehrt können wir auch zuerst das Teilchen im Zustand ϕ_{II} vernichten, und danach das Teilchen im Zustand ϕ_I erzeugen:

$$\begin{aligned}
 &\hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) & (19.11) \\
 &= \hat{a}^\dagger(\phi_I) \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi_{II}, \psi_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N-1; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}) \\
 &= \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \phi_{II}, \psi_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \psi_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\psi_{\nu_j}), \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I).
 \end{aligned}$$

Wir sehen, dass es auf die Reihenfolge ankommt:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) - \delta_\zeta \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) \right] \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &= \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}). \end{aligned}$$

Da jeder Zustand im Fock-Raum als Linearkombination von Basiselementen $\Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N})$ darstellbar ist, gilt nunmehr ganz allgemein im Fock-Raum $\mathcal{H}_{\text{Fock}}$ die Operator-Identität:

$$\hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) - \delta_\zeta \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) = \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \cdot \hat{1}_{\text{Fock}}. \quad (19.12)$$

Und wenn nacheinander zwei Teilchen erzeugt werden?

$$\begin{aligned} & \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}) \\ &= \hat{a}^\dagger(\phi_I) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N, N+1; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_{II}) \\ &= \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N, N+1, N+2; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_{II}, \phi_I) \\ &= \delta_\zeta \cdot \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N, N+1, N+2; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I, \phi_{II}) \\ &= \delta_\zeta \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N, N+1; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}, \phi_I) \\ &= \delta_\zeta \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) \Psi_\zeta(1, 2, \dots, N; \psi_{\nu_1}, \dots, \psi_{\nu_N}). \end{aligned}$$

Wir sehen es gilt ganz allgemein:

$$\hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) - \delta_\zeta \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) = \hat{0}. \quad (19.13)$$

Durch Adjungieren folgt dann ebenfalls:

$$\hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}(\phi_I) - \delta_\zeta \hat{a}(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) = \hat{0}. \quad (19.14)$$

Die Gleichungen (19.12), (19.13) und (19.14) sind die sog. **kanonischen Vertauschungsregeln** für Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Bosonen ($\delta_\zeta = 1$) und Fermionen ($\delta_\zeta = -1$) im Formalismus der „Zweiten Quantisierung“. Für die Addition (verschiedener) Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren gelten Kommutativ- und Assoziativgesetz, für die Multiplikation von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren gilt ebenfalls das Assoziativgesetz sowie das Distributivgesetz. Allerdings ist, wie in Gl. (19.12) gezeigt wurde, die Operator-Multiplikation nicht kommutativ. Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren befolgen die Regeln einer **nicht kommutativen Algebra**.

Nach dem Gesagten gelten für Systeme gleichartiger Teilchen bestehend aus

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

Bosonen bzw. Fermionen die folgenden fundamentalen Kommutator-Regeln:

$$\begin{aligned}
 & \text{Bosonen} & (19.15) \\
 \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) - \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) &= [\hat{a}^\dagger(\phi_{II}), \hat{a}^\dagger(\phi_I)]_- = \hat{0} \\
 \hat{a}(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) - \hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}(\phi_I) &= [\hat{a}(\phi_I), \hat{a}(\phi_{II})]_- = \hat{0} \\
 \hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) - \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) &= [\hat{a}(\phi_{II}), \hat{a}^\dagger(\phi_I)]_- = \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \cdot \hat{1}_{\text{Fock}},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \text{Fermionen} & (19.16) \\
 \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) + \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) &= [\hat{a}^\dagger(\phi_{II}), \hat{a}^\dagger(\phi_I)]_+ = \hat{0} \\
 \hat{a}(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) + \hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}(\phi_I) &= [\hat{a}(\phi_I), \hat{a}(\phi_{II})]_+ = \hat{0} \\
 \hat{a}(\phi_{II}) \hat{a}^\dagger(\phi_I) + \hat{a}^\dagger(\phi_I) \hat{a}(\phi_{II}) &= [\hat{a}(\phi_{II}), \hat{a}^\dagger(\phi_I)]_+ = \langle \phi_{II}, \phi_I \rangle \cdot \hat{1}_{\text{Fock}}.
 \end{aligned}$$

Oft schreibt man, wenn es sich um die Elemente ϕ_α, ϕ_β eines vollständigen Systems von (abzählbaren) orthonormalen Einteilchen-Wellenfunktionen $\{\phi_\nu(1)\}_{\nu \in \mathcal{I}_\phi}$ (auch Orbital genannt) handelt:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger(\phi_\alpha) &= \hat{a}_\alpha^\dagger \\
 \hat{a}(\phi_\alpha) &= \hat{a}_\alpha.
 \end{aligned}$$

Dann erhält man unter Berücksichtigung von

$$\sum_{-S \leq m^{(1)} \leq S} \int d^3 r^{(1)} \phi_\alpha^+(r^{(1)}, m^{(1)}) \phi_\beta(r^{(1)}, m^{(1)}) = \langle \phi_\alpha, \phi_\beta \rangle = \delta_{\alpha, \beta}$$

die Vertauschungsregeln für Bosonen bzw. Fermionen in der üblichen Form:

$$\begin{aligned}
 & \text{Bosonen} \\
 \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger - \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger &= [\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\beta^\dagger]_- = \hat{0} \\
 \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha - \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta &= [\hat{a}_\beta, \hat{a}_\alpha]_- = \hat{0} \\
 \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta^\dagger - \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha &= [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger]_- = \delta_{\alpha, \beta} \cdot \hat{1}_{\text{Fock}},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \text{Fermionen} \\
 \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger + \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger &= [\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\beta^\dagger]_+ = \hat{0} \\
 \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha + \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta &= [\hat{a}_\beta, \hat{a}_\alpha]_+ = \hat{0} \\
 \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta^\dagger + \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha &= [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger]_+ = \delta_{\alpha, \beta} \cdot \hat{1}_{\text{Fock}}.
 \end{aligned}$$

Der Erzeugungs-Operator \hat{a}_α^\dagger fügt in das „Orbital“ $\psi_\alpha(1)$ ein Fermion ein, falls das „Orbital“ $\psi_\alpha(1)$ vorher *unbesetzt* war, der Vernichtungs-Operator \hat{a}_α entfernt aus dem „Orbital“ $\psi_\alpha(1)$ ein Fermion, falls das „Orbital“ $\psi_\alpha(1)$ vorher *besetzt* war! Anderenfalls liefern beide Operatoren den Wert Null:

$$\text{Fermionen} \\ (\hat{a}_\alpha)^2 = \hat{0} = (\hat{a}_\alpha^\dagger)^2 .$$

Insbesondere findet man gemäß unserer Überlegungen für die Zustände $\Psi_{B,F}$ in der Besetzungszahldarstellung Gl. (19.5), (19.6):

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots) & \quad (19.17) \\ = \sqrt{n_{\alpha_j} + 1} \cdot \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N + 1; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j} + 1, \dots) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha_j} \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots) & \quad (19.18) \\ = \sqrt{n_{\alpha_j}} \cdot \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N - 1; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j} - 1, \dots) \end{aligned}$$

$$n_{\alpha_j} \in \begin{cases} \{0, 1, 2, 3, \dots\} & \text{für Bosonen,} \\ \{0, 1\} & \text{für Fermionen.} \end{cases}$$

Die in (19.17) angegebene Regel für die Wirkung des **Erzeugungs-Operators** $\hat{a}_{\alpha_j}^\dagger$ auf einen Besetzungszahl-Basiszustand $\Psi_{B,F}(1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots)$ folgt unmittelbar aus der Definitionsgleichung (19.7). Die in (19.18) angegebene Regel für die Wirkung des **Vernichtungs-Operators** \hat{a}_{α_j} auf einen Besetzungszahl-Basiszustand $\Psi_{B,F}(1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots)$ folgt dagegen unmittelbar aus Gl. (19.9), wobei in der in Gl. (19.9) auftretenden Summe über alle Minoren eine Mehrfachbesetzung des Zustands ψ_{α_j} zu einem Faktor n_{α_j} führt, der mit einem zweiten Faktor $1/\sqrt{n_{\alpha_j}}$, der vom Normierungsfaktor des Besetzungszahl-Basiszustands $\Psi_{B,F}(1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots)$ herrührt, insgesamt zu einem Faktor $\sqrt{n_{\alpha_j}}$ führt.

Für Bosonen ist die Analogie zu einem System entkoppelter harmonischer Oszillatoren manifest. In dem Fall ist das Wirken der Operatoren $\hat{a}_{\alpha_j}^\dagger$ und \hat{a}_{α_j} auf die Zustände $\Psi_B(1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j})$ analog zum Wirken der Aufsteige- und Absteige-Operatoren beim eindimensionalen harmonischen Oszillator (siehe Kapitel 10). Die Besetzungszahldarstellung für Boson-Vielteilchenzustände Ψ_B ist demnach äquivalent der Beschreibung der Schwingungen des harmonischen Oszillators in der Sprache der Anregungsquanten, der sog. **Phononen**. Die analoge Besetzungsdarstellung für die harmonischen Schwingungsmoden des elektromagnetischen Feldes in einem Hohlraum führt entsprechend auf den Begriff des **Photons**.

Die Anzahl der Einteilchenzustände mit Quantenzahl α_j im System ist dann gegeben zu n_{α_j} , d.h. der betreffende Teilchenzahl-Operator für die Besetzung des

Orbitals $\psi_{\alpha_j}(1)$ ist

$$\hat{N}_{\alpha_j} = \hat{a}_{\alpha_j}^\dagger \hat{a}_{\alpha_j},$$

also

$$\begin{aligned} \hat{N}_{\alpha_j} \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots) \\ = n_{\alpha_j} \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_j}, \dots). \end{aligned}$$

Insbesondere gilt für den Vakuum-Zustand Ψ_{Vac} :

$$\hat{a}_{\alpha_j} \Psi_{\text{Vac}} = 0.$$

Ausgehend vom Vakuum-Zustand Ψ_{Vac} können wir jetzt beliebige Vielteilchen-zustände für ein System von N gleichartigen Teilchen durch Superposition der Basiselemente

$$\begin{aligned} \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_N \quad (19.19) \\ \Psi_{B,F} (1, 2, \dots, N; n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_N}) = \frac{(\hat{a}_{\alpha_N}^\dagger)^{n_{\alpha_N}}}{\sqrt{n_{\alpha_N}!}} \dots \frac{(\hat{a}_{\alpha_2}^\dagger)^{n_{\alpha_2}}}{\sqrt{n_{\alpha_2}!}} \frac{(\hat{a}_{\alpha_1}^\dagger)^{n_{\alpha_1}}}{\sqrt{n_{\alpha_1}!}} \Psi_{\text{Vac}} \\ n_{\alpha_N} + \dots + n_{\alpha_2} + n_{\alpha_1} = N \end{aligned}$$

darstellen.

19.2 Ideales Fermi-Gas bei Temperatur $T = 0$

Wir betrachten die Einteilchen-Wellenfunktion $\phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m)$ eines Fermions, das sich im Inneren eines Kastens mit Volumen $V = L_x L_y L_z$ bewegen möge, z.B. ein Elektron (oder ein ${}^3\text{He}$ -Atom) mit Spin $s = \frac{1}{2}$, d.h. es gibt in dem Fall für den Spin nur zwei Einstellmöglichkeiten: $M, m \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$. Dann ist bei Abwesenheit von Spin-Bahn Wechselwirkung die Wellenfunktion $\phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m)$ ein Produkt aus einer Bahn-Wellenfunktion $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ und einer Spin-Eigenfunktion $\chi_{s,M}$:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m) &= \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_{s,M}(m) \\ \sum_{-s \leq m' \leq s} [\hat{S}^2]_{m,m'} \chi_{s,M}(m') &= \hbar^2 s(s+1) \chi_{s,M}(m) \\ \sum_{-s \leq m' \leq s} [\hat{S}_z]_{m,m'} \chi_{s,M}(m') &= \hbar M \chi_{s,M}(m'). \end{aligned}$$

Es ist demnach $\chi_{s,M}(m)$ die m -te Komponente des Spin-Eigenzustands $\chi_{s,M}$. Ein gegebener Spin-Eigenzustand $\chi_{s,M}$ hat $2s+1$ Komponenten $\chi_{s,M}(m)$ für $m \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$, und es gibt $2s+1$ zueinander orthogonale Spin-Eigenzustände $\chi_{s,M}$ für $M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$.

Wir wollen (der Einfachheit halber) periodische Randbedingungen postulieren:

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + L_a \mathbf{e}_a) &= \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ a &\in \{x, y, z\} \\ V &= L_x L_y L_z.\end{aligned}$$

Also folgt

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} &= k_x r_x + k_y r_y + k_z r_z \\ k_x &= \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \\ n_x, n_y, n_z &\in \mathbb{Z}.\end{aligned}$$

Der Erzeugungs-Operator $\hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\phi_{\mathbf{k},M})$ fügt dem System ein Teilchen mit Wellenzahl \mathbf{k} und Spin-Quantenzahl $M \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ hinzu, der Vernichtungs-Operator $\hat{a}_{\mathbf{k},M} = \hat{a}(\phi_{\mathbf{k},M})$ entfernt ein solches Teilchen aus dem System.

Der gefüllte Fermi-See bei Temperatur $T = 0$ ist der Grundzustand Ψ_F freier Fermionen (ohne Magnetfeld). In der Notation der Zweiten Quantisierung schreiben wir

$$\Psi_F = \prod_{\substack{\mathbf{k}, M \\ |\mathbf{k}| \leq k_F \\ M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \Psi_{\text{Vac}}.$$

Hier ist k_F der größtmögliche Betrag des Wellenzahlvektors \mathbf{k} , bis zu dem alle Einteilchenzustände $\phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m)$ besetzt sind. Dann gilt für die Besetzungszahl

$$n_{\mathbf{k},M} = \langle \Psi_F, \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},M} \Psi_F \rangle = \langle \hat{N}_{\mathbf{k},M} \rangle_{\Psi_F}$$

der Zustände $\phi_{\mathbf{k},M}$, da sich aufgrund des Pauli-Prinzips keine zwei Fermionen im selben Quantenzustand befinden können:

$$n_{\mathbf{k},M} = \begin{cases} 1 & \text{falls } |\mathbf{k}| \leq k_F, \\ 0 & \text{falls } |\mathbf{k}| > k_F. \end{cases}$$

Das ist leicht zu zeigen:

$$\begin{aligned}\hat{N}_{\mathbf{k},M} &= \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},M} \\ \hat{N}_{\mathbf{k},M} \Psi_F &= n_{\mathbf{k},M} \Psi_F \\ \langle \Psi_F, \Psi_F \rangle &= 1.\end{aligned}$$

Die Gesamt-Teilchenzahl im System ist

$$N = \sum_{\mathbf{k}, M} \langle \hat{N}_{\mathbf{k}, M} \rangle_{\Psi_F} = \sum_{\mathbf{k}, M} n_{\mathbf{k}, M}.$$

Für ein (eindimensionales) Integral gilt (unter gewissen Annahmen für den Integranden), dass das Integral durch eine Summe approximierbar ist. Man kennt das z.B. von der Trapez-Regel. Umgekehrt geht es auch: eine Summe kann durch ein Integral (und weitere Restglieder) approximiert werden. Die Fehlerabschätzung hierzu liefert die **Eulersche Summenformel**. In unserem Fall verschwinden die betreffenden Restglieder in der Eulerschen Summenformel für eine große Kastenlänge $L_a \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \sum_{k_a} f(k_a) &= \sum_{n_a \in \mathbb{Z}} f\left(\frac{2\pi}{L_a} n_a\right) \\ &\simeq \int_{-\infty}^{\infty} dn f\left(\frac{2\pi}{L_a} n\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L_a}\right) \\ &= \frac{L_a}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k). \end{aligned}$$

Demnach folgt in $D = 3$ räumlichen Dimensionen:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, M} n_{\mathbf{k}, M} &= \sum_{M=-s}^s \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} 1 \\ &\rightarrow \underbrace{(2s+1)}_{\text{Entartung des Spin}} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k \\ &\stackrel{\text{Kugelkoordinaten}}{=} (2s+1) \cdot V \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^2 \\ &= (2s+1) \cdot \frac{V}{2\pi^2} \frac{k_F^3}{3}. \end{aligned}$$

Demnach ist der Fermi-Wellenzahlvektor k_F für ein ideales Fermi-Gas mit Spin-Entartung $2s+1$ im Limes großer Teilchenzahl $N \gg 1$ allein durch die Teilchendichte

$$\nu = \frac{N}{V}$$

bestimmt:

$$k_F = \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 \nu \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Hat **ein** Teilchen im Kasten den Energie-Eigenwert

$$E_{\mathbf{k}, M} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2\mu},$$

so ist die Gesamtenergie E des Systems gleich der Summe aller **besetzten** Ein-
teilchen-Zustände (ohne Magnetfeld liegt für $E_{\mathbf{k},M}$ bzgl. der Spin-Quantenzahlen
 $M \in \{-S, -S + 1, \dots, S\}$ eine $(2S + 1)$ -fache Entartung vor!):

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_{\mathbf{k},M} E_{\mathbf{k},M} n_{\mathbf{k},M} \stackrel{\text{Eulersche Summenformel}}{=} \underbrace{(2s + 1)}_{\text{Entartung des Spin}} \cdot V \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2\mu} \\
 &\stackrel{\text{Kugelkoord.}}{=} (2s + 1) \cdot V \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^{k_F} dk k^4 \tag{19.20} \\
 &= (2s + 1) \cdot \frac{V}{2\pi^2} \underbrace{\frac{\hbar^2 k_F^2}{2\mu}}_{=E_F} \frac{k_F^3}{5} \\
 &= (2s + 1) \cdot \frac{V}{2\pi^2} E_F \cdot \frac{k_F^3}{5} \\
 &= (2s + 1) \cdot \frac{V}{2\pi^2} E_F \cdot \frac{1}{5} \left(\frac{6}{2s + 1} \pi^2 \frac{N}{V} \right) \\
 &= \frac{3}{5} N \cdot E_F.
 \end{aligned}$$

Hier ist

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 \nu \right)^{\frac{2}{3}}}{2\mu} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}}{2\mu}$$

die sog. **Fermi-Energie**, also die kinetische Energie eines Teilchens an der Fermi-
kante mit Wellenzahlvektor $|\mathbf{k}| = k_F$. Vergrößert sich das Volumen V des Systems
bei festgehaltener Teilchenzahl N , so nimmt E_F ab:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dV} E_F &= \frac{\hbar^2 \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 N \right)^{\frac{2}{3}}}{2\mu} \frac{d}{dV} V^{-\frac{2}{3}} \\
 &= -\frac{2}{3} \frac{\hbar^2 \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 N \right)^{\frac{2}{3}}}{2\mu} V^{-\frac{5}{3}}.
 \end{aligned}$$

Also folgt eine Änderung der Gesamtenergie E des Systems bei festgehaltener
Teilchenzahl (!) infolge einer Volumenänderung $V \rightarrow V + dV$ zu

$$\begin{aligned}
 dE &= - \underbrace{P}_{\text{Druck}} dV \\
 &= \frac{3}{5} N \cdot \left(\frac{d}{dV} E_F \right) dV.
 \end{aligned}$$

Nach dem Gesagten existiert in einem idealen Fermi-Gas bei Temperatur $T = 0$ ein endlicher Druck von

$$\begin{aligned} P &= -\frac{3}{5}N \cdot \left(\frac{d}{dV} E_F \right) \\ &= \frac{3}{5}N \frac{2}{3} \frac{\hbar^2 \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 N \right)^{\frac{2}{3}}}{2\mu} V^{-\frac{5}{3}} \\ &= \frac{2}{5} \left(\frac{6}{2s+1} \pi^2 \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{5}{3}}. \end{aligned}$$

Die Zustandsgleichung des idealen Fermi-Gases bei Temperatur $T = 0$ lautet somit

$$PV = \frac{2}{5}NE_F. \quad (19.21)$$

Der Erste Hauptsatz der Thermodynamik in der Form

$$E = TS + \mu N - PV$$

liefert für das **chemische Potential** μ des idealen Fermi-Gases bei Temperatur $T = 0$ das Ergebnis

$$\mu = \frac{E + PV}{N} = \frac{\left(\frac{3}{5}NE_F + \frac{2}{5}NE_F \right)}{N} = E_F. \quad (19.22)$$

Das Pauli-Prinzip ist demnach die tiefere Ursache für die sehr bemerkenswerte Eigenschaft des idealen Fermi-Gases, dass selbst am absoluten Nullpunkt $T = 0$ ein endlich großer Druck herrscht, der allein von der Teilchendichte $\frac{N}{V}$ abhängt. Dies ist z.B. für das Verständnis von sog. „Weißen Zwergsternen“ in der Astrophysik, für die Theorie der Metalle in der Festkörperphysik, oder für die Eigenschaften von flüssigem ^3He fundamental.

19.3 Operatoren im Formalismus der Zweiten Quantisierung

Der eingangs betrachtete Hamilton-Operator eines Systems von N gleichartigen Teilchen mit Masse μ kann ohne weiteres verallgemeinert werden, um z.B. für die Teilchen des Systems die Zeeman-Wechselwirkung der Spins mit einem (schwachen) äußeren Magnetfeld, oder auch zusätzlich zur potentiellen Energie der skalaren Dichte-Dichte Wechselwirkung eine vom Spin abhängige Teilchen-Teilchen

Wechselwirkung (z.B. magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung) zu beschreiben:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}^{(1)} + \hat{V}^{(2)} \\ \hat{H}^{(1)} &= \sum_{j=1}^N \mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)}) \\ \hat{V}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N [\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)})]_{m^{(j)}, m'^{(j)}; m^{(k)}, m'^{(k)}}.\end{aligned}\quad (19.23)$$

Hier ist $\mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)})$ ein **Integralkern**, der ausschließlich auf den j -ten Einteilchenzustand wirkt, und zugleich alle übrigen Einteilchenzustände unbeeinträchtigt lässt. Bzgl. der Spin-Freiheitsgrade handelt es sich um eine $(2s+1) \times (2s+1)$ -Matrix:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)}) \\ = \delta^{(D)}(\mathbf{r}'^{(j)} - \mathbf{r}^{(j)}) \left\{ \begin{array}{l} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}^{(j)}}^2 + U(\mathbf{r}^{(j)}) \right] \delta_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \\ + \frac{|e|\hbar}{\mu} \sum_{\mu \in \{x,y,z\}} [\mathbf{S}_{\mu}^{(j)}]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \cdot \mathbf{B}_{\mu}^{(ext)}(\mathbf{r}^{(j)}) \end{array} \right\}.\end{aligned}$$

Entsprechend ist auch

$$\begin{aligned}[\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)}; \mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{r}'^{(k)})]_{m^{(j)}, m'^{(j)}; m^{(k)}, m'^{(k)}} \\ \equiv \delta^{(D)}(\mathbf{r}'^{(j)} - \mathbf{r}^{(j)}) \delta^{(D)}(\mathbf{r}'^{(k)} - \mathbf{r}^{(k)}) [\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)})]_{m^{(j)}, m'^{(j)}; m^{(k)}, m'^{(k)}}\end{aligned}$$

ein Integralkern, der jetzt simultan auf den j -ten und den k -ten Einteilchenzustand wirkt, während alle übrigen Einteilchenzustände unbeeinträchtigt bleiben. Bzgl. der Spin-Freiheitsgrade handelt es sich um eine $[(2s+1) \times (2s+1)] \times [(2s+1) \times (2s+1)]$ -dimensionale Block-Matrix, da der Operator $\hat{V}^{(2)}$ per definitionem auf eine Vielteilchen-Wellenfunktion wirkt, die aus einem Produkt von mindestens zwei Einteilchen-Wellenfunktionen zusammengesetzt ist:

$$\begin{aligned}[\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)})]_{m^{(j)}, m'^{(j)}; m^{(k)}, m'^{(k)}} \\ = \left\{ \begin{array}{l} \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}|} \delta_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \delta_{m^{(k)}, m'^{(k)}} + \frac{\sum_{a \in \{x,y,z\}} [\mathbf{S}_a^{(j)}]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \cdot [\mathbf{S}_a^{(k)}]_{m^{(k)}, m'^{(k)}}}{|\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}|^3} \\ - 3 \frac{\left[\sum_{a \in \{x,y,z\}} \mathbf{S}_a^{(j)} \cdot (\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)})_a \right]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \left[\sum_{a' \in \{x,y,z\}} \mathbf{S}_{a'}^{(k)} \cdot (\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)})_{a'} \right]_{m^{(k)}, m'^{(k)}}}{|\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}|^5} \\ - \frac{8\pi}{3} \delta^{(3)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}) \cdot \sum_{a \in \{x,y,z\}} [\mathbf{S}_a^{(j)}]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \cdot [\mathbf{S}_a^{(k)}]_{m^{(k)}, m'^{(k)}} \end{array} \right\}.\end{aligned}$$

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

Sei $\phi_{\lambda_j}(j) = \phi_{\lambda_j}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)})$ Eigenfunktion des Einteilchen-Hamilton-Operators $\mathcal{H}(j) = [\mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)})]$ zum Eigenwert ε_{λ_j} für $j = 1, 2, \dots, N$:

$$\int d^D R' \sum_{-s \leq M' \leq s} \mathcal{H}_{M, M'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \phi_{\lambda}(\mathbf{R}', M') = \varepsilon_{\lambda} \phi_{\lambda}(\mathbf{R}, M)$$

$$\lambda \in \mathcal{I}_{\phi}.$$

Die Indexmenge \mathcal{I} dient der Abzählung aller Eigenzustände des Einteilchen-Hamilton-Operators $\mathcal{H}(j)$ für $j = 1, 2, \dots, N$. Das bedeutet, für das j -te Teilchen, genau wie für das k -te Teilchen, gibt es ein und dieselbe Indexmenge \mathcal{I}_{ϕ} , um die verschiedenen Einteilchen-Eigenzustände ϕ_{λ} abzuzählen.

Da $\mathcal{H}(j)$ hermitesch ist, gilt

$$\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_{\phi}} \phi_{\lambda}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \phi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}'^{(j)}, m'^{(j)}) = \delta^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}'^{(j)}) \delta_{m^{(j)} m'^{(j)}} \quad (19.24)$$

$$\langle \phi_{\lambda}, \phi_{\lambda'} \rangle = \sum_{-S \leq m^{(j)} \leq S} \int d^D r^{(j)} \phi_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \phi_{\lambda'}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) = \delta_{\lambda, \lambda'}$$

$$\lambda, \lambda' \in \mathcal{I}_{\phi}.$$

Demnach erhalten wir jetzt für einen aus solchen Einteilchen-Wellenfunktionen $\phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}$ aufgebauten N -Teilchenzustand Ψ_{ζ} gemäß Gl. (19.3), (19.4):

$$\begin{aligned} \zeta &\in \{S, A\} \\ \hat{H}^{(1)} \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) &= \sum_{j=1}^N \mathcal{H}(j) \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) \\ &= \sum_{j=1}^N \varepsilon_{\lambda_j} \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) \\ &= \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}} \varepsilon_{\lambda} n_{\lambda} \right) \Psi_{\zeta}(1, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}). \end{aligned}$$

Hier ist n_{λ} die Besetzungszahl des Einteilchenzustands $\phi_{\lambda}(\cdot)$. Für Bosonen ($\zeta = S$) ist $n_{\lambda} \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$, für Fermionen ($\zeta = A$) ist $n_{\lambda} \in \{0, 1\}$. Mit Hilfe des Besetzungszahl-Operators

$$\begin{aligned} \hat{N}_{\lambda} &= \hat{a}^{\dagger}(\phi_{\lambda}) \hat{a}(\phi_{\lambda}) \\ \hat{N}_{\lambda} \Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) &= n_{\lambda} \Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) \end{aligned}$$

folgt nun

$$\begin{aligned}
 & \hat{H}^{(1)} \Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) \\
 &= \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_{\phi}} \varepsilon_{\lambda} \hat{N}_{\lambda} \right) \Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}) \\
 &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_{\phi}} \varepsilon_{\lambda} \hat{a}^{\dagger}(\phi_{\lambda}) \hat{a}(\phi_{\lambda}) \Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}).
 \end{aligned}$$

Nun dürfen wir identifizieren, da jeder Vielteilchenzustand als Linearkombination der Basiselemente $\Psi_{\zeta}(1, 2, \dots, N; \phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N})$ im Fock-Raum darstellbar ist:

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_{\phi}} \varepsilon_{\lambda} \hat{a}^{\dagger}(\phi_{\lambda}) \hat{a}(\phi_{\lambda}).$$

Sei nun $\psi_{\mathbf{R},M}$ eine spezielle Einteilchen-Wellenfunktionen, die ein am Platz \mathbf{R} lokalisiertes Teilchen im Spin-Eigenzustand $\chi_{s,M}$ beschreibt. Zur Erinnerung (siehe Kapitel 13): Jeder der insgesamt $2M+1$ linear unabhängigen und orthogonalen Spin-Eigenzustände $\chi_{s,M}$ zum Spin s kann als Vektor mit $2S+1$ Komponenten $\chi_{s,M}(m^{(j)})$ dargestellt werden, wobei der Index $m^{(j)} \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$ die betreffende Komponenten von $\chi_{s,M}$ spezifiziert. Auf die Angabe der Spin-Quantenzahl s als „Label“ bei der Einteilchen-Wellenfunktion $\psi_{\mathbf{R},M}$ können wir im vorliegenden Fall verzichten, da wir ja identische Teilchen behandeln. Also

$$\begin{aligned}
 \psi_{\nu}(j) &= \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \equiv \delta_{\eta}^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{R}) \chi_{s,M}(m^{(j)}) \quad (19.26) \\
 D &= 1, 2, 3 \text{ räumliche Dimensionen.}
 \end{aligned}$$

Hier ist $\delta_{\eta}^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{R})$ eine geeignete Regularisierung der Dirac-Deltafunktion, z.B. ein auf Eins normiertes Gaußsches Wellenpaket mit Varianz η . Diese Einteilchen-Wellenfunktion ist (für $\eta \rightarrow 0^+$) sowohl eine Eigenfunktion des Orts-Operators $\hat{\mathbf{r}}_a^{(j)}$ (kartesische Komponenten $a \in \{x, y, z\}$) als auch des Spin-Operators $\hat{S}_z^{(j)}$ und des Quadrates $\sum_{a \in \{x, y, z\}} \hat{S}_a^{(j)} \hat{S}_a^{(j)}$ des Spin-Operators:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{r}}_a^{(j)} \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) &= \mathbf{R}_a \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \\
 \sum_{-s \leq m'^{(j)} \leq s} \left[\sum_{a \in \{x, y, z\}} \hat{S}_a^{(j)} \hat{S}_a^{(j)} \right]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m'^{(j)}) &= \hbar^2 s(s+1) \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \\
 \sum_{-s \leq m'^{(j)} \leq s} \left[\hat{S}_z^{(j)} \right]_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m'^{(j)}) &= \hbar M \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \\
 m^{(j)}, m'^{(j)}, M &\in \{-s, -s+1, \dots, s\} \\
 \mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R} &\in \text{Vol.}
 \end{aligned}$$

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

Wir sehen, der Multi-Index $\nu \equiv (\mathbf{R}, M) \in \mathcal{I}_\psi$ in der Einteilchen-Wellenfunktion $\psi_\nu(j) = \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)})$ zeigt die Position \mathbf{R} an, bei welcher das j -te Teilchen lokalisiert ist, sowie dessen Spin-Eigenzustand $\chi_{s,M}$. Die Indexmenge $\mathcal{I}_\psi = \text{Vol} \times \{-s, -s+1, \dots, s\}$ beschreibt also den Wertevorrat aller möglichen Positionen $\mathbf{R} \in \text{Vol}$ und aller Spin-Quantenzahlen $M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$, die das Teilchen annehmen darf.

Für das Skalarprodukt zweier solcher lokalisierter Einteilchen-Wellenfunktionen gilt

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_\nu, \psi_{\nu'} \rangle &= \sum_{\bar{j}} \psi_{\mathbf{R},M}(\bar{j}) \psi_{\mathbf{R}',M'}(\bar{j}) \\
 &= \sum_{-s \leq m^{(j)} \leq s} \int_{\text{Vol}} d^D r^{(j)} \psi_{\mathbf{R},M}^\dagger(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \psi_{\mathbf{R}',M'}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \\
 &= \int_{\text{Vol}} d^D r^{(j)} \delta_\eta^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{R}) \delta_\eta^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{R}') \sum_{-s \leq m^{(j)} \leq s} \chi_{s,M}^\dagger(m^{(j)}) \chi_{s,M'}(m^{(j)}) \\
 &= \delta_\eta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{M,M'} \\
 &= \delta_{\nu,\nu'}.
 \end{aligned}$$

Die Vollständigkeitsrelation lautet entsprechend:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} \psi_\nu(j) \psi_\nu^\dagger(j') &= \sum_{-s \leq M \leq s} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(j)} \psi_{\mathbf{R},M}^\dagger(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}'^{(j)}, m'^{(j)}) \\
 &= \delta^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}'^{(j)}) \delta_{m^{(j)}, m'^{(j)}} \\
 &= \delta_{j,j'}.
 \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt spezielle Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren, bezeichnet mit $\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M})$ und $\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M})$. Der Operator $\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M})$ erzeugt ein an der Position $\mathbf{R} \in \text{Vol}$ **lokalisertes** Teilchen im Spin-Eigenzustand $\chi_{s,M}$, der Feldoperator $\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M})$ vernichtet ein solches Teilchen.

Die allgemeinen Vertauschungsregeln für die Operatoren $\hat{a}(\phi)$ und $\hat{a}^\dagger(\phi)$, wie in den Gleichungen (19.12), (19.13), (19.14) angegeben, implizieren jetzt entsprechende Vertauschungsregeln für die speziellen Operatoren $\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M})$ und $\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M})$:

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M}), \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}',M'})]_{\mp} &= \langle \psi_{\mathbf{R},M}(\bar{j}), \psi_{\mathbf{R}',M'}(\bar{j}) \rangle \hat{1} = \delta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{M,M'} \hat{1} \\
 [\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M}), \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}',M'})]_{\mp} &= \hat{0} = [\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M}), \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}',M'})]_{\mp}.
 \end{aligned}$$

Zunächst beobachten wir, dass jeder Erzeugungs-Operator $\hat{a}^\dagger(\phi)$ bzgl. seines Arguments eine **lineare Abbildung** darstellt:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger(c_I \phi_I + c_{II} \phi_{II}) &= c_I \hat{a}^\dagger(\phi_I) + c_{II} \hat{a}^\dagger(\phi_{II}) \\
 c_I, c_{II} &\in \mathbb{C}.
 \end{aligned}$$

Die Linearität ist eine unmittelbar aus der Definitionsgleichung (19.7) ablesbare Eigenschaft des Erzeugungs-Operators. Somit gilt:

$$\hat{a}^\dagger \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}} c_\lambda \phi_\lambda \right) = \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} c_\lambda \hat{a}^\dagger (\phi_\lambda) \quad (19.27)$$

$c_\lambda \in \mathbb{C}.$

Für den zu $\hat{a}^\dagger (\phi_\lambda)$ adjungierten Operator $[\hat{a}^\dagger (\phi_\lambda)]^\dagger \equiv \hat{a} (\phi_\lambda)$ folgt nun mit der zu c_λ komplex konjugierten Zahl c_λ^* :

$$\hat{a} \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} c_\lambda \phi_\lambda \right) = \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} c_\lambda^* \hat{a} (\phi_\lambda). \quad (19.28)$$

Man sagt auch, der Vernichtungs-Operator $\hat{a} (\phi_\lambda)$ ist „anti-linear“.

Nun besteht aufgrund der Vollständigkeitsrelation Gl. (19.24) für die Einteilchen-Wellenfunktionen $\phi_\lambda(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)})$ die Relation

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda(j) \phi_\lambda^\dagger(k) &= \delta_{j,k} \\ \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \phi_\lambda^\dagger(\mathbf{r}^{(k)}, m^{(k)}) &= \delta^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}) \delta_{m^{(j)}, m^{(k)}}. \end{aligned}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \psi_\nu(j) &= \sum_k \delta_{j,k} \psi_\nu(k) \\ &= \sum_k \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda(j) \phi_\lambda^\dagger(k) \psi_\nu(k) \\ &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda(j) \sum_k \phi_\lambda^\dagger(k) \psi_\nu(k) \\ &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda(j) \langle \phi_\lambda, \psi_\nu \rangle. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für fest gewählten Index $\nu = (\mathbf{R}, M)$ mit $\mathbf{R} \in \text{Vol}$ und $M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$ die folgende Darstellung als Superposition der Eigenfunktionen ϕ_λ :

$$\psi_\nu = \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda\nu} \phi_\lambda,$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten $u_{\lambda\nu}$ zu

$$\begin{aligned} u_{\lambda\nu} &= \langle \phi_\lambda, \psi_\nu \rangle \\ &= \sum_j \phi_\lambda^\dagger(j) \psi_\nu(j) \\ &= \sum_{-s \leq m^{(j)} \leq s} \int_{\text{Vol}} d^D r^{(j)} \phi_\lambda^\dagger(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \psi_\nu(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \end{aligned}$$

gegeben sind. Dies hat zur Folge

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(\psi_\nu) &= \hat{a}^\dagger\left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda\nu} \phi_\lambda\right) \\ &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda\nu} \hat{a}^\dagger(\phi_\lambda).\end{aligned}\tag{19.29}$$

Durch Übergang zum adjungierten Operator folgt hieraus

$$\begin{aligned}\hat{a}(\psi_\nu) &= \hat{a}\left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda\nu} \phi_\lambda\right) \\ &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda\nu}^* \hat{a}(\phi_\lambda).\end{aligned}\tag{19.30}$$

Umgekehrt liefert die Orthogonalitätsrelation Gl. (19.25) den Zusammenhang:

$$\begin{aligned}\sum_{\nu'} u_{\lambda\nu'}^* \hat{a}^\dagger(\psi_{\nu'}) &= \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} u_{\lambda\nu'}^* \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} u_{\lambda'\nu'} \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} u_{\lambda'\nu'} u_{\lambda\nu'}^* \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} \langle \phi_{\lambda'}, \psi_{\nu'} \rangle \langle \phi_\lambda, \psi_{\nu'} \rangle^* \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} \langle \phi_{\lambda'}, \psi_{\nu'} \rangle \langle \psi_{\nu'}, \phi_\lambda \rangle \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} \left[\sum_j \phi_{\lambda'}^\dagger(j) \psi_{\nu'}(j) \right] \left[\sum_k \psi_{\nu'}^\dagger(k) \phi_\lambda(k) \right] \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \sum_{j,k} \phi_{\lambda'}^\dagger(j) \underbrace{\left[\sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} \psi_{\nu'}(j) \psi_{\nu'}^\dagger(k) \right]}_{=\delta_{j,k}} \phi_\lambda(k) \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \left[\sum_j \phi_{\lambda'}^\dagger(j) \phi_\lambda(j) \right] \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \sum_{\lambda' \in \mathcal{I}_\phi} \underbrace{\langle \phi_{\lambda'}, \phi_\lambda \rangle}_{=\delta_{\lambda,\lambda'}} \hat{a}^\dagger(\phi_{\lambda'}) \\ &= \hat{a}^\dagger(\phi_\lambda).\end{aligned}\tag{19.31}$$

Damit ist gezeigt:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger(\phi_\lambda) &= \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} u_{\lambda\nu}^* \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \\
 &= \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} \langle \phi_\lambda, \psi_\nu \rangle^* \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \\
 &= \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} \langle \psi_\nu, \phi_\lambda \rangle \hat{a}^\dagger(\psi_\nu).
 \end{aligned}$$

Wiederum folgt durch Übergang zum adjungierten Operator:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}(\phi_\lambda) &= \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} u_{\lambda\nu} \hat{a}(\psi_\nu) \\
 &= \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} \langle \phi_\lambda, \psi_\nu \rangle \hat{a}(\psi_\nu).
 \end{aligned} \tag{19.32}$$

Wir erhalten jetzt

$$\begin{aligned}
 \hat{H}^{(1)} &= \sum_{j=1}^N \mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)}) \\
 &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \varepsilon_\lambda \hat{a}^\dagger(\phi_\lambda) \hat{a}(\phi_\lambda) \\
 &= \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \varepsilon_\lambda \sum_{\nu \in \mathcal{I}_\psi} \langle \psi_\nu, \phi_\lambda \rangle \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \sum_{\nu' \in \mathcal{I}_\psi} \langle \phi_\lambda, \psi_{\nu'} \rangle \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_{\nu, \nu' \in \mathcal{I}_\psi} \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \left[\sum_j \psi_\nu^\dagger(j) \phi_\lambda(j) \right] \varepsilon_\lambda \left[\sum_k \phi_\lambda^\dagger(k) \psi_{\nu'}(k) \right] \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_{\nu, \nu' \in \mathcal{I}_\psi} \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \sum_{j,k} \psi_\nu^\dagger(j) \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda^\dagger(k) \varepsilon_\lambda \phi_\lambda(j) \right) \psi_{\nu'}(k) \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_{\nu, \nu' \in \mathcal{I}_\psi} \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \sum_{j,k} \psi_\nu^\dagger(j) \left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda^\dagger(k) \mathcal{H}(j) \phi_\lambda(j) \right) \psi_{\nu'}(k) \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_{\nu, \nu' \in \mathcal{I}_\psi} \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \sum_{j,k} \psi_\nu^\dagger(j) \mathcal{H}(j) \underbrace{\left(\sum_{\lambda \in \mathcal{I}_\phi} \phi_\lambda^\dagger(k) \phi_\lambda(j) \right)}_{=\delta_{k,j}} \psi_{\nu'}(k) \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_j \sum_{\nu, \nu' \in \mathcal{I}_\psi} \hat{a}^\dagger(\psi_\nu) \underbrace{\psi_\nu^\dagger(j) \mathcal{H}(j) \psi_{\nu'}(j)}_{\text{komplexe Zahl}} \hat{a}(\psi_{\nu'}) \\
 &= \sum_{-S \leq M, M' \leq S} \int_{\text{Vol}} d^D R \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) \mathcal{H}_{M, M'}(\mathbf{R}, \mathbf{S}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}, M'}).
 \end{aligned}$$

Im Unterschied zur Darstellung des Einteilchen Hamilton-Operators (sog. **erste Quantisierung**)

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{j=1}^N \mathcal{H}_{m^{(j)}, m'^{(j)}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}'^{(j)}) \quad (19.33)$$

für ein System von N identischen Teilchen, lautet die entsprechende Darstellung für $\hat{H}^{(1)}$ im Formalismus der **zweiten Quantisierung**:

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{-S \leq M, M' \leq S} \int_{\text{Vol}} d^D R \int_{\text{Vol}} d^D R' \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) \mathcal{H}_{M, M'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}', M'}). \quad (19.34)$$

Offensichtlich kommt in diesem Ausdruck für $\hat{H}^{(1)}$ die Teilchenzahl N nicht mehr explizit vor!

In dieser Unabhängigkeit von der Anzahl N der Teilchen des Systems ist der wesentliche Vorteil der Methode der Zweiten Quantisierung zu sehen! Der Hamilton-Operator hat jetzt eine viel übersichtlichere Struktur. Zugleich ist die Berechnung von Erwartungswerten physikalischer Observablen per constructionem derart angelegt, dass das Pauli-Prinzip automatisch berücksichtigt ist. Die Verwendung von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren erlaubt es, über die N -Teilchen-Schrödinger-Gleichung hinaus physikalische Prozesse zu beschreiben, bei denen die Teilchenzahl nicht erhalten bleibt.

Ganz analog zur vorherigen Betrachtung erhält man z.B. für die Ausdrücke für Teilchendichte $n(\mathbf{R})$, Stromdichte $j_a(\mathbf{R})$ oder Spindichte $m_a(\mathbf{R})$

$$\begin{aligned} n(\mathbf{R}) &= \sum_{j=1}^N \delta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{r}^{(j)}) \\ j_a(\mathbf{R}) &= \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{p}_a^{(j)} \delta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{r}^{(j)}) + \delta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{r}^{(j)}) \mathbf{p}_a^{(j)} \right] \\ m_a(\mathbf{R}) &= \sum_{j=1}^N \delta^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{r}^{(j)}) S_a^{(j)}, \end{aligned}$$

im Formalismus der Zweiten Quantisierung die Ausdrücke:

$$\hat{n}(\mathbf{R}) = \sum_{-S \leq M \leq S} \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}, M}) \quad (19.35)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2\mu} \sum_{-S \leq M \leq S} \left(\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_R \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}, M}) \right] - \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_R \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) \right] \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}, M}) \right) \quad (19.36)$$

$$\hat{m}_a(\mathbf{R}) = \sum_{-S \leq M \leq S} \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}, M}) [S_a]_{M, M'} \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}, M'}). \quad (19.37)$$

Es verbleibt noch die Aufgabe, den Wechselwirkungsterm

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N \left[\mathcal{V}^{(2)} \left(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)} \right) \right]_{m^{(j)}, m'^{(j)}; m^{(k)}, m'^{(k)}} \quad (19.38)$$

in Zweiter Quantisierung darzustellen. Offensichtlich handelt es sich dabei um eine Überlagerung der Beiträge der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung zwischen allen Paaren (j, k) des Systems.

Dazu sei angemerkt, dass wir $\hat{V}^{(2)}$ stets als Summe von Termen $\hat{V}^{(2,b)}$ schreiben dürfen, die jeweils für sich bzgl. der Spin-Freiheitsgrade eine separable Struktur aufweisen:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_b \hat{V}^{(2,b)}.$$

Um den (jetzt als separabel vorausgesetzten) Zwei-Teilchen-Term $\hat{V}^{(2,b)}$ in Zweiter Quantisierung darzustellen, ist es zweckmäßig, dazu spezielle Vielteilchenzuständen $\Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \omega_{\nu_2}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)})$ als Basis im Fock-Raum zu betrachten, die bzgl. der Ortsvariablen $\mathbf{r}^{(j)}$ aus lokalisierten Einteilchen-Wellenfunktionen $\omega_{\nu}^{(b)}(j)$ zusammengesetzt sind und bzgl. des Spin-Freiheitsgrades aus (noch zu bestimmen) Linearkombinationen von Spin-Eigenzuständen aufgebaut sind:

$$\begin{aligned} \nu &= (\mathbf{R}, M) \\ \omega_{\nu}^{(b)}(j) &= \omega_{\nu}^{(b)}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) = \delta_{\eta}^{(D)}(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{R}) \sigma_{s,M}^{(b)}(m^{(j)}) \\ \sigma_{s,M}^{(b)}(m^{(j)}) &= \sum_{M'=-s}^s U_{M,M'}^{(b)} \chi_{s,M'}^{(b)}(m^{(j)}) \\ \chi_{s,M'}^{(b)}(m^{(j)}) &= \sum_{M=-s}^s [U^{(b)}]_{M',M}^{\dagger} \sigma_{s,M}^{(b)}(m^{(j)}) \\ \sum_{M=-s}^s [U^{(b)}]_{M',M}^{\dagger} U_{M,M''}^{(b)} &= \delta_{M',M''} \\ \omega_{\mathbf{R},M}^{(b)}(j) &= \sum_{M'=-s}^s U_{M,M'}^{(b)} \psi_{\mathbf{R},M'}(j) \\ \psi_{\mathbf{R},M'}(j) &= \sum_{M=-s}^s [U^{(b)}]_{M',M}^{\dagger} \omega_{\mathbf{R},M}^{(b)}(j). \end{aligned}$$

Hier werden die Koeffizienten $U_{M,M'}^{(b)}$ derart gewählt, dass insbesondere das Produkt $\omega_{\nu_j}^{(b)}(j) \omega_{\nu_k}^{(b)}(k)$ von zwei solchen Einteilchen-Wellenfunktionen jetzt bzgl. der Spin-

Freiheitsgrade eine Eigenfunktion des Integralkerns $\mathcal{V}^{(2,b)}$ ist:

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{V}^{(2,b)} \circ \omega_{\nu_j}^{(b)}(j) \omega_{\nu_k}^{(b)}(k) \\
 = & \sum_{m^{(j)}, m^{(k)}} \left[\mathcal{V}^{(2,b)}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(k)}) \right]_{m^{(j)}, m^{(j)}; m^{(k)}, m^{(k)}} \\
 & \times \omega_{\mathbf{R}_j, M_j}^{(b)}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \omega_{\mathbf{R}_k, M_k}^{(b)}(\mathbf{r}^{(k)}, m^{(k)}) \\
 = & \left[\mathcal{E}^{(2,b)} \right]_{\mathbf{R}_j, M_j; \mathbf{R}_k, M_k} \omega_{\mathbf{R}_j, M_j}^{(b)}(\mathbf{r}^{(j)}, m^{(j)}) \omega_{\mathbf{R}_k, M_k}^{(b)}(\mathbf{r}^{(k)}, m^{(k)}) \\
 = & \left[\mathcal{E}^{(2,b)} \right]_{\nu_j, \nu_k} \omega_{\nu_j}^{(b)}(j) \omega_{\nu_k}^{(b)}(k).
 \end{aligned} \tag{19.39}$$

Wir verabreden jetzt zur Vereinfachung der Notation den Index b fortzulassen, sofern keine Verwechslungsmöglichkeit gegeben ist. Es folgt dann gemäß Gl. (19.9)

$$\begin{aligned}
 & \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}) \hat{a}(\omega_{\nu_{II}}) \hat{a}(\omega_{\nu_I}) \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}, \dots, \omega_{\nu_N}) \\
 = & \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}) \\
 & \times \hat{a}(\omega_{\nu_{II}}) \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \omega_{\nu_I}, \omega_{\nu_j} \rangle \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\omega_{\nu_j}), \dots, \omega_{\nu_N}) \\
 = & \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}) \sum_{j=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \langle \omega_{\nu_I}, \omega_{\nu_j} \rangle \sum_{k=1}^N (\sigma_{j,k}) \langle \omega_{\nu_{II}}, \omega_{\nu_k} \rangle \\
 & \times \Psi_\zeta(1, \dots, N-1; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \mathbf{\Omega}(\omega_{\nu_j}), \mathbf{\Omega}(\omega_{\nu_k}), \dots, \omega_{\nu_N}),
 \end{aligned}$$

wobei wie zuvor $\mathbf{\Omega}(\cdot)$ bedeutet, dass dieser Faktor bei der Summation auszulassen ist. Bei Bosonen kommt es nicht auf die Reihenfolge der Einteilchen-Zustände ω_{ν_j} und ω_{ν_k} an. Bei Fermionen berücksichtigt der Faktor $(\sigma_{j,k})$, ob der Zustand ω_{ν_j} in der verabredeten Folge von Zuständen $\omega_{\nu_1}, \dots, \omega_{\nu_N}$ nun vor dem Zustand ω_{ν_k} angeordnet ($j < k$) ist, oder dahinter ($j > k$):

$$(\sigma_{j,k}) = \begin{cases} (\delta_\zeta)^{N-k} & \text{falls } j < k, \\ (\delta_\zeta)^{N-k+1} & \text{falls } k < j. \end{cases}$$

Dann folgt unter Berücksichtigung von

$$\langle \omega_{\nu_I}, \omega_{\nu_j} \rangle = \delta_{\nu_I, \nu_j}$$

die Relation

$$\begin{aligned}
 & \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}) \hat{a}(\omega_{\nu_{II}}) \hat{a}(\omega_{\nu_I}) \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}, \dots, \omega_{\nu_N}) \\
 = & \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \delta_{\nu_I, \nu_j} (\sigma_{j,k}) \delta_{\nu_{II}, \nu_k} \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}) \\
 & \times \Psi_\zeta(1, \dots, N-2; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \Omega(\omega_{\nu_j}), \Omega(\omega_{\nu_k}), \dots, \omega_{\nu_N}) \\
 = & \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \delta_{\nu_I, \nu_j} (\sigma_{j,k}) \delta_{\nu_{II}, \nu_k} \\
 & \times \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \Omega(\omega_{\nu_j}), \Omega(\omega_{\nu_k}), \dots, \omega_{\nu_N}, \omega_{\nu_{II}}, \omega_{\nu_I}) \\
 = & \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (\delta_\zeta)^{N-j} \delta_{\nu_I, \nu_j} \delta_{\nu_{II}, \nu_k} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \Omega(\omega_{\nu_j}), \dots, \omega_{\nu_N}, \omega_{\nu_I}) \\
 = & \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \delta_{\nu_I, \nu_j} \delta_{\nu_{II}, \nu_k} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}, \omega_{\nu_2}, \dots, \omega_{\nu_N}),
 \end{aligned}$$

dabei bedeutet $\Omega(\cdot)$ Auslassung des Faktors bei der Summation. Also folgt das Resultat:

$$\begin{aligned}
 & \hat{V}^{(2,b)} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)}) \\
 = & \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N [\mathcal{E}^{(2,b)}]_{\nu_j, \nu_k} \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)}) \\
 = & \sum_{\nu_I, \nu_{II}} [\mathcal{E}^{(2,b)}]_{\nu_I, \nu_{II}} \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_I}^{(b)}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\nu_{II}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\nu_{II}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\nu_I}^{(b)}) \\
 & \times \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)}) \\
 = & \int_{\text{Vol}} d^D R^{(I)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(II)} \sum_{M^{(I)}=-s}^s \sum_{M^{(II)}=-s}^s [\mathcal{E}^{(2,b)}]_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}; \mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}} \\
 & \times \hat{a}^\dagger(\omega_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}}^{(b)}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}}^{(b)}) \\
 & \times \Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)}).
 \end{aligned}$$

Wir entwickeln jetzt die Einteilchenzustände $\omega_{\mathbf{R}, M}^{(b)}$ bzgl. des vollständigen Orthonormalsystems der lokalisierten Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_{\mathbf{R}, M}$:

$$\omega_{\mathbf{R}, M}^{(b)}(j) = \sum_{M'=-s}^s U_{M, M'}^{(b)} \psi_{\mathbf{R}, M'}(j).$$

Unter Verwendung von Gl. (19.29) und (19.30) erhalten wir für unsere Erzeugungs-

bzw. Vernichtungs-Operatoren bzgl. so eines Basiswechsels:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}^\dagger(\omega_{\mathbf{R},M}^{(b)}) &= \hat{a}^\dagger \left(\sum_{M'=-s}^s U_{M,M'}^{(b)} \psi_{\mathbf{R},M'} \right) \\
 &= \sum_{M'=-s}^s U_{M,M'}^{(b)} \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M'}) \\
 \hat{a}(\omega_{\mathbf{R},M}^{(b)}) &= \hat{a} \left(\sum_{M'=-s}^s U_{M,M'}^{(b)} \psi_{\mathbf{R},M'} \right) \\
 &= \sum_{M'=-s}^s [U^{(b)}]_{M',M}^\dagger \hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M'}).
 \end{aligned}$$

Es folgt nun wegen der linearen Unabhängigkeit und Vollständigkeit der Basiselemente $\Psi_\zeta(1, \dots, N; \omega_{\nu_1}^{(b)}, \dots, \omega_{\nu_N}^{(b)})$ im Fock-Raum ganz allgemein (unabhängig vom betrachteten Basiszustand!):

$$\begin{aligned}
 \hat{V}^{(2,b)} &= \int_{\text{Vol}} d^D R^{(I)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(II)} \sum_{M^{(I)}=-s}^s \sum_{M^{(II)}=-s}^s [\mathcal{E}^{(2,b)}]_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}; \mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}} \\
 &\quad \times \hat{a}^\dagger(\omega_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}}^{(b)}) \hat{a}^\dagger(\omega_{\mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}}^{(b)}) \hat{a}(\omega_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}}^{(b)}) \\
 &= \sum_{M^{(I)}=-s}^s \sum_{M'^{(II)}=-s}^s \sum_{M''^{(II)}=-s}^s \sum_{M''^{(I)}=-s}^s \int_{\text{Vol}} d^D R^{(I)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(II)} \\
 &\quad \times \underbrace{\left(\sum_{M^{(I)}=-s}^s \sum_{M^{(II)}=-s}^s [\mathcal{E}^{(2,b)}]_{\mathbf{R}^{(I)}, M^{(I)}; \mathbf{R}^{(II)}, M^{(II)}} \right.}_{\equiv [\mathcal{V}^{(2,b)}(\mathbf{R}^{(I)}, \mathbf{R}^{(II)})]_{M^{(I)}, M''^{(I)}; M'^{(II)}, M''^{(II)}}; \text{ siehe Gl. (19.39)}} \\
 &\quad \left. \times U_{M^{(I)}, M'^{(I)}}^{(b)} U_{M^{(II)}, M''^{(II)}}^{(b)} [U^{(b)}]_{M''^{(II)}, M^{(II)}}^\dagger [U^{(b)}]_{M''^{(I)}, M^{(I)}}^\dagger \right) \\
 &\quad \times \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(I)}, M'^{(I)}}) \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(II)}, M'^{(II)}}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(II)}, M''^{(II)}}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(I)}, M''^{(I)}}).
 \end{aligned}$$

Das Ergebnis unserer Betrachtungen ist eine Darstellung für den Wechselwirkungsterm in Zweiter Quantisierung, ausgedrückt durch die sog. Feldoperatoren $\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M})$ und $\hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M})$:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_b \hat{V}^{(2,b)} \tag{19.40} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{M^{(I)}=-s}^s \sum_{M'^{(II)}=-s}^s \sum_{M''^{(II)}=-s}^s \sum_{M''^{(I)}=-s}^s \int_{\text{Vol}} d^D R^{(I)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(II)} \\
 &\quad \times \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(I)}, M'^{(I)}}) \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(II)}, M'^{(II)}}) [\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{R}^{(I)}; \mathbf{R}^{(II)})]_{M^{(I)}, M''^{(I)}; M'^{(II)}, M''^{(II)}} \\
 &\quad \times \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(II)}, M''^{(II)}}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(I)}, M''^{(I)}}).
 \end{aligned}$$

Es sieht so aus, als hätte man den Erwartungswert der potentiellen Energie mit „Wellenfunktionen“ $\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(I)},M^{(I)}})\hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(II)},M^{(II)}})\hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(II)},M^{(II)}})\hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(I)},M^{(I)}})$ gebildet. Diese sind jedoch, wie wir ausführlich dargelegt haben, Operatoren auf dem Fock-Raum. Die Wellenfunktionen werden demnach zu Operatoren, während die vormals verwendeten Operatoren für die kinetische und die potentielle Energie in der Zweiten Quantisierung nunmehr zu komplexen Zahlen „degradiert“ werden. Daher der Name „Zweite Quantisierung“.

Bemerkung: Die gefundene Formel kann jetzt, nachdem die Struktur des Operators in Zweiter Quantisierung für eine Zwei-Teilchen Wechselwirkung klar ist, ohne weiteres auf die Wechselwirkung $\hat{V}^{(n)}$ zwischen mehr als zwei Körpern ($n > 2$) verallgemeinert werden. Für eine Drei-Körper-Wechselwirkung

$$\hat{V}^{(3)} = \frac{1}{3!} \sum_{\substack{j,k,l=1 \\ j \neq k \neq l}}^N [\mathcal{V}^{(3)}(\mathbf{r}^{(j)}; \mathbf{r}^{(k)}; \mathbf{r}^{(l)})]_{m^{(j)},m'^{(j)};m^{(k)},m'^{(k)};m^{(l)},m'^{(l)}}$$

erhält man demnach in Zweiter Quantisierung:

$$\begin{aligned} \hat{V}^{(3)} &= \frac{1}{3!} \sum_b \hat{V}^{(3,b)} \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\substack{M^{(I)},M'^{(II)},M''^{(III)},M''^{(III)},M''^{(II)},M''^{(I)} \\ \in \{-s,-s+1,\dots,s-1,s\}}} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(I)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(II)} \int_{\text{Vol}} d^D R^{(III)} \\ &\quad \times \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(I)},M^{(I)}}) \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(II)},M'^{(II)}}) \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R}^{(III)},M''^{(III)}}) \\ &\quad \times [\mathcal{V}^{(2)}(\mathbf{R}^{(I)}; \mathbf{R}^{(II)}; \mathbf{R}^{(III)})]_{M^{(I)},M''^{(I)};M'^{(II)},M''^{(II)};M''^{(III)},M''^{(III)}} \\ &\quad \times \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(III)},M''^{(III)}}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(II)},M'^{(II)}}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R}^{(I)},M^{(I)}}). \end{aligned}$$

Zu beachten ist allerdings bei Fermionen die umgekehrte (!) Reihenfolge der Indizes bei den Vernichtungs-Operatoren im Vergleich zur Reihenfolge bei den Erzeugungs-Operatoren!

Oft schreibt man Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für lokalisierte Einzelteilchenzustände

$$\psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}, m) = \delta_n^{(D)}(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \chi_{s,M}(m)$$

in der verkürzten Form

$$\begin{aligned} \hat{a}_M(\mathbf{R}) &\equiv \hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M}) \\ \hat{a}_M^\dagger(\mathbf{R}) &\equiv \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M}). \end{aligned}$$

Die Operatoren $\hat{a}_M(\mathbf{R})$ und $\hat{a}_M^\dagger(\mathbf{R})$ mit Spin-Index $M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$ bezeichnet man in der Literatur oft auch als **Feldoperatoren**. Der Feldoperator

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

$\hat{a}_M(\mathbf{R})$ vernichtet ein Teilchen mit Spin-Quantenzahl $M \in \{-s, -s+1, \dots, s\}$ am Ort $\mathbf{R} \in \text{Vol}$, der Feldoperator $\hat{a}_M^\dagger(\mathbf{R})$ erzeugt so ein Teilchen.

Für ein Teilchen im rechteckigen Kasten mit Volumen $V = |\text{Vol}| = L_x L_y L_z$ sind bei Vorgabe von periodischen Randbedingungen die Einteilchen-Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung gegeben zu:

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m) &= \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \chi_{s,M}(m) \\ \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} &= k_x r_x + k_y r_y + k_z r_z \\ k_a &= \frac{2\pi}{L_a} n_a \text{ mit } n_a \in \mathbb{Z}.\end{aligned}$$

Es folgt dann aus den in Gl. (19.31) und (19.32) angegebenen Relationen für den Wechsel von der Basis der lokalisierten Zustände $\psi_{\mathbf{R},M}(\mathbf{r}, m)$ zur Basis der ebenen Wellen $\phi_{\mathbf{k},M}(\mathbf{r}, m)$ der Zusammenhang:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(\phi_{\mathbf{k},M}) &= \int_{\text{Vol}} d^D R \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M}) \\ \hat{a}(\phi_{\mathbf{k},M}) &= \int_{\text{Vol}} d^D R \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M}).\end{aligned}$$

Wir schreiben jetzt

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger &\equiv \hat{a}^\dagger(\phi_{\mathbf{k},M}) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},M} &\equiv \hat{a}(\phi_{\mathbf{k},M})\end{aligned}$$

und erhalten folgerichtig

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger &= \int_{\text{Vol}} d^D R \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_M^\dagger(\mathbf{R}) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},M} &= \int_{\text{Vol}} d^D R \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_M(\mathbf{R}).\end{aligned}$$

Umgekehrt ist

$$\begin{aligned}\hat{a}_M^\dagger(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \\ \hat{a}_M(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}.\end{aligned}\tag{19.41}$$

Für den Teilchenzahl-Operator folgt, wie man leicht nachrechnet:

$$\begin{aligned}
 \hat{N} &= \int_{\text{Vol}} d^D R \hat{n}(\mathbf{R}) \\
 &= \sum_{-S \leq M \leq S} \int_{\text{Vol}} d^D R \hat{a}^\dagger(\psi_{\mathbf{R},M}) \hat{a}(\psi_{\mathbf{R},M}) \\
 &= \sum_{-S \leq M \leq S} \int_{\text{Vol}} d^D R \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}',M} \right) \\
 &= \sum_{-S \leq M \leq S} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{V} \int_{\text{Vol}} d^D R e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}',M}.
 \end{aligned}$$

Nun gilt (Übungsaufgabe!)

$$\frac{1}{V} \int_{\text{Vol}} d^D R e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}^{(D)}.$$

Demnach

$$\hat{N} = \sum_{-S \leq M \leq S} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},M}. \tag{19.42}$$

Der Teilchenzahl-Operator \hat{N} ist hier dargestellt als die Summe der Besetzungszahl-Operatoren $\hat{a}_{\mathbf{k},M}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},M}$, die abzählen, wie oft der Zustand $\phi_{\mathbf{k},M}$ (z.B. für ein Teilchen im Kasten, eine elektromagnetische Hohlraum-Mode, eine elastische Schwingungsmode im Kristall, usw.) besetzt ist.

19.4 Das Jellium-Modell des Elektronengases

Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist ein **ladungsneutrales** System bestehend aus einer Anzahl N negativ geladener (mobiler) Elektronen an den Orten $\mathbf{r}^{(k)}$ und einer Anzahl N positiv geladener (ruhender) Ionen an den Orten $\mathbf{R}^{(j)}$, wobei $j, k \in \{1, 2, \dots, N\}$. Das System wird durch einen Hamilton-Operator

$$H = K_{\text{el}} + V_{\text{el,el}} + V_{\text{el,ion}} + V_{\text{ion,ion}}$$

beschrieben, der sich aus der Wechselwirkungsenergie $V_{\text{ion,ion}}$ der positiv geladenen Ionen (Ladung $+|e|$) untereinander, der Wechselwirkungsenergie $V_{\text{el,ion}}$ der Ionen mit den negativ geladenen Elektronen (Ladung $-|e|$), und schließlich noch aus der Summe der kinetischen Energie K_{el} der Elektronen und der Wechselwirkungsenergie

gie $V_{\text{el,el}}$ der Elektronen untereinander zusammensetzt:

$$\begin{aligned}
 V_{\text{ion,ion}} &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ (j \neq k)}}^N \frac{1}{|\mathbf{R}^{(j)} - \mathbf{R}^{(k)}|} \\
 V_{\text{el,ion}} &= -\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{j,k=1 \\ (j \neq k)}}^N \frac{1}{|\mathbf{R}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}|} \\
 K_{\text{el}} + V_{\text{el,el}} &= \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}^{(j)}}^2 \right) + \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ (j \neq k)}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(k)}|}.
 \end{aligned}$$

Um einen sinnvollen thermodynamischen Limes bilden zu können, d.h. $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ mit $\frac{N}{V} = \text{const}$, ist es zweckmäßig, die Reichweite des Coulomb-Potentials durch einen Trick abzuschwächen:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}|} \rightarrow \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}.$$

Für die weitere Rechnung verabreden wir jetzt die folgende Grenzwertbildung: zuerst ist der Limes Volumen $V = L^3 \rightarrow \infty$, im zweiten Schritt der Limes $\kappa \rightarrow 0$ zu nehmen. So ist für die Abschirmlänge $\frac{1}{\kappa}$ stets die Bedingung $1 \ll \kappa L$ gewährleistet.

Mit Hilfe der Ionen-Dichteverteilung

$$n_{\text{ion}}(\mathbf{R}) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N \delta^{(3)}(\mathbf{R}^{(j)} - \mathbf{R})$$

folgt nun

$$\begin{aligned}
 V_{\text{ion,ion}} &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \int_{\text{Vol}} d^3R \int_{\text{Vol}} d^3R' \frac{n_{\text{ion}}(\mathbf{R}) n_{\text{ion}}(\mathbf{R}') e^{-\kappa|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} \\
 V_{\text{el,ion}} &= -\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1}^N \int_{\text{Vol}} d^3R \frac{n_{\text{ion}}(\mathbf{R}) e^{-\kappa|\mathbf{R}-\mathbf{r}^{(k)}|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}^{(k)}|}.
 \end{aligned}$$

Die Verwendung der Methode der Zweiten Quantisierung zur Beschreibung der Freiheitsgrade der Elektronen (Spin-Quantenzahl $s = \frac{1}{2}$, $\sigma \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \equiv \{\downarrow, \uparrow\}$) ergibt nun

$$\begin{aligned}
 \hat{K}_{\text{el}} &= \sum_{\sigma} \int_{\text{Vol}} d^3r \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \right) \hat{a}_{\sigma}(\mathbf{r}) \\
 \hat{V}_{\text{el,el}} &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{\text{Vol}} d^3r \int_{\text{Vol}} d^3r' \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \hat{a}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{a}_{\sigma}(\mathbf{r}).
 \end{aligned}$$

Im Rahmen des Jellium-Modells wird die Ionen-Dichteverteilung durch eine homogene räumlich konstante Teilchendichte approximiert:

$$n_{\text{ion}}(\mathbf{R}) \rightarrow \frac{N}{V} = \text{const.}$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} V_{\text{ion,ion}} &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int_{\text{Vol}} d^3R \int_{\text{Vol}} d^3R' \frac{e^{-\kappa|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} \\ V_{\text{el,ion}} &= -\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} \sum_{k=1}^N \int_{\text{Vol}} d^3R \frac{e^{-\kappa|\mathbf{R}-\mathbf{r}^{(k)}|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}^{(k)}|}. \end{aligned}$$

Die Substitution

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \mathbf{s}$$

liefert bei festgehaltenem \mathbf{R} :

$$V_{\text{ion,ion}} = \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int_{\text{Vol}} d^3R \int_{\text{Vol}} d^3s \frac{e^{-\kappa|\mathbf{s}|}}{|\mathbf{s}|}.$$

Entsprechend ergibt die Substitution

$$\mathbf{s} = \mathbf{R} - \mathbf{r}^{(k)}$$

bei festgehaltenem $\mathbf{r}^{(k)}$:

$$V_{\text{el,ion}} = -\frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} \sum_{k=1}^N \int_{\text{Vol}} d^3s \frac{e^{-\kappa|\mathbf{s}|}}{|\mathbf{s}|}.$$

Das Integral über die Variable \mathbf{s} ist unschwer in sphärischen Koordinaten zu berechnen:

$$\begin{aligned} \int_{\text{Vol}} d^3s \frac{e^{-\kappa|\mathbf{s}|}}{|\mathbf{s}|} &= 4\pi \lim_{L \rightarrow \infty} \int_0^L ds s^2 \frac{e^{-\kappa s}}{s} \\ &= 4\pi \lim_{L \rightarrow \infty} \int_0^L ds s e^{-\kappa s} \\ &= 4\pi \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{\partial}{\partial \kappa} \right) \int_0^L ds e^{-\kappa s} \\ &= 4\pi \left(-\frac{\partial}{\partial \kappa} \right) \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1 - e^{-\kappa L}}{\kappa} \\ &= \frac{4\pi}{\kappa^2}. \end{aligned}$$

Folglich ist

$$\begin{aligned} V_{\text{ion,ion}} &= \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \frac{1}{\kappa^2} \\ V_{\text{el,ion}} &= -\frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{N^2}{V} \frac{1}{\kappa^2}. \end{aligned}$$

Addieren der beiden Hintergrund-Beiträge der Ionen im Rahmen des Jellium-Modells ergibt:

$$V_{\text{el,ion}} + V_{\text{ion,ion}} = -\frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \frac{1}{\kappa^2}.$$

Unser Ziel ist die Berechnung der Grundzustandsenergie des Elektronengases als Funktion des mittleren Teilchenabstands $\propto \frac{1}{k_F}$. Dazu ist es nützlich, die Feldoperatoren als Superposition von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren der Einteilchenzustände $\phi_{k,\sigma}$ eines Elektrons im Kasten mit Volumen V darzustellen:

$$\begin{aligned} \hat{a}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \\ \hat{a}_\sigma(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}. \end{aligned}$$

Einsetzen liefert für den Term der kinetischen Energie der Elektronen

$$\begin{aligned} \hat{K}_{\text{el}} &= \sum_{\sigma} \int_{\text{Vol}} d^3r \hat{a}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \right) \hat{a}_\sigma(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\sigma} \int_{\text{Vol}} d^3r \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma} \right) \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{1}{V} \underbrace{\int_{\text{Vol}} d^3r e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}}_{=\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}^{(3)}} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}'|^2 \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma} \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}. \end{aligned}$$

Für die Coulomb-Wechselwirkungsenergie ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_{\text{el,el}} &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int_{\text{Vol}} d^3r \int_{\text{Vol}} d^3r' \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{a}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \hat{a}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{a}_{\sigma}(\mathbf{r}) \\
 &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int_{\text{Vol}} d^3r \int_{\text{Vol}} d^3r' \\
 &\quad \times \left(\sum_{\mathbf{k}_1} \frac{e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1,\sigma}^{\dagger} \right) \left(\sum_{\mathbf{k}_2} \frac{e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}'}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma'}^{\dagger} \right) \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \\
 &\quad \times \left(\sum_{\mathbf{k}_4} \frac{e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}'}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma'} \right) \left(\sum_{\mathbf{k}_3} \frac{e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}_3,\sigma} \right) \\
 &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} \frac{1}{V^2} \int_{\text{Vol}} d^3r' \int_{\text{Vol}} d^3r e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}'} \\
 &\quad \times \hat{a}_{\mathbf{k}_1,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_3,\sigma}.
 \end{aligned}$$

Die Berechnung des Matrixelements ergibt

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{V^2} \int_{\text{Vol}} d^3r' \int_{\text{Vol}} d^3r e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}'} \\
 &= \frac{1}{V^2} \int_{\text{Vol}} d^3r' \left[e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}'} \int_{\text{Vol}} d^3r e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right],
 \end{aligned}$$

Substitution $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ bei festgehaltener Variablen \mathbf{r}' ,

$$\begin{aligned}
 \stackrel{\mathbf{s}=\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{=} \frac{1}{V^2} \int_{\text{Vol}} d^3r' \underbrace{e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}'}}_{=V\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}^{(3)}} \int_{\text{Vol}} d^3s \underbrace{e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{s}} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{s}|}}{|\mathbf{s}|}}_{=\frac{4\pi}{\kappa^2+|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3|^2}}.
 \end{aligned}$$

Das zweite Integral wurde schon bei der Bestimmung des Streuquerschnitts der Coulomb-Wechselwirkung (siehe Kapitel 18) ausgerechnet. Somit

$$\hat{V}_{\text{el,el}} = \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}^{(3)} \sum_{\sigma,\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_1,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma'}^{\dagger} \frac{4\pi}{\kappa^2+|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3|^2} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_3,\sigma}.$$

Wir definieren neue Variablen \mathbf{k} , \mathbf{k}' und \mathbf{q} :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_1 &= \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \\
 \mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}' - \frac{\mathbf{q}}{2} \\
 \mathbf{k}_3 &= \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \\
 \mathbf{k}_4 &= \mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2}.
 \end{aligned} \tag{19.43}$$

Offensichtlich ist die Bedingung der Impulserhaltung erfüllt:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 = \mathbf{k} + \mathbf{k}' \\ \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 &= \mathbf{q} = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2. \end{aligned}$$

Dabei ist \mathbf{q} der Impulsübertrag bei der Streuung von zwei Teilchen. Wir erhalten:

$$\hat{V}_{\text{el,el}} = \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}.$$

Die Summe über die Wellenzahlen \mathbf{q} spalten wir in einen Term mit $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ und die übrigen Terme mit $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ auf:

$$\hat{V}_{\text{el,el}} = \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \left\{ \begin{aligned} &\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \frac{1}{\kappa^2} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} + \\ &+ \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}. \end{aligned} \right.$$

Unter Verwendung der kanonischen Vertauschungsregeln für Fermion-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren Gl. (19.14), (19.13) und (19.12) folgt dann:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} &= -\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \\ &= -\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{(3)} \delta_{\sigma, \sigma'} \hat{1} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \right) \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \\ &= \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{(3)} \delta_{\sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \\ &= \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}', \sigma'} - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{(3)} \delta_{\sigma, \sigma'} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}, \end{aligned}$$

$$\hat{V}_{\text{el,el}} = \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \left\{ \begin{aligned} &\frac{1}{\kappa^2} \left(\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}', \sigma'} - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}^{(3)} \delta_{\sigma, \sigma'} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}. \end{aligned} \right.$$

Mit Gl. (19.42) erhalten wir jetzt:

$$\hat{V}_{\text{el,el}} = \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \left\{ \begin{aligned} &\frac{1}{\kappa^2} \left(\hat{N}^2 - \hat{N} \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}. \end{aligned} \right.$$

Da der Hamilton-Operator mit dem Teilchenzahl-Operator vertauscht, können wir bei Anwenden von \hat{N} auf einen (auf Eins normierten) N -Elektronen-Zustand $\Psi \in \mathcal{H}_{\text{Fock}}$ einfach den Operator \hat{N} durch seinen Eigenwert N ersetzen. Es folgt

dann im Rahmen des Jellium-Modells

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} &= \langle \hat{K}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el,el}} + (V_{\text{el,ion}} + V_{\text{ion,ion}}) \hat{1} \rangle_{\Psi} \\ &= \left\{ \begin{aligned} &\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \langle \hat{N}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle_{\Psi} \\ &+ \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \rangle_{\Psi} \\ &+ \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{1}{V} \langle \hat{N}^2 - \hat{N} \rangle_{\Psi} - \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{N^2}{V} \frac{1}{\kappa^2} \langle \hat{1} \rangle_{\Psi}. \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

Da es schwierig ist, exakte Berechnungen in einem wechselwirkenden System anzustellen, machen wir eine Variationsrechnung, um so eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie E_G zu gewinnen. Als Variationswellenfunktion verwenden wir den Grundzustand

$$\Psi_F = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \Psi_{\text{Vac}}$$

des idealen Fermi-Gases. Dann gilt, wie bereits im Abschnitt über das ideale Fermi-Gas gezeigt wurde:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_{\Psi_F} &= n_{\mathbf{k}, \sigma} = \begin{cases} 1 & \text{falls } |\mathbf{k}| < k_F, \\ 0 & \text{falls } |\mathbf{k}| > k_F, \end{cases} \\ k_F &= \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \end{aligned}$$

denn für Elektronen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ ist der Spin-Entartungsgrad zu $2s + 1 = 2$ gegeben. Wir erhalten somit für die Energie des Grundzustands des Elektronengases (als Funktion des Fermi-Wellenzahlvektors k_F) eine obere Schranke:

$$E_G \leq \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F} = \left\{ \begin{aligned} &-\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{N}{V} + 2 \cdot \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \\ &+ \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \rangle_{\Psi_F}. \end{aligned} \right.$$

Das eigentliche Problem besteht jetzt darin, den Beitrag der Wechselwirkung auszurechnen:

$$\begin{aligned} &\langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \rangle_{\Psi_F} \\ &= \langle \Psi_F, \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \Psi_F \rangle \\ &= \langle \hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \Psi_F, \hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \Psi_F \rangle. \end{aligned} \tag{19.44}$$

19 Systeme aus gleichartigen Teilchen und Zweite Quantisierung

Da der Fermi-See Ψ_F gefüllt ist, sind notwendigerweise die Einteilchen-Zustände $\phi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}$ und $\phi_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma'}$ sowie $\phi_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma'}$ und $\phi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}$ besetzt, damit der Erwartungswert Gl. (19.44) überhaupt von Null verschieden sein kann:

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| &< k_F \\ \mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2} &< k_F \\ \mathbf{k}' - \frac{\mathbf{q}}{2} &< k_F \\ \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} &< k_F. \end{aligned} \quad (19.45)$$

Die beiden Vielteilchen-Zustände $\hat{a}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma'}\hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}\Psi_F$ wie auch $\hat{a}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma'}\hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}\Psi_F$ haben je eine Anzahl von $N - 2$ Elektronen, falls die angegebenen Bedingungen in Gl. (19.45) erfüllt sind. Das Skalarprodukt der beiden Vielteilchen-Zustände ist gleich Null, da die Zustände zueinander orthogonal sind, es sei denn, es ist entweder $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, oder es ist $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ und zugleich $\sigma' = \sigma$. Der Fall $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ist schon ausgeschlossen, da die Summe nur Terme mit $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ berücksichtigt. Es bleibt somit nur der zweite Fall zu betrachten:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F} = \left\{ \begin{aligned} &-\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{N}{V} + 2 \cdot \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \\ &+ \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \rangle_{\Psi_F}. \end{aligned} \right.$$

Nun gilt aufgrund der Vertauschungsregeln für Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Fermionen:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} = -\hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \quad \text{für } \mathbf{q} \neq \mathbf{0},$$

und deshalb

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \rangle_{\Psi_F} &= -\langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \rangle_{\Psi_F} \\ &= -\langle \hat{N}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{N}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \rangle_{\Psi_F}. \end{aligned}$$

Für den Erwartungswert des Produkts der Teilchenzahl-Operatoren $\hat{N}_{\mathbf{k}\pm\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma}$ erhalten wir, da Ψ_F ein auf Eins normierter Eigenzustand dieser Operatoren ist:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \hat{N}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} \rangle_{\Psi_F} &= n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\sigma} = \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \\ \Theta_H(x) &= \begin{cases} 1 & \text{falls } x > 0, \\ 0 & \text{falls } x < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Berücksichtigen wir noch einen Faktor 2 wegen der Spin-Entartung, $\sum_{\sigma} = 2s + 1 = 2$, folgt jetzt:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F} = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{N}{V} + 2 \cdot \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \\ -\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} 2 \cdot \sum_{\mathbf{k}} \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right). \end{array} \right.$$

Der Beitrag der kinetischen Energie wurde schon im Abschnitt „Ideales Fermi-Gas bei $T = 0$ “ bestimmt:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 n_{\mathbf{k}, \sigma} &= 2 \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \\ &\simeq 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} d^3k \frac{\hbar^2}{2\mu} |\mathbf{k}|^2 \\ &= \frac{3}{5} E_F N. \end{aligned}$$

Wir berechnen jetzt für konstant gehaltenen Impulsübertrag \mathbf{q} das Integral:

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{k}} \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \\ &\simeq \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right) \Theta_H \left(k_F - \left| \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right| \right). \end{aligned} \quad (19.46)$$

Wir wählen o.B.d.A. die z -Achse entlang der Verbindungslinie der beiden Punkte $\frac{\mathbf{q}}{2}$ und $-\frac{\mathbf{q}}{2}$. Das Integrationsgebiet im k -Raum ist offensichtlich die Schnittmenge zweier **Kugeln** mit Radius k_F , deren Mittelpunkte einmal am Punkt $\frac{\mathbf{q}}{2} = (0, 0, \frac{q}{2})$, und einmal am Punkt $-\frac{\mathbf{q}}{2} = (0, 0, -\frac{q}{2})$ positioniert sind:

$$\begin{aligned} k_x^2 + k_y^2 + \left(k_z - \frac{q}{2} \right)^2 &= k_F^2 \\ k_x^2 + k_y^2 + \left(k_z + \frac{q}{2} \right)^2 &= k_F^2. \end{aligned} \quad (19.47)$$

Die Oberflächen der beiden Kugeln schneiden sich in der Ebene $k_z = 0$ auf einem Kreis mit Radius

$$k_0 = \sqrt{k_F^2 - \frac{q^2}{4}},$$

falls die Bedingung

$$0 < \frac{q}{2} < k_F$$

erfüllt ist. Das Volumen des Integrationsgebietes für das Integral Gl. (19.46) ist somit gleich dem **doppelten** Volumen einer **Kugelkappe**, die durch die Ebene $z = 0$, z.B. von der unteren Kugel mit dem Mittelpunkt bei $(0, 0, -\frac{q}{2})$, jetzt „abgeschnitten“ wird:

$$\begin{aligned}
 J_{\mathbf{q}} &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2 \cdot \underbrace{\int_0^{k_F - \frac{q}{2}} dk_z \pi \cdot (k_x^2 + k_y^2)}_{\text{Volumen einer Kugelkappe}} \quad (19.48) \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F - \frac{q}{2}} dk_z \left[k_F^2 - \left(k_z + \frac{q}{2} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi k_F^3 \int_0^{1 - \frac{q}{2k_F}} dt \left[1 - \left(t + \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi k_F^3 \left[t - \frac{1}{3} \left(t + \frac{q}{2k_F} \right)^3 \right]_{t=0}^{t=1 - \frac{q}{2k_F}} \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi k_F^3 \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} \right) - \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 \right] \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi k_F^3 \left[\frac{2}{3} - \left(\frac{q}{2k_F} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 \right].
 \end{aligned}$$

Offensichtlich ist $J_{\mathbf{q}} = 0$ für $\frac{q}{2k_F} > 1$:

$$J_{\mathbf{q}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 \right] \cdot \Theta_H \left(1 - \frac{q}{2k_F} \right).$$

Wir berechnen nunmehr den Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen im Limes $\kappa \rightarrow 0$ zu

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} J_{\mathbf{q}} \\
 \simeq &\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} J_{\mathbf{q}} \\
 = &\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{2k_F} dq q^2 \frac{1}{\kappa^2 + q^2} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 \right] \\
 \stackrel{\kappa \rightarrow 0}{\simeq} &\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{4\pi}{3} k_F^3 \cdot 2k_F \int_0^1 d \left(\frac{q}{2k_F} \right) \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 \right] \\
 = &\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3\pi} k_F^4 \int_0^1 dx \left[1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \right] \\
 = &\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3\pi} k_F^4 \left[x - \frac{3}{4}x^2 + \frac{1}{8}x^4 \right]_{x=0}^{x=1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3\pi} k_F^4 \left(1 - \frac{3}{4} + \frac{1}{8}\right) \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2\pi} k_F^4.
 \end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F} &= -\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{N}{V} + \frac{3}{5} E_F N - \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{\kappa^2 + |\mathbf{q}|^2} J_{\mathbf{q}} \\
 &= \left(\frac{3}{5} E_F - \frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{1}{V} \right) N - \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2\pi} k_F^4.
 \end{aligned}$$

Wenn wir, wie verabredet, zuerst den Limes $V \rightarrow \infty$ und dann $\kappa \rightarrow 0$ vornehmen, ist der Term $\frac{|e|^2}{2\varepsilon_0} \frac{1}{\kappa^2} \frac{1}{V}$ gegenüber dem konstanten Energiebeitrag $\frac{3}{5} E_F$ vernachlässigbar. Wir erhalten demnach unter Beachtung von

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$

für die Energie pro Teilchen im Grundzustand des Elektronengases die Abschätzung:

$$\begin{aligned}
 \frac{E_G}{N} &\leq \frac{\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F}}{N} = \frac{3}{5} E_F - \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2\pi} \frac{k_F^3}{N} k_F \\
 &= \frac{3}{5} E_F - \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{3}{16\pi^2} k_F \\
 &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2\mu} - \frac{|e|^2}{\varepsilon_0} \frac{3}{16\pi^2} k_F.
 \end{aligned}$$

Mit den Größen

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{4\pi}{3} a_B^3 r_S^3 \cdot N \\
 a_B r_S &: \text{Teilchenabstand} \\
 a_B &: \text{Bohrscher Radius} \\
 r_S &: \text{dimensionsloses Maß für die Dichte des Elektronengases}
 \end{aligned}$$

folgt jetzt der Zusammenhang

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{1}{\frac{4\pi}{3} a_B^3 r_S^3} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a_B r_S}.$$

Nun ist (vgl. Kapitel 15) der Bohrsche Radius gegeben zu:

$$a_B = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{\mu |e|^2}.$$

Unser Variationsansatz für die N -Elektronen-Wellenfunktion Ψ_F liefert also für die Energie $\frac{E_G}{N}$ pro Teilchen im Grundzustand als Funktion des dimensionslosen Parameters r_S die folgende obere Schranke:

$$\begin{aligned} \frac{E_G[r_S]}{N} &\leq \lim_{\kappa \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\langle \hat{H} \rangle_{\Psi_F}}{N} = \frac{3 \hbar^2 k_F^2}{5 2\mu} - \frac{|e|^2}{\epsilon_0} \frac{3}{16\pi^2} k_F \\ &= \frac{3}{5} \left(\frac{a_B |e|^2}{2 4\pi\epsilon_0} \right) \left[\left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{a_B^2 r_S^2} \right] - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{4\pi} \left[\left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a_B r_S} \right] \\ &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_B} \left[\underbrace{\frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_S^2}}_{\simeq 2.21} - \underbrace{\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_S}}_{0.916} \right] \\ &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_B} \left[\frac{2.21}{r_S^2} - \frac{0.916}{r_S} \right]. \end{aligned}$$

Der erste Term ist die kinetische Energie der Elektronen. Sie dominiert für $r_S \rightarrow 0$. Der zweite, negative Term ist die sog. **Austauschenergie**. Das Minimum der oberen Schranke wird bei

$$(r_S)_{\min} = 4.83$$

angenommen. Bei so einer für Metalle typischen Dichte ist die Energie pro Teilchen negativ:

$$\frac{E_G[(r_S)_{\min}]}{N} \leq \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_B} \cdot (-0.095) \simeq -1.29 \text{ [eV]}.$$

Setzt man experimentelle Werte, z.B. für das Alkali-Metall Natrium (Na) ein, so folgt für den Dichteparameter r_S ein Wert von

$$(r_S)_{Na} = 3.98.$$

Für die Energie pro Teilchen, die aufzuwenden ist, um vom der festen Phase in die Dampf-Phase des Metalls Natrium überzugehen, wird experimentell ein Wert von

$$\left(\frac{E}{N} \right)_{Na} = -1.13 \text{ [eV]}$$

gemessen.

Fazit: das sehr einfache Jellium-Modell liefert eine überzeugende physikalische Erklärung für die beobachtete Größenordnung der Bindungsenergie von Metallen.

Eine bessere quantitative Übereinstimmung mit dem Experiment ist erst möglich, wenn die periodische Anordnung der Ionen im Gitter sowie die Eigenschwingungen der Ionen um ihre Gleichgewichtslage explizit berücksichtigt werden. Mehr zu den grundlegenden Problemen der Materialwissenschaften erfährt der interessierte Studierende in den Vorlesungen „Theorie der Kondensierten Materie“ und „Theorie korrelierter Vielteilchensysteme“.

19.5 Austauschwechselwirkung

Wir betrachten ein ladungsneutrales System bestehend aus zwei Atomen, genauer zwei (einfach) positiv geladene Ionenrümpfe und zwei Elektronen. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die Distanz $\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ zwischen beiden Atomkernen eine vorgegebene Konstante ist. Dann lautet der Hamilton-Operator H des Systems, wenn sich die zwei (negativ geladenen) Elektronen an den Plätzen \mathbf{r}_A und \mathbf{r}_B befinden:

$$\begin{aligned} H &= H_A + H_B + V_{AB} \\ H_A &= H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_A}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A|} \\ H_B &= H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_B}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B|} \\ V_{AB} &= V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \\ &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|} \right). \end{aligned}$$

Das Wechselwirkungspotential V_{AB} enthält insbesondere die Coulomb-Abstoßung zwischen beiden Elektronen! Da H_A bzw. H_B für sich genommen ein isoliertes Wasserstoff-Atom beschreiben, ist der Hamilton-Operator H ein Modell zur Beschreibung der elektronischen Bindungszustände eines Wasserstoff-Moleküls als Funktion des Abstands $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$.

Das Vorhaben, die Energie E_G des Grundzustands Ψ_G der beiden Elektronen als Funktion des Abstands $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ der Atomkerne exakt zu bestimmen, ist ein schwieriges Problem der Theoretischen Chemie und Molekülphysik. Dennoch kann die wesentliche Physik des Problems mittels eines einfachen Variationsansatzes verstanden werden. Dazu betrachtet man für eine gegebene Position \mathbf{R} des Atomkerns zunächst die elektronischen Eigenfunktionen

$$\phi_{\lambda,\sigma}(\mathbf{r}, \mu) = \phi_{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \chi_{\frac{1}{2},\sigma}(\mu)$$

des isolierten Atoms. Beim Wasserstoffatom repräsentiert λ die Quantenzahlen n, l, m mit $n \in \{1, 2, \dots\}$, $l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$, $m \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$, $\sigma \in$

$\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ ist die Spin-Quantenzahl, \mathbf{r} spezifiziert den Ort, an dem die Wahrscheinlichkeitsamplitude des Elektrons ausgewertet wird, μ spezifiziert die Komponente des Spin-Eigenzustands $\chi_{\frac{1}{2},\sigma}$ des Elektrons.

Für den **Bahnanteil** ϕ_λ der elektronischen Eigenfunktionen gilt demnach für $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B| \rightarrow \infty$, d.h. für weit entfernte, voneinander isolierte Atome:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) &= E_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \\ H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) \phi_\mu(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B) &= E_\mu \phi_\mu(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B). \end{aligned}$$

Zwar ist für beliebige Werte des Distanzparameters $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ jetzt

$$\begin{aligned} &[H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B)] \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \phi_\mu(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B) \\ &= (E_\lambda + E_\mu) \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \phi_\mu(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B), \end{aligned}$$

jedoch ist der von den Positionen \mathbf{R}_A und \mathbf{R}_B der Atomkerne **parametrisch** abhängende Operator $H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B)$ leider **nicht** invariant bzgl. der Vertauschungsoperation $(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rightarrow (\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ der Elektronen-Positionen:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) &= \begin{cases} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_A}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A|} \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_B}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B|} \end{cases} \\ H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_B) &= \begin{cases} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_B}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A|} \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_A}^2 - \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B|}. \end{cases} \end{aligned}$$

Wir sehen, dass gilt:

$$\begin{aligned} &[H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B)] - [H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_B)] \\ &= \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B|} \right] \\ &\equiv V(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) - V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B). \end{aligned}$$

Es folgt zugleich, dass der ursprüngliche Hamilton-Operator H invariant bzgl. der Vertauschungsoperation $(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rightarrow (\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ ist, wie es ja auch sein muss:

$$\begin{aligned} &H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) + V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \quad (19.49) \\ &= H \\ &= H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_B) + V(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B). \end{aligned}$$

Die symmetrisierte bzw. anti-symmetrisierte Zwei-Teilchen Bahn-Wellenfunktion

$$\phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \phi_\mu(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B) \pm \phi_\lambda(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A) \phi_\mu(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B)$$

ist aus den genannten Gründen zwar **kein** Eigenzustand von

$$H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B),$$

sie genügt aber dem Pauli-Prinzip! Heitler und London (1927) verwendeten deshalb so eine Wellenfunktion als **Variationsansatz** für die Zwei-Elektronen-Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B)$ des Wasserstoff-Moleküls. Da der Hamilton-Operator keine Spin-Bahn-Wechselwirkungsterme enthält, gibt es zwei Möglichkeiten:

1. die Spins der beiden Elektronen bilden einen Singulett-Zustand: $S = 0, S_z = 0$

$$\begin{aligned} \Psi_S &= \Psi_S(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \\ &= \begin{bmatrix} \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \phi_\lambda(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B) \\ + \phi_\lambda(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A) \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B) \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{\frac{1}{2}, \uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}, \downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2}, \downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}, \uparrow}^{(B)} \right). \end{aligned}$$

2. die Spins der beiden Elektronen koppeln zu einem Triplett-Zustand: $S = 1, S_z \in \{-1, 0, 1\}$

$$\begin{aligned} \Psi_T &= \Psi_T(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \\ &= \begin{bmatrix} \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_A) \phi_\lambda(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_B) \\ - \phi_\lambda(\mathbf{r}_B - \mathbf{R}_A) \phi_\lambda(\mathbf{r}_A - \mathbf{R}_B) \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{\frac{1}{2}, \uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}, \downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2}, \downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2}, \uparrow}^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Die diesem Ansatz für die Zwei-Elektronen-Wellenfunktion $\Psi_{S,T}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B)$ zugeordnete obere Schranke E_S bzw. E_T für die Energie E_G des Grundzustands des Moleküls ist dann gegeben zu

$$E_G \leq E_{S,T} = \frac{\langle \Psi_{S,T}, [H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) + V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B)] \Psi_{S,T} \rangle}{\langle \Psi_{S,T}, \Psi_{S,T} \rangle}.$$

Arbeiten wir mit auf Eins normierten atomaren Eigenfunktionen,

$$\begin{aligned} \phi_\lambda^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r}) &= \phi_\lambda(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \\ \int d^3r |\phi_\lambda^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r})|^2 &= 1 = \langle \phi_\lambda^{(\mathbf{R})}, \phi_\lambda^{(\mathbf{R})} \rangle \\ H(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \phi_\lambda^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r}) &= E_\lambda \phi_\lambda^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

und definieren wir das Überlapp-Integral zu

$$\Lambda_{A,B} = \langle \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}, \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)} \rangle, \quad (19.50)$$

so berechnen wir ohne Weiteres:

$$\begin{aligned} &\langle \Psi_S, \Psi_S \rangle \\ &= \int d^3r_A \int d^3r_B \left| \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_A) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_B) + \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_B) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_A) \right|^2 \\ &= 2 \left(1 + |\Lambda_{A,B}|^2 \right), \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi_T, \Psi_T \rangle \\
 &= \int d^3 r_A \int d^3 r_B \left| \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_A) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_B) - \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_B) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_A) \right|^2 \\
 &= 2 \left(1 - |\Lambda_{A,B}|^2 \right).
 \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Symmetrie Gl. (19.49) erhält man nach einigen elementaren Umstellungen das Ergebnis:

$$\begin{aligned}
 E_{S,T} &= \frac{\langle \Psi_{S,T}, [H(\mathbf{r}_A; \mathbf{R}_A) + H(\mathbf{r}_B; \mathbf{R}_B) + V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B)] \Psi_{S,T} \rangle}{\langle \Psi_{S,T}, \Psi_{S,T} \rangle} \\
 &= 2E_\lambda + \frac{J_{A,B}^{(C)} \pm J_{A,B}^{(X)}}{1 \pm |\Lambda_{A,B}|^2}.
 \end{aligned}$$

Hier bezeichnen $J_{A,B}^{(C)}$ und $J_{A,B}^{(X)}$ die sog. Zwei-Zentren-Integrale

$$J_{A,B}^{(C)} = \int d^3 r_A \int d^3 r_B \left| \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_A) \right|^2 V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \left| \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_B) \right|^2 \quad (19.51)$$

$$\begin{aligned}
 J_{A,B}^{(X)} &= \int d^3 r_A \int d^3 r_B \left[\phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_A) \right]^\dagger \left[\phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_B) \right]^\dagger \\
 &\quad \times V(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B; \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}(\mathbf{r}_B) \phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}(\mathbf{r}_A).
 \end{aligned} \quad (19.52)$$

Der Term $J_{A,B}^{(C)}$ entspricht dem klassischen Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung zur Energie. Dagegen beschreibt $J_{A,B}^{(X)}$ die **Austausch-Energie**. Die Existenz dieses Terms, der unanschaulich ist und der in der klassischen Elektrodynamik nicht vorkommt, ist eine unmittelbare Konsequenz des **Pauli-Prinzips**. Mit zunehmendem Abstand $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ wird $J_{A,B}^{(X)}$ aber rasch sehr klein im Vergleich zu $J_{A,B}^{(C)}$.

Für nicht zu kleine Werte des Distanzparameters $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ ist der Überlapp der beiden atomaren Wellenfunktionen $\phi_\lambda^{(\mathbf{R}_A)}$ und $\phi_\lambda^{(\mathbf{R}_B)}$ bereits klein, d.h. $|\Lambda_{A,B}|^2 \ll 1$. Dann folgt für die Singulett-Triplett-Aufspaltung

$$E_S - E_T \simeq 2J_{A,B}^{(X)}. \quad (19.53)$$

Für nicht zu großen Abstand $|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$ ist beim Wasserstoff-Atom, wenn zur Berechnung der Zwei-Zentren-Integrale mit atomaren Wellenfunktionen $\phi_{1s}^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r})$ gearbeitet wird, die Austausch-Energie positiv, $J_{A,B}^{(X)} > 0$. Dies bedeutet, dass beim Wasserstoff-Molekül der Grundzustand ein Spin-Singulett-Zustand ist.

Unsere Überlegungen sind nicht auf das Wasserstoff-Molekül beschränkt. Allgemein lässt sich die Wirkung des Hamilton-Operators H für zwei Elektronen, die sich im Coulomb-Feld zweier benachbarter (einfach positiv geladener und an

Gitterplätzen \mathbf{R}_A und \mathbf{R}_B fixierter) Ionen-Rümpfe bewegen, in einem durch Ψ_S und die drei Triplet-Zustände Ψ_T aufgespannten 4-dimensionalen Unterraum im Rahmen eines **Pseudo-Spin Modell** erfassen:

$$\hat{H} = a \cdot \hat{1} - b \cdot \sum_{j \in \{x,y,z\}} \sigma_j^{(A)} \otimes \sigma_j^{(B)}.$$

Die Parameter a und b des Modells sind dabei zu

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{4} (E_S + 3E_T) \\ b &= \frac{1}{4} (E_S - E_T) \end{aligned}$$

gegeben. Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \chi_{\frac{1}{2},\uparrow} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\frac{1}{2},\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Man rechnet leicht nach

$$\begin{aligned} &\sum_{j \in \{x,y,z\}} \sigma_j^{(A)} \otimes \sigma_j^{(B)} \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ &= -3 \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ &\sum_{j \in \{x,y,z\}} \sigma_j^{(A)} \otimes \sigma_j^{(B)} \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ &= \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Folglich ist

$$\begin{aligned} \hat{H} \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) &= (a + 3b) \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ &= E_S \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} - \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ \hat{H} \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) &= (a - b) \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right) \\ &= E_T \left(\chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(B)} + \chi_{\frac{1}{2},\downarrow}^{(A)} \otimes \chi_{\frac{1}{2},\uparrow}^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Für $b < 0$ ist der Singulett-Zustand bevorzugt, d.h. die Spins der Elektronen sind für $b < 0$ **anti-parallel** orientiert. Man spricht von einer **anti-ferromagnetischen** Ordnung. Für $b > 0$ ist der Triplet-Zustand bevorzugt. Die Spins der

Elektronen sind für $b > 0$ **parallel** orientiert (wir nehmen an, für die drei Zustände des Triplets $S = 1$, $S_z \in \{-1, 0, 1\}$ existiert eine energetische Bevorzugung des $S = 1$, $S_z = 1$ Zustands, z.B. infolge einer ganz schwachen Spin-Spin-Wechselwirkung). Man spricht dann von einer **ferromagnetischen** Ordnung.

Obwohl die Korrelationen davon abhängig sind, dass Elektronen einen Spin-Freiheitsgrad besitzen, rührt die **energetische Größenordnung** der gefundenen magnetischen Wechselwirkung überhaupt nicht vom magnetischen Moment des Elektrons her! Vielmehr ist es die **Austauschwechselwirkung** der Elektronen, repräsentiert durch das Zwei-Zentren-Integral $J_{A,B}^{(X)}$, die den fundamentalen Grund für den **Heisenberg-Ferromagnetismus** in der Festkörperphysik darstellt.