

Fakultät für Physik und Astronomie der Ruhr-Universität Bochum

Institut für Theoretische Physik Weltraum- und Astrophysik

Manuskript zur Vorlesung

Theoretische Physik III: Quantenmechanik

– basierend auf der Vorlesung in 2004/05 gehalten von R. Schlickeiser –

Bochum 2007

Vorlesung Theoretische Physik III (Quantenmechanik)

gehalten von R. Schlickeiser

Reinhard Schlickeiser Institut für Theoretische Physik Lehrstuhl IV: Weltraum- und Astrophysik

Grafiken von Christian Röken

23. Oktober 2007

Inhaltsverzeichnis

0	Einle	eitung		1
	0.1	Vorber	nerkung	1
1	Wel	lenmec	hanik	3
	1.1	Welle-	Teilchen Dualismus	3
	1.2	Teilche	eneigenschaften elektromagnetischer Wellen	3
		1.2.1	Photoelektrischer Effekt	3
		1.2.2	Compton-Effekt	6
	1.3	Wellen	aspekte der Materie	8
	1.4	Wellen	funktion	9
	1.5	Wellen	mechanik der Materie	10
		1.5.1	Korrespondenzmäßiger Übergang zu Differentialoperatoren im Orts-	
			raum, Freie Schrödinger-Gleichung	10
		1.5.2	Klein-Gordon-Gleichung für ein kräftefreies Teilchen	12
		1.5.3	Konstruktion eines freien Wellenpakets	13
		1.5.4	Ausbreitung eines freien Wellenpakets aufgrund der Schrödinger-Glei-	
			chung	17
	1.6	Statist	ische Interpretation der Wellenmechanik	22
2	Sch	rödinge	r-Gleichung	27
	2.1	Beweg	ungsgleichungen im Schrödinger-Bild	27
		2.1.1	Zwischenbemerkung: Operatoren	27
		2.1.2	Wellengleichung	27
		2.1.3	Allgemeines Verfahren für Systeme mit klassischer Korrespondenz	30
		2.1.4	Mehrdeutigkeiten bei der korrekten Herstellung des Hamilton-Operators	31
	2.2	Norme	rhaltung und Kontinuitätsgleichung	31
		2.2.1	Beispiel: Teilchen im eindimensionalen Potential	33
		2.2.2	Kontinuitätsgleichung	33
	2.3	Erwart	ungswerte	34
		2.3.1	Ortsdarstellung	34
		2.3.2	Impulsdarstellung	36
		2.3.3	Symmetrisierung	38
	2.4	Rechne	en mit Operatoren	39
		2.4.1	Rechenregeln für Kommutatoren	40
		2.4.2	Der Bahndrehimpuls-Operator	41
	~ -		antankan Cata	19

	2.6	Heisenbergsche Unschärferelation
		2.6.1 Beispiel 1: Wellenpaket
		2.6.2 Beispiel 2: Beugung am Spalt
		2.6.3 Konsequenz der Unschärferelation für Atome
	2.7	Wellenmechanik als formale klassische Feldtheorie (Ausbau der allgemeinen
		Theorie)
		2.7.1 Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder
		2.7.2 Lagrange-Dichte und Hamilton-Dichte
		2.7.3 Lagrange-Formalismus
		2.7.4 Hamilton-Dichte 52
	2.8	Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung 52
	2.0	2 8 1 Separationsansatz 52
		2.8.2 Vorteile von senarablen Lösungen 54
	29	Erweiterung auf Mehrteilchensysteme
	2.5	
3	Eind	limensionale Quantensysteme 57
	3.1	Eindimensionale Schrödinger-Gleichung
	3.2	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden
		3.2.1 Lösungseigenschaften
	3.3	Der harmonische Oszillator
		3.3.1 Algebraische Methode
		3.3.2 Analytische Methode
		3.3.3 Hermitesche Polynome
		3.3.4 Die Nullpunktsenergie
	3.4	Freie Teilchen
	3.5	Potentialstufe
		3.5.1 Fall 1: Teilchenenergie oberhalb Potentialstufe $E > V_0$
		3.5.2 Fall 2: Teilchenenergie unterhalb Potentialstufe $E < V_0$ 84
		3.5.3 Unendlich hohe Potentialstufe $V_0 \rightarrow \infty$
		354 Wellennakete 85
	36	Differentialgleichungen mit regulären Singularitäten 86
	0.0	3.6.1 Allgemeine Betrachtungen 87
		3.6.2 Die konfluente hypergeometrische Differentialgleichung 91
	37	Differentialgleichungen der Euchsschen Klasse
	0.1	3.7.1 Beispiel 1: Besselfunktion 97
		3.7.2 Beispiel 2: Hypergeometrische Differentialgleichung 98
		3.7.3 Nebenbemerkung: Zusammenbang zwischen der hypergeometrischen
		und der konfluenten hypergeometrischen Differentialgleichung 98
		3.7.4 Euchssche Differentialgleichungen
4	Näh	erungsverfahren Schrödinger-Gleichung 107
	4.1	Lineare homogene Differentialgleichung 2. Ordnung
		4.1.1 Normalform
		4.1.2 Selbst-adjungierte Form

		4.1.3	Beispiel: konfluente hypergeometrische Differentialgleichung	. 109
		4.1.4	Riccati-Gleichung	. 110
	4.2	WKB-	Näherung (Methode von Liouville-Green)	. 111
		4.2.1	Methode	. 111
		4.2.2	Anwendung auf die stationäre Schrödinger-Gleichung	. 112
		4.2.3	Anwendung: Linearer harmonischer Oszillator (III)	. 122
		4.2.4	Rezept zur approximativen Lösung linearer homogener Differential-	
			gleichungen 2. Ordnung	. 123
		4.2.5	Rezept zur approximativen Lösung selbstadjungierter linearer Diffe-	
			rentialgleichungen 2. Ordnung	. 123
	4.3	Anwen	dung: α -Zerfall, Tunneleffekt	. 125
		4.3.1	Tunneleffekt	. 125
		4.3.2	Anwendung auf den α -Zerfall	. 128
	4.4	Rayleig	gh-Ritz Variationsmethode	. 131
		4.4.1	Theorie	. 131
		4.4.2	Beispiel: Grundzustand des linearen harmonischen Oszillators (IV)	. 132
		4.4.3	Bezug zur Variationsrechnung	. 134
5	Alle	emeine	Formulierung der Quantenmechanik	135
Ŭ	5.1	Zustär	nde und Observable im Hilbert-Raum	. 135
	0.1	5.1.1	Ket-Vektor	. 135
		5.1.2	Dualer Vektorraum. Bra-Vektor	. 136
		5.1.3	Observablen	. 138
		5.1.4	Basis	. 141
	5.2	Darste	Ilung von Vektoren	. 143
	5.3	Darste	Ilung von Operatoren	. 144
	5.4	Eigenv	vertgleichung in Matrixform	. 146
		5.4.1	Säkulargleichung	. 146
		5.4.2	Entartete Eigenwerte, Schmidtsches Orthonormierungsverfahren	. 147
	5.5	Wechs	el der Darstellung, unitäre Transformationen	. 148
	5.6	Messp	rozess	. 151
		5.6.1	Axiome der Quantenmechanik	. 151
		5.6.2	Gleichzeitige Messbarkeit	. 152
6	0.1.2	ntondy	namik	155
U	Qua 6 1	Schröc	linger-Bild	155
	6.2	Heisen	herg-Bild	156
	6.3	Anmer	kungen zum Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild	. 158
	6.4	Wechs	elwirkungs-Bild	160
	6.5	Heisen	bergsche Operatormechanik	. 161
		6.5.1	Quantenmechanische Beschreibung physikalischer Systeme im Hei-	
			senberg-Bild	. 162
		6.5.2	Beispiel: Linearer harmonischer Oszillator (V=I)	. 162
	6.6	Allgem	neine Unschärferelation	. 164
		-		

		6.6.1	Schwartzsche Ungleichung für das Skalarprodukt
		6.6.2	Ableitung der allgemeinen Unschärferelation
		6.6.3	Beispiele
7	Drei	dimens	ionale Quantensysteme 169
	7.1	Schröd	linger-Gleichung in Kugelkoordinaten
	7.2	Drehin	npuls-Operator
		7.2.1	Bestimmung der Eigenwerte
		7.2.2	Weiterer Beweis der Eigenwerteigenschaften
		7.2.3	Eigenfunktionen des Drehimpuls-Operators in Ortsdarstellung 176
	7.3	Legend	dre-Polynome
		7.3.1	Eigenschaften der Legendre-Polynome
		7.3.2	Assoziierte Legendre-Polynome
	7.4	Zentra	lfelder
	7.5	Coulor	nb-Problem
		7.5.1	Lösung mit Kummer-Funktion
		7.5.2	Mitbewegung des Atomkerns
		7.5.3	Das Spektrum des Wasserstoffatoms
		7.5.4	Kontinuumszustände $E > 0$ im Coulomb-Feld $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 196$
	7.6	Darste	llung des Spins
		7.6.1	Spin $s = \frac{1}{2}$
		7.6.2	Gedanken experiment zu den Konzepten der Quantenmechanik $\ .\ .\ .\ 200$
		7.6.3	Magnetisches Moment
		7.6.4	Heuristische Herleitung der Spin-Bahn-Kopplung
	7.7	Identis	che Teilchen, Pauli-Prinzip
	7.8	Period	isches System \ldots \ldots \ldots 205
		7.8.1	Helium $(Z = 2)$
		7.8.2	Metalle $(Z > 2)$
8	Stör	ungsth	eorie 209
	8.1	Zeitun	abhängige Störungstheorie
		8.1.1	Nicht-entarteter Eigenwert
		8.1.2	Entarteter Eigenwert
	8.2	Anwen	dung: Feinstruktur von Wasserstoff \ldots
		8.2.1	Relativistische Korrektur des Hamilton-Operators $\ldots \ldots \ldots \ldots 215$
		8.2.2	Spin-Bahn-Kopplung
		8.2.3	Feinstrukturformel
	8.3	Anwen	dung: Stark-Effekt
		8.3.1	Nicht-entarteter Grundzustand $ n, l, m\rangle = 1, 0, 0\rangle$
		8.3.2	Entarteter Zustand $n = 2$
	8.4	Anwen	dung: Zeeman-Effekt
		8.4.1	Zeeman-Störoperator
		8.4.2	Ohne Spin-Berücksichtigung
		8.4.3	Begründung: Vernachlässigung des Operators \hat{H}'

		8.4.4	Mit Spin-Berücksichtigung	230
		8.4.5	Paschen-Back-Effekt	231
		8.4.6	Schwacher Zeeman-Effekt	231
	8.5	Zeitabh	nängige Störungstheorie	233
		8.5.1	Übergänge 1. Ordnung	234
		8.5.2	Mathematische Zwischenbetrachtung	235
		8.5.3	Goldene Regel	237
		8.5.4	Periodische Störung	238
0	c			0.4.1
9	Sem	IKIassis	che Theorie der Strahlung	241
	9.1	Grundg	leichungen	241
	9.2	Absorp	tion und induzierte Emission	243
		9.2.1	Monochromatische externe Felder	243
		9.2.2		245
		9.2.3	Induzierte Emission	246
		9.2.4	Nicht-monochromatische externe Felder	247
	9.3	Elektris	che Dipol-Approximation	251
	9.4	Sponta	ne Emission	253
		9.4.1	Lebensdauer angeregter Zustände	254
		9.4.2	Linienverbreiterung	255
	9.5	Auswah	ılregeln	255
		9.5.1	Wasserstoffähnliche Atome	255
		9.5.2	Lebensdauer des $2p$ -Zustands	259
		9.5.3	Laporte's Auswahlregel	261
		9.5.4	Viel-Elektronen Systeme	262
		9.5.5	Absolute Übergangsraten und Oszillatorstärke	262
	9.6	Photoe	lektrischer Effekt	262
10	Stre	utheorie		269
	10.1	Klassis	- che Streutheorie	269
	10.2	Quante	nmechanische Streutheorie	272
	10.3	Partial	vellenmethode	273
	10.0	10 3 1	Zerlegung nach Partialwellen	273
		10.3.2	Exkurs über Besselfunktionen	275
		10.3.2	Radiallösung	279
		10.3.4	Reisniel: Streuung an harter Kugel	215
		10.3.5	Streunbasendarstellung Ontisches Theorem	201
		10.3.5	Zurück zur Streuung an harter Kugel	284
		10.3.0	Integraldaretellung für Streunbasen	204
		10.3.7	Anwondung: Strowing langsamer Toilchon am Potentialtonf	201
		10.3.0	Reconnectrousing langeamer Teilchen am tiefen breiten Detentialtenf	290 202
		10.3.9	Broit Wigner Formel für Reconanzetreuung	290 205
	10 /	LU.J.LU	Diele wigher i onner für Nesonanzstreuung	290 206
	10.4		Integralform der Schrödinger Cleichung	290 207
		10.4.1		291

		10.4.2 Bestimmung der Green's-Funktion	298
		10.4.3 Bornsche Darstellung der Streuamplitude	302
		10.4.4 Erste Bornsche Näherung	303
		10.4.5 Beispiel: Abgeschirmtes Coulombpotential=Yukawa-Potential	305
		10.4.6 Bornsche Reihe	306
		10.4.7 Gültigkeitsbereich der Bornschen Näherung	307
11	Forn	nale Streutheorie	309
	11.1	Lippmann-Schwinger-Gleichung	309
	11.2	Alternativer Zugang zur Lippmann-Schwinger-Gleichung	313
	11.3	Die Streumatrix im zeitabhängigen Formalismus	317
	11.4	Møllersche Operatoren	321
	11.5	Die Transfermatrix	321
	11.6	Goldene Regel, Optisches Theorem	322
	11.7	Streutheorie bei Anwesenheit zweier Arten von Wechselwirkungen	325
		11.7.1 Verzerrte Wellen-Näherung	328
12	Rela	tivistische Quantenmechanik	331
	12.1	Die Lorentz-Transformation	331
	12.2	Minkowski-Raum	332
		12.2.1 Vierer-Skalare, Vierer-Vektoren und Vierer-Tensoren	334
		12.2.2 Freies Teilchen	335
	12.3	Die Dirac-Gleichung	337
	12.4	Lösungen der freien Dirac-Gleichung	340
		12.4.1 Ortunabhängige Lösungen	340
		12.4.2 Ebene Wellen-Lösungen	341
		12.4.3 Spinor-Normalisierung	344
		12.4.4 Positron-Spinor	345
	12.5	Alternative Form der Dirac-Gleichung	346
		12.5.1 Erhaltungsgrößen für das freie Fermiteilchen	347
		12.5.2 Kontinuitätsgleichung und Zitterbewegung	349
	12.6	Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld	1351
	12.7	Feinstruktur als Konsequenz der Dirac-Gleichung	355
	12.8	Exakte Lösung der Dirac-Gleichung für das Elektron im Coulomb-Feld	358
		12.8.1 Energiequantelung	366
		12.8.2 Figenfunktionen	371
	12.0	Die Foldy-Wouthuysen-Transformation für stationäre Zustände	377
	12.9	12.0.1 Problemstellung	377
		12.9.1 Problemstending	370
			513
Α	Anh	ang	387
	A.1	Empfohlene Literatur	387
		A.1.1 Bücher zur Quantenmechanik:	387
		A.1.2 Bücher für mathematische Formeln ("Grundausstattung"):	387
			501

A.1.3	Bücher für	mathematische	Physik	("Grundausstattung")): .						387
-------	------------	---------------	--------	----------------------	------	--	--	--	--	--	-----

Inhaltsverzeichnis

0 Einleitung

0.1 Vorbemerkung

Dieses Vorlesungsskript basiert auf Vorlesungen, die ich jeweils im Wintersemester 1999/00 und 2004/05 sowie im Sommersemester 2000 und 2005 an der Ruhr-Universität Bochum für Studierende des Diplomstudiengangs Physik im 5. und 6. Semester gehalten habe. Besonders danken möchte ich

- Herrn Dipl.-Phys. Christian Röken, der die grafischen Illustrationen zum Skript beigetragen hat,
- Frau Angelika Schmitz für ihren unermüdlichen Einsatz beim Korrigieren und Erstellen des Skripts in PDF-LATEX,
- Herrn Dipl.-Phys. Christian Röken, Herrn cand.-phys. Stephan Meißner sowie Herrn cand.-phys. Marc Reuting für den Hinweis auf viele Fehler in der Online-Version.

Ich hoffe, dass dieses Skript vielen Studierenden beim Erlernen der Quantenmechanik hilft.

Reinhard Schlickeiser

Bochum, im Oktober 2007

0 Einleitung

1.1 Welle-Teilchen Dualismus

Die theoretische Physik am Anfang des 20. Jahrhunderts bestand aus

- der klassischen Mechanik, die 1905 um die spezielle Relativitätstheorie erweitert wurde,
- der Elektrodynamik.

Die klassische Mechanik beschreibt die Dynamik von Massenpunkten auf der Grundlage der Newtonschen Axiome. Der Zustand eines klassischen Teilchens wird charakterisiert durch Angabe seines Orts $\vec{x}(t)$ und seines Impulses $\vec{p}(t)$ als Funktionen der Zeit t. Unsere Alltagserfahrung auf nichtatomaren Längenskalen zeigt uns, dass beide Größen gleichzeitig beliebig genau messbar sind. Die von Maxwell formulierte *Elektrodynamik* ist die Theorie der elektrischen und magnetischen Felder im Vakuum und bei Kenntnis der Materialkonstanten auch in Materie. Im Gegensatz zu klassischen Teilchen sind *elektromagnetische Wellen*, beschrieben durch elektrische $(\vec{E}(\vec{x},t))$ und magnetische $(\vec{B}(\vec{x},t))$ Felder bzw. durch die Potentiale $\vec{A}(\vec{x},t)$ und $\Phi(\vec{x},t)$, räumlich ausgedehnt, wie z.B. ebene Wellen $\propto \exp[\imath(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)]$ oder Kugelwellen $\propto r^{-1} \exp[\imath(kr - \omega t)]$. Energie und Impuls sind entsprechend der Energie- und Impulsdichte der Wellen auf ein räumlich ausgedehntes Gebiet verteilt. Grundlegende Experimente zur Teilchen- und Wellendynamik (siehe Tabelle 1.1) im atomaren Bereich haben zweierlei gezeigt:

- (1) die Unmöglichkeit der Trennung von Teilchen- und Wellenbild im mikroskopischen Bereich,
- (2) das Auftreten von diskreten Zuständen im atomaren Bereich.

Atomare Teilchen zeigen auch Welleneigenschaften wie etwa Interferenz und Beugung; Wellen zeigen auch Teilcheneigenschaften. Man spricht von **Welle-Teilchen Dualismus**. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik (Newton) und der Elektrodynamik (Maxwell) wurde die Quantenmechanik nicht von einem Forscher allein erschaffen. Ihre Grundgleichungen können plausibel gemacht werden, aber nicht streng hergeleitet werden. An ihrer Richtigkeit besteht kein Zweifel, da sie sich in allen Experimenten ausgezeichnet bewährt hat.

1.2 Teilcheneigenschaften elektromagnetischer Wellen

1.2.1 Photoelektrischer Effekt

(Hertz, Lenard) Der Photoeffekt besteht darin, dass durch Licht Elektronen aus einer Metalloberfläche herausgelöst werden. Die Energie der herausgelösten Elektronen ist durch die

Ausbreitung von	Strahlung	Materie		
	(z.B. elektromagnetische	(z.B. Elektronen)		
	Strahlung)			
Wellen	klassisch: Wellenlänge λ	quantenmechanisch: $\lambda = h/p$		
(ausgebreitete	(Elektrodynamik,	(de Broglie 1924,		
Erscheinung)	Optik)	Davisson und Germer 1928)		
Teilchen	quantenmechanisch: $p = h/\lambda$,	klassisch: Impuls p		
(lokale Erscheinung)	$\epsilon = h\nu$	(klassische Mechanik)		
	(Planck 1899,			
	Einstein 1905, Compton 1924)			

Tabelle 1.1: Welle-Teilchen-Dualismus

Frequenz des eingestrahlten Lichts bestimmt. Strahlt man Licht der Frequenz ω (im ultravioletten Bereich) auf eine Metallfolie oder -oberfläche (Abb. 1.1), so beobachtet man die Emission von Elektronen:

- a Monochromatisches Licht führt zu Elektronen einer bestimmten kinetischen Energie.
- b Die Erhöhung der Lichtintensität führt zu mehr Elektronen, ändert aber nichts an ihrer Energie.
- c Führen wir das Experiment mit monochromatischem Licht verschiedener Frequenzen durch, so ergibt sich der in Abb. 1.2 gezeigte lineare Zusammenhang oberhalb der Frequenz ω_A

$$E \propto (\omega - \omega_A)$$
 . (1.1)

Als Proportionalitätsfaktor ergibt sich aus der Steigung der Geraden das Plancksche Wirkungsquantum $h = 2\pi\hbar = 6.6 \cdot 10^{-34}$ Ws⁻², d.h.

$$E = \hbar(\omega - \omega_A) = h(\nu - \nu_A)$$

$$\frac{m}{2}v^2 = h\nu - W$$
(1.2)

oder

mit $W = h\nu_A$. Der experimentell gefundene Zusammenhang (1.2) zwischen v und ν ist klassisch nicht zu verstehen, da gemäß der Elektrodynamik die Energie des Lichts (der Energiestrom ist durch den Poynting-Vektor $\vec{S} = c\vec{E} \times \vec{B}/4\pi$ gegeben) nur von der Amplitude, nicht aber von der Frequenz der Welle abhängt. Klassisch würde man weiterhin erwarten, dass erst nach gewisser Zeit genügend Energie übertragen worden ist, um die Elektronenemission zu bewirken. Tatsächlich beobachtet man ein sofortiges Einsetzen der Elektronenemission.



Abbildung 1.1: Zum photoelektrischen Effekt

Auch sollte es keine untere Frequenz des Lichts ν_A für das Auftreten des Photoeffekts geben. **Erklärung nach Einstein (1905)**: Gleichung (1.2) beschreibt die Energieerhaltung, wenn man das Licht als einen Strom von Teilchen ("Photonen") auffasst und jedem Photon die Energie

$$\epsilon = h\nu = \hbar\omega \tag{1.3}$$

zuschreibt! Gleichung (1.2) besagt dann, dass die Photonenenergie dazu verwandt wird, ein Elektron unter Aufwendung der "Auslösearbeit" W aus der Oberfläche herauszuschlagen, und ihm eine kinetische Energie $E = mv^2/2$ zu geben. Wird die Intensität des Lichtstrahls erhöht, so erhöht sich die Anzahl der Photonen, die dann entsprechend mehr Elektronen aus dem Metall herausschlagen können. Die Lichtquanten sind Teilchen, deren Energie und Impuls den Erhaltungssätzen der klassischen Mechanik gehorchen.

Dies ist weitergehend als Planck, der bei der Begründung des Strahlungsgesetzes postulierte, dass die Lichtenergie in Portionen von der Größe $\hbar\omega$ bei der Emission und Absorption durch die Atome eines heißen Körpers auftritt.

Zusammen mit den Ergebnissen der Elektrodynamik gelangen wir zur Hypothese: Licht besteht aus Photonen der Energie $E = \epsilon = \hbar \omega$, der Geschwindigkeit c und breitet sich parallel zum elektromagnetischen Wellenvektor \vec{k} aus. Aus der speziellen Relativitätstheorie wissen wir, dass für beliebige Teilchen gilt

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \tag{1.4}$$

$$\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}c^2}{\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}} \,. \tag{1.5}$$

Wegen $|\vec{v}| = c$ folgt für Photonen m = 0 und damit E = pc. Der Vergleich mit $E = \hbar\omega = \hbar ck$ (Dispersionsrelation elektromagnetischer Wellen $|\omega| = ck$) ergibt $p = \hbar k$. Weil \vec{p} und \vec{k} parallel sind, gilt also

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} . \tag{1.6}$$

und



Abbildung 1.2: Energie der Photoelektronen in Abhänigkeit von der Frequenz des einfallenden Lichtes

Damit folgt für den Vierer-Impulsvektor des Photons

$$p^{\mu} = \begin{pmatrix} E/c\\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \omega/c\\ \vec{k} \end{pmatrix}$$
(1.7)

und für Gleichung (1.4) für Photonen

$$E = pc = h\nu . (1.8)$$

1.2.2 Compton-Effekt

Der Compton-Effekt liefert eine weitere Bestätigung des Teilchencharakters des Lichts. Compton (1923) hat bei der Streuung von Röntgenstrahlung an freien oder schwach gebundenen Elektronen (siehe Abb. 1.3) eine Frequenzverschiebung festgestellt. Die Wellenlänge des gestreuten Photons ist größer als die der einfallenden Strahlung: die Differenz $\Delta\lambda$ ist eine Funktion des Winkels Θ zwischen der Richtung der einfallenden und der gestreuten Strahlung,

$$\Delta \lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc^2} \sin^2 \Theta/2 , \qquad (1.9)$$

und ist insbesondere unabhängig von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Compton und Debye haben dieses Ergebnis auf der Basis der Photonenvorstellung erklärt. Beim elastischen Stoß zwischen Photon und Elektron bleibt der Gesamt-Vierer-Impuls erhalten, d.h.



Abbildung 1.3: Zum Comptoneffekt

Energie- und Impulserhaltung (Notation gemäß Abb. 1.3):

Impulserhaltung:
$$\vec{p}_{0\gamma} + \vec{p}_{0e} = \vec{p}_{\gamma} + \vec{p}_{e}$$

Energieerhaltung: $\epsilon_{0\gamma} + E_{0e} = \epsilon_{\gamma} + E_{e}$. (1.10)

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir an, dass das Elektron anfänglich ruht (d.h. $\vec{p}_{0e} = \vec{0}$ und $E_{0e} = m_e c^2$), so dass

$$\vec{p}_e = \vec{p}_{0\gamma} - \vec{p}_{\gamma}$$

oder quadriert

$$p_e^2 = p_{0\gamma}^2 + p_{\gamma}^2 - 2\vec{p}_{0\gamma} \cdot \vec{p}_{\gamma} = p_{0\gamma}^2 + p_{\gamma}^2 - 2p_{0\gamma}p_{\gamma}\cos\Theta .$$

Mit der Photonenbeziehung (1.8) gilt also

$$p_e^2 = \frac{h^2 \nu_0^2}{c^2} + \frac{h^2 \nu^2}{c^2} - 2\frac{h^2 \nu \nu_0}{c^2} \cos\Theta .$$
 (1.11)

Für die Energieerhaltungsgleichung (1.10) ergibt sich über die Photonenbeziehung (1.8) und Gleichung (1.4) für das Elektron

$$h\nu_0 + m_e c^2 = h\nu + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4}$$

 $\sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} = m_e c^2 + h(\nu_0 - \nu)$

oder

,	_	

und nach quadrieren

$$p_e^2 c^2 = 2h(\nu_0 - \nu)m_e c^2 + h^2(\nu - \nu_0)^2 ,$$

$$p_e^2 = 2h(\nu_0 - \nu)m_e + \frac{h^2}{c^2}(\nu - \nu_0)^2 . \qquad (1.12)$$

so dass

Das Gleichsetzen der Gleichungen (1.11) und (1.12) ergibt

$$\frac{h^2\nu_0^2}{c^2} + \frac{h^2\nu^2}{c^2} - 2\frac{h^2\nu\nu_0}{c^2}\cos\Theta = 2h(\nu_0 - \nu)m_e + \frac{h^2}{c^2}(\nu^2 + \nu_0^2 - 2\nu\nu_0),$$

so dass

$$h(\nu_0 - \nu)m_e = \frac{h^2}{c^2}\nu\nu_0 \left[1 - \cos\Theta\right] = \frac{2h^2}{c^2}\nu\nu_0 \sin^2\frac{\Theta}{2}$$

oder

$$\frac{1}{\nu}-\frac{1}{\nu_0}=\frac{2h}{m_ec^2}\sin^2\frac{\Theta}{2}\;.$$

Für die Wellenlängenänderung folgt

$$\Delta \lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = \frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu_0} = \frac{2h}{m_e c} \sin^2 \frac{\Theta}{2} = \frac{4\pi\hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\Theta}{2}$$
(1.13)

das Beobachtungsergebnis.

Die klassische Elektrodynamik lässt bei der Streuung elektromagnetischer Wellen keine Frequenzänderung zu, kann also den Compton-Effekt nicht erklären. Erst die Vorstellung von Lichtquanten mit Impuls $\hbar \vec{k}$ und Energie $\hbar \omega$ macht dies möglich. Der Compton-Effekt ist ein weiterer Beweis für das Konzept der Photonen und für die Gültigkeit von Impuls- und Energieerhaltungssatz bei der Wechselwirkung von Licht und Materie.

Die geschilderten Befunde enthüllen deutlich den Teilchencharakter von Licht. Andererseits ist durch Interferenz- und Beugungserscheinungen gesichert, dass Licht auch Welleneigenschaften besitzt.

1.3 Wellenaspekte der Materie

De Broglie (1923) versuchte, eine einheitliche Theorie für Materie und Strahlung zu schaffen, geleitet vom Ansatz: was für Photonen recht ist, sollte auch für alle Teilchen gelten. Teilchen sollten neben Korpuskeleigenschaften auch Welleneigenschaften zeigen.

Ein Teilchen der Masse m, das sich im feldfreien Raum mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegt, hat nach der **Korpuskelvorstellung** eine Energie E und den Impuls \vec{p} , und im **Wellenbild** eine Frequenz ν und den Wellenzahlvektor \vec{k} . Wenn es sich um zwei Aspekte desselben Objekts handelt, so muss gelten

$$E = h\nu = \hbar\omega$$
 und $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{\hbar\vec{k}}{\lambda\vec{k}}$. (1.14)

Diese Beziehungen sind richtig für das Photon und werden von de Broglie für alle Teilchen als allgemein gültig postuliert! D.h. materielle Teilchen besitzen die Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \,. \tag{1.15}$$

Für nichtrelativistische Elektronen gilt dann mit $E \simeq p^2/(2m_e)$

$$\lambda_e = 1.23 \cdot 10^{-7} \left[\frac{\text{eV}}{E}\right]^{1/2} \text{ cm} .$$
 (1.16)

Diese kühne Annahme wurde erst 1927 experimentell von Davisson und Germer durch Interferenz bei der Beugung eines Elektronenstrahls am Kristallgitter bewiesen.

1.4 Wellenfunktion

Sowohl Photonen als auch Teilchen unterliegen dem Welle-Teilchen Dualismus. Für Photonen, deren Ruhemasse gleich Null ist, gelten die Maxwellgleichungen. Die Analogie für Photonen und Teilchen legt es nahe, von den Maxwell-Gleichungen auszugehen, und diese in geigneter Weise auf Teilchen mit endlicher Ruhemasse zu verallgemeinern.

Die Maxwellgleichungen in Vakuum führen auf die Wellengleichung (Übungsaufgabe)

$$\Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = 0,$$

Laplace-Operator $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ (1.17)

für das skalare elektromagnetische Potential $\Phi(\vec{r},t)$. Die allgemeine Lösung der Wellengleichung ist das Wellenpaket

$$\Phi(\vec{r},t) = \int d^3k \ A(\vec{k}) \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)\right]$$
$$= \int d^3k \ A(\vec{k}) \exp\left[i\left(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t\right)\right], \qquad (1.18)$$

das die Überlagerung von *ebenen Wellen* $\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)]$ mit der Amplitudenfunktion $A(\vec{k})$ darstellt.

Das Einsetzen von Lösung (1.18) in die Wellengleichung (1.17) zeigt, dass die Amplitudenfunktion $A(\vec{k})$ beliebig ist, dass aber die *Dispersionsrelation*

$$\omega^2 = k^2 c^2 \tag{1.19}$$

gelten muss. Dies beruht auf den Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial x_n} e^{ik_n x_n} = ik_n e^{ik_n x_n} ,$$
$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-i\omega t} = -i\omega e^{-i\omega t} ,$$

also den Entsprechungen

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \stackrel{\circ}{=} \imath k_n , \qquad (1.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \quad \stackrel{\circ}{=} \quad -\imath\omega \tag{1.21}$$

von partiellen Operatoren im Orts-Zeit-Raum (\vec{r}, t) zu Faktoren nach entsprechender Fouriertransformation.

Benutzt man $E = \hbar \omega$ und $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, so erhält man für die Dispersionsrelation (1.19)

$$\frac{E^2}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} c^2$$
$$E^2 = p^2 c^2 .$$
(1.22)

oder

Umgekehrt, mit

$$p_n \stackrel{\circ}{=} -\imath \hbar \frac{\partial}{\partial x_n} , \qquad (1.23)$$

$$E \stackrel{\circ}{=} \imath \hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{1.24}$$

gelangt man von der Dispersionsrelation (1.22) im Fourier-transformierten Raum zum Differentialoperator (1.17) und damit zur Wellengleichung im Orts-Zeit-Raum.

1.5 Wellenmechanik der Materie

1.5.1 Korrespondenzmäßiger Übergang zu Differentialoperatoren im Ortsraum, Freie Schrödinger-Gleichung

Die Experimente der Elektronenbeugung an Kristallen von Davisson und Germer (1927) und die Experimente von Stern (1932) mit He-Atomen und Wasserstoffmolekülen zeigten die Welleneigenschaft von Materie und verifizierten die de Broglie-Beziehungen

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$
, $\left| \vec{k} \right| = 2\pi/\lambda$, und $E = \hbar \omega$. (1.25)

Deshalb beschreiben wir die Materiewelle durch ein Wellenpaket, d.i. die Superposition von ebenen monochromatischen Wellen:

$$\Psi(\vec{r},t) = \int d^3k \ f(\vec{k}) \ \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)\right]$$
$$= \int d^3p \ F(\vec{p}) \ \exp\left[i\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right], \qquad (1.26)$$

wobei wir die de Broglie-Beziehungen (1.25) ausgenutzt haben.

Dabei besteht ein Zusammenhang zwischen der Frequenz $\omega = E/\hbar$ und dem Wellenzahlvektor $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ nach der klassischen nichtrelativistischen Mechanik für die Energie eines freien Teilchens

$$E = \frac{p^2}{2m} . \tag{1.27}$$

Differenzieren wir Gleichung (1.26) partiell nach der Zeit:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right) = -\int d^{3}p \ F\left(\vec{p}\right) \ \frac{\imath E}{\hbar} \ \exp\left[\imath\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] ,$$
$$\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right) = \int d^{3}p \ F\left(\vec{p}\right) \ E \ \exp\left[\imath\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] . \tag{1.28}$$

oder

Ebenso erhalten wir für den Gradienten von Gleichung (1.26)

$$\frac{\hbar}{\imath} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi\left(\vec{r},t\right) = \int d^3p \ F\left(\vec{p}\right) \ \vec{p} \exp\left[\imath \left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right]$$

und damit für die Divergenz

$$\frac{\hbar}{\imath} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot \left[\frac{\hbar}{\imath} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi\left(\vec{r},t\right) \right] = -\hbar^2 \Delta \Psi\left(\vec{r},t\right) \\ = \int d^3 p \ F\left(\vec{p}\right) \ p^2 \exp\left[\imath \left(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et\right)/\hbar\right] , \qquad (1.29)$$

wobei wir Konvergenzfragen (Vertauschen von partiellen Ableitungen und Integral usw.) übergehen.

Wir teilen Gleichung (1.29) durch 2m und subtrahieren das Ergebnis von Gleichung (1.28). Mit Beziehung (1.27) erhalten wir dann

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right) + \frac{\hbar^{2}}{2m}\Delta\Psi\left(\vec{r},t\right) = \int d^{3}p \ F\left(\vec{p}\right) \ \left[E - \frac{p^{2}}{2m}\right] \exp\left[i\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] = 0$$

oder

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi\left(\vec{r},t\right) \ . \tag{1.30}$$

Gleichung (1.30) wird als nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung für das freie Teilchen bezeichnet. Die Schrödinger-Gleichung (1.30) ist eine lineare Gleichung für die Wellenfunktion Ψ , so dass die Superpositionseigenschaft gilt. Sind Ψ_1 und Ψ_2 Lösungen, so ist es auch jede lineare Kombination $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ mit beliebigen Konstanten c_1 und c_2 . Desweiteren ist die Schrödinger-Gleichung eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit: d.h. ist $\Psi(t=0)$ zu einer Anfangszeit t = 0 eindeutig bekannt, so erhält man aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung die spätere zeitliche Entwicklung.

Weiterhin ist das Korrespondenzprinzip zur klassischen Mechanik erfüllt, da die Schrödinger-Gleichung auf den Zuordnungen

$$E \leftrightarrow \imath \hbar \frac{\partial}{\partial t} , \quad \vec{p} \leftrightarrow -\imath \hbar \vec{\nabla}$$
 (1.31)

beruht. Wir erhalten diese quantenmechanische Bewegungsgleichung, wenn wir die Beziehungen der klassischen Mechanik als Operatorgleichung auffassen, die auf die Wellenfunktion wirkt.

1.5.2 Klein-Gordon-Gleichung für ein kräftefreies Teilchen

Anstatt der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung (1.27) wollen wir jetzt auf das Wellenpaket (1.26) die Energie-Impuls-Beziehung der speziellen Relativitätstheorie

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \tag{1.32}$$

für jede ebene monochromatische Welle anwenden. Differenzieren wir Gleichung (1.28) nochmals nach der Zeit, so folgt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} \right] = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r},t)}{\partial t^2}$$
$$= \int d^3 p \ F(\vec{p}) \ E^2 \exp\left[i\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] . \tag{1.33}$$

Aus Gleichung (1.29) folgt

$$-\hbar^2 c^2 \Delta \Psi(\vec{r},t) = \int d^3 p \ F(\vec{p}) \ p^2 c^2 \exp\left[i\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] \ . \tag{1.34}$$

Gemäß Gleichung (1.26) gilt

$$m^{2}c^{4}\Psi(\vec{r},t) = \int d^{3}p \ F(\vec{p}) \ m^{2}c^{4} \exp\left[i\left(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et\right)/\hbar\right] \ . \tag{1.35}$$

Aus den Gleichungen (1.33)-(1.35) folgt unter Verwendung der Beziehung (1.32)

$$-\hbar^{2} \frac{\partial^{2} \Psi}{\partial t^{2}} + \hbar^{2} c^{2} \Delta \Psi - m^{2} c^{4} \Psi$$

$$= \int d^{3} p F(\vec{p}) \left[E^{2} - p^{2} c^{2} - m^{2} c^{4} \right] \exp\left[i\left(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et\right)/\hbar\right] = 0$$

$$-\hbar^{2} \frac{\partial^{2} \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^{2}} = -\hbar^{2} c^{2} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + m^{2} c^{4} \Psi(\vec{r}, t) , \qquad (1.36)$$

also

die als freie Klein-Gordon-Gleichung bezeichnet wird.

Mithilfe des aus der Elektrodynamik bekannten d'Alembert-Operators oder Quabla,

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \tag{1.37}$$

schreibt sich die freie Klein-Gordon-Gleichung als

$$\left[\Box + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right] \Psi\left(\vec{r}, t\right) = 0.$$
(1.38)

Für masselose (m = 0) Teilchen (Photonen), ergibt diese gerade wieder die Wellengleichung (1.17) der Elektrodynamik.

Die Klein-Gordon-Gleichung spielt eine wichtige Rolle in der relativistischen Quantentheorie. Anders als die Schrödinger-Gleichung ist sie nicht von erster Ordnung in der Zeit. Man kann also aus ihr nicht bei Kenntnis der Wellenfunktion zu einer Anfangszeit das spätere Verhalten der Wellenfunktion berechnen. Ohne eine Neuinterpretaion der Wellenfunktion Ψ ist sie daher als dynamische Gleichung für die Materiewellenfunktion nicht brauchbar.

In Tabelle 1.2 fassen wir nochmal die erhaltenen Ergebnisse zusammen.

	Klassische Mechanik	Quantenmechanik
nichtrelativistisch	$E = \frac{p^2}{2m}$	$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$
		Schrödinger-Gleichung
relativistisch	$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$	$\left[\underline{\Box} + \left(\frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\right] \Psi = 0$
		Klein-Gordon-Gleichung

Tabelle 1.2: Klassische und quantenmechanische Bewegungsgleichungen für das freie Teilchen

1.5.3 Konstruktion eines freien Wellenpakets

Ebene monochromatische Wellen

Wir betrachten den Ausdruck für eine ebene monochromatische Welle in einer Raumdimension

$$f(x,t) = \exp\left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right] .$$
(1.39)

Dieser beschreibt die Störung mit der Wellenlänge $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$, die in Richtung des Wellenzahlvektors (hier $\vec{k} \propto \vec{e_x}$) mit konstanter Geschwindigkeit läuft. Dabei ist die Wellenlänge λ die Länge einer Periode (der Abstand von Punkten gleicher Phase), siehe Abbildung 1.4, und T die Schwingungsdauer, d.i. die Dauer einer Schwingung an einem festen Ort x. Der Realteil von Gleichung (1.39)

$$\Re f(x,t) = \Re \left(\exp \left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right] \right) \\ = \frac{1}{2} \left(\exp \left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right] + \exp \left[-2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right] \right) \\ = \cos \left(2\pi \left[\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right] \right)$$
(1.40)

für **festes** t ist in Abbildung 1.4 dargestellt und bildet eine Momentaufnahme der Störung. $N = 1/\lambda$ ist die Wellenzahl der ebenen Welle, d.i. die Anzahl der Perioden auf einer Längeneinheit, $\nu = 1/T$ ist die Frequenz der ebenen Welle, d.i. die Anzahl der Schwingungen pro Zeiteinheit an einem festen Ort, $k = 2\pi N = 2\pi/\lambda$ ist der Betrag des Wellenzahlvektors, $\omega = 2\pi\nu = 2\pi/T$ ist die Kreisfrequenz oder auch kurz Frequenz der Welle. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Ebenen gleicher Phase (siehe Abb. 1.4)

$$v_{\phi} = v = \frac{\lambda}{T} = \frac{\nu}{N} = \frac{\omega}{k} \tag{1.41}$$

wird als *Phasengeschwindigkeit* bezeichnet. Aufgrund von Dispersionsbeziehungen (siehe z.B. Gleichung (1.19)) ist $\omega = \omega(k)$ im allgemeinen eine Funktion von k.



Abbildung 1.4: Momentaufnahme einer ebenen Welle

Betrachtet man die Analogie zwischen Materiewellen und Wellenoptik, so kann man fragen, ob es möglich ist, den Begriff materieller Teilchen einfach zu verwerfen, und die klassische Theorie durch eine Wellentheorie zu ersetzen, bei der die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r},t)$ die gleiche Rolle wie das elektromagnetische Feld in der Strahlungstheorie einnimmt. Das Bild materieller Teilchen mit lokalisierter Energie und lokalisiertem Impuls würde man durch das einer kontinuierlichen Welle mit kontinuierlicher Energie- und Impulsverteilung ersetzen. Die Teilchen der klassischen Mechanik wären in Wirklichkeit Wellenpakete von endlicher, aber genügend kleiner, vernachlässigbarer Ausdehnung (als Realisation von Massenpunkten). Wir zeigen, dass solche Pakete den Bewegungsgesetzen für klassische Teilchen gehorchen und zwar in den Grenzfällen, in denen sich die klassische Mechanik als korrekt erweist. Allerdings tritt hierbei die Schwierigkeit des Zerfließens des Wellenpakets auf.

Wellenpaket

Im Grenzfall der klassischen Physik soll die wellenförmige Bewegung auf das Teilchenbild übergehen, insbesondere besteht dann eine Beziehung zwischem dem Wellenzahlvektor \vec{k} und dem Teilchenimpuls \vec{p} . Um diese Näherung zu verwirklichen, muss mit dem Teilchen eine Welle von endlicher Ausdehnung verknüpft werden. Eine ebene monochromatische Welle ist offensichtlich nicht geeignet, ein Teilchen zu beschreiben, das auf einen Ortsbereich beschränkt ist.

Ein **Wellenpaket** kann jedoch diese Eigenschaft besitzen. Ein Wellenpaket ist die Überlagerung von ebenen Wellen mit benachbarten Wellenvektoren, also etwa

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \ c(k) \ e^{i(kx-\omega t)} \ .$$

Nach Annahme (benachbarte Wellenvektoren) soll c(k) nur in einem schmalen Bereich um k_0 herum merkliche Werte haben, d.h.

$$\Psi(x,t) \simeq \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk \ c(k) \ e^{i(kx - \omega t)} \ . \tag{1.42}$$

Wir wollen zeigen, dass dann in gewissem Maße die Bewegung dieses freien Wellenpakets mit der Bewegung eines klassischen Teilchens verglichen werden kann.

Gemäß Konstruktion (1.42) ist $\Psi(x,t)$ das Integral über ein Produkt bestehend aus einer oszillierenden Funktion $e^{i(kx-\omega t)}$ und einer sich langsam ändernden Funktion von k.

Da Δk klein ist, entwickeln wir die Frequenz $\omega(k)$ nach Potenzen von $k - k_0$ bis zur 1. Ordnung:

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} (k-k_0) = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k-k_0) ,$$

wobei wir die Abkürzungen

$$\omega_0 = \omega(k_0) , \quad \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$$

eingeführt haben. Mit $\xi = k - k_0$ folgt für Gleichung (1.42)

$$\Psi(x,t) \simeq \int_{-\Delta k}^{\Delta k} d\xi \ c(k) \ e^{i\left(\xi x + k_0 x - \omega_0 t - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\xi\right)} \ .$$

Da c(k) in $[k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$ eine langsam veränderliche Funktion ist, gilt $c(k) \simeq c(k_0)$ und

$$\Psi(x,t) \simeq c(k_0) e^{i[k_0 x - \omega_0 t]} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} d\xi \quad e^{i\xi \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]}$$

Das Integral ist leicht auszuführen:

$$\Psi(x,t) \simeq c(k_0)e^{i[k_0x-\omega_0t]} \left[\frac{e^{i\xi\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0t\right]}}{i\left[x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0t\right]}\right]_{-\Delta k}^{\Delta k}$$
$$= 2c(k_0)e^{i[k_0x-\omega_0t]}\frac{\sin\left[\Delta k\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0t\right)\right]}{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0t},$$

was sich darstellen lässt als

$$\Psi(x,t) = c(x,t)e^{i[k_0x-\omega_0t]}$$

$$\sin\left[\Delta k\left(x-\left(\frac{d\omega}{\omega}\right),t\right)\right]$$
(1.43)

mit

$$c(x,t) = 2c(k_0) \frac{\sin\left[\Delta k \left(x - \left(\frac{\partial \omega}{\partial k}\right)_0 t\right)\right]}{x - \left(\frac{\partial \omega}{\partial k}\right)_0 t} .$$
(1.44)

In Abbildung 1.5 skizzieren wir die Variation der Funktion c(x,t) zum Zeitpunkt t = 0,

$$c(x,0) = 2c(k_0)\frac{\sin\left[\Delta kx\right]}{x} ,$$

15



Abbildung 1.5: Skizze der Funktion c(x, 0)

in Abhängigkeit von x. Im Argument der Sinusfunktion tritt die kleine Größe Δk auf, so dass sich c(x,t) als Funktion der Zeit t und der Koordinate x nur langsam ändert. Daher können wir c(x,t) als die Amplitude einer nahezu monochromatischen Welle ansehen und $k_0x - \omega t$ als ihre Phase. Diese Amplitude überlagert sich gemäß Gleichung (1.43) mit dem 2. Faktor, so dass nur in einem engen Ortsbereich das Wellenpaket merkliche Amplituden hat: $\Delta x = 2x_1 = 2\pi/\Delta k$ ist die räumliche Ausdehnung des Wellenpakets. Je kleiner Δk ist (Streuung der Impulswerte), desto größer ist die räumliche Ausdehnung des Pakets. Nun ermitteln wir den Punkt x_z , an dem die Amplitude c(x,t) ihr Maximum hat. Diesen

Punkt bezeichnen wir als Zentrum des Wellenpakets. Das gesuchte Maximum befindet sich im Punkt

$$x_z = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t$$

und bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{dx_z}{dt} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 \,. \tag{1.45}$$

Mit $\omega = E/\hbar$, $E = p^2/(2m)$ und $p = \hbar k$ folgt

$$\omega = \frac{p^2}{2\hbar m} = \frac{\hbar k^2}{2m} \; , \label{eq:scalar}$$

so dass

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{klassisch}} ,$$

d.h. die Gruppengeschwindigkeit der de Broglie-Wellen ist gleich der Teilchengeschwindigkeit der klassischen Mechanik. In gewisser Weise verhält sich das Zentrum des Wellenpakets wie ein Teilchen in der klassischen Mechanik.

Zusammenfassend kann man sagen: der Begriff des Wellenpakets erscheint sinnvoll, weil er

- (1) die richtigen quantenmechanischen Bewegungsgleichungen (Schrödinger-Gleichung, Klein-Gordon-Gleichung) liefert,
- (2) die Lokalisierbarkeit des quantenmechanischen Objekts einschließt,
- (3) im entsprechenden Grenzfall (Zentrum des Pakets verhält sich wie ein Teilchen) mit der klassischen Mechanik übereinstimmt.

Der physikalische Sinn der Wellen, die nach de Broglie mit der Teilchenbewegung verbunden sind, wurde nicht sofort erkannt. Anfangs versuchte man, die Partikel selbst als Gebilde von Wellen zu betrachten, die einen gewissen Raumteil erfüllen. Die Intensität der de Broglie-Wellen wurde in dieser Auffassung als die Größe betrachtet, die die Dichte der Materie kennzeichnet, aus der das Teilchen gebildet ist. Diese Auffassung ist durchaus klassisch, da man Wellengebilde konstruierte, deren Bewegung mit der eines Teilchens übereinstimmt, das sich nach den Gesetzen der klassischen Mechanik bewegt: so bewegt sich das Zentrum des Wellenpakets wie ein klassisches Teilchen. Im folgenden Abschnitt werden wir sehen, dass die Bewegung eines solchen Wellenpakets doch nicht genau mit der Bewegung eines Teilchens übereinstimmt.

1.5.4 Ausbreitung eines freien Wellenpakets aufgrund der Schrödinger-Gleichung

Allgemeine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung in einer Dimension

Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} . \qquad (1.46)$$

Mit dem Separationsansatz $\Psi(x,t) = u(x)g(t)$ gilt

$$rac{\partial \Psi}{\partial t} = u rac{dg}{dt} \;, \quad rac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = g rac{d^2 u}{dx^2} \;,$$

so dass

$$\imath \hbar u \frac{dg}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} g \frac{d^2 u}{dx^2} \; .$$

Nach Division durch gu erhalten wir

$$i\hbar \frac{1}{g(t)} \frac{dg(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(x)} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \hbar\omega$$
(1.47)

mit der Separationskonstanten $\hbar\omega$, da die linke Seite der Gleichung (1.47) nur von t abhängt und die rechte Seite nur von x abhängt, so dass beide Seiten gleich einer Konstanten sein müssen. Für den t-Anteil finden wir dann

$$\frac{dg(t)}{dt} = -\imath \omega g(t)$$

17

mit der Lösung

$$g(t) = e^{-\imath \omega t} \; .$$

Ist die Konstante ω reell, so ist g(t) eine zeitlich periodische Funktion. Für den $x\text{-}\mathsf{Anteil}$ finden wir

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m\omega}{\hbar}u(x) = 0.$$

Ist $\omega > 0$, so definieren wir $k^2 = 2m\omega/\hbar$, so dass

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0$$

mit der Lösung

$$u(x) = c(k)e^{ikx} ,$$

wobei c(k) eine beliebige Funktion von k sein kann. Als spezielle Lösung der Schrödinger-Gleichung (1.46) erhalten wir also

$$\Psi_k(x,t) = u(x)g(t) = c(k)e^{i(kx-\omega t)}$$

wobei $\omega = \hbar k^2/(2m)$ und k ein freier reeller Parameter ist. Die vollständige Lösung der Schrödinger-Gleichung ergibt sich aus der Überlagerung, also der Summe oder dem Integral über spezielle Lösungen $\Psi_k(x,t)$, d.i.

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \ c(k) \ e^{i\left(kx - \frac{\hbar t}{2m}k^2\right)} \ . \tag{1.48}$$

Das Wellenpaket (1.48) ist die allgemeine Lösung der nichtrelativistischen freien Schrödinger-Gleichung (1.46). Über die Funktion c(k) kann man weitgehend willkürlich verfügen, nur muss diese für $|k| \rightarrow \infty$ gegen Null gehen, damit das Integral (1.48) existiert. Durch geeignete Wahl von c(k) erhält man dann jeweils bestimmte, spezielle Lösungen.

Kontinuitätsgleichung

Wir bilden aus der Schrödinger-Gleichung (1.30) die entsprechende konjugiert komplexe Gleichung

$$-\imath\hbar\frac{\partial\Psi^{*}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\Delta\Psi^{*}(x,t)$$

und multiplizieren diese mit Ψ mit dem Ergebnis

$$-i\hbar\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi\Delta\Psi^* . \qquad (1.49)$$

Ebenso multiplizieren wir die Schrödinger-Gleichung (1.30) mit der konjugiert komplexen Wellenfunktion Ψ^* und erhalten

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\Delta\Psi . \qquad (1.50)$$

1.5 Wellenmechanik der Materie

,

Für die Differenz von Gleichung (1.50) und (1.49) folgt

$$i\hbar \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi^* \Psi \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* \right]$$
$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi^* \Psi \right] = -\frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* \right]$$

oder

die sich in der Form einer reellen Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{s} = 0 \tag{1.51}$$

schreiben lässt, wenn wir

$$\rho = \Psi^* \Psi \tag{1.52}$$

als Raumdichte und

$$\vec{s} = \frac{h}{2im} \left[\Psi^* \mathsf{grad}\Psi - \Psi \mathsf{grad}\Psi^* \right]$$
(1.53)

als Stromdichte des Wellenpakets deuten. Durch

$$\vec{s} = \rho \vec{v} \tag{1.54}$$

können wir weiterhin die Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} des ψ -Feldes definieren.

Zeitliche Entwicklung des Wellenpakets

Wir nehmen an, dass zur Zeit t = 0 das Wellenpaket in einem kleinen schmalen Ortsbereich um x = 0 konzentriert ist und sich mit dem Impuls $p_0 = \hbar k_0$ in x-Richtung bewegt. Das wird erreicht, wenn anfänglich

$$\Psi(x,0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right)$$
(1.55)

ist. Denn dann ist die anfängliche Raumdichte (1.52)

$$\rho(x,0) = \Psi(x,0)\Psi^*(x,0) = |A|^2 \exp\left(-x^2/a^2\right)$$

in $|x| \leq a$ lokalisiert (siehe Abb.1.6) und die Stromdichte (1.53) wird zu

$$s_x(x,0) = \frac{\hbar}{2im} \left[A^* A e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ik_0 x} \left(-\frac{x}{a^2} + ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} - A A^* e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} \left(-\frac{x}{a^2} - ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ik_0 x} \right]$$
$$= \frac{\hbar}{2im} |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} (2ik_0) = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x,0) .$$

Gemäß Gleichung (1.54) ist die anfängliche Geschwindigkeit des Wellenpakets $v_{x,0} = \hbar k_0/m$ mit dem Impuls $p_{x,0} = m v_{x,0} = \hbar k_0$.





Andererseits ist aber auch gemäß Lösung (1.48)

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \ c(k) \ e^{ikx} , \qquad (1.56)$$

d.i. die Darstellung der Funktion $\Psi(x,0)$ durch ein Fourier-Integral. Nach dem Umkehrtheorem ist

$$c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \Psi(x,0) \ e^{-\imath kx} \ , \tag{1.57}$$

so dass wir mit $\Psi(x,0)$ die Funktion c(k) berechnen können und damit dann die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ zu jeder anderen Zeit t.

Setzen wir Gleichung (1.55) in Gleichung (1.57) ein, so folgt

$$c(k) = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x} \ . \tag{1.58}$$

Zur Berechnung des Integrals benutzen wir das unbestimmte Integral (Abramowitz und Stegun, Formel 7-4-32)

$$\int dx \ e^{-\left(\alpha x^2 + 2bx + c\right)} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{b^2 - \alpha c}{\alpha}} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\alpha}x + \frac{b}{\alpha}\right) + \operatorname{const}$$
(1.59)

mit der Fehler-Funktion oder Error-Funktion

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \mathrm{dt} \; \mathrm{e}^{-\mathrm{t}^2} \;,$$
 (1.60)

wobei $\operatorname{erf}(\infty) = 1$.

In unserem Integral (1.58) ist $lpha=1/(2a^2)$, $b=\imath(k-k_0)/2$, c=0, so dass

$$c(k) = \frac{A}{2\pi} \left[\frac{1}{2} \sqrt{2a^2 \pi} e^{-\frac{2a^2(k-k_0)^2}{4}} \cdot 2 \right] = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}} .$$
(1.61)

20

Aus Gleichung (1.48) folgt dann nach Einsetzen des Ergebnisses (1.61) für die spätere zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \ c(k) \ e^{i\left(kx - \frac{\hbar t}{2m}k^2\right)} \\ = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \\ \times \ \exp\left(-\left[\left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m}\right)k^2 + 2\left(-\frac{ix}{2} - \frac{k_0a^2}{2}\right)k + \frac{a^2k_0^2}{2}\right]\right) . \quad (1.62)$$

Zur Berechnung des Integrals verwenden wir wieder Gleichung (1.59) jetzt mit

$$\alpha = \frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} = \frac{ma^2 + i\hbar t}{2m} ,$$

$$b = -\frac{1}{2} (ix + k_0 a^2) ,$$

$$c = \frac{a^2 k_0^2}{2}$$

und erhalten

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1 + \frac{\imath\hbar t}{ma^2}}} \exp\left[-\frac{x^2 - 2\imath a^2 k_0 x + \imath \frac{\hbar a^2 k_0^2 t}{m}}{2a^2 \left(1 + \frac{\imath\hbar}{ma^2} t\right)}\right].$$
 (1.63)

Daraus folgt mit $(\sqrt{z})^* = \sqrt{z^*}$ und $(e^z)^* = e^{z^*}$

$$\Psi^*(x,t) = \frac{A^*}{\sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left[-\frac{x^2 + 2ia^2k_0x - i\frac{\hbar a^2k_0^2t}{m}}{2a^2\left(1 - \frac{i\hbar}{ma^2}t\right)}\right] ,$$

so dass wir für die Raumdichte zur Zeit t erhalten

$$\rho(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right] .$$
 (1.64)

Das bedeutet: als Funktion von x ist ρ eine Glockenkurve mit dem Maximum an der Stelle $x = tk_0\hbar/m$. Das Zentrum des Wellenpakets bewegt sich mit der Geschwindigkeit $v_g = \hbar k_0/m$ (Gruppengeschwindigkeit). Gleichzeitig fließt das Wellenpaket breit. Während es anfangs die Breite a hatte, ist diese nach der Zeit t auf

$$a' = a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \tag{1.65}$$

angewachsen. Das Breitfließen setzt also allmählich ein, erfolgt dann aber proportional zur Zeit: für $t >> ma^2/\hbar$ gilt $a' \simeq \hbar t/(ma)$, d.h. das Wellenpaket fließt dann proportional zur Zeit auseinander. Das aus de Broglie-Wellen aufgebaute "Teilchengebilde" wird somit nicht

stationär sein und kann damit keine Erklärung für Materie in lokalisierter Form sein. Dies ist eine falsche Deutung der de Broglie-Wellen.

Die richtige Deutung der Wellenfunktion werden wir im nächsten Abschnitt anhand des Doppelspaltexperiments veranschaulichen, das uns auf die statistische Interpretation der Wellenmechanik nach Born führen wird.

1.6 Statistische Interpretation der Wellenmechanik

Wir betrachten ein idealisiertes Beugungsexperiment: den Durchgang eines Stroms von Teilchen (z.B. Elektronen) durch einen Spalt in einer absorbierenden Wand (siehe Abb. 1.7).



Abbildung 1.7: Schaubild Spaltexperiment

Ein Detektor rechts vom Spalt registriert das Eintreffen von Teilchen und misst deren Häufigkeitsverteilung $P_1(x)$ als Funktion des vertikalen Abstands von der Spaltmitte x. Die Teilchen treffen unregelmäßig auf und man findet eine Streuung der Ankunftsrichtungen um die mittlere Position. Mit einem geeigneten Detektor lässt sich die Ankunft eines Teilchens durch ein kurzes Klicken hörbar machen; dieses Klicken deutet darauf hin, dass Teilchen keine Wellen sondern Korpuskeln sind. Der Teilchenstrom benimmt sich wie ein Geschosshagel, allerdings treffen die Teilchen unregelmäßig auf.

Öffnen wir nun einen 2. Spalt in der Wand und schließen den ersten (Abb. 1.8), so ist erwartungsgemäß $P_2(x)$ nach unten verschoben.

Öffnet man nun beide Löcher, so erwartet man den in Abb. 1.9 gezeigten Befund $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$.

Dies ist jedoch falsch, denn der tatsächliche Befund ist $P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$. Er ähnelt



Abbildung 1.8: Schaubild Spaltexperiment mit verschobenem Spalt

einem Interferenzmuster (Abb. 1.10) ähnlich wie bei Wasserwellen, mit kleinen Teilchen an gewissen Stellen und in der Mitte mehr Teilchen als $P_1(0) + P_2(0)$.

Der Gangunterschied der Wellenzüge führt zu konstruktiver oder destruktiver Interferenz (siehe Abb. 1.11) und unterstreicht den Wellenaspekt der Teilchen.

Verringern wir den Strom einfallender Teilchen, so beobachtet man die Einzelereignisse zeitlich getrennt, einmal hier und einmal dort. Das Interferenzbild entsteht nach langer Zeit als Folge von Einzelereignissen und nicht als Folge des Zusammenwirkens mehrerer Teilchen. Die ersten, durch Elektronen bewirkten, lokalisierten Wirkungen auf der Detektorfläche verteilen sich dort scheinbar chaotisch, um dann bei hinreichend großer Ereigniszahl das Interferenzbild aufzubauen.

Bei einer Welle müsste das Interferenzbild stets als ganzes vorhanden sein und würde nur schwächer bei niedrigerer einfallender Amplitude. Zwei Detektoren in verschiedenen Maxima müssten gleichzeitig ansprechen, dies ist jedoch nicht der Fall. Die Teilchen benehmen sich wie kleine Geschosse, bauen aber ein Interferenzbild aus Einzelereignissen auf, das wie Welleninterferenz geformt ist.

Zusammenfassung des experimentellen Befunds: Die Elektronen (oder auch Photonen) werden als Teilchen nachgewiesen. Die Nachweiswahrscheinlichkeit ist wie die Intensität einer Welle verteilt. Der Impuls \vec{p} der Teilchen ist durch $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ mit dem Wellenvektor \vec{k} der Welle verknüpft. Die Wahrscheinlichkeit, Teilchen an einer bestimmten Stelle nachzuweisen, ist durch das Betragsquadrat einer Wellenamplitude gegeben.

Entscheidend für die Interpretation des Doppelspaltexperiments ist die Zufälligkeit des Elementarprozesses, d.h. die Unmöglichkeit, Zeit und Ort des Auftreffens eines Photons oder Elektrons exakt vorherzusagen. Warum das so ist, können wir nicht erklären; wir müssen es einfach als Erfahrungstatsache akzeptieren. Wenn wir es aber akzeptieren, dann müssen wir



Abbildung 1.9: Schaubild Erwartung Doppelspaltexperiment

auch die Statistik und mit ihr den Begriff der Wahrscheinlichkeit als das angemessene Konzept zur Beschreibung solcher zufälligen Ereignisse ansehen. Wir gelangen zur *statistischen Interpretation* von Born (1926) und deuten die Beziehung zwischen Teilchen und Welle statistisch.

Statistische Interpretation von Born: Jedem Teilchen wird eine zeit- und ortsabhängige Wellenamplitude $\Psi(\vec{x},t)$ zugeordnet, wobei $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ist. $\Psi(\vec{x},t)$ ist i.A. eine komplexe Zahl. $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ wird als Wahrscheinlichkeit interpretiert, das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} anzutreffen. Da die Wellenamplitude $\Psi(\vec{x},t)$ nur eine Wahrscheinlichkeitsamplitude ist, schließt sie den Teilchencharakter nicht aus und erlaubt gleichzeitig Interferenz.

Der Widerspruch zwischen den klassischen Konzepten "Welle" und "Teilchen" wird so aufgelöst: es gibt eine Wahrscheinlichkeitsamplitude ("Welle"), deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Nachweis von "Teilchen" ist. Damit sind Elektronen und Photonen weder einfach Teilchen noch einfach Wellen im klassischen Sinn.


Abbildung 1.10: Beobachtung am Doppelspaltexperiment



Abbildung 1.11: Interferenzentstehung beim Doppelspaltexperiment

1 Wellenmechanik

2.1 Bewegungsgleichungen im Schrödinger-Bild

Die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ bestimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilches am Ort \vec{x} zur Zeit t. Wie entwickelt sich die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ mit der Zeit t? Zur Beantwortung dieser Frage benötigen wir eine dynamische Gleichung für die zeitliche Entwicklung. Beim Aufstellen dieser dynamischen Gleichung gehen wir von zwei Postulaten aus:

1. Postulat: $\Psi(\vec{x},t)$ zur Zeit t ist die vollständige Beschreibung des Zustands des physikalischen Systems und legt demnach die zeitliche Entwicklung fest. Die dynamische Gleichung muss eine Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit sein.

2. Postulat: Das Superpositionsprinzip für die Lösungen der dynamischen Gleichung soll gelten, d.h. mit Ψ_1 und Ψ_2 soll auch die Linearkombination $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ Lösung der dynamischen Gleichung sein. Die dynamische Gleichung muss linear in Ψ sein.

2.1.1 Zwischenbemerkung: Operatoren

Die durch einen Operator \hat{A} bewirkte Zuordnung $\Psi(\vec{x},t) \xrightarrow{\hat{A}} \Psi'(\vec{x},t)$ wird geschrieben als

$$\Psi' = \hat{A}\Psi$$
 .

Beispiele:

$$\begin{split} \hat{A} &= \frac{\partial}{\partial t} \iff \Psi'(\vec{x},t) = \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} ,\\ \hat{A} &= \frac{\partial}{\partial x} \iff \Psi'(\vec{x},t) = \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial x} ,\\ \hat{A} &= f(x,t) \iff \Psi'(\vec{x},t) = f(x,t)\Psi(\vec{x},t) \quad \text{Multiplikations-Operator} ,\\ \hat{A} &= c \iff \Psi'(\vec{x},t) = c\Psi(\vec{x},t) . \end{split}$$

Ein linearer Operator besitzt die Eigenschaft

$$\hat{A} (c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) = c_1 \hat{A} \Psi_1 + c_2 \hat{A} \Psi_2 .$$

Alle oben gezeigten Beispiele sind lineare Operatoren. Ein Beispiel für einen nichtlineraren Operator ist $\hat{A}\Psi = \Psi^3$.

2.1.2 Wellengleichung

Die zwei Postulate sind äquivalent zu einer dynamischen Gleichung der Form

$$\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{O}\Psi(t) \; ,$$

wobei \hat{O} einen linearen Operator bezeichnet. Mit der Notation

$$\hat{O} = \frac{1}{\imath\hbar}\hat{H} \tag{2.1}$$

erhalten wir die grundlegende Bewegungsgleichung (*Schrödinger-Gleichung*), das allgemeine Gesetz für die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems. Der lineare Operator \hat{H} ist charakteristisch für das System und wird *Hamilton-Operator* genannt. Wie kann der Hamilton-Operator \hat{H} aussehen?

Ein freies nichtrelativistisches Teilchen wird beschrieben durch das Wellenpaket

$$\Psi\left(\vec{x},t\right) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 p \ f\left(\vec{p}\right) \ e^{i\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)/\hbar}$$
(2.2)

wegen $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ und $E = \hbar \omega$ wobei $E = p^2/(2m)$.

Damit ist die zeitliche Entwicklung explizit bekannt und \hat{H} lässt sich bestimmen:

$$\begin{split} \imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}p \ f\left(\vec{p}\right) \ E \ e^{\imath\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)/\hbar} \\ \frac{\hbar}{\imath}\nabla\Psi &= \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}p \ f\left(\vec{p}\right) \ \vec{p} \ e^{\imath\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)/\hbar} , \\ \nabla\Psi &\propto \left(\frac{\partial/\partial x}{\partial/\partial y}\right) e^{\frac{\imath}{\hbar}\left(p_{x}x+p_{y}y+p_{z}z\right)} \\ &= \frac{\imath}{\hbar} \begin{pmatrix} p_{x} \\ p_{y} \\ p_{z} \end{pmatrix} e^{\frac{\imath}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x}\right)} \\ \frac{\hbar}{\imath}\nabla\Psi &\propto \ \vec{p}e^{\frac{\imath}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x}\right)} . \end{split}$$

weil

Die nochmalige Anwendung ergibt

$$\left(\frac{\hbar}{\imath}\nabla\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{\imath}\nabla\Psi\right) = -\hbar^2\nabla^2\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} d^3p \ f\left(\vec{p}\right) \ p^2 \ e^{\imath\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)/\hbar} \ .$$

Mit dem Laplace-Operator $\Delta=\nabla\cdot\nabla=\nabla^2=$ div grad folgt unter Ausnutzung von $E=p^2/(2m),$ dass

$$\imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \tag{2.3}$$

erfüllt ist. Der Hamilton-Operator für ein freies Teilchen der Masse m ist demnach

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta . \tag{2.4}$$

Abbildung 2.1 fasst die formale Ableitung nochmals schematisch zusammen. Die formale Analogie mit der klassischen Mechanik wird durch die *Korrespondenzregeln*

$$E \to \imath \hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \vec{p} \to \frac{\hbar}{\imath} \nabla$$
 (2.5)

erreicht, wenn wir $E=p^2/(2m)$ als Operatorgleichung auffassen, die auf die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x},t)$ wirkt.



Abbildung 2.1: Zur Ableitung der Wellengleichung des freien Teilchens

Relativistische Mechanik

Fassen wir die Beziehung $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ für ein relativistisches Teilchen als Operatorgleichung auf, erhalten wir

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi$$

$$\underline{\Box} \Psi = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Delta\right) \Psi = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi$$
(2.6)

oder

als Wellengleichung für ein freies relativistisches Teilchen. Diese Klein-Gordon-Gleichung ist allerdings von 2. Ordnung in der Zeit, verletzt also das 1. Postulat.

Nichtrelatvistisches Teilchen in einem Potential

Verwenden wir die Korrespondenzregeln (2.5) in der klassischen Hamiltonfunktion für ein nichtrelatvistisches Teilchen in einem Potential $V(\vec{x})$:

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

so folgt für den Hamilton-Operator

(a)

(b)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) \qquad (2.7)$$

und für die zugehörige Schrödinger-Gleichung

$$\imath \hbar rac{\partial \Psi}{\partial t} \;\; = \;\; \left(-rac{\hbar^2}{2m} \Delta + V\left(ec{x}
ight)
ight) \Psi \; .$$

2.1.3 Allgemeines Verfahren für Systeme mit klassischer Korrespondenz

Gegeben sei ein dynamisches System in der klassischen Mechanik beschrieben durch verallgemeinerte Koordinaten ..., q_j , ... und verallgemeinerte Impulse ..., p_j , ... mit der klassischen Hamiltonfunktion $H(\ldots, q_j, \ldots, m_j, \ldots, p_j, \ldots, t)$.

Der Übergang zur Wellenmechanik erfolgt durch die Entsprechungen (oder Korrespondenzen)

$$q_j \iff q_j, \qquad p_j \iff \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}\right)$$
 (2.8)

und ergibt den Hamilton-Operator

$$\hat{H}\left(\ldots,q_j,\ldots,\ldots,-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial q_j},\ldots,t\right)$$
 (2.9)

Es gilt die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi . \qquad (2.10)$$

Man beachte die formale Ähnlichkeit der Wellengleichung zur Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik

$$\frac{\partial S}{\partial t} - H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = 0.$$
(2.11)

Beispiel: Atom mit Z-Elektronen

Für dieses System gilt die klassische Hamilton-Funktion

$$H = H\left(P, p_1, \dots, p_Z, \vec{X}, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_Z\right)$$
$$= \frac{P^2}{2M} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{p_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^2}{\left|\vec{X} - \vec{x}_i\right|} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\left|\vec{x}_j - \vec{x}_i\right|}, \qquad (2.12)$$

wobei M die Masse des Atomkerns und \vec{X} die Position des Atomkerns bezeichnet. Die ersten beide Terme in Gleichung (2.12) entsprechen der kinetischen Energie des Systems, die letzten beiden Terme beschreiben die elektrostatische Wechselwirkung.

Für die dazugehörige Schrödinger-Gleichung für die Gesamtwellenfunktion erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \left(\vec{X}, \vec{x}_{1}, \dots, \vec{x}_{Z}, t \right)$$

$$= \left(-\frac{\hbar^{2}}{2M} \Delta_{\vec{X}} - \sum_{i=1}^{Z} \frac{\hbar^{2}}{2m_{e}} \Delta_{\vec{x}_{i}} - \sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^{2}}{\left| \vec{X} - \vec{x}_{i} \right|} + \sum_{i < j} \frac{e^{2}}{\left| \vec{x}_{j} - \vec{x}_{i} \right|} \right)$$

$$\times \Psi \left(\vec{X}, \vec{x}_{1}, \dots, \vec{x}_{Z}, t \right) .$$
(2.13)

2.1.4 Mehrdeutigkeiten bei der korrekten Herstellung des Hamilton-Operators

 $T_1 = T_2$

Als Beispiel betrachten wir die Teilchenbewegung in einer zwei-dimensionalen Ebene, die sowohl in kartesischen Koordinaten $(x = r \cos \phi, y = r \sin \phi)$ als auch Polarkoordinaten (r, ϕ) beschrieben werden kann. Für den kinetischen Energieanteil in der Hamiltonfunktion gilt dann

mit

$$T_{1} = \frac{p^{2}}{2m} = \frac{1}{2m} \left(p_{x}^{2} + p_{y}^{2} \right) ,$$

$$T_{2} = \frac{p^{2}}{2m} = \frac{1}{2m} \left(p_{r}^{2} + \frac{1}{r^{2}} p_{\phi}^{2} \right)$$

Der jeweilige korrespondenzmäßige Übergang mit Vorschrift (2.8) liefert dann die ungleichen Operatoren $\hat{T}_1 \neq \hat{T}_2$ mit

$$\hat{T}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$\hat{T}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) .$$

und

Die *Erfahrungsregel* besagt, dass beim korrespondenzmäßigen Übergang immer kartesische Koordinaten verwendet werden müssen.

Allgemein ist festzuhalten, dass die Gültigkeit des Hamilton-Operators letztlich nur durch den Vergleich mit Experimenten feststellbar ist.

Für Systeme ohne klassische Korrespondenz ist der Hamilton-Operator nur durch "Versuch und Vergleich" zu gewinnen. Dabei leisten Invarianzeigenschaften des betrachteten physikalischen Systems wichtige Konstruktionshilfe.

2.2 Normerhaltung und Kontinuitätsgleichung

Der Zustand eines Teilchens wird durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x},t)$ festgelegt und $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ ist seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit zur Zeit t am Ort \vec{x} zu sein. Das Teilchen muss sich irgendwo aufhalten, also

$$\int d^3x \, |\Psi(\vec{x},t)|^2 = 1 \,. \tag{2.14}$$

Diese Bedingung muss für alle Zeiten gelten, da ein Teilchen mit nichtrelativistischer Energie nicht verschwinden kann (keine Annihilationsprozesse möglich). Ohne die Forderung (2.14) wäre die statistische Interpretation unsinnig.

Andererseits aber wird die Wellenfunktion durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt. Die Extrabedingung (2.14) an Ψ muss auch von der Schrödinger-Gleichung erfüllt sein. Garantiert die Schrödinger-Gleichung diese Konstanz der Norm?

Die Schrödinger-Gleichung ist linear: wenn Ψ eine Lösung ist, dann auch $a\Psi$, wobei a eine komplexe Zahl ist. Wir müssen a so wählen, dass die Bedingung (2.14) erfüllt ist (*Normierung der Wellenfunktion*).

Für einige Lösungen der Schrödinger-Gleichung ist das Integral (2.14) unendlich; diese können nicht verwandt werden und sind dann als Darstellungen von Teilchen unbrauchbar. **Physika-lisch sinnvolle Zustände entsprechen "quadratintegrablen" Lösungen der Schrödin-ger-Gleichung**, d.h.

$$\int d^{3}x \, |\Psi(\vec{x},t)|^{2} < \infty \,. \tag{2.15}$$

Wir müssen nun zeigen, dass die Schrödinger-Gleichung automatisch die Normierung erhält, d.h. eine zu einem Zeitpunkt normierte Wellenfunktion bleibt auch für alle anderen Zeiten normiert.

Wir bilden die zur Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{2.16}$$

konjugiert komplexe Schrödinger-Gleichung

$$-\imath\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \left(\hat{H}\Psi\right)^* \tag{2.17}$$

und erhalten damit für

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi\Psi^*) = \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$$
$$= \Psi^* \left[\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\Psi\right] + \Psi \left[-\frac{1}{i\hbar} \left(\hat{H}\Psi\right)^*\right]$$
$$= \frac{1}{i\hbar} \left[\Psi^* \hat{H}\Psi - \Psi \left(\hat{H}\Psi\right)^*\right],$$
$$\int d^3x \ |\Psi|^2 = \frac{1}{i\hbar} \int d^3x \ \left[\Psi^* \hat{H}\Psi - \Psi \left(\hat{H}\Psi\right)^*\right] = 0.$$
(2.18)

so dass

Notwendig und hinreichend für die Normerhaltung ist

 $\frac{\partial}{\partial t}$

$$\int d^3x \ \Psi^*(\vec{x},t) \ \hat{H}\Psi(\vec{x},t) = \int d^3x \ \Psi(\vec{x},t) \left(\hat{H}\Psi(\vec{x},t)\right)^* \ . \tag{2.19}$$

Operatoren, die diese Relation für alle quadratintegrablen Wellenfunktion Ψ erfüllen, heißen *hermitesch* oder *selbstadjungiert*.

Physikalische Hamilton-Operatoren müssen hermitesch sein. Dann gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \, |\Psi|^2 = 0$$

$$\int d^3x \, |\Psi|^2 = \text{const}$$
(2.20)

oder

bezüglich der Zeit.

2.2.1 Beispiel: Teilchen im eindimensionalen Potential

In diesem Fall schreibt sich der Hamilton-Operator (2.7a)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = \hat{H}_0 + V(x) ,$$

wobei für das reelle Potential V(x) gilt $V^* = V$. Es bleibt zu zeigen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, \left[\Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi \left(\hat{H} \Psi \right)^* \right] = 0 \, .$$

Wir berechnen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi \left(\hat{H} \Psi \right)^* \right]$$

=
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi \right) + \Psi \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi^* \right) \right]$$

=
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} - \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} \right].$$

Mit partieller Integration auf der rechten Seite folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi \left(\hat{H} \Psi \right)^* \right]$$

= $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} - \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} \right] \right)$
= $\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty} = 0,$

falls Ψ im Unendlichen hinreichend schnell abfällt. Dies ist für quadratintegrable Zustände erfüllt, so dass \hat{H}_0 hermitesch ist. Q.E.D.

2.2.2 Kontinuitätsgleichung

Wir definieren die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^* \left(\nabla \Psi \right) - \left(\nabla \Psi \right)^* \Psi \right] = \Re \left(\frac{\hbar}{im} \Psi^* \left(\nabla \Psi \right) \right) , \qquad (2.21)$$

d.h. das Integral über eine Fläche F, $\int_F \vec{j} \cdot d\vec{f}$, gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass durch diese Fläche F pro Sekunde ein Teilchen hindurchtritt. Wir bilden

$$\begin{split} \operatorname{div} \vec{j} &= \nabla \cdot \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\nabla \cdot \left[\Psi^* \left(\nabla \Psi \right) \right] - \nabla \cdot \left[\left(\nabla \Psi \right)^* \Psi \right] \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\left(\nabla \Psi^* \right) \left(\nabla \Psi \right) + \Psi^* \Delta \Psi - \left(\nabla \Psi^* \right) \left(\nabla \Psi \right) - \left(\Delta \Psi \right)^* \Psi \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^* \Delta \Psi - \left(\Delta \Psi \right)^* \Psi \right] \,. \end{split}$$

Mit der Schrödinger-Gleichung (2.16) und ihrer konjugiert komplexen (2.17) erhalten wir

$$\operatorname{div} \vec{j} = \frac{\hbar}{2m\imath} \left[\Psi^* \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \imath \hbar \dot{\Psi} \right) - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \imath \hbar \dot{\Psi}^* \right) \Psi \right] = - \left[\Psi^* \dot{\Psi} + \Psi \dot{\Psi}^* \right] = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi \Psi^* \right)$$

und damit die Kontinuitätsgleichung in differentieller Form

$$\operatorname{div}_{\vec{j}} + \frac{\partial P}{\partial t} = 0 , \quad \text{mit der Wahrscheinlichkeitsdichte} \quad P = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 . \quad (2.22)$$

In integraler Form gilt

$$\int_{G} d^{3}x \, \frac{\partial P}{\partial t} + \int_{G} d^{3}x \, \operatorname{div} \vec{j} = \frac{d}{dt} W_{G} + \oint_{O(G)} d\vec{o} \cdot \vec{j} = 0 \,.$$

$$(2.23)$$

Die Abnahme der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem Gebiet G ist gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom durch die Oberfläche O(G) des Gebiets. Dies entspricht der Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit.

2.3 Erwartungswerte

2.3.1 Ortsdarstellung

Da $P(\vec{x},t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert wird, ist wegen der Normierung (2.14)

$$\langle \vec{x} \rangle \equiv \int d^3 x \, \vec{x} P(\vec{x}, t)$$

= $\int d^3 x \, \vec{x} \, |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \frac{\int d^3 x \, \vec{x} \, |\Psi(\vec{x}, t)|^2}{\int d^3 x \, |\Psi(\vec{x}, t)|^2}$ (2.24)

als Erwartungswert, auch Mittelwert, des Orts der Teilchen aus der durch Ψ charakterisierten quantenmechanischen Gesamtheit anzusehen.

Gleichung (2.24) ist völlig analog zum Würfelspiel: die mittlere Zahl

$$\langle i \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{6} i p_i}{\sum_{i=1}^{6} p_i} = 3.5 \tag{2.25}$$

stellt sich ein, falls man oft genug würfelt. Die Vorhersage für einen bestimmten Wurf ist unbestimmt. Interessant ist, dass der mittlere Wert 3.5 als Einzelzahl auf dem Würfel nicht vorkommt! Ein ähnliches Beispiel ist die mittlere Kinderanzahl deutscher Familien von 1.2: es gibt keine einzige Familie, die 1.2 Kinder hat; allerdings weiß jeder, was mit diesem Ensemble-Mittelwert gemeint ist.

Ebenso hier: für die Ortsmessung eines Elektrons im allgemeinen Zustand ist keinerlei Vorhersage zu machen. Wenn man jedoch an identischen Systemen (d.h. dieselben Zustände Ψ) wiederholt Messungen macht, findet man den mittleren Ort (2.24) über viele identische Systeme.

Wir ordnen also der klassischen Variablen \vec{x} den Operator \vec{x} zu, der also ein einfacher Multiplikationsoperator ist. Einer beliebigen Ortsfunktion $F(\vec{x})$ wird demnach der Multiplikationsoperator $F(\vec{x})$ zugeordnet mit dem dazugehörigen Erwartungswert

$$\langle F(\vec{x}) \rangle \equiv \int d^3x \ F(\vec{x}) P(\vec{x},t) = \frac{\int d^3x \ F(\vec{x}) |\Psi(\vec{x},t)|^2}{\int d^3x \ |\Psi(\vec{x},t)|^2} .$$
 (2.26)

Welcher Operator wird dem klassischen Impuls \vec{p} zugeordnet? Zur Beantwortung dieser Frage betrachten wir die zeitliche Entwicklung von $\langle \vec{x} \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\langle \vec{x} \right\rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3x \ \vec{x} \left| \Psi \left(\vec{x}, t \right) \right|^2 \\ &= \frac{d}{dt} \int d^3x \ \vec{x} \Psi \left(\vec{x}, t \right) \Psi^* \left(\vec{x}, t \right) \\ &= \int d^3x \ \left[\dot{\Psi^*} \vec{x} \Psi + \Psi^* \vec{x} \dot{\Psi} \right] \,. \end{aligned}$$

Nach Einsetzen der Schrödinger-Gleichung (2.16) und ihrer konjugiert komplexen (2.17) für das Potential V,

$$\dot{\Psi^*} = \frac{\imath}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \Psi^* ,$$

$$\dot{\Psi} = -\frac{\imath}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \Psi ,$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{\hbar}{2m} \int d^3x \left[(\Delta \Psi^*) \, \vec{x} \Psi - \Psi^* \vec{x} \, (\Delta \Psi) \right] .$$
(2.27)

folgt

Der Term auf der rechten Seite wird partiell integriert und, da Ψ bei großen Entfernungen verschwindend klein ist, gilt z.B. für den 1. Term in einer Dimension

$$T_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial (x\Psi)}{\partial x} \ .$$

Nach nochmaliger partieller Integration finden wir

$$T_{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \Psi^{*} \frac{\partial^{2}(x\Psi)}{\partial x^{2}}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \Psi^{*} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi + x \frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \Psi^{*} \left(2 \frac{\partial\Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^{2}\Psi}{\partial x^{2}}\right)$$

Der letzte Summand fällt mit dem 2. Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.27) weg und wir erhalten für diese nach entsprechender Integration der anderen beiden Koordinaten

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \frac{\hbar}{2im} \int d^3x \ \Psi^* \left[2 \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{x}} \right] \\ = \frac{1}{m} \int d^3x \ \Psi^* \ \frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{x}} \Psi = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle$$

Dies legt die Deutung

$$\left< \vec{p} \right> = m \frac{d}{dt} \left< \vec{x} \right> \;,$$

nahe, wobei

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 x \, \Psi^* \, \frac{\hbar}{\imath} \nabla_x \Psi \tag{2.28}$$

der Erwartungswert des Impulses der Teilchen im Zustand Ψ ist. Wir ordnen also dem klassischen Impuls \vec{p} den Operator $(\hbar/i)\nabla_x$ zu. Wir haben diese Zuordnung schon beim Übergang von der Hamiltonfuntion $H = p^2/(2m)$ zum Hamilton-Operator $\hat{H} = -\hbar^2 \Delta/(2m)$ verwandt, aber die Ergebnisse sind zueinander konsistent.

Der Impuls-Operator $\hat{\vec{p}} = (\hbar/\imath)\nabla_x$ ist hermitesch gemäß Bedingung (2.19), denn nach partieller Integration ist

$$\int d^3x \ \Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla_x \Psi = \left[\frac{\hbar}{i} \Psi^* \Psi \right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i} \int d^3x \ (\nabla_x \Psi^*) \Psi$$
$$= + \int d^3x \ \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_x \Psi \right)^* \Psi$$
(2.29)

für quadratintegrable Wellenfunktionen.

2.3.2 Impulsdarstellung

 $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, den Ort \vec{x} zu finden. Kann man die Wahrscheinlichkeit $|\psi(\vec{p},t)|^2$ angeben, um den Impuls \vec{p} zu finden? Dazu betrachten wir die Fourier-Darstellung von $\Psi(\vec{x},t)$:

$$\Psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \ \psi\left(\vec{k},t\right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \ \psi\left(\vec{p},t\right) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} , \qquad (2.30)$$

wobei wir $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ benutzt haben. Für die konjugiert komplexe Wellenfunktion gilt dann

$$\Psi^*\left(\vec{x},t\right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}} \int d^3p' \ \psi^*\left(\vec{p}',t\right) e^{-\imath \vec{p}' \cdot \vec{x}/\hbar} \ . \tag{2.31}$$

Damit folgt für die Normierung

$$\int d^3x \ |\Psi(\vec{x},t)|^2 = \int d^3x \ \Psi(\vec{x},t) \ \Psi^*(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \ \int d^3p \ \int d^3p' \ \psi^*\left(\vec{p}',t\right) \psi\left(\vec{p},t\right) e^{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot\vec{x}-\vec{p}'\cdot\vec{x}\right]} .$$

Mit der Darstellung der dreidimensionalen Delta-Funktion

$$\int d^3x \ e^{\frac{i}{\hbar} \left[\vec{p} - \vec{p}' \right] \cdot \vec{x}} = (2\pi\hbar)^3 \,\delta^3 \left(\vec{p} - \vec{p}' \right) \tag{2.32}$$

2.3 Erwartungswerte

folgt das sog. Parseval-Theorem der Fourier-Theorie

$$\int d^3x \ |\Psi(\vec{x},t)|^2 = \int d^3p \ |\psi(\vec{p},t)|^2 \ . \tag{2.33}$$

Folglich ist

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} \rangle &= \int d^3 x \, \Psi^* \left(\vec{x}, t \right) \frac{\hbar}{\imath} \nabla_x \Psi \left(\vec{x}, t \right) \\ &= \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^3} \int d^3 x \, \int d^3 p \, e^{-\imath \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar} \psi^* \left(\vec{p}, t \right) \frac{\hbar}{\imath} \nabla_x \int d^3 p' \, e^{\imath \vec{p}' \cdot \vec{x}/\hbar} \psi \left(\vec{p}', t \right) \\ &= \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^3} \int d^3 x \, \int d^3 p \, e^{-\imath \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar} \psi^* \left(\vec{p}, t \right) \int d^3 p' \, \vec{p}' \, e^{\imath \vec{p}' \cdot \vec{x}/\hbar} \psi \left(\vec{p}', t \right) \\ &= \int d^3 p \, \vec{p} \, |\psi \left(\vec{p}, t \right)|^2 \,, \end{aligned}$$

$$(2.34)$$

d.h. $|\psi(\vec{p},t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, im Zustand Ψ den Impuls \vec{p} anzutreffen. Durch Fourier-Inversion von Gleichung (2.30) gewinnen wir die Impulswellenfunktion ψ :

$$\psi(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \ \Psi(\vec{x},t) \ e^{-\imath \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar} \ . \tag{2.35}$$

Gemäß Gleichungen (2.28) und (2.35) gelangen wir zu zwei Darstellungen vom Erwartungswert $\langle \vec{p} \rangle$:

$$\begin{array}{lll} \mbox{Ortsdarstellung} & \langle \vec{p} \rangle & = & \int d^3x \; \Psi^*\left(\vec{x},t\right) \; \frac{\hbar}{\imath} \nabla_x \Psi\left(\vec{x},t\right) \\ \mbox{Impulsdarstellung} & \langle \vec{p} \rangle & = & \int d^3p \; \psi^*\left(\vec{p},t\right) \; \vec{p} \psi\left(\vec{p},t\right) \; . \end{array}$$

Ähnliches muss auch für den Erwartungswert $\langle \vec{x} \rangle$ gelten. Mithilfe von Gleichung (2.30) erhalten wir für die Impulsdarstellung (des Orts)

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \rangle &= \int d^3 x \ \Psi^*\left(\vec{x},t\right) \vec{x} \Psi\left(\vec{x},t\right) \\ &= \int d^3 x \ \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3} \int d^3 p \ e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \psi^*\left(\vec{p},t\right) \int d^3 p' \ \psi\left(\vec{p}',t\right) \ \vec{x} e^{i\vec{p}'\cdot\vec{x}/\hbar} \end{aligned}$$

Mit

$$ec{x}e^{\imath ec{p}'\cdotec{x}/\hbar} = rac{\hbar}{\imath}
abla_{ec{p}'} e^{\imath ec{p}'\cdotec{x}/\hbar}$$

folgt unter Verwendung der Delta-Funktions-Darstellung (2.32)

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \; \psi^* \left(\vec{p}, t \right) \int d^3 p' \; \psi \left(\vec{p}', t \right) \frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{p}'} \int d^3 x \; e^{\imath \left(\vec{p}' - \vec{p} \right) \cdot \vec{x}/\hbar} \\ &= \int d^3 p \; \psi^* \left(\vec{p}, t \right) \int d^3 p' \; \psi \left(\vec{p}', t \right) \frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{p}'} \delta^3 \left(\vec{p}' - \vec{p} \right) \end{aligned}$$

Klassische Variable	Quantenmechanische	Quantenmechanische
	Operatoren im Ortsraum	Operatoren im Impulsraum
Ort \vec{x}	\vec{x}	$-rac{\hbar}{\imath} abla_{ec p}$
Impuls \vec{p}	$\frac{\hbar}{\imath} abla_{ec x}$	\vec{p}
Drehimpuls $\vec{x} \times \vec{p}$	$ec{x} imes rac{\hbar}{\imath} abla_{ec{x}}$	$-rac{\hbar}{\imath} abla_{ec p} imesec p$
kinet. Energie $\frac{p^2}{2m}$	$-rac{\hbar^2}{2m}\Delta$	$\frac{p^2}{2m}$
Potential $V(\vec{x})$	$V(\vec{x})$	$V(\imath\hbar abla_{ec p})$
$G(\vec{p})$	$G\left(\frac{\hbar}{\imath}\nabla_{\vec{x}}\right)$	$G(\vec{p})$

Tabelle 2.1: Zusammenstellung der Darstellung von Operatoren

und nach partieller Integration des letzten Integrals

$$\langle \vec{x} \rangle = \int d^3 p \ \psi^* \left(\vec{p}, t \right) \left[-\frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{p}} \right] \psi \left(\vec{p}, t \right) \ . \tag{2.36}$$

Bezüglich der Amplitude $\psi(\vec{p},t)$ wird der Orts-Operator durch $-(\hbar/i)\nabla_{\vec{p}}$ dargestellt. Die Ortswellenfunktion $\Psi(\vec{x},t)$ und die Impulswellenfunktion $\psi(\vec{p},t)$ kennzeichnen den Zustand in gleicher Weise. Es sind äquivalente Darstellungen eines Zustands (siehe Tabelle 2.1). Erwartungswerte von Operatoren \hat{A} sind von der Form

$$\langle A \rangle = \int d^3x \ \Psi^*\left(\vec{x},t\right) \ \hat{A} \Psi\left(\vec{x},t\right) \ ,$$

hier in Ortsdarstellung. Falls A Observable ist, d.h. messbar ist, muss der Messwert < A > reell sein, d.h.

 $\langle A \rangle = \langle A \rangle^* ,$

also

$$\int d^3x \ \Psi^*\left(\vec{x},t\right) \ \hat{A}\Psi\left(\vec{x},t\right) = \int d^3x \ \left(\hat{A}\Psi\left(\vec{x},t\right)\right)^* \ \Psi\left(\vec{x},t\right) \ , \tag{2.37}$$

d.h. der der Observablen A zugeordnete Operator \hat{A} muss hermitesch sein.

2.3.3 Symmetrisierung

Vorsicht ist geboten bei der Zuordnung von Operatoren zu klassischen Größen: so gilt z.B. für das klassische Skalarprodukt die Symmetrie $\vec{x} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{x}$, aber die zugeorneten Operatoren etwa in Ortsdarstellung

$$\vec{x} \cdot \frac{\hbar}{\imath} \nabla \neq \frac{\hbar}{\imath} \nabla \cdot \vec{x}$$
(2.38)

sind nicht gleich!

Beide Operatoren auf der linken und rechten Seite von Gleichung (2.38) sind nicht hermitesch. Für den linken Operator gilt mit partieller Integration

$$\int d^{3}x \ \Psi^{*}(\vec{x}) \ \vec{x} \cdot \frac{\hbar}{\imath} \nabla \Psi(\vec{x})$$

$$= \int d^{3}x \ \Psi^{*}(\vec{x}) \left[x \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar}{\imath} \int d^{3}x \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^{*}(\vec{x}) x \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Psi^{*}(\vec{x}) y \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Psi^{*}(\vec{x}) z \right) \right] \Psi(\vec{x})$$

$$= -\frac{\hbar}{\imath} \int d^{3}x \left[3\Psi^{*}\Psi + \frac{\partial\Psi^{*}}{\partial x} x\Psi(\vec{x}) + \frac{\partial\Psi^{*}}{\partial y} y\Psi(\vec{x}) + \frac{\partial\Psi^{*}}{\partial z} z\Psi(\vec{x}) \right]$$

$$= -\frac{3\hbar}{\imath} + \int d^{3}x \left(\vec{x} \cdot \frac{\hbar}{\imath} \nabla \Psi(\vec{x}) \right)^{*} \Psi(\vec{x}) . \qquad (2.39)$$

Ebenso zeigt man, dass der Operator auf der rechten Seite von Gleichung (2.38) nicht hermitesch ist (Übungsaufgabe).

Als *Verabredung* für solche Fälle gilt, dass man vorher symmetrisiert. Hermitesch ist der symmetrisierte Ausdruck (Übungsaufgabe)

$$\vec{x} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} \left[\vec{x} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{x} \right] \to \frac{1}{2} \left[\vec{x} \cdot \frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{x}} + \frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{x} \right]$$

der dann der richtige quantenmechanische Operator für die klassische Größe $\vec{x} \cdot \vec{p}$ ist.

2.4 Rechnen mit Operatoren

Wir definieren die $Summe \hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$ zweier Operatoren:

$$\hat{C}\Psi \equiv \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi$$
.

Das $Produkt \ \hat{A}\hat{B} = \hat{C}$ ist definiert als die Hintereinanderausführung

$$\hat{C}\Psi \equiv \left(\hat{A}\hat{B}\right)\Psi = \hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right)$$
.

Falls \hat{A} und \hat{B} hermitesch sind, so ist auch die Summe $\hat{A} + \hat{B}$ hermitesch. Anders ist es beim Produkt-Operator, der im allgemeinen nicht kommutativ ist, d.h.

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$$
 .

Man definiert deshalb den Kommutator oder die Vertauschungsklammer

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_{-} \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.40}$$

und anlalog dazu den Antikommutator

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_{+} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} . \qquad (2.41)$$

Als Beispiel berechnen wir die *Heisenbergschen Vertauschungsrelationen* von Impuls- und Orts-Operator. (*Tipp:* Bei solchen Berechnungen sollte man die Operatoren immer auf eine Wellenfunktion Ψ wirken lassen, um Mehrdeutigkeiten zu vermeiden.)

$$[\hat{p}_{j}, \hat{x}_{k}]_{-} \Psi = \left[\frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial x_{j}}, x_{k}\right]_{-} \Psi = \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial x_{j}} (x_{k}\Psi) - x_{k} \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial\Psi}{\partial x_{j}}$$

$$= \frac{\hbar}{\imath} x_{k} \frac{\partial\Psi}{\partial x_{j}} + \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial x_{k}}{\partial x_{j}} \Psi - \frac{\hbar}{\imath} x_{k} \frac{\partial\Psi}{\partial x_{j}} = \frac{\hbar}{\imath} \delta_{k,j} \Psi$$

$$[\hat{p}_{j}, \hat{x}_{k}]_{-} = -\imath \hbar \delta_{kj}$$

$$(2.42)$$

oder kurz

mit dem Kronecker-Symbol

$$\delta_{kj} = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq j \\ 1 & \text{für } k = j \end{cases}$$
(2.43)

Ebenso finden wir

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k]_- = \frac{\hbar^2}{i^2} \left[\frac{\partial}{\partial x_j}, \frac{\partial}{\partial x_k} \right]_-$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} \right) = 0$$
(2.44)

und

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k]_- = 0. (2.45)$$

2.4.1 Rechenregeln für Kommutatoren

Seien \hat{A}_1 , \hat{A}_2 , \hat{A}_3 und \hat{B} Operatoren und α ein Skalar. Dann gelten

$$\begin{bmatrix} \hat{A}, \hat{B} \end{bmatrix}_{-} = -\begin{bmatrix} \hat{B}, \hat{A} \end{bmatrix}_{-}$$
(2.46)

$$\left[\hat{A},\hat{A}\right]_{-} = 0 \tag{2.47}$$

$$\left[\hat{A},\alpha\hat{B}\right]_{-} = \alpha \left[\hat{A},\hat{B}\right]_{-} \qquad (2.48)$$

$$\left[\hat{A}_1 + \hat{A}_2, \hat{B} \right]_{-} = \left[\hat{A}_1, \hat{B} \right]_{-} + \left[\hat{A}_2, \hat{B} \right]_{-}$$
(2.49)

$$\left[\hat{A}_{1}\hat{A}_{2},\hat{B}\right]_{-} = \left[\hat{A}_{1},\hat{B}\right]_{-}\hat{A}_{2} + \hat{A}_{1}\left[\hat{A}_{2},\hat{B}\right]_{-}$$
(2.50)

$$\left[\hat{B}, \hat{A}_{1}\hat{A}_{2}\right]_{-} = \left[\hat{B}, \hat{A}_{1}\right]_{-}\hat{A}_{2} + \hat{A}_{1}\left[\hat{B}, \hat{A}_{2}\right]_{-}$$
(2.51)

und die Jacobi-Identität

$$\left[\hat{A}_{1}, \left[\hat{A}_{2}, \hat{A}_{3}\right]_{-}\right]_{-} + \left[\hat{A}_{2}, \left[\hat{A}_{3}, \hat{A}_{1}\right]_{-}\right]_{-} + \left[\hat{A}_{3}, \left[\hat{A}_{1}, \hat{A}_{2}\right]_{-}\right]_{-} = 0.$$
(2.52)

Der Beweis der Regeln (2.46)-(2.49) ist trivial.

Regel (2.50) folgt aus

$$\begin{bmatrix} \hat{A}_1 \hat{A}_2, \hat{B} \end{bmatrix}_{-} = \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{B} - \hat{B} \hat{A}_1 \hat{A}_2 = \hat{A}_1 \hat{B} \hat{A}_2 - \hat{B} \hat{A}_1 \hat{A}_2 + \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{B} - \hat{A}_1 \hat{B} \hat{A}_2 = \begin{bmatrix} \hat{A}_1, \hat{B} \end{bmatrix}_{-} \hat{A}_2 + \hat{A}_1 \begin{bmatrix} \hat{A}_2, \hat{B} \end{bmatrix}_{-}$$

Q.E.D.

Zum Beweis der Regel (2.51) nutzen wir Regel (2.46) und (2.50):

$$\begin{bmatrix} \hat{B}, \hat{A}_{1} \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-} = - \begin{bmatrix} \hat{A}_{1} \hat{A}_{2}, \hat{B} \end{bmatrix}_{-}$$

$$= - \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{B} \end{bmatrix}_{-} \hat{A}_{2} - \hat{A}_{1} \begin{bmatrix} \hat{A}_{2}, \hat{B} \end{bmatrix}_{-}$$

$$= \hat{A}_{1} \begin{bmatrix} \hat{B}, \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} \hat{B}, \hat{A}_{1} \end{bmatrix}_{-} \hat{A}_{2}$$

Q.E.D.

Zum Beweis der Jacobi-Identität nutzen wir nacheinander Regeln (2.49), (2.51) und (2.46):

$$\begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \begin{bmatrix} \hat{A}_{2}, \hat{A}_{3} \end{bmatrix}_{-} \end{bmatrix}_{-} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{2} \hat{A}_{3} \end{bmatrix}_{-} - \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{3} \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-}$$

$$= \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-} \hat{A}_{3} + \hat{A}_{2} \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{3} \end{bmatrix}_{-} - \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{3} \end{bmatrix}_{-} \hat{A}_{2} - \hat{A}_{3} \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-}$$

$$= -\begin{bmatrix} \hat{A}_{3}, \begin{bmatrix} \hat{A}_{1}, \hat{A}_{2} \end{bmatrix}_{-} \end{bmatrix}_{-} - \begin{bmatrix} \hat{A}_{2}, \begin{bmatrix} \hat{A}_{3}, \hat{A}_{1} \end{bmatrix}_{-} \end{bmatrix}_{-}$$

Q.E.D.

2.4.2 Der Bahndrehimpuls-Operator

Der klassische Bahndrehimpuls

$$\vec{l} = \vec{x} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

korrespondiert zum quantenmechanischen Bahndrehimpuls-Operator

$$\hat{l} = \hat{x} \times \hat{p} \tag{2.53}$$

mit den Komponenten (zur Vereinfachung der Schreibweise setzen wir $\hat{l}_x = l_x$ usw.)

$$l_x = yp_z - zp_y ,$$

$$l_y = zp_x - xp_z ,$$

$$l_z = xp_y - yp_x .$$
(2.54)

Wir berechnen mit den oben bewiesenen Regeln den Kommutator

$$\begin{split} [l_x, l_y] &= [l_x, l_y]_- \\ &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x - xp_z] - [zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= y [p_z, zp_x - xp_z] - [zp_y, zp_x - xp_z] p_z \\ &- z [p_y, zp_x - xp_z] - [z, zp_x - xp_z] p_y \\ &= y [p_z, zp_x] - y [p_z, xp_z] + [y, zp_x] p_z - [y, xp_z] p_z \\ &- z [p_y, zp_x] + z [p_y, xp_z] - [z, zp_x] p_y + [z, xp_z] p_y \\ &= y ([p_z, z] p_x + z [p_z, p_x]) - y ([p_z, x] p_z + x [p_z, p_z]) \\ &+ ([y, z] p_x + z [y, p_x]) p_z - ([y, x] p_z + x [y, p_z]) p_z \\ &- z ([p_y, z] p_x + z [z, p_x]) p_y + ([z, x] p_z + x [p_y, p_z]) \\ &- ([z, z] p_x + z [z, p_x]) p_y + ([z, x] p_z + x [z, p_z]) p_y . \end{split}$$

Mit den Heisenbergschen Vertauschungsregeln (2.42), (2.44) und (2.45) folgt

$$[l_x, l_y] = y\frac{\hbar}{\imath}p_x - \frac{\hbar}{\imath}xp_y = -\imath\hbar\left(yp_x - xp_y\right) = \imath\hbar l_z$$

Ebenso berechnet man

Das Levi-Civita Symbol ϵ_{ijk} ist +1 für ijk = 123, 231 oder 312; -1 für ijk = 132, 213 oder 321; und 0 in allen anderen Fällen.

2.5 Ehrenfestscher Satz

Wir betrachten die totale zeitliche Änderung des Erwartungswerts

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{d}{dt} \int d^3 x \, \Psi^* \left(\vec{x}, t \right) \hat{F} \Psi \left(\vec{x}, t \right)$$

$$= \int d^3 x \, \dot{\Psi}^* \hat{F} \Psi + \int d^3 x \, \Psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \Psi + \int d^3 x \, \Psi^* \left(\vec{x}, t \right) \hat{F} \dot{\Psi} \,. \qquad (2.56)$$

Aus der Schrödinger-Gleichung (2.16) und ihrer konjugiert komplexen (2.17) folgt

$$\begin{split} \dot{\Psi}^* &= \frac{\imath}{\hbar} \hat{H} \Psi^* , \\ \dot{\Psi} &= -\frac{\imath}{\hbar} \hat{H} \Psi , \end{split}$$

da der Hamilton-Operator hermitesch ist ($(\hat{H})^* = \hat{H}$). Für Gleichung (2.56) folgt

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{\imath}{\hbar} \int d^3 x \, \Psi^* \left(\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H} \right) \Psi \\
= \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{\imath}{\hbar} \int d^3 x \, \Psi^* \left[\hat{H}, \hat{F} \right]_- \Psi \\
= \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{\imath}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{F} \right]_- \right\rangle.$$
(2.57)

Für zeitunabhängiges F, d.h. $(\partial F/\partial t) = 0$, gilt dann

$$\frac{d}{dt}\left\langle F\right\rangle = \frac{\imath}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{F}\right]_{-} \right\rangle \,. \tag{2.58}$$

Als erstes wählen wir $\hat{F}=p_k$ und den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) . \qquad (2.59)$$

Wir erhalten

$$\begin{split} \begin{bmatrix} \hat{H}, \hat{F} \end{bmatrix}_{-} \Psi &= \begin{bmatrix} \hat{H}, p_k \end{bmatrix}_{-} \Psi \\ &= \frac{1}{2m} \begin{bmatrix} p^2, p_k \end{bmatrix}_{-} \Psi + \begin{bmatrix} V(x), p_k \end{bmatrix}_{-} \Psi \\ &= 0 + \begin{bmatrix} V(x), p_k \end{bmatrix}_{-} \Psi \\ &= (V(x)p_k - p_k V(x)) \Psi \\ &= V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} (V(x)\Psi) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \Psi \frac{\partial V(x)}{\partial x_k} , \end{split}$$

so dass Gleichung (2.58) in diesem Fall ergibt

$$\frac{d}{dt}\left\langle p_{k}\right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x_{k}}\right\rangle = \left\langle K_{k}\right\rangle$$

mit der Kraftkomponente $K_k=-\partial V(x)/\partial x_k.$ Verallgemeinert auf den Impulsvektor \vec{p} gilt dann

$$\frac{d}{dt}\left\langle \vec{p}\right\rangle = \left\langle \vec{K}\left(\vec{x}\right)\right\rangle \,. \tag{2.60}$$

Als zweites wählen wir $F = x_k$. Mit dem Hamilton-Operator (2.59) folgt in diesem Fall

$$\begin{bmatrix} \hat{H}, \hat{F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{H}, x_k \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2m} \begin{bmatrix} p^2, x_k \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2m} \begin{bmatrix} p_k^2, x_k \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\begin{bmatrix} p_k, x_k \end{bmatrix} p_k + p_k \begin{bmatrix} p_k, x_k \end{bmatrix} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{im} p_k$$

unter Ausnutzung von Vertauschungsregel (2.42). Mit Gleichung (2.58) finden wir

$$\frac{d}{dt}\left\langle x_{k}\right\rangle =\left\langle \frac{p_{k}}{m}\right\rangle$$

oder verallgemeinert auf den Ortsvektor \vec{x}

$$m\frac{d}{dt}\left\langle \vec{x}\right\rangle = \left\langle \vec{p}\right\rangle \ . \tag{2.61}$$

Damit haben wir das *Ehrenfestsche Theorem* bewiesen: die Erwartungswerte quantenmechanischer Größen bewegen sich nach den klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen. Zusammengefasst besagen Gleichungen (2.60) und (2.61)

$$m\frac{d^2}{dt^2}\left\langle \vec{x} \right\rangle = \left\langle \vec{K}\left(\vec{x} \right) \right\rangle = -\left\langle \mathsf{grad}V \right\rangle \ . \tag{2.62}$$

Gleichung (2.62) ist aber nicht identisch mit den klassischen Newton-Gleichungen, da im allgemeinen

$$\left\langle \vec{K}\left(\vec{x}\right)\right\rangle \neq \vec{K}\left(\left\langle \vec{x}\right\rangle\right)$$
 . (2.63)

Eine Ausnahme ist der Spezialfall, dass V(x) ein Polynom 2. Grades in x ist.

2.6 Heisenbergsche Unschärferelation

Im Kapitel 2.3 wurden die Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung $\Psi(\vec{x},t)$ und in der Impulsdarstellung $\psi(\vec{p},t)$ betrachtet. Beide Darstellungen sind durch Fouriertransformation verknüpft:

$$\begin{split} \Psi \left(\vec{x}, t \right) &= \frac{1}{\left(2 \pi \hbar \right)^{3/2}} \int d^3 p \; \psi \left(\vec{p}, t \right) e^{\imath \vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar} \; , \\ \psi \left(\vec{p}, t \right) &= \frac{1}{\left(2 \pi \hbar \right)^{3/2}} \int d^3 x \; \Psi \left(\vec{x}, t \right) e^{-\imath \vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar} \; . \end{split}$$

 $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der Ortsmesswerte \vec{x} ; $|\psi(\vec{p},t)|^2$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der Impulsmesswerte \vec{p} . Zwischen den Verteilungen $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ und $|\psi(\vec{p},t)|^2$ besteht eine Korrelation, die quantitativ durch die Unschärferelation ausgedrückt wird.

 $\langle \vec{x} \rangle$ und $\langle \vec{p} \rangle$ seien die mittleren Messwerte im ein-dimensionalen Zustand Ψ (z.B. $x = x_x$ und $p = p_x$). Wir definieren die *Abweichung*

$$\delta x \equiv x - \langle x \rangle \ , \tag{2.64}$$

die positiv oder negativ sein kann, und die Unschärfe der Ortsvariablen (Achtung: Δ hier nicht Laplace-Operator!)

$$\Delta x \equiv \sqrt{\left\langle (\delta x)^2 \right\rangle}, \qquad (2.65)$$
$$(\Delta x)^2 = \left\langle \left(x^2 - 2x \left\langle x \right\rangle + \left\langle x \right\rangle^2 \right) \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2$$

so dass

also

und

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} . \tag{2.66}$$

Ebenso erhalten wir für die Unschärfe des Impulses mit der Abweichung $\delta p \equiv p - \langle p \rangle$:

$$\Delta p \equiv \sqrt{\left\langle (\delta p)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle p^2 \right\rangle - \left\langle p \right\rangle^2} \tag{2.67}$$

Im folgenden verwenden wir die Notation

$$\begin{split} \tilde{x} &\equiv x - \langle x \rangle &\to \Delta x = \sqrt{\langle \tilde{x}^2 \rangle} \\ \tilde{p} &\equiv p - \langle p \rangle &\to \Delta p = \sqrt{\langle \tilde{p}^2 \rangle} \,. \end{split}$$

Dann gilt für den Kommutator

$$\begin{split} [\tilde{p}, \tilde{x}] &= \tilde{p}\tilde{x} - \tilde{x}\tilde{p} \\ &= (p - \langle p \rangle) \left(x - \langle x \rangle \right) - \left(x - \langle x \rangle \right) \left(p - \langle p \rangle \right) \\ &= px - p \left\langle x \right\rangle - \langle p \right\rangle x + \langle p \rangle \left\langle x \right\rangle - (xp - x \left\langle p \right\rangle - \left\langle x \right\rangle p + \left\langle x \right\rangle \left\langle p \right\rangle) \\ &= px - xp = -i\hbar . \end{split}$$

$$(2.68)$$

Wir betrachten den positiven Ausdruck

$$0 < I(\lambda) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \left| \tilde{x} \Psi + i\lambda \tilde{p} \Psi \right|^2 \,, \qquad (2.69)$$

wobei λ ein reeller Parameter ist. Es ist

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (\tilde{x}\Psi + i\lambda\tilde{p}\Psi)^* \, (\tilde{x}\Psi + i\lambda\tilde{p}\Psi)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, (\tilde{x}^*\Psi^* - i\lambda \, (\tilde{p}\Psi)^*) \, (\tilde{x}\Psi + i\lambda\tilde{p}\Psi)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \left(\tilde{x}^2 \, |\Psi|^2 + \tilde{x}^*\Psi^* i\lambda\tilde{p}\Psi - i\lambda \, (\tilde{p}\Psi)^* \, \tilde{x}\Psi + \lambda^2 \, (\tilde{p}\Psi)^* \, (\tilde{p}\Psi)\right)$$

$$= (\Delta x)^2 + \lambda^2 \, (\Delta p)^2 + i\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \Psi^* \, (\tilde{x}\tilde{p} - \tilde{p}\tilde{x}) \, \Psi \, .$$

Verwendung von Gleichung (2.68) im letzten Term ergibt

$$I(\lambda) = (\Delta p)^2 \lambda^2 - \hbar \lambda + (\Delta x)^2 > 0, \quad \forall \lambda .$$
(2.70)

Weil dieses Polynom zweiten Grades in λ nach Konstruktion (2.69) positiv ist, müssen die Nullstellen der quadratischen Gleichung $I(\lambda) = 0$ komplex sein. Für die Nullstellen gilt

$$\lambda^2 - \frac{\hbar}{\left(\Delta p\right)^2}\lambda + \frac{\left(\Delta x\right)^2}{\left(\Delta p\right)^2} = 0$$

mit den Lösungen

$$\lambda_{1,2} = \frac{\hbar}{2\left(\Delta p\right)^2} \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{4\left(\Delta p\right)^4} - \frac{\left(\Delta x\right)^2}{\left(\Delta p\right)^2}} \,.$$

Wir erhalten komplexe Nullstellen $\lambda_{1,2}$ falls

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle \frac{\hbar^2}{4 \left(\Delta p \right)^4} - \frac{\left(\Delta x \right)^2}{\left(\Delta p \right)^2} & \leq & 0 \; , \\ \displaystyle \hbar^2 - 4 \left(\Delta x \right)^2 \left(\Delta p \right)^2 & \leq & 0 \; , \end{array}$$

oder

was auf die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\left(\Delta p_x\right)\left(\Delta x\right) \ge \frac{\hbar}{2} \tag{2.71}$$

führt. Ebenso erhält man

$$(\Delta p_y) (\Delta y) \geq \frac{\hbar}{2} , (\Delta p_z) (\Delta z) \geq \frac{\hbar}{2} .$$
 (2.72)

Je genauer im Zustand Ψ der Ort x lokalisiert ist, desto ungenauer ist der Wert des Impulses p und umgekehrt! Diese Erkenntnis hat enorme philosophische Konsequenzen.

In Bezug auf makroskopische Objekte ergeben sich keine praktischen Einschränkungen, weil der Wert von \hbar klein ist. Wir wollen die Bedeutung der Unschärferelation an mehreren Beispielen erläutern.

2.6.1 Beispiel 1: Wellenpaket

Gemäß Gleichung (1.43) gilt für das Wellenpaket

$$\Psi(x,t) = 2c \left(k_0\right) \frac{\sin\left[\Delta k \left(x - v_g t\right)\right]}{x - v_g t} e^{i[k_0 x - \omega_0 t]}$$

zur Zeit t = 0 die in Abb. 2.2 gezeigte Wahrscheinlichsdichte

$$|\Psi(x,0)|^{2} = \Psi(x,0) \Psi^{*}(x,0) = 4c^{2}(k_{0}) \frac{\sin^{2}(\Delta kx)}{x^{2}}.$$
(2.73)

2.6 Heisenbergsche Unschärferelation



Abbildung 2.2: Wahrscheinlichkeitsdichte des Wellenpakets zur Zeit t = 0

Die Ausdehnung des Wellenpakets ist durch den Abstand der ersten beiden Minima $\Delta x \simeq x_1 - x'_1 = 2x_1$ gegeben. Das erste Mimumum der Funktion (2.73) ist durch

$$\frac{\sin^2\left(\Delta kx\right)}{x^2} = 0$$

bestimmt und tritt auf wenn $\Delta k x_1 = \pi$, so dass

$$\left(\Delta k\right)\left(\Delta x\right) = 2\pi \; .$$

Nach Multiplikation mit \hbar folgt mit $\Delta p = \hbar \Delta k$

$$(\Delta x) (\Delta p) = 2\pi\hbar = h . \qquad (2.74)$$

Im Bereich der Mikrophysik können Ort und Impuls nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden.

2.6.2 Beispiel 2: Beugung am Spalt

Es falle eine ebene Elektronenwelle senkrecht auf einen Spalt der Breite a ein (siehe Abb. 2.3).

Bevor die Welle den Spalt und anschließend den Schirm erreicht, hat sie einen scharfen Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ in *y*-Richtung, d.h. $\Delta p_y = 0$, und eine unendliche Ausdehnung in *y*-Richtung $\Delta y = \infty$. Dies ist im Einklang mit $\Delta p_y \Delta y \ge \hbar/2$.

Kurz nach dem Durchtritt durch den Spalt ist die Ausdehnung der Welle in y-Richtung durch die Spaltbreite festgelegt, d.h. $\Delta y = a$. Aufgrund der Beugung am Spalt ist die Größe des Impulses p_y in y-Richtung nach Durchtritt nicht mehr völlig bestimmt. Die Breite der Impulsverteilung wird größenordnungsmäßig durch das erste Minimum des Beugungsbilds



Abbildung 2.3: Unschärferelation beim Beugungsexperiment

gegeben, $\Delta p_y \simeq |\vec{p}|\sin\Theta_{\min}$. Für die Beugung am Spalt gilt mit der Wellenlänge λ die Gleichung

a sin
$$\Theta_{\min} \simeq \lambda$$
,
sin $\Theta_{\min} \simeq \frac{\lambda}{a} = \frac{2\pi 1}{\left|\vec{k}\right| a} = \frac{2\pi 1}{\left|\vec{k}\right| \Delta y} = \frac{2\pi h}{\left|\vec{p}\right| \Delta y}$,
 $\Delta y \left|\vec{p}\right| \sin \Theta_{\min} \simeq \Delta y \Delta p_y \simeq 2\pi \hbar = h$, (2.75)

so dass

oder

wiederum im Einklang mit der Unschärferelation.

2.6.3 Konsequenz der Unschärferelation für Atome

Ein Elektron, das sich im anziehenden Coulombfeld $-e^2/r$ des Protons bewegt, fällt nach der klassischen Physik (unter Abstrahlung elektromagnetischer Energie) ins Zentrum. Quantenmechanisch hat es, wenn es sich im Ortsbereich r bewegt, nach der Unschärferelation mindestens Impulse von der Größe $p \simeq \Delta p \simeq \hbar/r$. Die kinetische Energie des Elektrons beträgt dann

$$\frac{p^2}{2m_e} \simeq \frac{\hbar^2}{2m_e r^2}$$

so dass die Gesamtenergie des Elektrons am Ort r durch

$$E(r) \simeq \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r}$$
 (2.76)

gegeben ist. Wir berechnen die Minimalenergie aus

$$\left. \frac{dE}{dr} \right|_{r_0} = -\frac{\hbar^2}{m_e r_0^3} + \frac{e^2}{r_0^2} = 0$$

und erhalten für den sog. Bohr-Radius

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha_f m_e c} = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{cm} , \qquad (2.77)$$

wobei

$$\alpha_f = \frac{e^2}{(\hbar c)} = \frac{1}{137.04}$$
(2.78)

die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante bezeichnet. Wir finden

$$E_{\min} = E(r_0)$$

$$= \frac{1}{r_0} \left[\frac{\hbar^2 m_e e^2}{2m_e \hbar^2} - e^2 \right] = -\frac{e^2}{2r_0} = -\frac{e^2 m_e c \alpha_f}{2\hbar}$$

$$= -\frac{1}{2} \alpha_f^2 m_e c^2 = -13.6 \text{eV} . \qquad (2.79)$$

Da eine tiefere Energie nicht möglich ist, kann das Elektron im Grundzustand keine Energie abstrahlen und ins Zentrum fallen! Die Unschärferelation liefert also eine einfache, qualitative Abschätzung für die Größe (Bohr-Radius) und die Energie des Wasserstoffatoms.

2.7 Wellenmechanik als formale klassische Feldtheorie (Ausbau der allgemeinen Theorie)

2.7.1 Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder

Aus der Mechanik-Vorlesung wissen wir, dass sich die Lagrange-Gleichungen und die kanonischen Bewegungsgleichungen aus dem Hamilton-Prinzip der kleinsten Wirkung,

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) \, dt = 0 \,, \qquad (2.80)$$

ergeben.

In diesem Abschnitt wollen wir zeigen, wie sich die Schrödinger-Gleichung aus einem entsprechend verallgemeinerten Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder ableiten lässt.

2.7.2 Lagrange-Dichte und Hamilton-Dichte

Im Rahmen einer Feldtheorie führen wir die Lagrange-Dichte \mathcal{L} durch das Volumenintegral

$$L = \iiint \mathcal{L} dx dy dz \tag{2.81}$$

ein, wobei das Integrationsvolumen beliebig ist. Die Lagrange-Dichte \mathcal{L} ist dabei eine Funktion von einer oder mehreren Funktionen $u_r(x, y, z, t)$ und deren ersten partiellen Ableitungen $\partial u_r/\partial x$, $\partial u_r/\partial y$, $\partial u_r/\partial z$ und $\partial u_r/\partial t$.

Das Hamilton-Prinzip (2.80) lautet dann

$$\delta \iiint \int \mathcal{L} dx dy dz dt = 0 , \qquad (2.82)$$

wobei die willkürlichen Variationen δu_r an den Randflächen des beliebigen durch x, y, z und t beschriebenen vierdimensionalen Raum-Zeit-Volumens verschwinden sollen.

In Analogie zur klassischen Mechanik definieren wir die Hamilton-Dichte durch

$$\mathcal{H} \equiv \sum_{r} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_{r}} \dot{u}_{r} - \mathcal{L}$$
(2.83)

und die Hamilton-Funktion ergibt sich durch Integration dieser Dichte über das drei-dimensionale Raumelement

$$H = \iiint \mathcal{H} dx dy dz . \tag{2.84}$$

Wir führen jetzt die Variation gemäß Gleichung (2.82) aus, d.h.

$$\iiint \delta \mathcal{L} dx dy dz dt = 0.$$
 (2.85)

Mit der δ -Notation (siehe Mechanik-Vorlesung Kap. (3.11.1)) gilt

$$\delta \mathcal{L} = \sum_{r} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{r}} \delta u_{r} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_{r}}{\partial x}} \delta \frac{\partial u_{r}}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_{r}}{\partial y}} \delta \frac{\partial u_{r}}{\partial y} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_{r}}{\partial z}} \delta \frac{\partial u_{r}}{\partial z} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_{r}}{\partial t}} \delta \frac{\partial u_{r}}{\partial t} \right) . \quad (2.86)$$

Weil die beliebigen Variationen unabhängig vom Ableitungsprozess sind, gilt

$$\delta \frac{\partial u_r}{\partial x} = \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial x}, \qquad \delta \frac{\partial u_r}{\partial y} = \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial y}, \\ \delta \frac{\partial u_r}{\partial z} = \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial z}, \qquad \delta \frac{\partial u_r}{\partial t} = \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial t},$$

so dass z.B. nach partieller Integration

$$\iiint \int \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \delta \frac{\partial u_r}{\partial x} dx dy dz dt$$

$$= \iiint \int \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial x} dx dy dz dt$$

$$= \int dy \int dz \int dt \int dx \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \frac{\partial (\delta u_r)}{\partial x}$$

$$= \int dy \int dz \int dt \left(\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \delta u_r \right]_{\text{Rand von x}} - \int dx \delta u_r \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \right] \right)$$

$$= -\iiint \delta u_r \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} \right] dx dy dz dt , \qquad (2.87)$$

weil der Randterm verschwindet aufgrund der Annahme $\delta u_r|_{\text{Rand von x}} = 0$. Verfährt man ebenso mit den anderen Termen von Gleichung (2.86), erhält man für Gleichung (2.85)

$$\iiint \int \sum_{r} \delta u_r \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_r} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial y}} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial z}} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial t}} \right) dx dy dz dt = 0 \ .$$

Weil die Variationen δu_r beliebig sind, gilt für jede Feldfunktion u_r

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_r} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial x}} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial y}} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial z}} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial u_r}{\partial t}} = 0$$
(2.88)

zu jedem Zeitpunkt und an jedem Punkt des betrachteten Raum-Zeit-Gebiets. Die Gleichungen (2.88) werden als *Euler-Lagrange Gleichungen* bezeichnet.

2.7.3 Lagrange-Formalismus

Wir suchen eine Lagrange-Dichte mit den zwei Feldfunktion $u_1 = \Psi$ und $u_2 = \Psi^*$,

$$\mathcal{L}\left(\Psi,\Psi^*,\partial_t\Psi,\partial_t\Psi^*,\partial_i\Psi,\partial_i\Psi^*\right)$$
,

die die Schrödinger-Gleichung und ihre konjugiert komplexe als Feldgleichungen ergibt. Gemäß Gleichung (2.88) gilt dann

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{i} \Psi)} = 0$$
(2.89)

und

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \Psi^*)} = 0$$
(2.90)

mit der Abkürzung

$$\partial_i \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} , \quad i = 1, 2, 3$$

Als Ansatz für die Lagrange-Dichte erraten wir

$$\mathcal{L} = \imath \hbar \Psi^* \dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 \left(\partial_k \Psi^* \right) \left(\partial_k \Psi \right) - V \Psi^* \Psi .$$
(2.91)

Es gilt dann

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} = -V\Psi^*, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = \imath\hbar\Psi^*, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \Psi)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_i \Psi^*\right)$$
(2.92)

und

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = \imath \hbar \dot{\Psi} - V \Psi , \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0 , \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \Psi^*)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_i \Psi \right) .$$
(2.93)

Mit den Ergebnissen (2.93) folgt für die zweite Lagrange-Gleichung (2.90) dann

$$\imath \hbar \dot{\Psi} - V \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i^2 \Psi \right) = 0 ,$$

also die Schrödinger-Gleichung

$$\imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi.$$
(2.94)

Mit den Ergebnissen (2.92) folgt für die erste Lagrange-Gleichung (2.89) dann ebenso

$$-V\Psi^* - i\hbar \dot{\Psi}^* + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i^2 \Psi^*\right) = 0 ,$$

also die konjugiert komplexe Schrödinger-Gleichung

$$-\imath\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi^* .$$
(2.95)

2.7.4 Hamilton-Dichte

Für die Hamilton-Dichte (2.83) erhalten wir mit den kanonischen Impulsen

$$\pi^{(1)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = \imath \hbar \Psi^* , \qquad \pi^{(2)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi^*}} = 0$$

aus der Lagrange-Dichte (2.91)

$$\mathcal{H} = \pi^{(1)} \dot{\Psi} - i\hbar \Psi^* \dot{\Psi} + V \Psi^* \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 (\partial_k \Psi^*) (\partial_k \Psi)$$

= $V \Psi^* \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 (\partial_k \Psi^*) (\partial_k \Psi)$
= $-\frac{i}{\hbar} V \pi^{(1)} \Psi - \frac{i\hbar}{2m} \sum_{k=1}^3 (\partial_k \pi^{(1)}) (\partial_k \Psi)$. (2.96)

2.8 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Für zeitunabhängige Potentiale $V(\vec{x})$ ist der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\left(\vec{x}\right)$$

ebenfalls zeitunabhängig. Wir betrachten den eindimensionalen Fall

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) . \qquad (2.97)$$

2.8.1 Separationsansatz

Die dazugehörige eindimensionale Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t) \tag{2.98}$$

ergibt mit dem Separationsansatz $\Psi(x,t) = \Phi(x)f(t)$

$$i\hbar \frac{df}{dt} \Phi(x) = f(t)\hat{H}\Phi(x) ,$$

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\Phi}\hat{H}\Phi(x) = E , \qquad (2.99)$$

oder

wobei E die Separationskonstante ist. Da die linke Seite von Gleichung (2.99) nur eine Funktion von t ist, der mittlere Teil nur eine Funktion von x ist, kann für alle Werte von t und x diese Gleichung nur gelten, wenn beide Teile gleich derselben Konstanten E sind. Wir erhalten dann die zwei Gleichungen

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \qquad (2.100)$$
$$\frac{1}{\Phi} \hat{H} \Phi(x) = E . \qquad (2.101)$$

und

Gleichung (2.100) hat die Lösung

$$\ln f = c_0 - \frac{\imath}{\hbar} Et \; .$$

Wir setzen die Konstante $c_0 = 0$ (andere Werte können wir in den Anteil $\Phi(x)$ hineinsetzen), so dass

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} . (2.102)$$

Die Funktion $\Phi(x)$ erfüllt gemäß (2.101) die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\Phi(x) = E\Phi(x) . \tag{2.103}$$

Diese kann erst gelöst werden, wenn das Potential V(x) spezifiziert wird. Sie ergibt dann Eigenlösungen $\Phi = \Phi_E$ zu allen erlaubten Eigenwerten E.

Die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung (2.98) ist das Integral

$$\Psi(x,t) = \int dE \ A(E)f(t,E)\Phi(x,E)$$
(2.104)

über das Produkt der Funktionen f und Φ multipliziert mit einer beliebigen Funktion A(E)der Separationskonstanten, weil damit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \hat{H}\Psi(x,t) = \int dE \ A(E) \left[\Phi i\hbar \frac{df}{dt} - f\hat{H}\Phi \right]$$
$$= \int dE \ A(E) \left[E\Phi f - Ef\Phi \right] = 0 . \tag{2.105}$$

53

(2.101)

2.8.2 Vorteile von separablen Lösungen

Es gibt drei wesentliche Vorteile von separablen Lösungen.

(1) Es existieren *stationäre*, *zeitunabhängige Zustände*: obwohl die Wellenfunktion selbst von *t* abhängt,

$$\Psi(x,t) = \Phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} ,$$

ist die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\Psi(x,t)|^{2} = \Psi^{*}\Psi = \Phi^{*}(x)e^{\frac{i}{\hbar}Et}\Phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = |\Phi(x)|^{2}$$

zeitunabhängig, weil E für normierbare Funktionen reell sein muss. Das gleiche gilt für die Erwartungswerte jeder dynamischen Variablen

$$\begin{aligned} \langle Q(x,p) \rangle &= \int dx \ \Psi^*(x,t) Q\left(x \ , \frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx}\right) \Psi(x,t) \\ &= \int dx \ \Phi^*(x) Q\left(x \ , \frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx}\right) \Phi(x) \ , \end{aligned}$$

die ebenfalls zeitlich konstant sind.

(2) Diese Zustände haben eine *definierte Gesamtenergie* (Bedeutung der Separationskonstanten): Sei \hat{H} der Hamilton-Operator zur klassischen Hamiltonfunktion H = T + V im zeitunabhängigen Fall, dann ist

$$\int dx \ \Psi^*(x,t) \hat{H} \Psi(x,t) = \int dx \ \Psi^*(x,t) \left(\hat{T} + \hat{V}\right) \Psi(x,t)$$
$$= \langle T \rangle + \langle V \rangle \ ,$$

aber auch mit Gleichung (2.103)

$$\int dx \ \Psi^*(x,t) \hat{H}\Psi(x,t) = \int dx \ \Phi^*(x) f^*(t) \hat{H}\Phi(x) f(t)$$

$$= \int dx \ \Phi^*(x) \hat{H}\Phi(x)$$

$$= E \int dx \ \Phi^*(x) \Phi(x)$$

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

$$\langle T \rangle + \langle V \rangle = E . \qquad (2.106)$$

so dass

Die Separationskonstante E ist der Erwartungswert der Gesamtenergie. Weiterhin ist

$$\hat{H}^2 \Phi = \hat{H} \left(\hat{H} \Phi \right) = \hat{H} \left(E \Phi \right) = E \left(\hat{H} \Phi \right) = E^2 \Phi$$
$$\left\langle H^2 \right\rangle = \int dx \ \Phi^*(x) \hat{H}^2 \Phi(x) = E^2 \int dx \ |\Phi|^2 = E^2 ,$$

und

so dass die Unschärfe

$$\sigma_{H}^{2} = \left\langle H^{2} \right\rangle - \left\langle H \right\rangle^{2} = E^{2} - E^{2} = 0 \; . \label{eq:self-self-self-self-eq}$$

Eine separable Lösung hat die Eigenschaft, dass jede Messung der Gesamtenergie den Wert E ergibt.

(3) *Linearkombination von separablen Lösungen*: Wie mit Gleichung (2.104) ausgedrückt, ist die allgemeine Lösung eine Superposition von separablen Lösungen der Form

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \Phi_n(x, E_n) e^{-iE_n t/\hbar} , \qquad (2.107)$$

wobei wir das Integral in Gleichung (2.104) hier als unendliche Reihe schreiben.

Es wird sich zeigen, dass alle Lösungen für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren so dargestellt werden können: die Eigenlösungen hermitescher Operatoren bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im Raum der quadratintegrablen Funktionen.

2.9 Erweiterung auf Mehrteilchensysteme

 $|\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, die Teilchen $1, 2, \dots, N$ an den Orten $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$ anzutreffen. Aus dieser Wahrscheinlichkeit erhält man z. B. für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Teilchen 1 unabhängig von der Position der anderen Teilchen

$$P(\vec{x}_1, t) = \int d^3 x_2 \dots d^3 x_N |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)|^2$$
(2.108)

Für die entsprechende Wellenfunktion im Impulsraum gilt

$$\psi(\vec{p}_{1},\vec{p}_{2},\ldots,\vec{p}_{N},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \int d^{3}x_{1}\ldots d^{3}x_{N} \Psi(\vec{x}_{1},\vec{x}_{2},\ldots,\vec{x}_{N},t) \\ \times \exp\left[-i\sum_{j=1}^{N}\vec{p}_{j}\cdot\vec{x}_{j}/\hbar\right]$$
(2.109)

und als 3N-dimensionale Fourier-Umkehrtransformation gilt für die Wellenfunktion im Ortsraum

$$\Psi(\vec{x}_{1}, \vec{x}_{2}, \dots, \vec{x}_{N}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \int d^{3}p_{1} \dots d^{3}p_{N} \ \psi(\vec{p}_{1}, \vec{p}_{2}, \dots, \vec{p}_{N}, t)$$
$$\times \exp\left[+i\sum_{j=1}^{N} \vec{p}_{j} \cdot \vec{x}_{j}/\hbar\right].$$
(2.110)

Die zeitliche Konstanz der Norm

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t)|^2 = 0$$
(2.111)

folgt aus der Hermitezität des Mehrteilchen-Hamilton-Operators $\hat{H}.$ Die Erwartungswerte berechnen sich z. B. zu

$$\begin{split} \langle \vec{x}_1 \rangle &= \int d^3 x_1 \, \vec{x}_1 P \left(\vec{x}_1, t \right) \\ &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \, \vec{x}_1 \, |\Psi \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t \right)|^2 \\ &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \, \Psi^* \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t \right) \, \vec{x}_1 \Psi \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t \right) \, (2.112) \\ \text{und} \quad \langle \vec{p}_2 \rangle &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \, \Psi^* \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t \right) \, \frac{\hbar}{\imath} \nabla_{\vec{x}_2} \Psi \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t \right) \, .(2.113) \end{split}$$

3 Eindimensionale Quantensysteme

3.1 Eindimensionale Schrödinger-Gleichung

Dieser einfachste Fall ist sehr wichtig, da Systeme mit mehreren Freiheitsgraden im allgemeinen durch Separationsansatzlösungen auf Systeme mit einem Freiheitsgrad zurückgeführt werden können. Eindimensionale Systeme sind mathematisch leichter zu durchschauen als mehrdimensionale; sie illustrieren gut quantenmechanische Phänomene und mathematische Formulierungen.

Mit einer Raumdimension lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung (siehe Kap. 2.8) in der Ortsdarstellung

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x) \right] \psi(x) = 0 , \qquad (3.1)$$

mit der Annahme, dass Wechselwirkungen durch das ortsabhängige Potential V(x) beschrieben werden.

Gleichung (3.1) ist eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung, linear und homogen. Zu jedem Wert von E gibt es zwei linear unabhängige Fundamentallösungen. Ohne Randbedingungen sind diese Lösungen noch nicht eindeutig festgelegt.

Aber: die Deutung des Betragsquadrats der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte für Ortsmessungen verlangt drei einschränkende Forderungen an physikalisch sinnvolle Wellenfunktionen (Randbedingungen):

- (R1) Für alle Werte von x sollen die Lösungen endlich, stetig und eindeutig sein, damit die Stetigkeit der Wahrscheinlichskeitsdichte gewährleistet ist.
- (R2) Die Lösungen sollen differenzierbar sein für alle Werte von x, außer an den Sprungstellen des Potentials V(x). Für endliche Sprünge soll dort die Ableitung der Wellenfunktion stetig sein. Diese Forderung garantiert die Stetigkeit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte (2.21).
- (R3) Die Lösungen sollen normierbar, also quadratintegrabel sein.

Diese drei Forderungen sind im allgemeinen nicht für beliebige Werte von E erfüllbar und führen auf ein Spektrum von zulässigen Energieeigenwerten. Diese "Quantelung" der Energieeigenwerte E ist eine Konsequenz der obigen drei Randbedingungen.

Begründung der Randbedingungen R1 und R2:

Wir betrachten das in Abb. 3.1 gezeigte Potential V(x), das stetig in den Bereichen I und II ist, bei x = a aber einen endlichen Sprung hat.

Angenommen, die Wellenfunktion $\psi(x)$ wäre unstetig an der Potentialsprungstelle a, d.h.

$$\psi(x) \propto \Theta(x-a) \; ,$$

3 Eindimensionale Quantensysteme

wobei $\Theta(z) = 1$ für z > 0, $\Theta(z) = 0$ für z < 0 die Heaviside-Springfunktion bezeichnet. Dann wäre die erste Ableitung nach x, $\psi' \propto \delta(x - a)$ und die zweite Ableitung

$$\psi'' \propto \delta'(x-a) . \tag{3.2}$$

Ebenso, wenn $\psi^{'} \propto \Theta(x-a)$ unstetig wäre bei x=a, dann wäre die zweite Ableitung

$$\psi'' \propto \delta(x-a) . \tag{3.3}$$

In beiden Fällen (3.2) und (3.3) hätte $\psi^{''}$ einen unendlich großen Sprung bei x = a! Das wäre aber ein Widerspruch zu Gleichung (3.1), wonach

$$\psi''(a) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(a) \right] \psi(a) \tag{3.4}$$

höchstens eine endliche Sprungstelle hat. Q.E.D.



Abbildung 3.1: Eindimensionales Potential mit endlicher Sprungstelle

Mathematisch lauten die Randbedingungen R1 und R2 also in diesem Fall

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a) \tag{3.5}$$

und

$$\psi'_{I}(a) = \psi'_{II}(a).$$
 (3.6)

Statt Gleichung (3.6) ist es oft zweckmäßiger, die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung

$$\frac{\psi'_{I}(a)}{\psi_{I}(a)} = \left[\frac{d}{dx}\ln\psi_{I}(x)\right]_{x=a}$$
$$= \left[\frac{d}{dx}\ln\psi_{II}(x)\right]_{x=a} = \frac{\psi'_{II}(a)}{\psi_{II}(a)}$$
(3.7)

zu verwenden.

3.2 Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Als erstes Beispiel behandeln wir das in Abb. 3.2 gezeigte Potential

0



Abbildung 3.2: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Dieses Potential begrenzt die Teilchenbewegung auf das Innere eines Kastens, weil an den Stellen x = 0 und x = a eine unendlich große Kraft das Entweichen der Teilchen verhindert. Im Inneren des Potentialtopfs ($0 \le x \le a$) gilt mit V = 0 nach Gleichung (3.1)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 aga{3.9}$$

а

x

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \qquad (3.10)$$

Dabei haben wir implizit positive Werte von E > 0 angenommen, da negative Werte E < 0 keine normierbaren Lösungen ergeben (Übungsaufgabe).

Welche Lösung gilt im Aussenraum (x < 0 und x > a), wo $V = V_{\infty} = V_0 = \infty$? Ein physikalisches Potential ist nie wirklich unendlich groß: wir betrachten zunächst den Fall $V_0 \gg E$ und dann den Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$.

Für x < 0 und x > a gilt

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0 \tag{3.11}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \simeq \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} > 0. \qquad (3.12)$$

mit

3 Eindimensionale Quantensysteme

Die Lösung von Gleichung (3.11) ist

$$\psi(x) = A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x) . \qquad (3.13)$$

Die Forderung nach Normierbarkeit $\int_{-\infty}^\infty dx |\psi(x)|^2=1$ schließt exponentiell ansteigende Lösungen aus. Wir erhalten also

$$\psi(x) = \begin{cases} B \exp(-\kappa x) & \text{für} \quad x > a \\ B' \exp(\kappa x) & \text{für} \quad x < 0 \end{cases}$$
(3.14)

mit den konstanten B und B'.

Ein klassisches Teilchen mit $E < V_0$ könnte sich nur im Bereich $0 \le x \le a$ bewegen. Die Lösung (3.14) sagt, dass quantenmechanische Teilchen auf der Länge

$$\Delta x \simeq \frac{1}{\kappa} \simeq \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}} \tag{3.15}$$

in den klassisch unzugänglichen Teil eindringen können. Eine Impulsmessung in diesem Bereich würde zu

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \sqrt{2mV_0} \tag{3.16}$$

führen, also gerade zu Impulsen mit $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \simeq V_0$, die klassisch zur Überwindung der Barriere erforderlich wären.

Im Grenzfall $V_0 \to \infty$ geht die Eindringtiefe (3.15) $\Delta x \to 0$. Mit $\kappa \to \infty$ wird die Lösung (3.14) zu

 $\psi(x) = 0$, für x < 0, x > a. (3.17)

Nebenbemerkung: Wir könnten zur Begründung der Lösung (3.17) auch mit dem Erwartungswert der potentiellen Energie

$$\langle V\rangle = \int_{-\infty}^\infty dx \; V(x) |\psi(x)|^2$$

argumentieren. Damit < V > und damit die Gesamtenergie der Lösung endlich ist, muss die Wellenfunktion in Bereichen mit $V_0 = \infty$ verschwinden.

Aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion (3.5) lautet das zu lösende Problem mit Gleichung (3.9) und (3.17)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad \text{DGL}, \quad 0 \le x \le a$$
(3.18)

$$\psi(0)=\psi(a) \ = \ 0 \ , \qquad {\rm Randbedingungen} \ . \eqno(3.19)$$

Die Lösung der Differentialgleichung (3.18) ist

$$\psi(x) = A_1 \sin(kx) + A_2 \cos(kx) .$$

Die erste Randbedingung $\psi(0) = A_2 = 0$ liefert $A_2 = 0$. Die zweite Randbedingung lautet dann

$$\psi(a) = A_1 \sin(ka) = 0$$
. (3.20)
Die triviale Lösung $A_1 = 0$ wäre nicht normierbar, es bleibt also die Forderung

$$\sin(ka) = 0,
 ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
(3.21)

d.h.

n = 0 würde $\psi(x) = 0$ ergeben; negative Werte von n ergeben nur einen Vorzeichenwechsel, weil $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ ist, also keine neue linear unabhängige Lösung. Das negative Vorzeichen kann in der Konstanten A_1 berücksichtigt werden. Wir erhalten also die diskreten Werte $k = k_n$ mit

$$k_n = \frac{n\pi}{a}$$
, $n = 1, 2, 3, \dots$ (3.22)

Die Randbedingung bei x = a bestimmt also nicht die Konstante A_1 , sondern die Konstante $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und damit die möglichen Werte der Separationskonstanten

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} .$$
 (3.23)

Im Gegensatz zum klassischen Teilchen kann das quantenmechanische Teilchen nicht jede Energie haben, sondern nur die durch Gleichung (3.23) erlaubten. Die zu den Werten (3.22) gehörenden Lösungen

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$$

werden normiert durch

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_n(x)|^2 = A_n^2 \int_0^a dx \, \sin^2(k_n x)$$

= $\frac{A_n^2}{k_n} \int_0^{ak_n} dt \, \sin^2 t = \frac{A_n^2}{k_n} \left[\frac{t}{2} - \frac{1}{2} \sin t \cos t \right]_0^{ak_n}$
= $\frac{A_n^2}{2k_n} [ak_n - \sin(ak_n) \cos(ak_n)]$
= $\frac{A_n^2}{2k_n} [ak_n - \sin(n\pi) \cos(n\pi)] = \frac{A_n^2 a}{2},$
 $A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}.$

so dass

Damit erhalten wir

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$
, für $0 \le x \le a$, $n = 1, 2, 3, ...$ (3.24)

unendlich viele Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in diesem Fall. Der Grundzustand mit n = 1 hat die niedrigste Energie

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Die Zustände mit $n \ge 2$ werden als *angeregte Zustände* bezeichnet weil $E_n = n^2 E_1 > E_1$ ist.

In Abb. 3.3 skizzieren wir den Verlauf der ersten drei Wellenfunktionen. Die Lösungen sehen aus wie stehende Wellen auf einer Saite der Länge *a*.



Abbildung 3.3: Verlauf der Wellenfunktionen $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ und $\psi_3(x)$ als Funktion von x

3.2.1 Lösungseigenschaften

- 1. Die Lösungen sind abwechselnd symmetrisch oder antisymmetrisch zum Punkt x = a/2. ψ_1 und ψ_3 sind symmetrisch, ψ_2 ist antisymmetrisch (siehe Abb. 3.3).
- 2. Mit zunehmender Energie erhöht sich die Zahl der Nullstellen, außer bei x = 0 und x = a. ψ_1 hat keine Nullstelle, ψ_2 hat eine, ψ_3 hat zwei Nullstellen usw.
- 3. Die Lösungen sind zueinander orthogonal, d.h.

$$\int_{0}^{a} dx \,\psi_{m}^{*}(x)\psi_{n}(x) = 0 , \quad \text{für} \quad n \neq m .$$
 (3.25)

Beweis: Wir berechnen das Integral (3.25) mit den Lösungen (3.24) zu

$$I = \int_0^a dx \,\psi_m^*(x)\psi_n(x) = \frac{2}{a} \int_0^a dx \,\sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Wir verwenden

$$\cos X - \cos Y = -2\sin\left(\frac{X+Y}{2}\right)\sin\left(\frac{X-Y}{2}\right)$$

in unserem Fall mit

$$\frac{X+Y}{2} = \frac{n\pi x}{a}, \qquad \frac{X-Y}{2} = \frac{m\pi x}{a},$$
$$X = (n+m)\frac{\pi x}{a}, \qquad Y = (n-m)\frac{\pi x}{a}.$$

Dann finden wir

so dass

$$I = \frac{1}{a} \int_{0}^{a} dx \, \left[\cos Y - \cos X\right]$$

= $\frac{1}{a} \int_{0}^{a} dx \, \cos\left[\frac{(n-m)\pi x}{a}\right] - \frac{1}{a} \int_{0}^{a} dx \, \cos\left[\frac{(n+m)\pi x}{a}\right]$
= $\frac{1}{(n-m)\pi} \sin\left[\frac{(n-m)\pi x}{a}\right]_{0}^{a} - \frac{1}{(n+m)\pi} \sin\left[\frac{(n+m)\pi x}{a}\right]_{0}^{a}$
= $\frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{n-m} \sin\left[(n-m)\pi\right] - \frac{1}{n+m} \sin\left[(n+m)\pi\right]\right] = 0.$

Q.E.D.

Mit der Normierung $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n|^2 = 1$ von Lösung (3.24) gilt dann die Orthonormierungsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn} \ . \tag{3.26}$$

Man sagt, die Eigenlösungen (3.24) sind orthonormal.

4. Die Eigenlösungen (3.24) sind vollständig (Fourier-Reihe), d.h. *jede* andere Lösung f(x) kann als Linearkombination der ψ_n dargestellt werden:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) , \qquad (3.27)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten c_n für gegebenes f(x) aus den Orthonormierungsrelationen (3.26) folgen. Multiplizieren wir Gleichung (3.27) mit mit $\psi_m^*(x)$ und integrieren über x, so erhalten wir

$$\int dx f(x)\psi_m^*(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int dx \,\psi_n(x)\psi_m^*(x)$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{nm} = c_m$$

unter Ausnutzung der Relation (3.26), also

$$c_n = \int dx \ f(x)\psi_n^*(x) \ .$$
 (3.28)

Alle obigen vier Lösungseigenschaften sind enorm mächtig. Nach Gleichung (2.107) ist die vollständige *zeitabhängige* Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right) .$$
(3.29)

Mit dieser Gleichung bestimmt sich aus einer vorgegebenen Anfangsbedingung $\Psi(x,0)$ die gesamte zeitliche Entwicklung. Aus Gleichung (3.29) folgt

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),$$

so dass mit Gleichung (3.28)

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a dx \,\Psi(x,0) \,\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{3.30}$$

die dazugehörigen Entwicklungskoeffizienten bestimmt sind.

3.3 Der harmonische Oszillator

Gegeben sei das Potential V(x) mit einem Minimum bei x_0 (Abb. 3.4).



Abbildung 3.4: Parabelapproximation eines beliebigen Potentials nahe eines lokalen Minimums

Die Taylor-Entwicklung um das lokale Minimum ergibt

$$V(x) \simeq V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

= $V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$,

weil im Minimum $V'(x_0) = 0$. Durch Verschiebung der Energieskala um $V(x_0)$ ändert sich nur die Phase der Wellenfunktion aber nicht die Energieeigenwerte. Weiterhin wählen wir die Ortsvariable so, dass das Minimum bei $x_0 = 0$ liegt, so dass dann

$$V(x) \simeq \frac{1}{2} V^{''}(0) x^2$$
 .

Deshalb ist das Potential des harmonische Oszillators

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$
 (3.31)

mit $\omega^2 = V''(0)/m$ so wichtig, da wir jedes beliebige Potential mit einem ausgeprägten Minimum gut damit approximieren können.

Die dazugehörige zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi$$
(3.32)

mit Randbedingungen nur im Unendlichen. Wir erhalten nur gebundene Zustände, weil stets $E < V(\infty)$.

Gleichung (3.32) ist eine gewöhnliche, lineare, homogene Differentialgleichung 2. Ordnung, die nicht allgemein durch elementare Funktionen lösbar ist. Wir diskutieren nacheinander zwei verschiedene Ansätze zur Lösung dieser Differentialgleichung:

- (a) eine (unglaublich clevere) algebraische Methode,
- (b) eine analytische Methode mit Potenzreihen-Ansatz.

3.3.1 Algebraische Methode

Wir schreiben Gleichung (3.32) in der Form

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \psi = E\Psi$$
(3.33)

mit der *Idee*, den quadratischen Term in der Klammer zu faktorisieren. Wären die Summanden Zahlen, so wäre es mit dem dritten binomischen Gesetz $u^2 + v^2 = (u + iv)(u - iv)$ einfach. Hier ist es aber schwerer, weil u und v Operatoren sind, die im Allgemeinen nicht kommutieren, d.h. $uv \neq vu$.

Wir definieren trotzdem die Operatoren

$$a_{+} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right)$$
(3.34)

und

$$a_{-} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} - \imath m \omega x \right) . \tag{3.35}$$

Was ist das Produkt $a_{-}a_{+}$? Wir lassen dieses auf die Testfunktion f(x) wirken:

$$(a_{-}a_{+}) f(x) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} - \imath m \omega x \right) \left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} + \imath m \omega x \right) f(x)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} - \imath m \omega x \right) \left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{df}{dx} + \imath m \omega x f \right)$$

$$= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^{2} \frac{d^{2}f}{dx^{2}} + \hbar m \omega \frac{d}{dx} (xf) - \hbar m \omega x \frac{df}{dx} + (m \omega x)^{2} f \right]$$

$$= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^{2} \frac{d^{2}f}{dx^{2}} + \hbar m \omega f + (m \omega x)^{2} f \right]$$

$$= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} \right)^{2} + (m \omega x)^{2} + \hbar m \omega \right] f,$$

so dass ohne Testfunktion gilt

$$a_{-}a_{+} = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^{2} + (m\omega x)^{2} \right] + \frac{1}{2} \hbar \omega . \qquad (3.36)$$

Gleichung (3.33) faktorisiert nicht perfekt wegen des Extraterms $\hbar\omega/2$. Aber mit Gleichung (3.36) folgt

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right] = a_-a_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

und Gleichung (3.33) wird zu

$$\left(a_{-}a_{+}-\frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi=E\psi.$$
(3.37)

Die Reihenfolge des Operatorprodukts ist wichtig, denn

$$a_{+}a_{-} = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{\imath} \frac{d}{dx} \right)^{2} + (m\omega x)^{2} \right] - \frac{1}{2} \hbar \omega , \qquad (3.38)$$

so dass

$$a_{-}a_{+} - a_{+}a_{-} = \hbar\omega . (3.39)$$

Wir können die Schrödinger-Gleichung auch alternativ zu (3.37) schreiben als

$$\left(a_{+}a_{-} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = E\psi. \qquad (3.40)$$

Behauptung: Wenn ψ die Schrödinger-Gleichung mit der Energie E erfüllt, dann erfüllt $a_+\psi$ die Schrödinger-Gleichung mit der Energie $E + \hbar\omega$. Also aus Gleichung (3.37),

$$\left(a_{-}a_{+}-\frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = E\psi \tag{3.41}$$

folgt gemäß (3.40)

$$\left(a_{+}a_{-} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\left(a_{+}\psi\right) = \left(E + \hbar\omega\right)\left(a_{-}\psi\right) . \tag{3.42}$$

Beweis: Es ist unter Verwendung von (3.37)

$$\left(a_{+}a_{-} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)(a_{+}\psi) = \left(a_{+}a_{-}a_{+} + \frac{1}{2}\hbar\omegaa_{+}\right)\psi$$

$$= a_{+}\left(a_{-}a_{+} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi$$

$$= a_{+}\left[\left(a_{-}a_{+} - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) + \hbar\omega\right]\psi$$

$$= a_{+}\left(E\psi + \hbar\omega\psi\right) = (E + \hbar\omega)\left(a_{+}\psi\right)$$

Q.E.D.

Ebenso zeigt man, dass $(a_-\psi)$ die Schrödinger-Gleichung mit der Energie $(E - \hbar\omega)$ erfüllt: gemäß Gleichung (3.37) folgt unter Verwendung von (3.40)

$$\left(a_{-}a_{+}-\frac{1}{2}\hbar\omega\right)(a_{-}\psi) = a_{-}\left(a_{+}a_{-}-\frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi$$

$$= a_{-}\left[\left(a_{+}a_{-}+\frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi-\hbar\omega\psi\right]$$

$$= a_{-}\left[E\psi-\hbar\omega\psi\right] = (E-\hbar\omega)(a_{-}\psi) .$$
(3.43)

Q.E.D.

Wir können also aus einer bekannten Lösung ψ zum Eigenwert E, Lösungen mit höherer und niedrigerer Energie erzeugen. a_+ und a_- heißen Leiter-Operatoren: a_+ Aufsteige-Operator , a_- Absteige-Operator (siehe Abb. 3.5).



Abbildung 3.5: Zur Wirkung von Auf-, und Absteige-Operatoren beim harmonischen Oszillator

Aber wenn ich a_{-} zu oft anwende, erhalte ich einen Zustand mit negativer Energie, was nicht sein kann. Irgendwo funktioniert diese Methode nicht mehr, aber wo genau? Wir wissen, dass $(a_{-}\psi)$ eine neue Lösung der Schrödinger-Gleichung ergibt, aber *es ist nicht garantiert, dass diese normierbar ist*! Sie kann

- (1) exakt gleich Null sein, oder
- (2) das Normierungsintegral ist unendlich groß.

Die 2. Möglichkeit scheidet aus (Übungsaufgabe). D.h. für die niedrigste Lösung ψ_0 gilt

$$a_{-}\psi_{0} = 0 , \qquad (3.44)$$

d.h. mit Gleichung (3.35)

$$\frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \psi_0 = 0,$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0,$$

$$\ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + const,$$

$$\psi_0 = A_0 \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right]. \qquad (3.45)$$

oder so dass

oder

Die Energie dieses niedrigsten Zustands ergibt sich aus Gleichung (3.40)

$$\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi_0 = E_0\psi_0$$

mit der Eigenschaft $a_-\psi_0=0$ zu

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{3.46}$$

für diesen Grundzustand.

Von diesem Grundzustand ausgehend erhalten wir durch Anwendung des Aufsteige-Operators a_+ die angeregten Zustände

$$\psi_{n}(x) = (a_{+})^{n}\psi_{0} = A_{0}(a_{+})^{n}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^{2}\right],$$

$$E_{n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 1, 2, 3, \dots,$$

$$(3.47)$$

mit

also z.B.

$$\psi_1 = A_0 a_+ e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = \frac{A_0}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$
$$= \frac{A_0}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \left(-\frac{m\omega}{\hbar} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + im\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right]$$
$$= \frac{A_0}{\sqrt{2m}} 2im\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = iA_0\omega\sqrt{2m} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

3.3.2 Analytische Methode

Wir multiplizieren Gleichung (3.32) mit dem Faktor $2/(\hbar\omega)$ und erhalten

$$\left[-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right]\psi = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi.$$
(3.48)

Wir wählen

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{3.49}$$

als dimensionslose Variable, so dass

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi} \; .$$

3.3 Der harmonische Oszillator

Wir erhalten dann für Gleichung (3.48)

$$\begin{bmatrix} -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \end{bmatrix} \psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi ,$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - k) \psi \qquad (3.50)$$

oder

mit

$$k = \frac{2E}{(\hbar\omega)} \,. \tag{3.51}$$

Gleichung (3.50) wird als Differentialgleichung des linearen harmonischen Oszillators bezeichnet. Als Randbedingung gilt, dass im Unendlichen $\xi \to \pm \infty$, $\psi(\pm \infty) = 0$ ist.

Die Differentialgleichung (3.50) wird durch einen Trick von Sommerfeld gelöst. Man betrachtet zunächst das asymptotische Verhalten für große $\xi^2 \gg k$, so dass

$$\frac{d^2\psi_{\rm asy}}{d\xi^2}\simeq\xi^2\psi_{\rm asy}\;.$$

Die asymptotischen Lösungen verhalten sich wie

$$\psi_{\rm asy} \propto e^{\pm \xi^2/2}$$
,

denn dann ist

und

$$\begin{array}{lll} \psi'_{\rm asy} & \propto & \pm \xi e^{\pm \xi^2/2} \\ \psi''_{\rm asy} & \propto & \xi^2 e^{\pm \xi^2/2} \pm e^{\pm \xi^2/2} \simeq \xi^2 e^{\pm \xi^2/2} \end{array}$$

für $\xi \gg 1$. Wegen der Normierbarkeit ist nur $\psi_{\rm asy} \propto e^{-\xi^2/2}$ brauchbar. Wir setzen daher als Lösungsansatz für Gleichung (3.50) an

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi) . \tag{3.52}$$

Damit erhalten wir

$$\psi' = H' e^{-\xi^2/2} - H\xi e^{-\xi^2/2} = \left(H' - \xi H\right) e^{-\xi^2/2}$$

und damit für die zweite Ableitung

$$\psi'' = \left(H'' - H - \xi H'\right) e^{-\xi^2/2} - \left(H' - \xi H\right) \xi e^{-\xi^2/2}$$
$$= \left[H'' - 2\xi H' + (\xi^2 - 1) H\right] e^{-\xi^2/2} .$$

Eingesetzt in Gleichung (3.50) finden wir

$$H'' - 2\xi H' + (\xi^2 - 1) H = (\xi^2 - k) H(\xi) ,$$

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (k - 1) H(\xi) = 0 .$$
(3.53)

oder

Einfache spezielle Polynom-Lösungen kann man direkt ablesen: H = const. ist Lösung für k = 1, $H = \xi$ ist Lösung für k = 3. Zum Finden der allgemeinen Lösung versuchen wir daher den Potenzreihen-Ansatz

$$H(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots$$
 (3.54)

Wir erhalten dann für die Ableitungen

$$H'(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} = a_1 + 2a_2 \xi + 3a_3 \xi^2 + \dots$$
$$H''(\xi) = 2a_2 + 6a_3 \xi + 12a_4 \xi^2 + \dots$$
$$= \sum_{j=2}^{\infty} j (j-1)a_j \xi^{j-2}$$
$$= \sum_{J=0}^{\infty} (J+2)(J+1)a_{J+2} \xi^J$$

mit J = j - 2, so dass

und

$$\xi H'(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^j .$$

Für Gleichung (3.53) ergibt sich

$$\sum_{j=0}^{\infty} \xi^j \left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (k-1)a_j \right] = 0.$$
(3.55)

Der Koeffizient bei jeder Potenz von ξ muss verschwinden,

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} + (k-1-2j)a_j = 0$$

und wir erhalten die Rekursionsformel

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-k}{(j+1)(j+2)}a_j .$$
(3.56)

Für gegebene a_0 und a_1 können wir die a_2, a_4, a_6, \ldots bzw. a_3, a_5, a_7, \ldots berechnen. Wir erhalten also

$$\begin{split} H(\xi) &= H_{\rm gerade}(\xi) + H_{\rm ungerade}(\xi) \\ {\rm mit} & H_{\rm gerade}(\xi) &= a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots \,, \end{split}$$

aufgebaut auf a_0 , und

$$H_{\text{ungerade}}(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots ,$$

3.3 Der harmonische Oszillator

aufgebaut auf a_1 .

Aber nicht alle diese Lösungen sind **normierbar**! Für $j \gg 1$ gilt für die Rekursionsformel

$$a_{j+2} \simeq \frac{2}{j}a_j$$

mit der asymptotischen Lösung (C = const.)

$$a_j \simeq \frac{C}{\left(\frac{j}{2}\right)!} , \qquad (3.57)$$

denn mit n! = n(n-1)! folgt

$$a_{j+2} = \frac{C}{\left(\frac{j+2}{2}\right)!} = \frac{C}{\left(\frac{j}{2}+1\right)!} = \frac{C}{\left(\frac{j}{2}+1\right)!} = \frac{a_j}{\left(\frac{j}{2}+1\right)\left(\frac{j}{2}\right)!} = \frac{a_j}{\left(\frac{j}{2}+1\right)} \simeq \frac{2}{j} a_j ,$$

weil $(j/2) \gg 1$. Für Gleichung (3.54) folgt dann mit der Potenzreihendarstellung der Exponentialfunktion

$$H(\xi) \simeq C \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\xi^j}{\left(\frac{j}{2}\right)!} = C \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi^{2m}}{m!} = C e^{\xi^2}$$

Damit erhalten wir gemäß Ansatz (3.52)

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2} = Ce^{\xi^2/2} , \qquad (3.58)$$

und diese Lösung ist nicht normierbar!

Ausweg: um normierbare Lösungen zu erhalten, muss die Potenzreihe (3.56) abbrechen! Das ist genau dann der Fall, wenn k einen der diskreten Werte

$$k = 2n + 1$$
, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ (3.59)

annimmt, d.h. mit Gleichung (3.51) für die Energie

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega k = \frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega , \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (3.60)

Mit der Bedingung (3.59) bricht eine der beiden Folgen

 $a_0 \rightarrow a_2 \rightarrow a_4 \rightarrow \dots, \quad a_1 \rightarrow a_3 \rightarrow a_5 \rightarrow \dots$

ab. Die andere muss durch die Wahl $a_1 = 0$ oder $a_0 = 0$ zu Null gemacht werden.

Als Lösung für $H(\xi)$ erhalten wir damit ein endliches Polynom $H_n(\xi)$, das entweder gerade oder ungerade ist:

$$\psi_n(\xi) = a_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} . \tag{3.61}$$

Wir bestimmen explizit die Lösungen niedrigster Ordnung:

 $F\ddot{u}r \ n = 0 \ ist \ k = 1$. Mit der Wahl $a_1 = 0$ folgt aus der Rekursionsformel (3.56) $a_{2\nu+1} = 0$ $\forall \nu = 1, 2, 3, \dots$ Sei $a_0 \neq 0$: nach der Rekursionsformel (3.56) im Fall k = 1

$$a_{j+2} = \frac{2j}{(j+1)(j+2)}a_j$$

folgt aus j = 0, dass $a_2 = a_4 \ldots = 0$. Als einzige Lösung bleibt übrig im Fall n = 0

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2} = a_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$
,

die exakt gleich Lösung (3.45) ist.

Für n = 1 *ist* k = 3. Wir wählen $a_0 = 0$, so dass $a_{2\nu} = 0$ $\forall \nu = 1, 2, 3, ...$ Sei $a_1 \neq 0$: nach der Rekursionsformel (3.56) im Fall k = 3

$$a_{j+2} = \frac{2j-2}{(j+1)(j+2)}a_j$$

folgt aus j = 1 (äquivalent zu $a_1 \neq 0$), dass $a_3 = a_5 \ldots = 0$. Als einzige Lösung bleibt übrig im Fall n = 1

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

Für n = 2 *ist* k = 5. Wir wählen $a_1 = 0$ so dass $a_{2\nu+1} = 0$. Die Rekursionsformel (3.56) im Fall k = 5 lautet

$$a_{j+2} = \frac{2j-4}{(j+1)(j+2)}a_j$$

Sei $a_0 \neq 0$, dann folgt aus j = 0 $a_2 = \frac{-4}{1 \cdot 2} a_0 = -2a_0$, und aus j = 2 folgt $a_4 = a_6 = \ldots = 0$. Im Fall n = 2 erhalten wir als Lösung

$$\psi_2(\xi) = (a_0 - 2a_0\xi^2)e^{-\xi^2/2} = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$$
.

Alle so konstruierten Lösungen sind proportional zu einem unbestimmten Koeffizienten a_0 oder a_1 . Dieser Koeffizient wird durch die Normierung bestimmt. Im allgemeinen Fall ist $H_n(\xi)$ ein Polynom *n*-ter Ordnung in ξ , nur mit geraden Potenzen ξ^n , wenn *n* gerade ist, und nur mit ungeraden Potenzen, wenn *n* ungerade ist. Man bezeichnet diese Polynome als *Hermitesche Polynome*.

3.3.3 Hermitesche Polynome

Die Hermiteschen Polynome $H_n(x)$ genügen der Differentialgleichung (3.53) mit k = 2n + 1:

$$\frac{d^2 H_n}{dx^2} - 2x \frac{dH_n}{dx} + 2n H_n(x) = 0.$$
(3.62)

Definition der Hermiteschen Polynome: Die Hermiteschen Polynome werden als Koeffizienten der Taylorreihe der erzeugenden Funktion

$$S(x,t) \equiv e^{-t^2 + 2tx} = e^{x^2} e^{-(t-x)^2} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n$$
(3.63)

definiert. Aus Gleichung (3.63) folgt

$$H_{n}(x) = \left[\frac{\partial^{n} S(x,t)}{\partial t^{n}}\right]_{t=0} = \left[e^{x^{2}}\frac{\partial^{n}}{\partial t^{n}}e^{-(t-x)^{2}}\right]_{t=0}, \quad (3.64)$$

$$S = H_{0} + \frac{H_{1}}{1}t + \frac{H_{2}}{2!}t^{2} + \dots,$$

denn

so dass

$$\frac{\partial S}{\partial t}_{t=0} = H_1, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial t^2}_{t=0} = H_2.$$

Setzen wir y = t - x, so dass $\partial/\partial y = \partial/\partial t$, so folgt für Gleichung (3.64)

$$H_n(x) = \left[e^{x^2}\frac{\partial^n}{\partial y^n}e^{-y^2}\right]_{y=-x} = (-1)^n e^{x^2}\frac{\partial^n}{\partial x^n}e^{-x^2}$$

die Rodrigues-Formel für Hermitesche Polynome

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2} . \qquad (3.65)$$

Diese zeigt, dass diese Polynome vom Grad n sind. *Rekursionsbeziehungen:* Aus der Definitionsgleichung (3.63) berechnen wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(x,t)}{\partial x} &= 2te^{-t^2 + 2tx} = 2tS(t,x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(x)}{n!} t^{n+1} \\ \frac{\partial S(x,t)}{\partial x} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(x)}{n!} t^n , \end{aligned}$$

und

wobei $H_n^{'}(x)=dH_n(x)/dx.$ Das Gleichsetzen beider Ausdrücke ergibt

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(x)}{n!} t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(x)}{n!} t^{n+1}$$
$$= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2H_{m-1}(x)}{(m-1)!} t^m$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2H_{n-1}(x)}{(n-1)!} t^n .$$

Der Koeffizientenvergleich für $n\geq 1$ liefert

$$H'_{n}(x) = \frac{2n!}{(n-1)!}H_{n-1}(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

die 1. Rekursionsformel

$$H'_{n}(x) = 2nH_{n-1}(x), \qquad n \ge 1.$$
 (3.66)

Weiterhin berechnen wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} &= (2x-2t)e^{-t^2+2tx} = 2(x-t)S(x,t) \\ &= 2(x-t)\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2xH_nt^n - 2H_nt^{n+1}}{n!} \\ \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nH_n(x)}{n!}t^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n(x)t^{n-1}}{(n-1)!} . \end{aligned}$$

und

Das Gleichsetzen beider Ausdrücke ergibt

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n(x)t^{n-1}}{(n-1)!} = 2x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^{n+1}}{n!}$$

In der Summe der linken Seite setzen wir m = n - 1 oder n = m + 1, und in der zweiten Summe der rechten Seite setzen wir m = n + 1 oder n = m - 1, so dass

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_{m+1}(x)t^m}{m!} = 2x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!} - 2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{H_{m-1}(x)t^m}{(m-1)!}$$
$$= 2x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!} - 2\sum_{m=0}^{\infty} \frac{mH_{m-1}(x)t^m}{m!}$$

Setzen wir wieder m = n, so folgt

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_{n+1}(x)t^n}{n!} = 2x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2nH_{n-1}(x)t^n}{n!}$$
$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left[H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) \right] = 0.$$

oder

Der Koeffizientenvergleich für $n\geq 1$ liefert die 2. Rekursionsformel

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0, \qquad n \ge 1.$$
(3.67)

Für n = m - 1 besagt die 2. Rekursionsformel

$$H_m - 2xH_{m-1} + 2(m-1)H_{m-2} = 0$$

Aus der 1. Rekursionsformel (3.66) finden wir

$$2(m-1)H_{m-2} = H'_{m-1} ,$$

$$H_m - 2xH_{m-1} + H'_{m-1} = 0 .$$

so dass

Wir multiplizieren diese Gleichung mit 2m:

$$2mH_m - 2x \cdot 2mH_{m-1} + 2mH'_{m-1} = 2mH_m - 2xH'_m + 2mH'_{m-1} = 0, \qquad (3.68)$$

wobei wir im zweiten Term $2mH_{m-1} = H'_m$ nach Gleichung (3.66) benutzt haben. Wir leiten Gleichung (3.66) nach x ab mit dem Ergebnis $H''_n = 2nH'_{n-1}$ und erhalten damit für den dritten Term in Gleichung (3.68)

$$\begin{array}{rcl} 2mH_{m-1}^{'} &=& H_{m}^{''}\,,\\ 2mH_{m}-\,\,2xH_{m}^{'}+\,\,H_{m}^{''} &=& 0\,\,. \end{array}$$

so dass

Mit m = n ergibt sich

$$2nH_n - 2xH'_n + H''_n = 0$$

gerade die Differentialgleichung (3.62). Dies zeigt, dass alle abgeleiteten Beziehungen in der Tat für Hermitesche Polynome gelten.

Orthogonalität: Wir betrachten das Integral

$$J(t,s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-t^2 + 2tx} \ e^{-s^2 + 2sx} \ e^{-x^2}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-x^2} S(x,t) S(x,s)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^n s^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} .$$
(3.69)

Es ist

$$\begin{split} J(t,s) &= e^{-(t^2+s^2)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-x^2+2(s+t)x} \\ &= e^{-(t^2+s^2)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-x^2+2(s+t)x+(s+t)^2-(s+t)^2} \\ &= e^{-(t^2+s^2)+(s+t)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-[x-(s+t)]^2} \; . \end{split}$$

Mit y = x - (s + t) ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-[x-(s+t)]^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dy \ e^{-y^2} = \sqrt{\pi} ,$$
$$J(t,s) = \pi^{1/2} e^{2st} = \pi^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} .$$
(3.70)

so dass

Das Gleichsetzen von Gleichungen (3.69) und (3.70) ergibt

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left(\pi^{1/2} 2^n s^n - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^m}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} \right) = 0 \ .$$

Daraus folgt die Orthonormalitätsrelation der Hermiteschen Polynome

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} = 2^n \pi^{1/2} n! \delta_{nm} \ . \tag{3.71}$$

Speziell für n = m gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ H_n^2(x) e^{-x^2} = \pi^{1/2} 2^n n!$$

und die normierten Eigenfunktionen (3.61)

$$\psi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$
(3.72)

sind orthonormal auf dem Intervall $-\infty \le \xi \le \infty$. Explizite Berechnung einzelner Hermitescher Polynome: Aus der Rodrigues-Formel (3.65)

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2} ,$$

erhalten wir sofort $H_0(x) = 1$,

$$H_{1}(x) = (-1)e^{x^{2}}\frac{\partial}{\partial x}e^{-x^{2}} = (-1)e^{x^{2}}\left(-2xe^{-x^{2}}\right) = 2x$$
$$H_{2}(x) = e^{x^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}e^{-x^{2}} = e^{x^{2}}\frac{\partial}{\partial x}\left(-2xe^{-x^{2}}\right)$$
$$= -2e^{x^{2}}\left(e^{-x^{2}} - 2x^{2}e^{-x^{2}}\right) = 4x^{2} - 2.$$

und

Die Rekursionsformel (3.67) für
$$n = 2$$
 liefert

$$H_3 = 2xH_2 - 4H_1 = 2x(4x^2 - 2) - 8x = 8x^3 - 12x ,$$

für n = 3 erhalten wir

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12 .$$

3.3.4 Die Nullpunktsenergie

Klassisch ist die niedrigste Energie des linearen harmonischen Oszillators E = 0, quantenmechanisch ergibt sich $E_0 = \hbar \omega/2$ aus Gleichung (3.60), $E_n = (n + 1/2)\hbar \omega$, für n = 0. Wir zeigen hier, dass diese endliche Nullpunktsenergie seinen Grund in der Heisenbergschen Unschärferelation (2.71) hat.

Mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

folgt nach Gleichung (2.106)

$$E = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\left\langle p^2 \right\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle x^2 \right\rangle . \tag{3.73}$$

Nach der Heisenbergschen Unschärferelation (2.71) mit < p > = < x > = 0 (Begründung weiter unten) gilt

$$\begin{array}{rcl} \left\langle p^2 \right\rangle \left\langle x^2 \right\rangle & \geq & \frac{\hbar^2}{4} \\ \left\langle x^2 \right\rangle & \geq & \frac{\hbar^2}{4 \left\langle p^2 \right\rangle} \end{array}$$

oder

Damit erhalten wir für ${\cal E}$ die untere Grenze

$$E \ge E_g = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\hbar^2 \omega^2}{8 \langle p^2 \rangle} . \tag{3.74}$$

Zur Suche des Minimums von E_g berechnen wir

$$\begin{split} \frac{\partial E_g}{\partial \langle p^2 \rangle} &= \frac{1}{2m} - \frac{m\hbar^2 \omega^2}{8 \langle p^2 \rangle_0^2} = 0 \\ \frac{\langle p^2 \rangle_0^2}{2m} &= \frac{m\hbar^2 \omega^2}{8} , \\ \langle p^2 \rangle_0^2 &= \frac{m^2 \hbar^2 \omega^2}{4} , \end{split}$$

so dass

oder

d.h.
$$\left< p^2 \right>_0 \;\; = \;\; {1\over 2} m \hbar \omega \; .$$

Für das Minimum finden wir

$$E_{\min} = E_g \left(\left\langle p^2 \right\rangle_0 \right) = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0 . \qquad (3.75)$$

Die Nullpunktsenergie hat seinen Grund in der Unschärferelation. Wie versprochen, begründen wir $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$. Für die Eigenfunktionen (3.72) des harmonischen Oszillators

$$\begin{split} \psi_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \\ \text{folgt, dass} & |\psi_n(\xi)|^2 &= \frac{H_n^2(\xi) e^{-\xi^2}}{\pi^{1/2} 2^n n!} \end{split}$$
(3.76)

gerade Funktionen von $\xi \propto x$ sind, also symmetrisch um x = 0 verlaufen, so dass

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, x \, |\psi_n(\xi)|^2 = 0 ,$$

weil der Integrand eine ungerade Funktion von x ist.

Ebenso erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_n^*(\xi) \hat{p} \psi_n(x) = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_n^*(\xi) \frac{d\psi_n(x)}{dx} \\ &= -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{d}{dx} \, |\psi_n(\xi)|^2 = -\frac{i\hbar}{2} \left[|\psi_n(\xi)|^2 \right]_{-\infty}^{\infty} = 0 \\ (\Delta p)^2 &= \langle p^2 \rangle \\ (\Delta x)^2 &= \langle x^2 \rangle . \end{aligned}$$

also und

3.4 Freie Teilchen

Die Untersuchung der Ausbreitung freier Teilchen (V(x) = 0 überall) mit der Schrödinger-Gleichung sollte einfach sein, ist aber trickreich. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist in diesem Fall

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

oder mit $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ oder $E=\hbar^2k^2/(2m)$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \; .$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\psi(x) = Ae^{\imath kx} + Be^{-\imath kx} , \qquad (3.77)$$

und es gibt keine Randbedingungen, um die Werte von k und E einzugrenzen. Ein freies Teilchen kann jeden positiven Energiewert haben.

Die zeitabhängige Lösung der Schrödinger-Gleichung ist dann nach Kap. 2.7

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\imath E t/\hbar} = Ae^{\imath k \left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)} + Be^{-\imath k \left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)} .$$
(3.78)

Diese Lösung repräsentiert eine Welle, die mit festem Profil (siehe Abb. 1.4) mit der Geschwindigkeit $v = \pm \hbar k/2m$ in die negative oder positive *x*-Richtung läuft. Der erste Term stellt eine Welle in positive *x*-Richtung dar, der zweite Term eine rückwärtslaufende Welle in negative *x*-Richtung. Der einzige Unterschied in beiden Termen ist das Vorzeichen von *k*. Erlauben wir auch negative Werte von *k*, d.h.

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} , \qquad (3.79)$$

so können wir Lösung (3.78) vereinfacht schreiben als

$$\Psi_k(x,t) = A e^{i \left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}, \qquad (3.80)$$

wobei negatives k Wellen beschreibt, die in Richtung der negativen x-Achse propagieren. Die Lösung (3.80) hat folgende Eigenschaften:

3.4 Freie Teilchen

1. Die Phasengeschwindigkeit der Wellenlösung (3.80) ist

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}} . \qquad (3.81)$$

Zum Vergleich ist die klassische Geschwindigkeit eines freien Teilchens mit $E = mv^2/2$

$$v_{\text{klassisch}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\phi}$$

zweimal größer als die Phasengeschwindigkeit der quantenmechanischen Welle.

2. Die Wellenfunktion (3.80) ist nicht normierbar, denn

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \,\Psi_k^*(x,t) \Psi_k(x,t) = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, 1 \to \infty , \qquad (3.82)$$

d.h. separable Lösungen existieren nicht für freie Teilchen. Freie Teilchen haben keine definierten Energiewerte, sondern die Eigenwerte E_n sind kontinuierlich.

Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung ist durch die Überlagerung (vgl. Gleichungen (2.104) und (2.107))

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$
(3.83)

gegeben. Für geeignete Funktionen $\Phi(k)$ kann diese Wellenfunktion dann normiert werden. Die resultierende Lösung beinhaltet dann eine Verteilung der k-Werte. Gleichung (3.83) ist eine spezielle Form eines Wellenpakets

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \,\Phi(k) e^{i(kx-\omega t)} , \qquad (3.84)$$

mit $\omega = \hbar k^2/(2m)$. Mit der Anfangsbedingung

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

bestimmt sich durch Fourier-Inversion die Funktion $\Phi(k)$ zu

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \Psi(x,0) e^{-\imath kx} \; .$$

3. Vergleichbar zur klassischen Teilchengeschwindigkeit ist die Gruppengeschwindigkeit v_G des Wellenpakets (3.83) (siehe auch Kap. 1.5.3). Wenn die Funktion $\Phi(k)$ nur Werte von k um k_0 herum annimmt, dürfen wir in Gleichung (3.84) nähern

$$\begin{split} \omega(k) &\simeq \omega_0 + \omega'_0(k - k_0) \\ \omega'_0 &= \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k = k_0} , \\ \omega_0 &= \omega(k_0) , \end{split}$$

und mit der Variablen $s = k - k_0$ erhalten wir für das Wellenpaket ((3.84) dann

$$\Psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \,\Phi(k_0+s) e^{i\left[(k_0+s)x - \left(\omega_0 + \omega'_0 s\right)t\right]} \\ = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t\right)} \int_{-\infty}^{\infty} ds \,\Phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)\left(x - \omega'_0 t\right)} \,.$$
(3.85)

Speziell zur Zeit t = 0 gilt

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \,\Phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)x} \,. \tag{3.86}$$

Vergleicht man die Ergebnisse (3.85) und (3.86), so erkennt man, dass bis auf die Verschiebung $x \rightarrow x - \omega'_0 t$ das *s*-Integral in Gleichung (3.85) gleich dem *s*-Integral in Gleichung (3.86) ist, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds \,\Phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)\left(x - \omega'_0 t\right)} = \sqrt{2\pi} \Psi\left(x - \omega'_0 t, 0\right) ,$$

$$\Psi(x, t) \simeq e^{-i\left(\omega_0 - k_0 \omega'_0\right)t} \Psi\left(x - \omega'_0 t, 0\right) . \quad (3.87)$$

so dass

Die Exponentialfunktion in Gleichung (3.87) ist ein reiner Phasenfaktor, der nicht in $|\Psi|^2$ eingeht. Gleichung (3.87) zeigt, dass sich die Anfangsstörung mit der Gruppengeschwindigkeit $v_G = \omega'_0$ entlang der *x*-Achse ausbreitet. Mit $\omega = \hbar k^2/(2m)$ folgt

$$v_G = \frac{\hbar k}{m} = 2v_\phi = v_{\text{klassisch}} . \qquad (3.88)$$

Die Gruppengeschwindigkeit des Teilchens stimmt mit der klassischen Teilchengeschwindigkeit überein.

3.5 Potentialstufe

Wir untersuchen das in Abb. 3.6 skizzierte Stufenpotential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{wenn } x > 0 \text{ (Bereich II)} \\ 0 & \text{wenn } x < 0 \text{ (Bereich I)} \end{cases}$$

3.5 Potentialstufe



Abbildung 3.6: Potentialstufe

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lautet dann

im Bereich I
$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I \qquad (3.89)$$

und im Bereich II
$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_{II}. \qquad (3.90)$$

Als Randbegingungen benutzen wir:

(R1) Die Wellenfunktion ψ ist überall beschränkt,

- (R2) ψ ist stetig (Stetigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit P),
- (R3) ψ' oder $d\ln\psi/dx$ ist stetig (Stetigkeit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $ec{j}$).

3.5.1 Fall 1: Teilchenenergie oberhalb Potentialstufe $E > V_0$

Für Teilchenenergien $E > V_0$ (siehe Abb. 3.7) lauten die beiden Schrödinger-Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} &= -k^2\psi_I , \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} &= -q^2\psi_{II} , \qquad q = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} > 0 \end{aligned}$$

und

mit den Fundamentallösungen $e^{\imath\kappa x}$ und $e^{-\imath\kappa x}$, wobei

$$\kappa = \begin{cases} k & \text{für } x < 0 \\ q & \text{für } x > 0 \end{cases}$$



Abbildung 3.7: Potentialstufe mit Fall $E > V_0$

Wir setzen voraus, dass das Teilchen von links $(x = -\infty)$ einfällt: dann ist die Wellenfunktion im Bereich I die Überlagerung einer einfallenden Welle e^{ikx} , die gegen $\rightarrow +\infty$ läuft, mit der Amplitude 1 (o.B.d.A.) und einer reflektierten Welle Re^{-ikx} (läuft nach $-\infty$):

$$\psi_I(x) = e^{\imath kx} + R e^{-\imath kx} . \tag{3.91}$$

Im Bereich II gibt es die durchgehende (transmittierte) Welle

$$\psi_{II}(x) = T e^{iqx} . \tag{3.92}$$

(Als Nebenbemerkung vermerken wir: liefe das Teilchen von rechts ein, so würden wir $\psi_{II} = e^{-iqx} + R_1 e^{iqx}$ und $\psi_I = T_1 e^{-ikx}$ ansetzen.) Die Stetigkeit von $\psi(x = 0)$ liefert

oder

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) 1+R = T.$$
(3.93)

Die Stetigkeit von $\psi'(x=0)$ liefert

$$ik - ikR = iqT$$

$$k(1 - R) = qT.$$
(3.94)

oder

Die Kombination von Gleichungen (3.93) und (3.94) ergibt

$$k(1-R) = q(1+R)$$
oder
$$qR + kR = k - q,$$
so dass
$$R = \frac{k - q}{k + q}, \qquad T = 1 + R = \frac{2k}{k + q}.$$
(3.95)

Für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (2.21) erhalten wir $ec{j}=jec{e}_x$ mit

$$j = \Re \left[\frac{\hbar}{mi} \psi^* \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right]$$

im Bereich I

$$j_{I} = \Re \left[\frac{\hbar}{mi} \left(e^{-ikx} + R^{*}e^{ikx} \right) ik \left(e^{ikx} - Re^{-ikx} \right) \right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \Re \left[\left(e^{-ikx} + R^{*}e^{ikx} \right) \left(e^{ikx} - Re^{-ikx} \right) \right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \Re \left[1 - Re^{-2ikx} + R^{*}e^{2ikx} - |R|^{2} \right]$$

$$= \frac{\hbar k}{2m} \left[2 \left(1 - |R|^{2} \right) - Re^{-2ikx} + R^{*}e^{2ikx} - R^{*}e^{2ikx} + Re^{-2ikx} \right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \left[1 - |R|^{2} \right] = j_{\text{ein}} - j_{\text{refl}}$$
(3.96)

und im Bereich II

$$j_{II} = \Re \left[\frac{\hbar}{mi} T^* e^{-iqx} \left(iqT e^{iqx} \right) \right] = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = j_{\text{trans}} .$$
(3.97)

Wir definieren den Reflexionskoeffizienten

$$r = \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{ein}}} = |R|^2$$

und den Transmissionskoeffizienten

$$t = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}} = \frac{q}{k} |T|^2 .$$
 (3.98)

Zwei Bemerkungen zu den Ergebnissen:

- 2. Es gilt die Teilchenzahlerhaltung. Mit den Gleichungen (3.95) erhalten wir für

$$\begin{split} j_I &= \frac{\hbar k}{m} \left[1 - |R|^2 \right] = \frac{\hbar k}{m} \left[1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \right] \\ &= \frac{\hbar k}{m(k+q)^2} \left[(k+q)^2 - (k-q)^2 \right] = \frac{4\hbar k^2 q}{m(k+q)^2} \\ j_{II} &= \frac{\hbar q}{m} |T|^2 = \frac{\hbar q}{m} \frac{4k^2}{(k+q)^2} = j_I , \\ j_I &= j_{II} \end{split}$$

und

oder

so dass

 $j_{\rm ein} = j_{\rm refl} + j_{\rm trans}$.

3.5.2 Fall 2: Teilchenenergie unterhalb Potentialstufe $E < V_0$

Im Fall von Teilchenenergien $E < V_0$ (siehe Abb. 3.8) ist die Lösung (3.91) im Bereich I weiterhin gültig:

$$\psi_I(x) = e^{\imath kx} + Re^{-\imath kx}, \qquad x < 0.$$
 (3.99)



Abbildung 3.8: Potentialstufe mit Fall $E < V_0$

Aber im Bereich II erhalten wir aus der Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} &= \kappa^2\psi_{II} \\ \text{mit} & \kappa &= \sqrt{2m\frac{(V_0 - E)}{\hbar^2}} = -iq \\ \text{oder} & q &= i\kappa \\ \text{die Lösung} & \psi_{II}(x) &= Te^{-\kappa x}, \quad x > 0. \end{aligned}$$
(3.100)

oder

mit

Die exponentiell-ansteigende Fundamentallösung ist unbrauchbar, da ψ_{II} beschränkt sein muss. Natürlich erhalten wir Lösung (3.100) auch aus Gleichung (3.92) mit $q = i\kappa$. Aus den Gleichungen (3.95) folgt mit $q = i\kappa$

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \qquad T = 1 + R = \frac{2k}{k + i\kappa}.$$
(3.101)

Für die Ergebnisse gilt:

1. Nach Gleichung (3.101) ist

$$r = |R|^2 = RR^* = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \frac{k + i\kappa}{k - i\kappa} = 1 ,$$

es tritt also vollständige Reflexion r = 1 auf.

2. Wegen $T \neq 0$ und

$$|T|^{2} = TT^{*} = \frac{2k}{k + i\kappa} \frac{2k}{k - i\kappa} = \frac{4k^{2}}{k^{2} + \kappa^{2}} \neq 0$$

dringen Teilchen etwa bis zu einer Tiefe $\Delta x \simeq 1/\kappa$ in die Potentialstufe ein. Es findet aber kein Teilchenfluss nach rechts statt, denn

$$j_{II} = \Re \left[\frac{\hbar}{m\iota} \left(T^* e^{-\kappa x} (-\kappa) T e^{-\kappa x} \right) \right] = \Re \left[\iota \frac{\hbar \kappa}{m} T^2 e^{-2\kappa x} \right] = 0 \; .$$

3.5.3 Unendlich hohe Potentialstufe $V_0 \rightarrow \infty$

In diesem Grenzfall wird $\kappa \to \infty$, so dass nach Gleichung (3.101) $R \to -1$ und $|T| \to 0$. Für die Wellenfunktion (3.99) gilt dann

$$\psi_I(x) = e^{\imath kx} - e^{-\imath kx} = 2\imath \sin kx$$

und damit insbesondere $\psi_I(0) = 0$ als allgemeine Randbedingung an einer unendlich hohen Potentialschwelle $\psi_{\text{Schwelle}} = 0$. Damit ist nochmals die Lösung (3.17) begründet.

3.5.4 Wellenpakete

Obwohl wir nur die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gelöst haben, ist es gerechtfertigt, von ein- und auslaufenden Wellen zu sprechen, weil wir zu jeder Lösung ψ_I und ψ_{II} die Zeitabhängigkeit

$$e^{-\frac{\imath\hbar k^2 t}{2m}} = e^{-\frac{\imath E t}{\hbar}}$$

hinzufügen können, ohne dass sich an den Ergebnissen für den Reflektions- und Transmissionkoeffizienten etwas ändert. Mit dem Zeitabhängigkeitsfaktor können wir dann ein- und auslaufende Wellenpakete konstruieren etwa durch

$$\Psi_{I}(x,t) = \int_{0}^{\infty} dk_{1}' f\left(k_{1}' - k_{1}\right) \psi_{E'} e^{-\imath E' t/\hbar}$$

im Bereich I. $f(k'_1 - k_1)$ ist dabei eine reellwertige Funktion von k'_1 mit dem Maximum im Punkt k_1 . Setzen wir gemäß Lösung (3.91)

$$\psi_{E_{I}'}(x) = e^{\imath k_{1}'x} + Re^{-\imath k_{1}'x}$$

ein, so folgt

$$\Psi_I(x,t) = \Psi_{\text{ein}}(x,t) + \Psi_{\text{refl}}(x,t)$$
(3.102)

als Superposition von einem einfallenden und reflektierten Wellenpaket

$$\Psi_{\rm ein}(x,t) = \int_0^\infty dk'_1 f(k'_1 - k_1) e^{i(k'_1 x - \frac{E't}{\hbar})}$$

=
$$\int_0^\infty dk'_1 f(k'_1 - k_1) e^{i\Phi_{\rm ein}}$$
(3.103)
$$\Phi_{\rm ein} = k'_1 x - \frac{E't}{\hbar} = -\frac{\hbar k'_1^2 t}{\hbar} + k'_1 x$$

mit

$$= k_{1}^{'}x - \frac{E^{'}t}{\hbar} = -\frac{\hbar k_{1}^{'2}t}{2m} + k_{1}^{'}x$$

und

$$\Psi_{\text{refl}}(x,t) = \int_{0}^{\infty} dk'_{1} f(k'_{1} - k_{1}) R(k'_{1}) e^{-i(k'_{1}x + \frac{E't}{\hbar})}$$

$$= \int_{0}^{\infty} dk'_{1} f(k'_{1} - k_{1}) e^{i\Phi_{\text{refl}}}$$

$$\Phi_{\text{refl}} = -k'_{1}x - \frac{E't}{\hbar} - i \ln R$$

$$= \frac{\hbar k'^{2}t}{\hbar}$$
(3.104)

mit

$$= -\frac{\hbar k_1^{'2} t}{2m} - k_1^{'} x - i \ln R .$$

Das Zentrum des einfallenden Wellenpakets (3.103)

$$0 = \frac{\partial \Phi_{\text{ein}}}{\partial k'_1} = -\frac{\hbar k'_1}{m}t + x_0 = -v_G t + x_0$$

bewegt sich gemäß $x_0 = v_G t$ in positiver x-Richtung mit der Geschwindigkeit $v_G = \hbar k_1'/m$ auf die Potentialstufe zu und erreicht den Punkt $x_0 = 0$ zur Zeit t = 0. Das Zentrum des reflektierten Wellenpakets (3.104)

$$0 = \frac{\partial \Phi_{\text{refl}}}{\partial k'_1} = -\frac{\hbar k'_1}{m} t - x_0 - i \frac{d}{dk'_1} \left(\ln R\left(k'_1\right) \right)$$
$$= -v_G t - x_0 - i \frac{d}{dk'_1} \left(\ln R\left(k'_1\right) \right)$$

bewegt sich gemäß

$$x_0 = -v_G \left(t - \tau \right) , \qquad \tau = -\frac{\imath}{v_G} \frac{d}{dk_1'} \left(\ln R \left(k_1' \right) \right) ,$$

d.h. es bewegt sich mit der Geschwindigkeit v_G in negativer x-Richtung und verlässt den Ort des Ursprungs verzögert um die Verzögerungszeit τ , nachdem die einfallende Welle den Punkt x = 0 erreicht hat. Diese Verzögerung ist ein weiterer Unterschied zum klassischen Verhalten.

3.6 Differentialgleichungen mit regulären Singularitäten

Kastenförmige Potentiale haben den Vorteil, zu besonders einfach lösbaren Differentialgleichungen zu führen. Aber das Beispiel des linearen harmonischen Oszillators (Kap. 3.3) konnte bereits nicht mehr mit elementaren Funktionen der Mathematik gelöst werden.

Deshalb wollen wir in diesem Abschnitt eine mathematische Methode zur Behandlung einer großen Klasse von "nichtelementaren" linearen Differentialgleichungen entwickeln. Diese Methode erlaubt es, die meisten physikalisch interessanten linearen Differentialgleichungen zu lösen, darunter auch die Schrödinger-Gleichung für viele physikalisch wichtige Potentiale.

3.6.1 Allgemeine Betrachtungen

Gegeben sei die Differentialgleichung (im folgenden abgekürzt mit DGL) der Form

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \frac{P(z)}{z}\frac{dw}{dz} + \frac{Q(z)}{z^2}w(z) = 0.$$
(3.105)

Wir nehmen an, dass sich die Funktionen P(z) und Q(z) in der Nähe des Nullpunkts in Taylorreihen entwicken lassen:

$$P(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n , \qquad Q(z) = \sum_{n=0}^{\infty} q_n z^n . \qquad (3.106)$$

In der Differentialgleichung (3.105) hat der Koeffizient vor w' einen Pol von höchstens erster Ordnung und der Koeffizient vor w einen Pol von höchstens zweiter Ordnung. Solche Fälle von DGLn bezeichnet man als DGLn mit *regulären Singularitäten*.

Wegen der Pole empfiehlt sich der etwas allgemeinere ($\rho \neq 0$) Potenzreihenansatz für die Lösung

$$w(z) = z^{\rho} \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{3.107}$$

mit $n \in \mathbb{N}_0$ als natürliche Zahl plus Null und $\rho, c_n, z \in C$ als komplexe Zahlen. Damit gilt

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{n+\rho} ,$$

$$w'(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+\rho) z^{n+\rho-1} ,$$

$$w''(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+\rho) (n+\rho-1) z^{n+\rho-2}$$

und nach Einsetzen in Gleichung (3.105)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left((n+\rho) (n+\rho-1) c_n z^{n+\rho-2} + (n+\rho) c_n z^{n+\rho-2} P(z) + c_n z^{n+\rho-2} Q(z) \right) = 0.$$

Das Kürzen des gemeinsamen Faktors $z^{\rho-2}$ ergibt

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \left((n+\rho) \left(n+\rho -1 \right) + (n+\rho) P(z) + Q(z) \right) = 0.$$
 (3.108)

Nach Annahme (3.106) sind P(z) und Q(z) Potenzreihen, so dass Gleichung (3.108) eine neue Potenzreihe darstellt derart

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m z^m = 0 , \qquad m \in I\!\!N_0 .$$
 (3.109)

Diese Gleichung kann $\forall z$ nur erfüllt werden, wenn $a_m = 0 \forall m!$ Die Koeffizienten a_m müssen dabei aus Gleichung (3.108) bestimmt werden.

Wir gehen schrittweise vor und berechnen zunächst a_0 : setzen wir n = 0 in Gleichung (3.108) und $P(z) = p_0$, $Q(z) = q_0$ durch die ersten Terme ihrer jeweiligen Potenzreihe, so erhalten wir

$$a_0 = c_0 \left[\rho \left(\rho - 1 \right) + \rho p_0 + q_0 \right] = 0$$

und mit $c_0 \neq 0$ die sog. Index-Gleichung oder charakteristische Gleichung

$$\rho(\rho - 1) + \rho p_0 + q_0 = 0. \qquad (3.110)$$

Zur Berechnung von a_1 müssen wir in Gleichung (3.108) Terme mit n = 0 und n = 1 betrachten und $P(z) = p_0 + p_1 z$, $Q(z) = q_0 + q_1 z$ setzen. Es folgt unter Verwendung von (3.110)

$$c_{0} \left[\rho \left(\rho - 1 \right) + \rho \left(p_{0} + p_{1}z \right) + q_{0} + q_{1}z \right] + c_{1}z \left[\left(1 + \rho \right) \rho + \left(1 + \rho \right) \left(p_{0} + p_{1}z \right) + q_{0} + q_{1}z \right] = c_{0} \left[0 + \rho p_{1}z + q_{1}z \right] + c_{1}z \left[\left(1 + \rho \right) \rho + \left(1 + \rho \right) \left(p_{0} + p_{1}z \right) + q_{0} + q_{1}z \right] = z \left[\left(\rho p_{1} + q_{1} \right) c_{0} + c_{1} \left[\left(1 + \rho \right) \rho + \left(1 + \rho \right) p_{0} + q_{0} \right] \right] + \mathcal{O}(z^{2}) ,$$

so dass aus
$$a_1 = c_1 [(1+\rho)\rho + (1+\rho)p_0 + q_0] + c_0(\rho p_1 + q_1) = 0$$

folgt $c_1 = \frac{-\rho p_1 - q_1}{(1+\rho)\rho + (1+\rho)p_0 + q_0} c_0$. (3.111)

Setzt man dieses Verfahren fort, so erhält man allgemein für m = n

$$c_n \left((n+\rho) \left(n+\rho-1 \right) + (n+\rho) p_0 + q_0 \right) \\ + \sum_{\mu=0}^{n-1} c_\mu \left(\left(\mu+\rho \right) p_{n-\mu} + q_{n-\mu} \right) = 0$$

und somit die Rekursionsformel

$$c_n = \frac{-\sum_{\mu=0}^{n-1} c_\mu \left((\mu+\rho) p_{n-\mu} + q_{n-\mu}\right)}{(n+\rho) \left(n+\rho-1\right) + (n+\rho) p_0 + q_0}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
(3.112)

Durch Vergleich mit (3.111) überprüft man sofort, dass diese allgemeine Rekursionsformel für n = 1 stimmt.

Weiterhin ist die Annahme $c_0 \neq 0$ gerechtfertigt, denn im Fall $c_0 = 0$ würden wir die Lösung w(z) = 0 erhalten.

Als allgemeine Eigenschaften der Lösung (3.107) notieren wir:

1. Im Allgemeinen hat die quadratische Index-Gleichung (3.110) zwei Wurzeln ρ_1 und ρ_2 , die sog. *Indizes der DGL*. Damit erhalten wir die zwei linear unabhängigen Lösungen

$$w_1(z) = z^{\rho_1} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(1)} z^n , \qquad w_2(z) = z^{\rho_2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(2)} z^n .$$
 (3.113)

Die Indizes bestimmen das Verhalten dieser Lösungen für $z \rightarrow 0$. Man erhält reguläre Singularitäten, d.h. die Grenzwerte

$$\lim_{z \to 0} z^{-\rho_1} w_1(z) , \qquad \text{und} \qquad \lim_{z \to 0} z^{-\rho_2} w_2(z)$$

existieren.

- 2. ρ_1 und ρ_2 sind nicht unbedingt ganze Zahlen. Der Wert $\rho = 0$ ist nur möglich falls $q_0 = 0$.
- 3. Treten in Gleichung (3.105) stärkere Singularitäten auf, z.B.

$$\frac{Q(z)}{z^3}w(z) \tag{3.114}$$

mit $q_0 \neq 0$, so ist der Koeffizientenvergleich nicht mehr durchführbar. Für dieses Beispiel bliebe der Term $q_0 c_0 z^{\rho-3}$ in Gleichung (3.108) einzeln stehen.

4. Durch die Rekursionsformel (3.112) ist die Konstante c_0 noch nicht festgelegt. Schreibt man Gleichung (3.112) etwas anders in der Form

$$c_n = \frac{-(q_n + \rho p_n) c_0 - \sum_{\mu=1}^{n-1} c_\mu \left((\mu + \rho) p_{n-\mu} + q_{n-\mu}\right)}{(n+\rho) (n+\rho-1) + (n+\rho) p_0 + q_0}$$

so sieht man, dass durch unterschiedliche Wahl von c_0 keine neuen, sondern nur linear abhängige Lösungen entstehen. O.B.d.A. setzen wir deshalb $c_0 = 1$. Abgesehen von speziellen Fällen, die wir unter Punkt (5) diskutieren, lautet die vollständige Lösung der DGL (3.105) mit Gleichungen (3.113)

$$w(z) = Az^{\rho_1} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(1)} z^n + Bz^{\rho_2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(2)} z^n .$$
 (3.115)

5. Die Rekursionsformel (3.112) ist nur dann sinnvoll, wenn der Nenner

$$D(c_n) = (n+\rho)(n+\rho-1) + (n+\rho)p_0 + q_0 \neq 0$$
(3.116)

immer von Null verschieden ist. Der Nenner (3.116) wird Null $D(c_n) = 0$, wenn

$$0 = (n+\rho)(n+\rho-1) + (n+\rho)p_0 + q_0$$

= $n^2 + n(\rho - 1 + \rho) + \rho(\rho - 1) + np_0 + \rho p_0 + q_0 = n(n+2\rho + p_0 - 1)$

unter Verwendung der Index-Gleichung (3.110). Probleme mit der Rekursionsformel tauchen also auf, wenn gerade

$$n + 2\rho + p_0 - 1 = 0. (3.117)$$

Weiterhin, wenn

$$\rho_1 = \rho_2 + m, \qquad m \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \ldots\}$$
(3.118)

also $\rho_1 > \rho_2$, dann tritt im Nenner von c_m der Ausdruck

$$D(c_m) = (m + \rho_2)(m + \rho_2 - 1) + (m + \rho_2)p_0 + q_0$$

= $\rho_1(\rho_1 - 1) + \rho_1 p_0 + q_0 = 0$

auf, der wegen der Gültigkeit der Indexgleichung (3.110) für ρ_1 verschwindet. Die Rekursionsformel für $c_m^{(2)}$ wird singulär. In diesem Fall führt nur der Index ρ_1 zu einer Lösung. Die zweite, linear unabhängige Lösung muss auf andere Weise konstruiert werden. Man erhält sie im wesentlichen über die Wronski-Determinante (für Details siehe z.B. Arfken S. 401-409) durch Differentiation von w_1 nach ρ_1 , wobei mit

$$z^{\rho_1} = e^{\rho_1 \ln z} \quad \rightarrow \quad \frac{d}{d\rho_1} z^{\rho_1} = z^{\rho_1} \ln z$$

ein Faktor $\ln z$ erzeugt wird. Im Fall von $\rho_1 - \rho_2 \in N_0$ ist dann die allgemeine Lösung

$$w(z) = Aw_1(z) + B [w_1(z) \ln z + z^{\rho_2} \tilde{w}(z)] ,$$

wobei $\tilde{w}(z)$ holomorph an der Stelle z = 0 ist. Falls $\rho_1 = \rho_2$ gilt zusätzlich $\tilde{w}(0) = 0$.

6. Die Faktoren z^{ρ} in der allgemeinen Lösung (3.115) haben zur Folge, dass w(z) im allgemeinen mehrdeutig ist, denn wegen

$$z^{\rho} = \left(|z|e^{i\phi}\right)^{\rho} = |z|^{\rho}e^{i\rho\phi}$$

hat w(z) für $z = |z|e^{i\phi}$ und $z = |z|e^{i(\phi+2\pi)}$, die den gleichen Punkt beschreiben, verschiedene Werte, die sich um den Faktor $e^{i2\pi\rho}$ unterscheiden! Um für w(z) eine eindeutige Funktion zu erhalten, legt man in die komplexe z-Ebene einen Verzweigungsschnitt, z.B. entlang der negativen reellen Achse, und definiert z^{ρ} zunächst nur für einen Zweig mit

$$-\pi < \phi < \pi$$
, d.h. $|\arg z| < \pi$.

In der so aufgeschnittenen komplexen Zahlenebene ist w(z) überall eindeutig definiert.

3.6.2 Die konfluente hypergeometrische Differentialgleichung

Die einfachsten Funktionen in der DGL (3.105) sind natürlich die Konstanten $P(z) = p_0 = const.$ und $Q(z) = q_0 = const.$, so dass

$$z^{2}\frac{d^{2}w}{dz^{2}} + p_{0}z\frac{dw}{dz} + q_{0}w(z) = 0.$$
(3.119)

Diese DGL wird durch die Potenzfunktion $w(z) \propto z^{\lambda}$ gelöst. Nach Einsetzen erhält man

$$\lambda (\lambda - 1) + p_0 \lambda + q_0 = 0 \lambda^2 + (p_0 - 1)\lambda + q_0 = 0 ,$$

so dass

$$\lambda_{1,2} = \frac{1-p_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1-p_0}{2}\right)^2 - q_0}.$$

Die allgemeine Lösung von DGL (3.119) ist dann

$$w(z) = Az^{\lambda_1} + Bz^{\lambda_2} . (3.120)$$

Interessanter für physikalische Anwendungen sind lineare Funktionen für P(z) und Q(z). Wir untersuchen speziell

$$P(z) = b - z$$
, $Q(z) = -az$. (3.121)

Damit erhalten wir für die DGL (3.105)

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \frac{b-z}{z}\frac{dw}{dz} - \frac{a}{z}w(z) = 0$$

$$z\frac{d^2w}{dz^2} + (b-z)\frac{dw}{dz} - aw(z) = 0.$$
(3.122)

oder

Diese DGL wird als *konfluente hypergeometrische Differentialgleichung bezeichnet*. Durch geeignete Transformationen lassen sich viele DGLn der mathematischen Physik auf diese Form reduzieren.

Mit $p_0 = b, p_1 = -1$ und $q_0 = 0, q_1 = -a$ erhalten wir für die Index-Gleichung (3.110) in diesem Fall

$$\rho(\rho + p_0 - 1) + q_0 = \rho(\rho + b - 1) = 0$$

mit den Lösungen

$$\rho_1 = 0 , \qquad \rho_2 = 1 - b . \tag{3.123}$$

Die zu $\rho_1 = 0$ gehörende Lösung

$$w_1(z) = M(a, b, z) = {}_1F_1(a, b, z)$$
(3.124)

bezeichnet man als konfluente hypergeometrische Funktion 1. Art oder als Kummer-Funktion 1. Art.

Die zu $\rho_2=1-b$ gehörende Lösung kann ebenfalls durch M(a,b,z)ausgedrückt werden. Mit dem Ansatz

folgt

$$\begin{array}{lll} w(z) &=& z^{1-b}h(z) \\ w' &=& z^{1-b}h' + (1-b)z^{-b}h \ , \\ w'' &=& z^{1-b}h'' + 2(1-b)z^{-b}h' + (-b)(1-b)z^{-1-b}h \end{array}$$

und nach Einsetzen in DGL (3.122)

$$\begin{split} z^{2-b}h^{''} &+ 2(1-b)z^{1-b}h^{'} - b(1-b)z^{-b}h \\ &+ (b-z)\left(z^{1-b}h^{'} + (1-b)z^{-b}h\right) - az^{1-b}h \\ &= z^{2-b}h^{''} + z^{1-b}h^{'}\left[2(1-b) + (b-z)\right] \\ &+ h\left[-b(1-b)z^{-b} + (b-z)(1-b)z^{-b} - az^{1-b}\right] = 0 \;. \end{split}$$

Nach Multiplikation mit z^{b-1} erhalten wir

$$\begin{aligned} zh^{''} + \left[2 - 2b + b - z\right]h^{'} + z^{-1}h\left[(1 - b)(b - z - b) - az\right] &= 0\\ z\frac{d^{2}h}{dz^{2}} + (2 - b - z)\frac{dh}{dz} - (a - b + 1)h &= 0, \end{aligned}$$

oder

d.h. gemäß der DGL (3.122)

$$h(z) = M(a - b + 1, 2 - b, z)$$

und somit als 2. Lösung

$$w_2(z) = z^{1-b} M(a-b+1, 2-b, z) . (3.125)$$

Damit bleibt als Aufgabe, noch M(a,b,z) zu bestimmen. Nach Gleichung (3.107) gilt mit $\rho_1=0$ der Potenzreihenansatz

$$M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n .$$
 (3.126)

Die Rekursionsformel (3.112) lässt sich nach Gleichung (3.117) verwenden, wenn

$$n + 2\rho_1 + p_0 - 1 = n + 0 + b - 1 = n + b - 1 \neq 0,$$

$$b \neq 1 - n = 0, -1, -2, -3, \dots.$$
(3.127)

Ist b weder Null noch negativ ganzzahlig, so erhalten wir nach Gleichung (3.111) für $\rho_1 = 0$

$$c_1 = \frac{-q_1}{p_0 + q_0} c_0 = \frac{a}{b} c_0$$

und nach Gleichung (3.112) für $\rho_1 = 0$

$$c_n = \frac{-\sum_{\mu=0}^{n-1} c_\mu \left(\mu p_{n-\mu} + q_{n-\mu}\right)}{n(n-1) + np_0 + q_0} \ .$$

92

d.h.

Mit $q_k = -a\delta_{k,1}$ und $p_k = b\delta_{k,0} - 1\delta_{k,1}$ ergibt die Summe $\sum_{\mu=0}^{n-1}$ nur Beiträge für $\mu = n-1$, so dass

$$c_n = \frac{-c_{n-1}\left(-(n-1)-a\right)}{n(n-1+b)} = \frac{a+n-1}{n(n+b-1)}c_{n-1}.$$

Nach Umbenennung der Indizes $n \rightarrow n+1$ erhalten wir für allgemeines n

$$c_{n+1} = \frac{a+n}{(n+1)(n+b)}c_n$$
.

Durch vollständige Induktion zeigt man leicht

$$c_{n+1} = \frac{a+n}{(b+n)(n+1)} \cdot \frac{a+n-1}{(b+n-1)(n-1+1)} c_{n-1}$$

= $\frac{a \cdot (a+1) \cdots (a+n)}{b \cdot (b+1) \cdots (b+n)} \cdot \frac{1}{(n+1)!} c_0$
= $\frac{(a)_{n+1}}{(b)_{n+1}(n+1)!} c_0$, (3.128)

wobei wir das Pochhammersymbol

definiert haben. Mit

$$(a+n-1)! = [1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (a-1)] [a \cdot (a+1) \cdots (a+n-1)] = (a-1)! \cdot (a)_n$$

lässt sich das Pochhammersymbol durch Gamma-Funktionen berechnen:

$$(a)_n = \frac{(a+n-1)!}{(a-1)!} = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} .$$
(3.130)

Mit der Wahl $c_0 = 1$ erhalten wir aus den Gleichungen (3.126) und (3.128)

$$M(a,b,z) =_1 F_1(a,b,z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} .$$
(3.131)

Durch den Faktor (1/n!) konvergiert diese Reihe in der ganzen komplexen z-Ebene. Der bekannteste Spezialfall der Kummer-Funktion 1. Art ist die Exponentialfunktion $e^z = M(a, a, z)$.

Integraldarstellung der konfluenten hypergeometrischen Funktion

Unter Verwendung von Gleichung (3.130) erhalten wir für Gleichung (3.131)

$$M(a,b,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b+n)} \frac{z^n}{n!} .$$
 (3.132)

Wir nutzen die Integraldarstellung der Beta-Funktion für $\Re x > 0$, $\Re y > 0$

$$B(x,y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = \int_0^1 dt \ t^{x-1}(1-t)^{y-1}$$
(3.133)

zur Berechnung des Faktors

$$f_1 = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b+n)} = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \frac{\Gamma(b-a)\Gamma(a+n)}{\Gamma(b+n)}$$

Mit x = b - a und y = a + n, so dass x + y = b + n gilt dann

$$f_1 = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

= $\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} B(x,y)$
= $\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} B(b-a,a+n)$
= $\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 dt \ t^{b-a-1} (1-t)^{a+n-1}$

Mit der Substitution s = 1 - t im Integral folgt dann für $\Re b > \Re a > 0$

$$f_1 = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 ds \ s^{a+n-1} (1-s)^{b-a-1}$$

und damit für Gleichung (3.132) die Integraldarstellung

$$M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_{0}^{1} ds \ s^{a+n-1}(1-s)^{b-a-1} \frac{z^{n}}{n!}$$

$$= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_{0}^{1} ds \ s^{a-1}(1-s)^{b-a-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(sz)^{n}}{n!}$$

$$= \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_{0}^{1} ds \ s^{a-1}(1-s)^{b-a-1} e^{sz} , \quad \Re b > \Re a > 0 , \quad (3.134)$$

wobei wir die Potenzreihendarstellung der Exponentialfunktion

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(sz)^n}{n!} = e^{sz}$$

benutzt haben.

Mit der Substitution s = 1 - t in der Integraldarstellung (3.134) folgt die Transformationsformel

$$M(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} e^{z} \int_{0}^{1} dt \ e^{-zt} (1-t)^{a-1} t^{b-a-1}$$

= $e^{z} M(b-a, b, -z)$. (3.135)

Asymptotische Entwicklung

Mit der Integraldarstellung (3.134) gilt

$$\begin{split} M(a,c,x) &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 dt \ t^{a-1} (1-t)^{c-a-1} e^{tx} \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} e^x \int_0^1 dt \ t^{a-1} (1-t)^{c-a-1} e^{-x(1-t)} \ . \end{split}$$

Wir substituieren $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{x}(1-t)$ und erhalten

$$M(a,c,x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} x^{a-c} e^x \int_0^x ds \, e^{-s} s^{c-a-1} \left[1 - \frac{s}{x}\right]^{a-1} \, .$$

Mit der Reihendarstellung

$$\begin{bmatrix} 1 - \frac{s}{x} \end{bmatrix}^{a-1} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (a-1)!}{r! (a-1-r)!} \left(\frac{s}{x}\right)^r$$

$$M(a,c,x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} x^{a-c} e^x \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (a-1)!}{r! (a-1-r)! x^r}$$

$$\times \int_0^x ds \, e^{-s} s^{c+r-a-1} \,.$$
(3.136)

folgt

Für große $|x| \gg 1$ approximieren wir

$$\int_0^x ds \, e^{-s} s^{c+r-a-1} \ \simeq \ \int_0^\infty ds \, e^{-s} s^{c+r-a-1} \\ = \ \Gamma(c+r-a) = (c+r-a-1)!$$

und erhalten

$$M(a,c,x \gg 1) \simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} x^{a-c} e^x \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (a-1)! (c+r-a-1)!}{r! (a-1-r)! x^r}$$
$$\simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} x^{a-c} e^x$$
$$\times \left[\Gamma(c-a) - \frac{(a-1)(c-a)\Gamma(c-a)}{x} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x^2}\right) \right]$$
$$\simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} x^{a-c} e^x \left[1 + \frac{(1-a)(c-a)}{x} \right].$$
(3.137)

Die Kummer-Funktion 1. Art divergiert für große Argumente dann wie

$$w_1(z \gg 1) = M(a, c, z \gg 1) \simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} z^{a-c} e^z$$
 (3.138)

Die zweite Lösung (3.125) $w_2(z) = z^{1-b}M(a-b+1, 2-b, z)$ divergiert ebenfalls für große Argumente $|z| \gg 1$ exponentiell, $w_2(z \gg 1) \propto e^z$. Um eine Lösung zu erhalten, die für große z nicht divergiert, bildet man die Linearkombination U(a, b, z) aus w_1 und w_2 :

$$U(a, b, z) = \frac{\pi}{\sin \pi b} \left[\frac{w_1(z)}{\Gamma(1 + a - b)\Gamma(b)} - \frac{w_2(z)}{\Gamma(a)\Gamma(2 - b)} \right] \\ = \frac{\pi}{\sin \pi b} \left[\frac{M(a, b, z)}{\Gamma(1 + a - b)\Gamma(b)} - \frac{z^{1-b}M(1 + a - b, 2 - b, z)}{\Gamma(a)\Gamma(2 - b)} \right], \quad (3.139)$$

die man als konfluente hypergeometrische Funktion 2. Art oder als Kummer-Funktion 2. Art bezeichnet. Diese Funktion ist auch für $b = \pm n$ definiert und besitzt die Integraldarstellung

$$U(a,b,z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty dt \ e^{-zt} t^{a-1} (1+t)^{b-a-1} , \quad \Re a > 0 , \quad \Re z > 0 .$$
 (3.140)

Mit der Substitution t = s/z folgt

$$\begin{aligned} U(a,b,z) &= \frac{1}{\Gamma(a)} z^{-a} \int_0^\infty ds \; e^{-s} s^{a-1} \left(1 + \frac{s}{z}\right)^{b-a-1} \\ &= \frac{1}{\Gamma(a)} z^{-a} \sum_{r=0}^\infty \frac{(b-a-1)!}{r!(b-a-1-r)!z^r} \int_0^\infty ds \; e^{-s} s^{r+a-1} \\ &= \frac{1}{\Gamma(a)z^a} \sum_{r=0}^\infty \frac{(b-a-1)!(r+a-1)!}{r!(b-a-1-r)!z^r} \; . \end{aligned}$$

Für große Argumente folgt die asymptotische Entwicklung

$$U(a, b, z \gg 1) \simeq \frac{1}{z^a} \left[1 - \frac{a(1+a-b)}{z} \right]$$
 (3.141)

3.7 Differentialgleichungen der Fuchsschen Klasse

Wir wollen nun das Lösungsverfahren aus Kap. 3.6.1 übertragen auf ähnliche DGLn, die nicht nur im Nullpunkt sondern auch an anderen Stellen der komplexen Ebene singulär sind. Es gibt eine systematische Lösungstheorie für eine große Anzahl von DGLn, die zur "Fuchsschen Klasse" gehören.

Wir betrachten die DGL

$$w''(z) + p(z)w'(z) + q(z)w(z) = 0$$
(3.142)

und definieren:

1. Divergieren die Funktionen p(z) und q(z) für $z \to z_0$, aber bleiben $(z - z_0)p(z)$ und $(z - z_0)^2q(z)$ endlich für $z \to z_0$, dann ist $z = z_0$ eine reguläre Singularität.
2. Divergiert die Funktion p(z) schneller als $1/(z - z_0)$, so dass

$$\lim_{z \to z_0} \left(z - z_0 \right) p(z) \to \infty \; ,$$

oder divergiert die Funktion q(z) schneller als $1/(z-z_0)^2$, so dass

$$\lim_{z \to z_0} \left(z - z_0 \right)^2 q(z) \to \infty \; ,$$

dann bezeichnen wir $z = z_0$ als *irreguläre Singularität* oder *essentielle Singularität*. Diese Definitionen gelten für alle endlichen Werte von z_0 .

3. Im Grenzfall $z_0 = \infty$, also $z \to \infty$, setzen wir y = 1/z und untersuchen dann den Grenzfall $y \to 0$. Aus z = 1/y folgt $dz/dy = -1/y^2$ und damit

$$\frac{d}{dz} = \frac{1}{\frac{dz}{dy}}\frac{d}{dy} = -y^2\frac{d}{dy}$$
$$\frac{d^2}{dz^2} = -y^2\frac{d}{dy}\left[-y^2\frac{d}{dy}\right] = y^4\frac{d^2}{dy^2} + 2y^3\frac{d}{dy}.$$

und

Für die DGL (3.142) erhalten wir

$$y^{4} \frac{d^{2} w}{dy^{2}} + \left[2y^{3} - y^{2} p\left(y^{-1}\right)\right] \frac{dw}{dy} + q\left(y^{-1}\right) w(y) = 0.$$
 (3.143)

Das Verhalten für $z \to \infty$ $(y \to 0)$ hängt ab vom Verhalten der neuen Funktionen

$$\tilde{p} = \frac{2y^3 - y^2 p(y^{-1})}{y^4}
\tilde{q} = \frac{q(y^{-1})}{y^4}$$
(3.144)

und

für $y \to 0$. Bleiben diese endlich, so ist der Punkt $z = \infty$ ein gewöhnlicher Punkt. Divergieren sie schwächer als 1/y bzw. $1/y^2$, so ist $z = \infty$ eine reguläre Singularität, ansonsten eine essentielle Singularität.

3.7.1 Beispiel 1: Besselfunktion

Die Besselsche DGL lautet

$$z^{2}w'' + zw' + (z^{2} - n^{2})w(z) = 0, \qquad (3.145)$$
$$p(z) = \frac{1}{z}, \qquad q(z) = 1 - \frac{n^{2}}{z^{2}}.$$

so dass

Der Punkt z = 0 ist die einzige reguläre Singularität für *endliche z*. Für $z \to \infty$ berechnen wir nach Gleichungen (3.144)

$$\begin{split} \tilde{p} &= \; rac{2y^3 - y^2 \cdot y}{y^4} = rac{1}{y} \ \tilde{q} &= \; rac{1 - n^2 y^2}{y^4} \propto rac{1}{y^4} \,, \end{split}$$

und

d.h. $z=\infty$ ist eine essentielle Singularität.

3.7.2 Beispiel 2: Hypergeometrische Differentialgleichung

Die hypergeometrische DGL lautet

$$z(z-1)w'' + [(1+a+b)z-c]w' + abw(z) = 0$$

$$(3.146)$$

$$(3.146)$$

oder

$$w + \frac{1}{z(z-1)}w + \frac{1}{z(z-1)}w = 0,$$

$$p(z) = \frac{(1+a+b)z-c}{z(z-1)}, \qquad q(z) = \frac{ab}{z(z-1)}.$$

so dass

Es existieren also reguläre Singularitäten bei z = 0 und z = 1. Für $z \to \infty$ berechnen wir nach Gleichungen (3.144)

$$\begin{split} \tilde{p} &= \frac{1}{y^4} \left[2y^3 - y^2 \frac{(1+a+b)\frac{1}{y} - c}{\frac{1}{y} \left(\frac{1}{y} - 1\right)} \right] \\ &= \frac{1}{y^4} \left[2y^3 - y^3 \frac{(1+a+b) - cy}{1-y} \right] \\ &= \frac{y^3}{y^4 (1-y)} \left[2(1-y) - (1+a+b) + cy \right] \\ &= \frac{(c-2)y + (1-a-b)}{(1-y)y} \\ \tilde{q} &= \frac{1}{y^4} \frac{aby}{\frac{1}{2} - 1} = \frac{aby^2}{(1-y)y^4} = \frac{ab}{(1-y)y^2} \,. \end{split}$$

und

$$= \frac{1}{y^4} \frac{a \cdot y}{\frac{1}{y} - 1} = \frac{a \cdot y}{(1 - y)y^4} = \frac{a \cdot y}{(1 - y)y}$$

Wir erhalten

$$\lim_{y \to 0} \tilde{p} \to \lim_{y \to 0} \frac{1 - a - b}{y}$$

divergent in 1. Ordnung von y und

$$\lim_{y \to 0} \tilde{q} \to \lim_{y \to 0} \frac{ab}{y^2}$$

divergent in 2. Ordnung von y, d.h. der Punkt $z = \infty$ ist eine reguläre Singularität. Insgesamt hat die hypergeometrische DGL also drei reguläre Singularitäten bei $0, 1, \infty$.

Übungsaufgaben:

Untersuchen Sie die Natur der Singularitäten bei den DGLn von (a) Laguerre, (b) Legendre und (c) der konfluenten hypergeometrischen DGL.

3.7.3 Nebenbemerkung: Zusammenhang zwischen der hypergeometrischen und der konfluenten hypergeometrischen Differentialgleichung

Wir substituieren z = t/b in der hypergeometrische DGL (3.146), so dass

$$\frac{dw}{dz} = \frac{b}{b}\frac{dw}{dz} = b\frac{dw}{d(bz)} = b\frac{dw}{dt} ,$$

und erhalten

$$\frac{t}{b}\left(\frac{t}{b}-1\right)b^2\frac{d^2w}{dt^2} + \left[(1+a+b)\frac{t}{b}-c\right]b\frac{dw}{dt} + abw = 0.$$

Wir teilen diese Gleichung durch den Faktor b und finden

$$t\left(\frac{t}{b}-1\right)\frac{d^2w}{dt^2} + \left[(1+a+b)\frac{t}{b}-c\right]\frac{dw}{dt} + aw =$$

$$t\left(\frac{t}{b}-1\right)\frac{d^2w}{dt^2} + \left[\frac{(1+a)t}{b}+t-c\right]\frac{dw}{dt} + aw = 0.$$
(3.147)

Im Grenzfall $b \rightarrow \infty$ erhalten wir für Gleichung (3.147)

$$-t\frac{d^2w}{dt^2} - (c-t)\frac{dw}{dt} + aw = 0$$

$$t\frac{d^2w}{dt^2} + (c-t)\frac{dw}{dt} - aw = 0,$$
 (3.148)

und

die mit der konfluenten hypergeometrischen DGL (3.122) übereinstimmt.

Durch das "Konfluieren" (z = t/b mit Grenzfall $b \to \infty$) werden aus den zwei regulären Singularitäten bei z = 0 und z = 1 eine reguläre Singularität bei t = 0, und aus der regulären Singularität bei $z = \infty$ wird eine essentielle Singularität bei $t = \infty$.

3.7.4 Fuchssche Differentialgleichungen

Definition: Unter DGLn der Fuchsschen Klasse versteht man solche, deren Funktionen p(z) und q(z) in der gesamten komplexen Ebene einschließlich $z = \infty$ höchstens endlich viele reguläre Singularitäten haben, d.h. die Funktion p(z) besitzt höchstens Pole 1. Ordnung und die Funktion q(z) besitzt höchstens Pole 2. Ordnung. Es gilt also

$$p(z) = \sum_{k=1}^{n} \frac{A_k}{z - a_k} + g_1(z)$$
(3.149)

$$q(z) = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{B_k}{(z-a_k)^2} + \frac{C_k}{z-a_k} \right) + g_2(z) , \qquad (3.150)$$

wobei a_i die Polstellen mit den entsprechenden Residuen (Polstärken) A_i, B_i, C_i bezeichnen, und $g_1(z)$ und $g_2(z)$ ganze Funktionen sind: sie haben höchstens in $z = \infty$ eine Singularität. Die Bedingung, dass $z = \infty$ eine reguläre Singularität ist, schränkt die Funktionen p(z) und q(z) weiter ein. Mit Gleichung (3.149) erhalten wir für Gleichung (3.144)

$$\tilde{p} = \frac{2}{y} - \frac{1}{y^2} p\left(\frac{1}{y}\right) = \frac{2}{y} - \frac{1}{y^2} \sum_{k=1}^n \frac{A_k y}{1 - a_k y} + \frac{1}{y^2} g_1\left(\frac{1}{y}\right)$$
$$= \frac{2}{y} - \frac{1}{y} \sum_{k=1}^n \frac{A_k}{1 - a_k y} + \frac{1}{y^2} g_1\left(\frac{1}{y}\right)$$
$$g_1(z) = 0, \qquad (3.151)$$

und es folgt

3 Eindimensionale Quantensysteme

weil sonst der Grenzwert

$$L_1 = \lim_{y \to 0} \left(y\tilde{p} \right) \propto \lim_{y \to 0} \left(\frac{1}{y} g_1\left(\frac{1}{y}\right) \right)$$

divergiert. Ebenso erhalten wir mit Gleichung (3.150) für Gleichung (3.144)

$$\begin{split} \tilde{q} &= \frac{1}{y^4} q\left(\frac{1}{y}\right) \\ &= \frac{1}{y^4} g_2\left(\frac{1}{y}\right) + \frac{1}{y^4} \sum_{k=1}^n \left(\frac{B_k y^2}{(1-a_k y)^2} + \frac{C_k y}{1-a_k y}\right) \\ &= \frac{1}{y^4} g_2\left(\frac{1}{y}\right) + \frac{1}{y^2} \sum_{k=1}^n \frac{B_k}{(1-a_k y)^2} + \frac{1}{y^3} \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{1-a_k y} , \\ L_2 &= \lim_{y \to 0} \left(y^2 \tilde{q}\right) \end{split}$$

so dass

$$= \lim_{y \to 0} \frac{g_2\left(\frac{1}{y}\right)}{y^2} + \sum_{k=1}^n B_k + \lim_{y \to 0} \frac{\sum_{k=1}^n C_k}{y} \,.$$

Die Bedingung eines endlichen Grenzwerts ${\it L}_2$ erfordert

$$g_2(z) = 0 (3.152)$$

$$\sum_{k=1}^n C_k = 0. (3.153)$$

(3.153)

$$\sum$$

k=1

und

Für Fuchssche Differentialgleichungen

$$w''(z) + p(z)w'(z) + q(z)w(z) = 0$$
(3.154)

gelten deshalb

$$p(z) = \sum_{k=1}^{n} \frac{A_k}{z - a_k}$$
(3.155)

und

$$q(z) = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{B_k}{(z-a_k)^2} + \frac{C_k}{z-a_k} \right)$$
(3.156)

mit der Nebenbedingung (3.153), $\sum_{k=1}^n C_k = 0$. Die allgemeine Fuchssche DGL (3.154) hat n+1 reguläre Singularitäten: $z = a_1, a_2, \ldots, a_n$ und $z = \infty$.

Fall n = 0

Im einfachsten Fall n = 0 sind gemäß Gleichungen (3.155) – (3.156) die Funktionen p(z) =q(z) = 0 und die entsprechende DGL

$$w''(z) = 0 (3.157)$$

hat eine reguläre Singularität bei $z = \infty$. Die Lösung von Gleichung (3.157) ist

$$w(z) = \alpha + \beta z \; .$$

Durch die Transformation

 $\begin{aligned} \xi &= a + \frac{1}{z} \\ z &= \frac{1}{\xi - a} \end{aligned} \tag{3.158}$

oder

können wir die Singularität in den Punkt $\xi = a$ verschieben. Aus Gleichung (3.158) folgt

$$\frac{d}{dz} = \frac{1}{\frac{dz}{d\xi}} \frac{d}{d\xi} = -(\xi - a)^2 \frac{d}{d\xi}$$
$$\frac{d^2}{dz^2} = (\xi - a)^2 \frac{d}{d\xi} \left[(\xi - a)^2 \frac{d}{d\xi} \right]$$
$$= (\xi - a)^4 \frac{d^2}{d\xi^2} + 2(\xi - a)^3 \frac{d}{d\xi} .$$

und damit

Für die DGL (3.157) erhalten wir dann

$$\frac{d^2w}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi - a}\frac{dw}{d\xi} = 0.$$
 (3.159)

lst umgekehrt eine DGL diesen Typs gegeben, so kann sie durch die Transformation (3.158) auf den einfachen Fall (3.157) zurückgeführt werden.

Fall n = 1

Zunächst sei die DGL für z = 0 und $z = \infty$ singulär. Dann gilt

$$p(z) = \frac{A}{z}$$
, $q(z) = \frac{B}{z^2}$, $C_1 = 0$

und die Fuchssche DGL (3.154) lautet

$$w''(z) + \frac{A}{z}w'(z) + \frac{B}{z^2}w(z) = 0.$$
(3.160)

Dies ist der einfachste Fall der DGL (3.105) und entspricht DGL (3.119) mit der Potenzfunktionslösung

$$w(z) = \alpha_1 z^{\rho_1} + \alpha_2 z^{\rho_2} \tag{3.161}$$

$$\rho_{1,2} = \frac{1-A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1-A}{2}\right)^2 - B}.$$
(3.162)

mit

3 Eindimensionale Quantensysteme

Durch die Transformation

$$\xi = \frac{1}{z + \frac{1}{a_1 - a_2}} + a_2 = a_2 + \frac{a_1 - a_2}{1 + (a_1 - a_2)z}$$
(3.163)

mit der Umkehrtransformation

$$z = \frac{1}{\xi - a_2} - \frac{1}{a_1 - a_2}$$

können die Singularitäten in die Punkte $\xi = a_1$ und $\xi = a_2$ verschoben werden.

Fall n = 2

Mathematisch interessant sind DGLn mit drei Singularitäten, die wir zunächst in die Punkte $z = 0, 1, \infty$ legen. Nach Gleichungen (3.155) – (3.156) gilt gann für die Koeffizientenfunktionen

$$p(z) = \frac{A_0}{z} + \frac{A_1}{z - 1},$$

$$q(z) = \frac{B_0}{z^2} + \frac{B_1}{(z - 1)^2} + \frac{C}{z} - \frac{C}{z - 1},$$
(3.164)

weil wegen der Nebenbedingung (3.153)

$$\sum_{k=0}^{1} C_k = C_0 + C_1 = 0$$
$$C = C_0 = -C_1 .$$

oder

In den Gleichungen (3.164) treten noch die fünf Koeffizienten A_0, A_1, B_0, B_1, C auf, die man jedoch auf drei unabhängige Konstanten reduzieren kann. Dazu substituieren wir in der Fuchsschen DGL (3.154)

und

$$w(z) = k(z)W(z) ,k(z) = z^{\lambda}(1-z)^{\mu} .$$
(3.165)

Es folgt

$$\begin{split} w' &= k'W + kW', \\ w'' &= k''W + 2k'W' + kW'' \\ k' &= \lambda z^{\lambda-1}(1-z)^{\mu} - \mu z^{\lambda}(1-z)^{\mu-1} \\ &= z^{\lambda-1}(1-z)^{\mu-1} \left[\lambda(1-z) - \mu z\right] \\ &= \left[\lambda - (\mu + \lambda)z\right] z^{\lambda-1}(1-z)^{\mu-1} \\ k'' &= \lambda(\lambda - 1)z^{\lambda-2}(1-z)^{\mu} - 2\mu\lambda z^{\lambda-1}(1-z)^{\mu-1} + \mu(\mu - 1)z^{\lambda}(1-z)^{\mu-2} \\ &= z^{\lambda-2}(1-z)^{\mu-2} \left[\lambda(\lambda - 1)(1-z)^2 - 2\mu\lambda z(1-z) + \mu(\mu - 1)z^2\right]. \end{split}$$

Für die Fuchssche DGL (3.154) finden wir

$$\begin{split} kW^{''} + 2k^{'}W^{'} + k^{''}W + pk^{'}W + pkW^{'} + qkW &= \\ kW^{''} + \left[2k^{'} + pk\right]W^{'} + \left[k^{''} + pk^{'} + qk\right]W &= 0 \;. \end{split}$$

Nach Multiplikation mit $z^{2-\lambda}(1-z)^{2-\mu}$ ergibt sich

$$z^{2}(1-z)^{2}W'' + z(1-z)W' \left[2\left[\lambda - (\mu + \lambda)z\right] + p(z)z(1-z) \right] + W \left[q(z)z^{2} (1-z)^{2} + p(z)z(1-z)\left[\lambda - (\mu + \lambda)z\right] + \lambda(\lambda - 1)(1-z)^{2} - 2\mu\lambda z(1-z) + \mu(\mu - 1)z^{2} \right] = 0.$$
(3.166)

Mit Gleichungen (3.164) finden wir

und

$$p(z)z(1-z) = A_0(1-z) - A_1z$$

$$q(z)z^2(1-z)^2 = B_0(1-z)^2 + B_1z^2 + C[z(z-1)^2 - z^2(z-1)]$$

$$= B_0(1-z)^2 + B_1z^2 + Cz(1-z).$$

Gleichung (3.166) reduziert sich dann auf

$$z^{2}(1-z)^{2}W'' + z(1-z)W' \left[2\left[\lambda - (\mu + \lambda)z\right] + A_{0}(1-z) - A_{1}z\right] + W \left[B_{0}(1-z)^{2} + B_{1}z^{2} + Cz(1-z) + \left[A_{0}(1-z) - A_{1}z\right] \left[\lambda - (\mu + \lambda)z\right] + \lambda(\lambda - 1)(1-z)^{2} - 2\mu\lambda z(1-z) + \mu(\mu - 1)z^{2} \right] = z^{2}(1-z)^{2}W'' + z(1-z)W' \left[(1-z)\left[2\lambda + A_{0}\right] - \left[A_{1} + 2\mu\right]z\right] + W \left[(1-z)^{2} \left[\lambda^{2} + (A_{0} - 1)\lambda + B_{0}\right] + z^{2} \left[\mu^{2} + (A_{1} - 1)\mu + B_{1}\right] + z(1-z)\left[C - 2\mu\lambda - A_{1}\lambda - A_{0}\mu\right] \right] = 0. \quad (3.167)$$

Wir wählen jetzt die Werte von λ und μ so, dass

$$\begin{split} \lambda^2 + (A_0 - 1)\lambda + B_0 &= 0 , \\ \mu^2 + (A_1 - 1)\mu + B_1 &= 0 , \end{split}$$

d.h.

$$\lambda_{1,2} = \frac{1-A_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1-A_0}{2}\right)^2 - B_0} ,$$

$$\mu_{1,2} = \frac{1-A_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1-A_1}{2}\right)^2 - B_1} .$$
(3.168)

3 Eindimensionale Quantensysteme

Nach Division durch $z^2(1-z)^2$ vereinfacht sich Gleichung (3.167) dann zu

$$W'' + p_1(z)W' + q_1(z)W(z) = 0 (3.169)$$

mit

$$p_1(z) = \frac{\alpha_0}{z} + \frac{\alpha_1}{z - 1}, \qquad q_1(z) = \frac{\beta}{z(1 - z)}$$

$$\alpha_0 = 2\lambda + A_0 = 1 \pm \sqrt{(1 - A_0)^2 - 4B_0}, \qquad (3.170)$$

und

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= 2\lambda + A_0 = 1 \pm \sqrt{(1 - A_0)^2 - 4\lambda} \\ \alpha_1 &= A_1 + 2\mu \\ \beta &= C - 2\mu\lambda - A_1\lambda - A_0\mu . \end{aligned}$$

In der Tat sind in der DGL (3.169) nur noch die drei Konstanten $\alpha_0, \alpha_1, \beta$ enthalten. Statt dieser wählen wir neue Parameter (a,b,c) durch die Forderungen, dass

$$p_{1}(z) = \frac{c}{z} + \frac{1+a+b-c}{z-1},$$

$$q_{1}(z) = \frac{ab}{z(z-1)}.$$
(3.171)

Durch Vergleich mit den Gleichungen (3.170) erhalten wir $ab = -\beta$, $c = \alpha_0$ und $1+a+b-c = \alpha_1$. Die beiden letzten Beziehungen ergeben

$$a+b = \alpha_0 + \alpha_1 - 1$$

und mit $b = -\beta/a$ folgt die quadratische Gleichung

$$a^2 - (\alpha_0 + \alpha_1 - 1)a = \beta$$
.

Wir erhalten

$$c = \alpha_0 , \qquad (3.172)$$

$$a_{1,2} = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 - 1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha_0 + \alpha_1 - 1}{2}\right)^2 + \beta} , \qquad (3.173)$$

$$b_{1,2} = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 - 1}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\alpha_0 + \alpha_1 - 1}{2}\right)^2 + \beta} .$$
 (3.174)

Für Gleichung (3.169) erhalten wir dann die hypergeometrische DGL

$$z(1-z)W'' + [c - (a+b+1)z]W' - abW(z) = 0.$$
(3.175)

Zur Konstruktion der Lösung der hypergeometrischen DGL (3.175) bedienen wir uns der Methode von Kap. 3.6. Wir schreiben die DGL (3.169) in der Form (3.105) als

$$W'' + \frac{P(z)}{z}W' + \frac{Q(z)}{z^2}W(z) = 0$$
(3.176)

3.7 Differentialgleichungen der Fuchsschen Klasse

mit

$$P(z) = zp_1(z) = \alpha_0 - \alpha_1 \frac{z}{1-z}$$
(3.177)

und

$$Q(z) = z^2 q_1(z) = \frac{\beta z}{1-z} .$$
(3.178)

Nahe des Nullpunkts z = 0 gilt

und

$$P(z) \simeq \alpha_0 - \alpha_1 z (1+z) = \alpha_0 - \alpha_1 z - \alpha_1 z^2$$

$$Q(z) \simeq \beta z (1+z) = \beta z + \beta z^2$$

$$(3.179)$$

und wir erhalten für die ersten Terme der Potenzreihenentwicklung (vergl. Kap. 3.6.1)

 $p_0 = \alpha_0 \;, \qquad p_1 = -\alpha_1 \;, \qquad q_0 = 0 \;, \qquad q_1 = \beta \;.$

Die Index-Gleichung (3.110) lautet dann

$$\rho(\rho - 1 + \alpha_0) = 0$$

mit den Lösungen $\rho_1 = 0$ und $\rho_2 = 1 - \alpha_0$. Für die erste Lösung kann dann der Potenzreihenansatz

$$W_1(z) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n z^n$$

verwandt werden, wenn gemäß Gleichung (3.117)

und

$$n + \alpha_0 - 1 \neq 0$$

 $\alpha_0 \neq 1 - n = 0, -1, -2, \dots$

ist. Mit Verwendung der Rekursionsformel (3.112) erhält man (ohne Beweis hier) mit den Pochhammersymbolen

$$C_n = \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} C_0$$

wobei a, b und c gerade durch die Gleichungen (3.172) – (3.174) bestimmt sind. Mit $C_0 = 1$ folgt als erste Lösung die hypergeometrische Funktion

$$W_1(z) = {}_2F_1(a,b;c;z) = F(a,b;c;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n(b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!} .$$
(3.180)

Die zu $\rho_2=1-\alpha_0=1-c$ gehörende Lösung kann ebenfalls durch F(a,b;c;z)ausgedrückt werden. Mit dem Ansatz

folgt

$$W_2 = z^{1-c}h(z)$$

$$W'_2 = z^{1-c}h' + (1-c)z^{-c}h,$$

$$W''_2 = z^{1-c}h'' + 2(1-c)z^{-c}h' + (-c)(1-c)z^{-1-c}h$$

3 Eindimensionale Quantensysteme

und nach Einsetzen in die hypergeometrische DGL (3.146)

$$z(1-z)z^{-1-c} \left[z^2 h'' + 2(1-c)zh' - c(1-c)h \right] + \left[c - (a+b+1)z \right] z^{-c} \left[zh' + (1-c)h \right] - abhz^{1-c} = 0.$$

Nach Multiplikation mit z^{c-1} und Ordnen erhalten wir

$$z(1-z)h'' + h'[(1-z)2(1-c) + c - (a+b+1)z] + h[-ab + c(1-c) - (a+b+1)(1-c)] = z(1-z)h'' + h'[2-c-z(3+a+b-2c)] - h[ab + (1-c)(a+b+1-c)] = 0.$$
(3.181)

Diese Gleichung wird durch die hypergeometrische Funktion F(A, B; C; z) gelöst mit

$$A = a - c + 1$$
, $B = b - c + 1$, $C = 2 - c$. (3.182)

Zum Beweis dieser Behauptung nutzen wir, dass die hypergeometrische DGL (3.175) für F(A, B; C; z) gilt, d.h.

$$z(1-z)F'' + [C - (A+B+1)z]F' - ABF(z) = 0$$
(3.183)

und vergleichen mit Gleichung (3.181). Man erkennt sofort, dass C=2-c sein muss. Desweiteren muss sein

$$AB = ab + (1-c)(a+b+1-c)$$

und
$$A+B+1 = 3+a+b-2c.$$

Setzen wir nach Behauptung (3.182) ein zeigt sich in der Tat

$$A + B + 1 = a - c + 1 + b - c + 1 + 1 = 3 + a + b - 2c$$

$$AB = (a - c + 1)(b - c + 1)$$

$$= (a + 1 - c)(b + 1 - c)$$

$$= ab + (1 - c)(a + b) + (1 - c)^{2}$$

$$= ab + (1 - c)(a + b + 1 - c) .$$

Die zweite Lösung der hypergeometrischen DGL ist deshalb durch

$$W_2(z) = z^{1-c}F(a-c+1, b-c+1; 2-c; z)$$
(3.184)

gegeben.

und

Die Schrödinger-Gleichung ist im Allgemeinen nur für sehr einfache Potentialverläufe V(x) geschlossen lösbar. Wir behandeln deshalb Näherungsverfahren für kompliziertere Potentialfunktionen V(x).

Die eindimensionale zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (3.1)

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x)\right]\psi(x) = 0$$

ist ein Spezialfall einer gewöhnlichen, linearen, homogenen Differentialgleichung 2. Ordnung in Normalform

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + J(x)f(x) = 0, \qquad (4.1)$$

wobei im Fall der Schrödinger-Gleichung

$$J(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x) \right] \,. \tag{4.2}$$

4.1 Lineare homogene Differentialgleichung 2. Ordnung

Die allgemeine Form einer linearen homogenen DGL 2. Ordnung lautet

$$p_0(x)\frac{d^2F(x)}{dx^2} + p_1(x)\frac{dF(x)}{dx} + p_2(x)F(x) = 0, \qquad (4.3)$$

mit beliebigen Funktionen $p_0(x), p_1(x), p_2(x)$.

4.1.1 Normalform

Jede DGL der Form (4.3) lässt sich auf Normalform (4.1) bringen mithilfe der Substitution

$$F(x) = \phi(x)f(x) ,$$

$$\phi(x) = \exp\left[-\int^{x} dx' \frac{p_{1}(x')}{2p_{0}(x')}\right] .$$
(4.4)

wobei

Zum Beweis dieser Behauptung berechnen wir

$$\frac{dF}{dx} = F' = \phi'f + \phi f' = -\frac{p_1}{2p_0}\phi f + \phi f' = \phi \left[f' - \frac{p_1}{2p_0}f\right]$$
(4.5)
$$F'' = \phi''f + 2\phi'f' + \phi f''$$

und

$$= \phi \left[f'' - \frac{p_1}{p_0} f' + \left(\frac{p_1^2}{4p_0^2} + \frac{p_1 p'_0}{2p_0^2} - \frac{p_0 p'_1}{2p_0^2} \right) f \right] , \qquad (4.6)$$

wobei wir $\phi^{'} = - \frac{p_1}{2p_0} \phi \; ,$

$$\phi'' = \frac{-2p_0p'_1 + 2p_1p'_0}{4p_0^2}\phi - \frac{p_1}{2p_0}\phi'$$
$$= \left[\left(\frac{p_1}{2p_0}\right)^2 + \frac{p_1p'_0}{2p_0^2} - \frac{p_0p'_1}{2p_0^2}\right]\phi$$

benutzt haben. Das Einsetzen von Gleichungen (4.5) und (4.6) ergibt für Gleichung (4.3)

$$f'' - \frac{p_1}{p_0}f' + \left(\frac{p_1^2}{4p_0^2} + \frac{p_1p_0'}{2p_0^2} - \frac{p_0p_1'}{2p_0^2}\right)f + \frac{p_1}{p_0}\left[f' - \frac{p_1}{2p_0}f\right] + \frac{p_2}{p_0}f = f'' + f\left[\frac{p_2}{p_0} - \frac{p_1^2}{4p_0^2} + \frac{p_1p_0' - p_0p_1'}{2p_0^2}\right] = 0 \quad (4.7)$$

Q.E.D. Gleichung (4.7) besitzt Normalform

$$f'' + J(x)f(x) = 0 (4.8)$$

mit

$$J(x) = \frac{p_2}{p_0} - \frac{p_1^2}{4p_0^2} + \frac{p_1 p_0' - p_0 p_1'}{2p_0^2}$$
$$= \frac{p_2}{p_0} - \left(\frac{p_1}{2p_0}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{p_1}{p_0}\right) .$$
(4.9)

4.1.2 Selbst-adjungierte Form

Multiplizieren wir Gleichung (4.3) mit dem Faktor

$$\frac{1}{p_0(x)} \exp\left[\int^x dx' \frac{p_1\left(x'\right)}{p_0\left(x'\right)}\right] ,$$

4.1 Lineare homogene Differentialgleichung 2. Ordnung

so folgt

$$\exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}\left(x'\right)}{p_{0}\left(x'\right)}\right] \frac{d^{2}f}{dx^{2}}$$

$$+ \frac{p_{1}(x)}{p_{0}(x)} \exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}\left(x'\right)}{p_{0}\left(x'\right)}\right] \frac{df}{dx}$$

$$+ \frac{p_{2}(x)}{p_{0}(x)} \exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}\left(x'\right)}{p_{0}\left(x'\right)}\right] f$$

$$= \frac{d}{dx} \left(\exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}\left(x'\right)}{p_{0}\left(x'\right)}\right] \frac{df}{dx}\right)$$

$$+ \frac{p_{2}(x)}{p_{0}(x)} \exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}\left(x'\right)}{p_{0}\left(x'\right)}\right] f =$$

und damit die selbst-adjungierte Form

$$\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{df}{dx}\right) + q(x)f(x) = 0 \tag{4.10}$$

mit

$$p(x) = \exp\left[\int^{x} dx' \frac{p_{1}(x')}{p_{0}(x')}\right]$$
(4.11)

0

und

$$q(x) = \frac{p_2(x)}{p_0(x)} p(x) .$$
(4.12)

4.1.3 Beispiel: konfluente hypergeometrische Differentialgleichung

Als Beispiel betrachten wir die konfluente hypergeometrische DGL (3.122)

$$x\frac{d^2F}{dx^2} + (b-x)\frac{dF}{dx} - aF(x) = 0, \qquad (4.13)$$

d.h. in diesem Fall sind $p_0(x) = x$, $p_1(x) = b - x$ und $p_2(x) = -a$. Für die Funktion (4.4b) erhalten wir dann

$$\phi(x) = \exp\left[-\int^x dx' \frac{b-x'}{2x'}\right] = \exp\left[-\frac{b}{2}\ln x + \frac{x}{2}\right] = x^{-b/2}e^{x/2} ,$$

so dass mit dem Ansatz (4.4a)

$$F(x) = \phi(x)f(x) = x^{-b/2}e^{x/2}f(x)$$
(4.14)

die Normalform der konfluenten hypergeometrischen DGL resultiert. Zur Berechnung von J(x) gemäß Gleichung (4.9) verwenden wir

$$\frac{p_2}{p_0} = -\frac{a}{x} , \qquad \frac{p_1}{2p_0} = \frac{b-x}{2x} = \frac{b}{2x} - \frac{1}{2} , \qquad \frac{d}{dx} \left[\frac{p_1}{2p_0} \right] = -\frac{b}{2x^2}$$

und erhalten

$$J(x) = -\frac{a}{x} - \left(\frac{b}{2x} - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{b}{2x^2} = \frac{b}{2x^2} - \frac{a}{x} - \left(\frac{b^2}{4x^2} - \frac{b}{2x} + \frac{1}{4}\right)$$
$$= -\frac{1}{4} + \frac{b - 2a}{2x} - \frac{b^2 - 2b}{4x^2} = -\left[\frac{1}{4} + \frac{2a - b}{2x} + \frac{b^2 - 2b}{4x^2}\right].$$

Die Normalform der konfluenten hypergeometrischen DGL lautet dann

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \left[\frac{1}{4} + \frac{a - (b/2)}{x} + \frac{b^2 - 2b}{4x^2}\right]f(x) .$$
(4.15)

Die sog. Whittaker-Funktionen $M_{\kappa,\mu}(x)$ und $W_{\kappa,\mu}(x)$ erfüllen die DGL

$$\frac{d^2M}{dx^2} = \left[\frac{1}{4} - \frac{\kappa}{x} + \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{x^2}\right]M.$$
(4.16)

•

Durch Vergleich der DGLn (4.15) und (4.16) finden wir

$$\begin{array}{rcl} \kappa & = & \frac{b}{2} - a \;, \qquad \mu^2 - \frac{1}{4} = \frac{b^2 - 2b}{4} \\ \mu^2 & = & \frac{b^2 - 2b + 1}{4} = \frac{(b-1)^2}{4} \; \rightarrow \mu = \frac{b-1}{2} \end{array}$$

so dass

Umgekehrt gilt $b = 1 + 2\mu$ und $a = (b/2) - \kappa = \mu - \kappa + (1/2)$. Für die allgemeine Lösung von Gleichung (4.15) gilt dann mit Gleichung (4.14) und den Ergebnissen von Kap. 3.6.2

$$f_{1,2}(x) = A_1 M_{\frac{b}{2}-a, \frac{b}{2}-\frac{1}{2}}(x) + A_2 W_{\frac{b}{2}-a, \frac{b}{2}-\frac{1}{2}}(x) = x^{b/2} e^{-x/2} F_{1,2}(x)$$

$$= x^{\mu+\frac{1}{2}} e^{-x/2} \left[A_1 M \left(\mu - \kappa + \frac{1}{2}, 1 + 2\mu, x \right) + A_2 U \left(\mu - \kappa + \frac{1}{2}, 1 + 2\mu, x \right) \right] .$$

$$(4.17)$$

4.1.4 Riccati-Gleichung

Mit dem Ansatz

$$\frac{df(x)}{dx} = S(x)f(x) \tag{4.18}$$

lässt sich jede lineare homogene DGL 2. Ordnung in Normalform (4.1) in die nichtlineare Riccati-Gleichung transformieren. Gleichung (4.18) ist gleichbedeutend mit

$$f(x) = \exp\left[\int^{x} dx' S\left(x'\right)\right] \,. \tag{4.19}$$

Mit dem Ansatz (4.18) folgt

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = S^{'}f + Sf^{'} = S^{'}f + S^2f = \left(S^{'} + S^2\right)f \ ,$$

und wir erhalten für die Normalform (4.1) die Riccati-Gleichung

$$\frac{dS(x)}{dx} + S^2(x) + J(x) = 0$$
(4.20)

für die Funktion S(x). Die Riccati-Gleichung ist von 1. Ordnung in x, dafür aber nichtlinear aufgrund des Terms S^2 .

4.2 WKB-Näherung (Methode von Liouville-Green)

4.2.1 Methode

Die Riccati-Gleichung (4.20) wird näherungsweise gelöst mit der Annahme

$$\left|\frac{dS(x)}{dx}\right| \ll \left|S^2(x)\right| , \qquad (4.21)$$

deren Gültigkeit im Nachhinein (a posteriori) zu überprüfen ist.

In nullter Näherung vernachlässigen wir dann in der Riccati-Gleichung (4.20) den ersten Term (S') gegen den quadratischen Term S^2 und erhalten

$$S_0^2(x) \simeq -J(x) = i^2 J(x)$$

$$S_0(x) = \pm i J^{1/2}(x) .$$
(4.22)

Mit dieser Näherung ist Gleichung (4.21) äquivalent zu

$$\left| \pm i \frac{1}{2} J^{-1/2}(x) \frac{dJ}{dx} \right| \ll \left| -J^{(k)} \right| ,$$

$$\left| \frac{dJ}{2J^{3/2}} \right| \ll 1 .$$

$$(4.23)$$

oder

und

Als verbesserte ${\bf erste}$ Näherung nehmen wir dann den Term S' in der Näherung $S'\simeq S_0'$ mit und erhalten

$$\left[S^{(1)}\right]^2(x) \simeq -J(x) - S'_0(x) . \tag{4.24}$$

Nach Gleichung (4.22) gilt

$$S_0'(x) = \frac{dS_0(x)}{dx} = \pm i \frac{1}{2} J^{-1/2}(x) \frac{dJ}{dx}$$

und damit für Gleichung (4.24)

$$\left[S^{(1)}\right]^2(x) \simeq -J(x) \mp \frac{i}{2} J^{-1/2}(x) \frac{dJ}{dx} = -J(x) \left[1 \pm \frac{i}{2} J^{-3/2}(x) \frac{dJ}{dx}\right] .$$

Wir erhalten die beiden Näherungslösungen

$$S_{1,2}^{(1)}(x) \simeq \pm i J^{1/2}(x) \left[1 \pm \frac{i}{2} J^{-3/2}(x) \frac{dJ}{dx} \right]^{1/2}$$

Aufgrund von Bedingung (4.23) können wir die zweite Wurzel entwickeln und erhalten

$$S_{1,2}^{(1)}(x) \simeq \pm i J^{1/2}(x) \left[1 \pm \frac{i}{4} J^{-3/2}(x) \frac{dJ}{dx} \right]$$

$$= \pm i J^{1/2}(x) - \frac{1}{4} J^{-1}(x) \frac{dJ}{dx}$$

$$= \pm i J^{1/2}(x) - \frac{1}{4} \frac{d \ln J(x)}{dx}$$

$$= \pm i J^{1/2}(x) + \frac{d}{dx} \ln \left[J^{-1/4}(x) \right] . \qquad (4.25)$$

Verwenden wir die Näherungslösung (4.25) in Gleichung (4.19), dann erhalten wir die beiden WKB-Näherungslösungen

$$f_{1,2}(x) = \exp\left[\int^{x} dx' S_{1,2}^{(1)}\left(x'\right)\right]$$

= $\exp\left[\pm i \int^{x} dx' J^{1/2}\left(x'\right) + \int^{x} dx' \frac{d}{dx'} \ln\left[J^{-1/4}\left(x'\right)\right]\right]$
= $\exp\left[\pm i \int^{x} dx' J^{1/2}\left(x'\right) + \ln\left[J^{-1/4}(x)\right]\right]$
= $\frac{1}{J^{1/4}(x)} \exp\left[\pm i \int^{x} dx' J^{1/2}\left(x'\right)\right].$ (4.26)

Diese mathematische Näherungsmethode wurde ursprünglich von Liouville und Green entwickelt und später in der Quantenmechanik von Wentzel, Kramers und Brillouin (plus Jeffreys) bei Näherungslösungen der Schrödinger-Gleichung "wiederentdeckt". Man nennt sie daher heute kurz *WKB-Näherung*.

4.2.2 Anwendung auf die stationäre Schrödinger-Gleichung

Die stationäre Schrödinger-Gleichung ist eine lineare DGL in Normalform mit der Funktion (4.2)

$$J_s(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x) \right] \; .$$

Wir definieren die effektive Wellenzahl

$$K(x) \equiv J_s^{1/2}(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x)\right]\right)^{1/2}, \quad \text{für} \quad E > V(x) \quad (4.27)$$

und

$$K(x) \equiv -\imath \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[V(x) - E\right]\right)^{1/2} = -\imath \kappa(x) , \quad \text{für} \quad V(x) > E . \quad (4.28)$$

Die Bedingung (4.23) für die Gültigkeit der WKB-Näherung kann alternativ geschrieben werden als

$$\left|\frac{d}{dx}J^{-1/2}(x)\right| \ll 1 \tag{4.29}$$

$$|xJ^{1/2}(x)| \gg 1.$$
 (4.30)

oder

Mit der effektiven Wellenzahl (4.27) lauten die Bedingungen (4.29) und (4.30)

$$\left|\frac{d}{dx}J_s^{-1/2}(x)\right| = \left|\frac{d}{dx}\frac{1}{K(x)}\right| \ll 1, \qquad (4.31)$$

und

$$|xK(x)| \gg 1, \qquad (4.32)$$

d.h. die dazugehörende effektive Wellenlänge $\lambda(x) = 2\pi/K(x)$ darf sich nur langsam ändern:

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1 \; .$$

Für die Gültigkeit der WKB-Näherung bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung darf sich auf einer Strecke Δx die de Broglie-Wellenlänge nur um einen Betrag $\Delta \lambda$ ändern, der klein gegen Δx ist.

Dies ist gleichbedeutend mit schwachen Änderungen des Potentials V(x), denn mit

$$p(x) = \hbar K(x) = [2m(E - V(x))]^{1/2}$$

gilt einerseits

$$\left|\frac{dp}{dx}\right| = m \left|\frac{dV}{dx}\right| \,, \tag{4.33}$$

während Bedingung (4.31)

$$\left|\frac{dK}{dx}\right| \ll K^2 = 2\pi \frac{|K|}{|\lambda|}$$

andererseits impliziert, dass

$$\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll \frac{|p|}{|\lambda(x)|} \; .$$

Mit Gleichung (4.33) folgt dann

$$\lambda(x) \left| \frac{dV}{dx} \right| \ll \frac{|p(x)|^2}{m} . \tag{4.34}$$

Die Änderung der potentiellen Energie über eine Wellenlänge muss sehr viel kleiner als die lokale kinetische Energie sein.

Die WKB-Gültigkeitsbedingung (4.34) ist in den Umkehrpunkten x = u der Bewegung, wo

$$V(u) = E \quad \to \quad x = u , \qquad (4.35)$$

nicht mehr erfüllt. Dies ist besonders ersichtlich an der WKB-Bedingung in der Form (4.32): in den Umkehrpunkten ist die effektive Wellenzahl (4.27) $K_u = 0$ gleich Null, so dass $|K(x)x| \gg 1$ nicht erfüllt werden kann.

Wie können wir nun die WKB-Näherungslösung der Schrödinger-Gleichung aufstellen? Im klassisch erlaubten Bereich der Bewegung E > V(x), gleichbedeutend mit $x \ll u$ (siehe Abb. 4.1), schreibt sich die WKB-Lösung (4.26) mit der effektiven Wellenzahl (4.27) als

$$\psi(x \ll u) \simeq \frac{C}{\sqrt{K(x)}} \exp\left[-i \int_{u}^{x} K(s) ds\right] + \frac{D}{\sqrt{K(x)}} \exp\left[+i \int_{u}^{x} K(s) ds\right]$$
(4.36)



Abbildung 4.1: Klassisch erlaubter und verbotener Bereich

mit noch zu bestimmenden Konstanten C und D. Im *klassisch verbotenen* Bereich der Bewegung E < V(x), gleichbedeutend mit $x \gg u$, schreibt sich die WKB-Lösung (4.26) mit der effektiven Wellenzahl (4.28) als

$$\psi(x \gg u) \simeq \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_{u}^{x} \kappa(s)ds\right] + \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[+\int_{u}^{x} \kappa(s)ds\right]$$
(4.37)

mit ebenfalls noch zu bestimmenden Konstanten A und B.

Die unteren Integrationsgrenzen der Integrale in den Lösungen (4.36) und (4.37) sind zwar beliebig, jedoch zur Eindeutigkeit haben wir sie zu x = u gesetzt.

Wie ist nun die Relation der Konstanten A, B, C, D zueinander, wenn sie den gleichen quantenmechanischen Zustand, obwohl in unterschiedlichen Ortsbereichen, beschreiben? Die Anpassung von ψ und ψ' bei den Umkehrpunkten x = u scheidet aus, weil dort, wie oben diskutiert wegen $K(u) = \kappa(u) = 0$, die WKB-Lösungen nicht gelten. Man sieht dies auch formal an den Lösungen (4.36) und (4.37), die bei x = u wegen $K(u) = \kappa(u) = 0$ unendlich groß werden.

Es bietet sich folgender Ausweg an: wir entwickeln das Potential in der Nähe der Umkehrpunkte x = u in eine Taylorreihe bis zur 1. Ordnung, so dass mit Gleichung (4.35)

$$V(x) - E \simeq V(u) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{u} (x - u) - E = \left. \frac{dV}{dx} \right|_{u} (x - u) = g(x - u) , \qquad (4.38)$$

wobei die Konstante

$$g \equiv \left. \frac{dV}{dx} \right|_u \tag{4.39}$$

positiv ist für ein ansteigendes Potential.

Mit der Entwicklung (4.38) lautet die Schrödinger-Gleichung

_

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + g(x-u)\psi = 0.$$
(4.40)

Wir transformieren auf die Variable

$$z = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x-u) = c_1(x-u) , \qquad (4.41)$$

so dass

$$\frac{d}{dx} = \frac{dz}{dx}\frac{d}{dz} = c_1 \frac{d}{dz}
\frac{d^2}{dx^2} = c_1^2 \frac{d^2}{dz^2} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{2/3} \frac{d^2}{dz^2}.$$
(4.42)

und

Eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung (4.40) folgt dann

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{2/3} \frac{d^2\psi}{dz^2} + g \left(\frac{\hbar^2}{2mg}\right)^{1/3} z\psi = 0$$
$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z\psi = 0.$$
(4.43)

oder

Diese DGL ist ein Spezialfall der in Formel 8.494.10 von Gradstheyn & Ryzhik angegebenen DGL

$$\frac{d^2U}{dx^2} - c^2 x^{2\nu-2} U = 0 \tag{4.44}$$

mit der Lösung

$$U(x) = x^{1/2} Z_{\frac{1}{2\nu}} \left(i \frac{c}{\nu} x^{\nu} \right) , \qquad (4.45)$$

wobei $Z_{\mu}(iy) = I_{\mu}(y), K_{\mu}(y)$ modifizierte Bessel-Funktionen sind. Im Fall von Gleichung (4.43) sind $2\nu - 2 = 1$ oder $\nu = 3/2$ und c = 1, so dass

$$U(x) = x^{1/2} Z_{1/3} \left(i \frac{2}{3} x^{3/2} \right) ,$$

d.h. die allgemeine Lösung von Gleichung (4.43) ist

$$\psi(z) = z^{1/2} \left[\alpha_1 I_{1/3} \left(\frac{2}{3} z^{3/2} \right) + \alpha_2 K_{1/3} \left(\frac{2}{3} z^{3/2} \right) \right]$$
(4.46)

oder andere Linearkombinationen dieser beiden Fundamentallösungen. Gebräuchlich sind die sog. Airy-Funktionen Ai(z) und Bi(z) erster und zweiter Art, die die DGL

$$\frac{d^2u}{dz^2} - zu = 0 (4.47)$$

erfüllen, und durch

$$u_1 = \operatorname{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{3}\right)^{1/2} \operatorname{K}_{1/3}\left(\frac{2z^{3/2}}{3}\right)$$
 (4.48)

$$u_2 = \text{Bi}(z) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{3}\right)^{1/2} \left[I_{-1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3}\right) + I_{1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3}\right) \right]$$
(4.49)

gegeben sind.

Für große Argumente ($|z|\gg 1$) gelten die asymptotischen Entwicklungen

Ai
$$(\mathbf{z}, |\mathbf{z}| \gg 1) \simeq \frac{1}{2\pi^{1/2}} z^{-1/4} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}}$$
 (4.50)

und

Bi
$$(z, |z| \gg 1) \simeq \frac{1}{\pi^{1/2}} z^{-1/4} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}}$$
. (4.51)

Für negative Argumente (z
ightarrow -z) gilt mit den Bessel-Funktionen $J_{\mu}(y)$

Ai (-z) =
$$\frac{z^{1/2}}{3} \left[J_{-1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3} \right) + J_{1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3} \right) \right]$$
 (4.52)

und

Bi (-z) =
$$\frac{z^{1/2}}{3} \left[J_{-1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3} \right) - J_{1/3} \left(\frac{2z^{3/2}}{3} \right) \right]$$
 (4.53)

mit den asymptotischen Entwicklungen

Ai
$$(-z, |z| \gg 1) \simeq \pi^{-1/2} |z|^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$
 (4.54)

und

Bi
$$(-z, |z| \gg 1) \simeq -\pi^{-1/2} |z|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$
. (4.55)

Als Lösung für Schrödinger-Gleichung (4.43) mit dem linearisierten Potential notieren wir

$$\psi_p(z) = \alpha_1 \operatorname{Ai} (z) + \alpha_2 \operatorname{Bi} (z) , \qquad (4.56)$$

wobei z(x) durch Gleichung (4.41) bestimmt ist.

Wie in Abb. 4.2 skizziert ist, gilt die Lösung (4.56) in der Umgebung der Umkehrpunkte x = u der Bewegung, dem Anpassungsbereich. Wir müssen nun die WKB-Lösungen (4.36) und (4.37) auf beiden Seiten des Umkehrpunkts x = u an die Lösung (4.56) im Anpassungsbereich angleichen und dabei die Werte der Konstanten A, B, C, D, α_1 und α_2 bestimmen. Der Umkehrpunkt entspricht in der Variablen z nach Gleichung (4.41) gerade dem Punkt z = 0 (siehe Abb. 4.3). Bei der Anpassung benutzen wir die asymptotische Entwicklung der Lösung (4.56) für $|z| \gg 1$.

Im Überlappungsbereich 1 (x < u, d.h. z < 0) gilt die WKB-Lösung (4.36)

$$\psi \simeq \frac{C}{\sqrt{K(x)}} \exp\left[-i \int_{u}^{x} K(s) ds\right] + \frac{D}{\sqrt{K(x)}} \exp\left[+i \int_{u}^{x} K(s) ds\right]$$
(4.57)



Abbildung 4.2: Anpassungsbereich und klassisch erlaubte und verbotene Bereiche im Ortsraum \boldsymbol{x}

und für die Lösung (4.56) erhalten wir mit den Entwicklungen (4.54)-(4.55)

$$\psi_p \simeq \alpha_1 \pi^{-1/2} |z|^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) - \alpha_2 \pi^{-1/2} |z|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) .$$
(4.58)

Im Überlappungsbereich 2 (x > u, d.h. z > 0) gilt die WKB-Lösung (4.37)

$$\psi \simeq \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_u^x \kappa(s) ds\right] + \frac{B}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[+\int_u^x \kappa(s) ds\right]$$

Damit $\psi(x = \infty) = 0$ ist, muss die Konstante B = 0 sein, so dass

$$\psi(x > u) \simeq \frac{A}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_{u}^{x} \kappa(s) ds\right] .$$
(4.59)

Für die Lösung (4.56) erhalten wir mit den Entwicklungen (4.50)–(4.51)

$$\psi_p \simeq \pi^{-1/2} z^{-1/4} \left(\frac{\alpha_1}{2} e^{-\frac{2}{3} z^{3/2}} + \alpha_2 e^{\frac{2}{3} z^{3/2}} \right) .$$
 (4.60)

Für die effektive Wellenzahl (4.28) erhalten wir im Überlappungsbereich 2 mit $V(x) - E \simeq$



Anpassungsbereich

Abbildung 4.3: Umkehrpunkt, Anpassungsbereich und Lösungsüberlappungsbereiche mit den WKB-Lösungen als Funktionen der Varibalen \boldsymbol{z}

g(x-u)

$$\kappa = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[V(x) - E\right]\right)^{1/2} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}(x-u)\right)^{1/2} ,$$
$$\int_u^x \kappa(s) ds = \frac{2}{3} \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/2} (x-u)^{3/2}$$

so dass

und damit für Lösung (4.59)

$$\psi(x > u) \simeq \frac{A}{\left[\frac{2mg}{\hbar^2}(x-u)\right]^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/2}(x-u)^{3/2}\right],$$

oder unter Ausnutzung von Gleichung (4.41),

$$z = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/3} (x-u) ,$$

als Funktion der Variablen z

$$\psi(z) = A \frac{\hbar^{1/3}}{(2mg)^{1/6} z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} .$$
(4.61)

Der Vergleich der Lösungen (4.61) und (4.60) ergibt dann

$$\begin{aligned}
\alpha_2 &= 0 \\
\frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2}} &= A \frac{\hbar^{1/3}}{(2mg)^{1/6}} \\
\alpha_1 &= \frac{\pi^{1/2} \hbar^{1/3} 2^{5/6}}{(mg)^{1/6}} A .
\end{aligned}$$
(4.62)

und

oder

Ergebnis (4.62) impliziert im Überlappungsbereich 1 für Lösung (4.58)

$$\psi_p \simeq \alpha_1 \pi^{-1/2} |z|^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \\ = \frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2} |z|^{1/4}} \left[\exp\left(i\frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{i\pi}{4}\right) + \exp\left(-i\frac{2}{3} |z|^{3/2} + \frac{i\pi}{4}\right) \right]$$
(4.63)

und hier gilt z < 0.

Für die effektive Wellenzahl (4.27) erhalten wir im Überlappungsbereich 1 mit $E-V(x)\simeq g(u-x)$

$$K(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x)\right]\right)^{1/2} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}(u-x)\right)^{1/2} ,$$

so dass
$$\int_u^x K(s) ds = -\frac{2}{3} \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/2} (u-x)^{3/2} = -\frac{2}{3} (-z)^{3/2} ,$$

mit z negativ, und

$$K^{1/2}(x) = \left[\frac{2mg}{\hbar^2}(u-x)\right]^{1/4}$$

= $\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}\cdot 1/4} \left[\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(u-x)\right]^{1/4}$
= $\left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^{1/6}(-z)^{1/4}.$ (4.64)

Für die WKB-Lösung (4.57) finden wir damit

$$\psi \simeq \frac{\hbar^{1/3}}{(2mg)^{1/6}|z|^{1/4}} \left[C \exp\left(i\frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) + D \exp\left(-i\frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \right] .$$
(4.65)

Der Vergleich der Lösungen (4.63) und (4.65) liefert die Anschlussformeln

$$\frac{\hbar^{1/3}}{(2mg)^{1/6}} C = \frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2}} e^{\frac{-i\pi}{4}} , \qquad \frac{\hbar^{1/3}}{(2mg)^{1/6}} D = \frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2}} e^{\frac{i\pi}{4}} C = \frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2}} \frac{(2mg)^{1/6}}{\hbar^{1/3}} e^{\frac{-i\pi}{4}} , \qquad D = \frac{\alpha_1}{2\pi^{1/2}} \frac{(2mg)^{1/6}}{\hbar^{1/3}} e^{\frac{i\pi}{4}} .$$

so dass

Gleichung (4.62) eingesetzt ergibt dann

$$C = \frac{1}{2\pi^{1/2}} \frac{(2mg)^{1/6}}{\hbar^{1/3}} e^{\frac{-i\pi}{4}} \frac{\pi^{1/2} \hbar^{1/3} 2^{5/6}}{(mg)^{1/6}} A = A e^{\frac{-i\pi}{4}}$$
(4.66)
$$D = A e^{\frac{\pm i\pi}{4}} .$$
(4.67)

(4.67)

(4.69)

und

Damit erhalten wir letztlich für die WKB-Lösungen (4.36) und (4.37)

$$\psi(x < u) \simeq \frac{A}{\sqrt{K(x)}} \left(\exp\left[-i\int_{u}^{x} K(s)ds - \frac{i\pi}{4}\right] + \exp\left[i\int_{u}^{x} K(s)ds + \frac{i\pi}{4}\right] \right)$$
$$= \frac{2A}{\sqrt{K(x)}} \cos\left[\int_{u}^{x} ds K(s) + \frac{\pi}{4}\right]$$
(4.68)
$$\psi(x > u) \simeq \frac{A}{\sqrt{|K(x)|}} \exp\left[-\int_{u}^{x} ds |K(s)|\right].$$
(4.69)

und

Aufgrund der Symmetrie $\cos(-t) = \cos t$ und der Beziehung $\cos t = \sin(t + \pi/2)$ gilt

$$\cos\left[\int_{u}^{x} ds \, K(s) + \frac{\pi}{4}\right] = \cos\left[-\int_{x}^{u} ds \, K(s) + \frac{\pi}{4}\right] = \\ \cos\left[\int_{x}^{u} ds \, K(s) - \frac{\pi}{4}\right] = \sin\left[\int_{x}^{u} ds \, K(s) + \frac{\pi}{4}\right],$$
so dass
$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{2A}{\sqrt{K(x)}} \sin\left[\int_{x}^{u} ds \, K(s) + \frac{\pi}{4}\right] & \text{für } x < u \\ \frac{A}{\sqrt{|K(x)|}} \exp\left[-\int_{u}^{x} ds \, |K(s)|\right] & \text{für } x \ge u \end{cases}.$$
(4.70)

Nach Vorraussetzung gilt die Lösung (4.70) für ansteigendes Potential $(dV/dx)_{x=u} > 0$ im Umkehrpunkt x = u (siehe Abb. 4.4a). Für abfallendes Potential $(dV/dx)_{x=v} > 0$ an einem



Abbildung 4.4: Ansteigende (a) und abfallende (b) Potentiale im Umkehrpunkt

Umkehrpunkt x = v (siehe Abb. 4.4b) ergibt sich (Übungsaufgabe) in analoger Weise

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \frac{G}{\sqrt{|K(x)|}} \exp\left[-\int_x^v ds \left|K(s)\right|\right] & \text{für } x < v\\ \frac{2G}{\sqrt{K(x)}} \sin\left[\int_v^x ds \left|K(s)\right| + \frac{\pi}{4}\right] & \text{für } x \ge v \end{cases}$$
(4.71)

Wir betrachten jetzt den Fall eines Potentialwalls (siehe Abb. 4.5). Im inneren Bereich



Abbildung 4.5: Potentialwall

v < x < u lässt sich die Wellenfunktion sowohl nach Gleichung (4.70) als auch nach Gleichung (4.71) darstellen, d.h.

$$\psi(x) \simeq \frac{2A}{\sqrt{K(x)}} \sin \Theta_u(x) , \quad \text{mit} \quad \Theta_u(x) = \int_x^u ds \, K(s) + \frac{\pi}{4}$$

der $\psi(x) \simeq -\frac{2G}{\sqrt{K(x)}} \sin \Theta_v(x) , \quad \text{mit} \quad \Theta_v(x) = -\int_v^x ds \, K(s) - \frac{\pi}{4} .$

oc

Die Argumente der jeweiligen Sinus-Funktionen müssen gleich sein (A und -G werden bei der Normalisierung der Wellenfunktion berücksichtigt), so dass

$$\Theta_u = \Theta_v + n\pi$$
, $n = 1, 2, 3, \dots$, (4.72)

oder nach Einsetzen

$$\int_{x}^{u} ds K(s) + \frac{\pi}{4} = -\int_{v}^{x} ds K(s) - \frac{\pi}{4} + n\pi .$$
(4.73)

Ordnen und Zusammenfassen ergibt

$$\int_{v}^{x} ds K(s) + \int_{x}^{u} ds K(s) = \int_{v}^{u} ds K(s) = n\pi - \frac{\pi}{2}$$

also
$$\int_{v}^{u} ds K(s) = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
(4.74)

Diese Gleichung für die effektive Wellenzahl (4.27) bestimmt die erlaubten Energien in einem Potentialwall mit ab- und aufsteigenden Potential.

4.2.3 Anwendung: Linearer harmonischer Oszillator (III)

Mit dem Oszillator-Potential (3.31) $V(x)=m\omega^2 x^2/2$ folgt für die effektive Wellenzahl (4.27)

$$K(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x)\right]\right)^{1/2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)} .$$
(4.75)

Für die Umkehrpunkte der Bewegung K(u) = 0 folgt

$$u_{1,2} = \pm q$$
, $q = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

gemäß Gleichung (4.74) berechnen wir das Integral

$$I = \int_{u_1}^{u_2} dx \, K(x) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{-q}^{q} dx \, \sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E}x^2} \; .$$

Mit der Substitution $y = \sqrt{m\omega^2/2E}x$ gilt

$$\frac{dx}{dy} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

und für $x = \pm q$ ist $y = \pm 1$, so dass

$$I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \int_{-1}^{1} dy \, (1-y^2)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega} 2 \int_{0}^{1} dy \, (1-y^2)^{1/2} \, .$$

Wie man durch Differenzieren leicht überprüft, ist

$$\int_0^z dy \, (1-y^2)^{1/2} = \frac{z}{2} (1-z^2)^{1/2} + \frac{1}{2} \arcsin z \,, \tag{4.76}$$

und wir erhalten

$$I = \frac{4E}{\hbar\omega} \frac{1}{2} \arcsin(1) = \frac{2E}{\hbar\omega} \frac{\pi}{2} = \frac{\pi E}{\hbar\omega}$$

Gleichung (4.74) ergibt dann

$$\frac{\pi E}{\hbar\omega} = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
$$E = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots \qquad (4.77)$$

oder

Der Vergleich mit dem früheren Ergebnis (3.46) und (3.47) zeigt, dass die WKB-Methode das exakte Ergebnis für die Energieeigenwerte liefert.

4.2.4 Rezept zur approximativen Lösung linearer homogener Differentialgleichungen 2. Ordnung

Gegeben sei eine lineare homogene DGL 2. Ordnung

$$p_0(x)\frac{d^2F(x)}{dx^2} + p_1(x)\frac{dF(x)}{dx} + p_2(x)F(x) = 0$$
(4.78)

mit beliebigen Funktionen $p_0(x), p_1(x), p_2(x)$.

1. Schritt: Umwandlung der DGL (4.78) in Normalform durch Ansatz

$$F(x) = \phi(x)f(x)$$
, $\phi(x) = \exp\left[-\int^x dx' \frac{p_1(x')}{2p_0(x')}\right]$

Man erhält

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + J(x)f(x) = 0 (4.79)$$

mit

$$J(x) = \frac{p_2(x)}{p_0(x)} - \left(\frac{p_1(x)}{2p_0(x)}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{p_1(x)}{p_0(x)}\right) .$$
(4.80)

2. Schritt: WKB-Lösung von Gleichung (4.80)

$$f_{1,2}(x) \propto \frac{1}{J^{1/4}(x)} \exp\left[\pm i \int^x dx' J^{1/2}\left(x'\right)\right]$$
 (4.81)

ist gültig für $|J^{1/2}(x)x| \gg 1$.

Aus der WKB-Lösung (4.81) lässt sich oft das asymptotische Verhalten der Lösungen ablesen und ebenso günstige Substitutionen zur Berechnung der exakten Lösung.

In Bereichen $|J^{1/2}(x)x| \ll 1$, in denen die WKB-Lösung nicht gilt, entwickelt man $J(x) = j_o + j_1 x$ bis zur ersten Ordnung und verwendet die Airy-Funktions-Lösungen (siehe Gleichungen (4.38–4.49)).

4.2.5 Rezept zur approximativen Lösung selbstadjungierter linearer Differentialgleichungen 2. Ordnung

Gegeben sei eine lineare homogene DGL 2. Ordnung in selbstadjungierter Form

$$\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{dF(x)}{dx}\right] + q(x)F(x) = 0$$
(4.82)

mit beliebigen Funktionen p(x), q(x). Wie wir in Kap. 4.1.2 gezeigt haben, kann jede lineare DGL der Form (4.78) auf diese Form gebracht werden.

1. Schritt: Wir multiplizieren Gleichung (4.82) mit p(x):

$$p(x)\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{dF(x)}{dx}\right] + p(x)q(x)F(x) = 0$$
(4.83)

und führen eine neue Variable t ein, die durch

$$p(x)\frac{d}{dx} = \frac{d}{dt} \tag{4.84}$$

bestimmt ist. Gleichung (4.84) ergibt

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{p(x)} \tag{4.85}$$

oder

$$t(x) = \int^{x} \frac{dx'}{p(x')} .$$
 (4.86)

Aus DGL (4.82) wird dann

$$\frac{d^2 F(t)}{dt^2} + J(t)F(t) = 0$$
(4.87)

eine DGL in Normalform mit

$$J(t) = p(x(t))q(x(t)) . (4.88)$$

2. Schritt: Die WKB-Näherung von Gleichung (4.88) ergibt

$$F_{1,2}(t) \propto \frac{1}{J^{1/4}(t)} \exp\left[\pm i \int^{t} dt' J^{1/2}\left(t'\right)\right]$$

= $\frac{1}{\left[p(x)q(x)\right]^{1/4}} \exp\left[\pm i \int^{x} dx' \frac{dt'}{dx'} p^{1/2}\left(x'\right) q^{1/2}\left(x'\right)\right],$ (4.89)

so dass mit

$$\frac{dt'}{dx'} = \frac{1}{p\left(x'\right)}$$

nach Gleichung (4.85)

$$F_{1,2}(x) \propto \frac{1}{\left[p(x)q(x)\right]^{1/4}} \exp\left[\pm i \int^x dx' \frac{q^{1/2}(x')}{p^{1/2}(x')}\right]$$
(4.90)

Diese Näherungslösungen sind gültig für

$$\left|\frac{d}{dt}J^{-1/2}(t)\right| \ll 1 \; ,$$

d.h. mit den Gleichungen (4.84) und (4.88)

$$\left| p(x) \frac{d}{dx} \left[p^{-1/2}(x) q^{-1/2}(x) \right] \right| \ll 1$$
 (4.91)

Wir merken abschließend an, dass die Inversion x = x(t) von Gleichung (4.86) nicht explizit nötig ist, um die Näherungslösung (4.90) zu erhalten.

4.3 Anwendung: α -Zerfall, Tunneleffekt

Eine weitere Anwendung der WKB-Methode betrifft den α -Zerfall der Atomkerne. Diese Anwendung wurde 1928 von Gamow und unabhängig von Condon und Gurney zur erfolgreichen Erklärung des Geiger-Nutall-Gesetzes durchgeführt und trug wesentlich zur damaligen Anerkennung der Quantenmechanik bei.

Man beobachtete die spontane Umwandlung von Atomkernen durch Emission eines α -Teilchens (= He-Kern), z.B. von Polonium zu Blei:

und

 $\begin{array}{rcl} ^{212}{\rm Po} & \rightarrow \alpha + \ ^{208}{\rm Pb} \ , & \tau_{1/2} & = & 3 \cdot 10^{-7} \ {\rm s} \ , & E_{\alpha} = \ 8.953 \ \ {\rm MeV} \\ ^{210}{\rm Po} & \rightarrow \alpha + \ ^{206}{\rm Pb} \ , & \tau_{1/2} & = & 1.2 \cdot 10^7 \ {\rm s} \ , & E_{\alpha} = \ 5.408 \ \ {\rm MeV} \ . \end{array}$

Das *Geiger-Nutall-Gesetz* besagt, dass die beobachteten Halbwertszeiten $\tau_{1/2}$ des α -Zerfalls mit den kinetischen Energien E_{α} gemäß

$$\log_{10} \tau_{1/2} = 1.61 \left[\frac{Z_1}{E_{\alpha}^{1/2}} - Z_1^{2/3} \right] - 28.9$$
(4.92)

korreliert sind, wobei Z_1 die Kernladungszahl des Tochterkerns ist.

4.3.1 Tunneleffekt

Wir betrachten zunächst die in Abb. 4.6 gezeigte Potentialstufe mit E < V. Wir approximieren dabei das wahre Potential V(x) im Bereich $0 \le x \le a$ durch die Konstante $V(x) \simeq V_0$: 1. Links der Barriere (x < 0) setzt sich die Wellenfunktion

$$\psi(x) = Ae^{\imath kx} + Be^{-\imath kx}$$
, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$

aus einer einlaufenden (mit Amplitude A) und einer reflektierten (mit Amplitude B) Welle zusammen.

2. Rechts der Barriere (x > a) haben wir die transmittierte Welle

$$\psi(x) = F e^{\imath k x} \; .$$

Wir wollen die sog. Tunnelwahrscheinlichkeit

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 \tag{4.93}$$

berechnen.

3. im klassisch verbotenen Tunnelbereich ($0 \le x \le a$) ergibt die WKB-Näherung analog zu Gleichung (4.37)

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{\kappa}} e^{\kappa x} + \frac{D}{\sqrt{\kappa}} e^{-\kappa x}$$
$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

mit



Abbildung 4.6: Durchtunneln einer Potentialstufe

Aus der Stetigkeit von ψ und ψ' erhalten wir als Anschlussbedingungen bei x = 0:

$$A + B = \frac{C}{\sqrt{\kappa}} + \frac{D}{\sqrt{\kappa}}$$

$$ikA - ikB = C\kappa^{1/2} - D\kappa^{1/2}$$

$$(4.94)$$

und oder

$$A - B = \frac{\kappa^{1/2}}{ik} (C - D) .$$
 (4.95)

Ebenso erhalten wir als Anschlussbedingungen bei x = a:

$$\frac{C}{\sqrt{\kappa}}e^{\kappa a} + \frac{D}{\sqrt{\kappa}}e^{-\kappa a} = Fe^{ika}$$
(4.96)

$$C\kappa^{1/2}e^{\kappa a} - D\kappa^{1/2}e^{-\kappa a} = ikFe^{ika}.$$
(4.97)

und

$$A = \frac{1}{2\kappa^{1/2}} \left[C\left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right) + D\left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right) \right] .$$
(4.98)

Die Addition von Gleichungen (4.96) und (4.97) ergibt

$$C = \frac{\kappa^{1/2}}{2} e^{-\kappa a} F e^{ika} \left[1 + i \frac{k}{\kappa} \right] , \qquad (4.99)$$

während die Subtraktion von Gleichungen (4.96) und (4.97) auf

$$D = \frac{\kappa^{1/2}}{2} e^{\kappa a} F e^{\imath k a} \left[1 - \imath \frac{k}{\kappa} \right]$$
(4.100)

führt. Setzen wir diese beiden Ergebnisse in Gleichung (4.98) ein, erhalten wir

$$A = \frac{F}{4}e^{ika}\left[\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)\left(1+i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-\kappa a}+\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right)\left(1-i\frac{k}{\kappa}\right)e^{\kappa a}\right]$$
$$= \frac{F}{4k\kappa}e^{ika}\left[\left(k-i\kappa\right)\left(\kappa+ik\right)e^{-\kappa a}+\left(k+i\kappa\right)\left(\kappa-ik\right)e^{\kappa a}\right]$$
$$= \frac{Fe^{ika}}{4k\kappa}\left[\left(k\kappa-i\kappa^{2}+ik^{2}-i^{2}k\kappa\right)e^{-\kappa a}+\left(k\kappa+i\kappa^{2}-ik^{2}-i^{2}k\kappa\right)e^{\kappa a}\right]$$
$$= \frac{Fe^{ika}}{4k\kappa}\left[\left(2k\kappa+i\left(k^{2}-\kappa^{2}\right)\right)e^{-\kappa a}+\left(2k\kappa+i\left(\kappa^{2}-k^{2}\right)\right)e^{\kappa a}\right]$$
$$= \frac{Fe^{ika}}{4k\kappa}\left[2k\kappa\left(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a}\right)+i\left(\kappa^{2}-k^{2}\right)\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)\right]$$
$$= \frac{Fe^{ika}}{2k\kappa}\left[2k\kappa\cosh\left(\kappa a\right)+i\left(\kappa^{2}-k^{2}\right)\sinh\left(\kappa a\right)\right]$$
$$= Fe^{ika}\left[\cosh\left(\kappa a\right)+\frac{i}{2}\left(\frac{\kappa}{k}-\frac{k}{\kappa}\right)\sinh\left(\kappa a\right)\right].$$
(4.101)

Für die Tunnelwahrscheinlichkeit (4.93) folgt dann

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^{2} = \left(\frac{F}{A}\right) \left(\frac{F}{A}\right)^{*}$$

$$= \left[\cosh\left(\kappa a\right) + \frac{i}{2}\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)\sinh\left(\kappa a\right)\right]^{-1} \times \left[\cosh\left(\kappa a\right) - \frac{i}{2}\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)\sinh\left(\kappa a\right)\right]^{-1}$$

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

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

$$= \left[1 + \left[1 + \frac{\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right)^{2}}{4}\right]\sinh^{2}\left(\kappa a\right)\right]^{-1}.$$
(4.102)

Im Grenzfall hoher und tiefer Potentialbarrieren ist

so dass

$$\kappa a \gg 1,$$

$$so \text{ dass} \qquad \sinh(\kappa a) \simeq \frac{1}{2}e^{\kappa a}$$

$$T \simeq 4e^{-2\kappa a} \left[1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4\kappa^2 k^2}\right]^{-1}$$

$$= \frac{16\kappa^2 k^2}{4\kappa^2 k^2 + k^4 - 2\kappa^2 k^2 + \kappa^4}e^{-2\kappa a}$$

$$= \frac{(4\kappa k)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2}e^{-2\kappa a}.$$
(4.103)

K

Die Tunnelwahrscheinlichkeit (4.103) ist im wesentlichen durch den sog. *Gamow-Faktor* bestimmt

$$T \simeq e^{-2\kappa a} = e^{-2\int_0^a |K(x)| dx}$$
 (4.104)

wobei

$$(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar \tag{4.105}$$

die effektive Wellenzahl (4.27) ist.

4.3.2 Anwendung auf den α -Zerfall

Ein α -Teilchen ist identisch zu einem He-Kern und besteht aus zwei Protonen und zwei Neutronen. Wegen seiner positiven Ladung (+2e) wird es vom verbleibenden Tochterkern mit der Ladung $(+Z_1e)$ abgestoßen, sobald es den Kernbindungskräften entkommt. Gamow beschrieb das Gesamtpotential als die Überlagerung (siehe Abb. 4.7) von

(a) einer negativen Potentialschwelle, die die anziehende Kernbindungskraft beschreibt, bis zum Radius des Kerns r_1 ,

und

(b) dem abstoßenden Coulombpotential



Abbildung 4.7: Approximation des Gesamt potentials beim α -Zerfall

$$V(r) = \frac{Q_1 Q_2}{r} = \frac{2Z_1 e^2}{r} .$$
(4.106)

Das α -Teilchen mit der Energie E muss das Coulomb-Potential durchtunneln. Der äußere Umkehrpunkt r_2 der Tunnelbewegung ist dann durch

$$E = V(r_2) = \frac{2Z_1 e^2}{r_2} \tag{4.107}$$

bestimmt.

Mit Gleichungen (4.104)-(4.105) erhalten wir dann für die Tunnelwahrscheinlichkeit mit $a = r_2$

$$T = \exp\left[-2\int_{r_1}^{r_2} dr \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left| \sqrt{E - \frac{2Z_1 e^2}{r}} \right| \right] = e^{-\gamma}$$
(4.108)
$$\gamma = 2\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} .$$

mit

Mit der Substitution $r = r_2 x^2$ erhalten wir

$$\gamma = 4r_2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{(r_1/r_2)^{1/2}}^1 dx \ \sqrt{1-x^2} \ .$$

Wir benutzen das Integral (4.76)

$$\int_0^z dy \, \left(1 - y^2\right)^{1/2} = \frac{z}{2} \left(1 - z^2\right)^{1/2} + \frac{1}{2} \arcsin z$$

und erhalten

$$\gamma = 2r_2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\arcsin(1) - \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{r_1}{r_2}\right)^{1/2} - \arcsin\left(\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) \right] \\ = \frac{2r_2}{\hbar} \sqrt{2mE} \left[\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_1}{r_2} \left[1 - \frac{r_1}{r_2}\right]} - \arcsin\left(\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) \right].$$
(4.109)

Für kleine Argumente ist

$$\operatorname{arcsin}\left(\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) \simeq \sqrt{\frac{r_1}{r_2}}$$
$$\gamma \simeq \frac{2r_2}{\hbar}\sqrt{2mE} \left[\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right]$$
$$= \frac{2}{\hbar}\sqrt{2mr_2E} \left[\frac{\pi}{2}r_2^{1/2} - 2r_1^{1/2}\right].$$

Mit $r_2 = 2Z_1 e^2/E$ erhalten wir

$$\gamma = K_1 \frac{Z_1}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z_1 r_1}$$

$$K_1 = \frac{2\pi e^2 \sqrt{2m}}{\hbar} = 2\pi \sqrt{2mc^2} \frac{e^2}{\hbar c}$$
(4.110)

mit

so dass

$$= \frac{2\pi \sqrt{2mc^2}}{\hbar} = 2\pi \sqrt{2mc^2} \frac{\sigma}{\hbar c}$$

= $2\pi \sqrt{2mc^2} \alpha_f = 3.922 \text{ MeV}^{1/2}$ (4.111)

$$K_2 = \frac{8\sqrt{me^2}}{\hbar} = 10^{-7} \text{ m}^{1/2} . \qquad (4.112)$$

$$\frac{5 \,\mathrm{mc}}{\hbar} = 10^{-7} \,\mathrm{m}^{1/2} \,. \tag{4.112}$$

Die Zerfallswahrscheinlichkeit pro Sekunde ergibt sich als Produkt aus der Tunnelwahrscheinlichkeit T(E) mal der Häufigkeit der Kernwandstöße der α -Teilchen

$$\dot{Z} = T(E) \times \frac{v_{\alpha}}{2r_1}$$

Die Änderung der radioaktiven Kerne durch spontanen α -Zerfall ist dann im Zeitintervall dt

$$dN = -N \times \dot{Z} \times dt = -\frac{N}{\tau} dt ,$$

$$N(t) = N(0)e^{-t/\tau}$$
(4.113)

so dass

mit

$$\tau = \frac{1}{\dot{Z}} = \frac{2r_1}{v_{\alpha}T(E)} = \frac{2r_1}{v_{\alpha}}e^{\gamma} , \qquad (4.114)$$

(4.113)

wobei wir Gleichung (4.108) benutzt haben. Die Halbwertszeit $au_{1/2}$ ergibt sich aus der Bedingung

$$N\left(\tau_{1/2}\right) = \frac{N(0)}{2}$$

Mit Gleichung (4.113) folgt

$$\begin{array}{rcl} \frac{1}{2} & = & e^{-\tau_{1/2}/\tau} \\ \ln 2 & = & \frac{\tau_{1/2}}{\tau} \end{array},$$

oder

so dass

$$\tau_{1/2} = (\ln 2) \tau = \frac{2(\ln 2)r_1}{v_{\alpha}}e^{\gamma}. \qquad (4.115)$$

Logarithmieren wir diese Gleichung, so finden wir mit Gleichung (4.110)

$$\log_{10} \tau_{1/2} = \log_{10} \left(\frac{2 (\ln 2) r_1}{v_{\alpha}} \right) + (\gamma \log_{10} e)$$

=
$$\log_{10} \left(\frac{2 (\ln 2) r_1}{v_{\alpha}} \right) - K_2 (\log_{10} e) \sqrt{Z_1 r_1}$$

+
$$K_1 (\log_{10} e) \frac{Z_1}{\sqrt{E}} , \qquad (4.116)$$

in sehr guter Übereinstimmung mit dem beobachteten Geiger-Nutall-Gesetz (4.92), ohne den Wert von v_{α} genau zu kennen.

Wir berechnen z.B. aus Gleichung (4.115) für das Verhältnis für $r_1 \rightarrow 0$

$$\ln \frac{\tau_{1/2} (^{212} \text{Po})}{\tau_{1/2} (^{210} \text{Po})} \simeq \frac{\gamma (^{212} \text{Po})}{\gamma (^{210} \text{Po})}$$
$$= K_1 \left(\frac{82}{\sqrt{8.953 \text{ MeV}}} - \frac{82}{\sqrt{5.408 \text{ MeV}}} \right) = -30.76 ,$$
$$\frac{\tau_{1/2} (^{212} \text{Po})}{\tau_{1/2} (^{210} \text{Po})} \simeq 4.4 \cdot 10^{-14} ,$$

also

in guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert $2.5 \cdot 10^{-14}$.

Nebenbemerkung: Verallgemeinert man von α -Teilchen ($Z_1 = 2$) auf andere Kerne mit Ladung Z_2 , so bestimmt der Gamow-Faktor

$$\exp\left[-\frac{K_1 Z_1}{\sqrt{E}} \cdot \frac{Z_2}{2}\right] = \exp\left[-\sqrt{\frac{2m}{E}} \frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar}\right]$$
(4.117)

auch die Wahrscheinlichkeit für den umgekehrten Vorgang, d.h. die Fusion zweier Kerne mit den Ladungen Z_1 und Z_2 . Daraus folgt, dass die Kernfusion bevorzugt für Materialien mit niedriger Ladungszahl Z erfolgt, also für Wasserstoff mit seinen Isotopen Deuterium und Tritium mit den Reaktionen

$_{1}H^{2} + {}_{1}H^{2} \rightarrow {}_{2}He^{3} + n ,$	freigesetzte Energie	3.27	MeV
$_{1}H^{2} + {}_{1}H^{2} \rightarrow {}_{1}He^{3} + p ,$	freigesetzte Energie	4	MeV
$_{1}H^{2} + {}_{1}H^{3} \rightarrow {}_{2}He^{4} + n ,$	freigesetzte Energie	17.6	MeV
$_{1}H^{3} + {}_{1}H^{3} \rightarrow {}_{2}He^{4} + 2n ,$	freigesetzte Energie	11	MeV .

Für höhere Ladungszahlen steigt die Coulomb-Barriere an und damit die erforderliche Fusionsreaktortemperatur $E \simeq k_B T$ zu deren Überwindung.

4.4 Rayleigh-Ritz Variationsmethode

4.4.1 Theorie

Wir wollen den Grundenergiezustand E_0 eines quantenmechanischen Systems mit dem Hamilton-Operator \hat{H} berechnen, können aber nicht die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lösen, weil das Potential $V(\vec{r})$ zu kompliziert ist. Was machen wir?

Wir dürfen irgendeine normierbare und mit den Randbedingungen konsistente Testfunktion ψ_t wählen und erhalten damit eine *obere* Grenze für E_0 durch

$$E_0 \le \left\langle \hat{H} \right\rangle = \frac{\int d^3 x \psi_t^* \hat{H} \psi_t}{\int d^3 x \psi_t^* \psi_t} \,. \tag{4.118}$$

Beweis: Nach Kap. 2.7 bilden die Eigenfunktionen ψ_n hermitescher Operatoren (\hat{H}) ein vollständiges Orthonormalsystem, obwohl wir sie hier nicht explizit kennen, d.h. wir können

die Testfunktion darstellen als

$$\psi_t = \sum_n c_n \psi_n ,$$
$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n .$$

Es folgt
$$\psi_t^* =$$

und

und

wobei

damit

$$\int d^3x \psi_t^* \psi_t = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \int d^3x \psi_m^* \psi_n$$

$$= \sum_n \sum_m c_m^* c_n \delta_{m,n} = \sum_n |c_n|^2$$

$$\int d^3x \psi_t^* \hat{H} \psi_t = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \int d^3x \psi_m^* \hat{H} \psi_n$$

$$= \sum_n \sum_m c_m^* c_n \int d^3x \psi_m^* E_n \psi_n$$

$$= \sum_n \sum_m c_m^* c_n E_n \delta_{m,n} = \sum_n E_n |c_n|^2$$

 $\sum_m c_m^* \psi_m^*$

Nun ist jeder Energieeigenwert $E_n \ge E_0$ größer als der Grundenergiezustand E_0 , so dass aus der letzten Gleichung folgt

$$\int d^3x \psi_t^* \hat{H} \psi_t = \sum_n E_n |c_n|^2 \ge E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \int d^3x \, |\psi_t|^2$$

und es ergibt sich

$$E_0 \le \frac{\int d^3 x \psi_t^* \hat{H} \psi_t}{\int d^3 x \left|\psi_t\right|^2}$$

die Behauptung. Q.E.D.

4.4.2 Beispiel: Grundzustand des linearen harmonischen Oszillators (IV)

Als Beispiel betrachten wir den Hamilton-Operator des linearen harmonischen Oszillators

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 . \qquad (4.119)$$

Wir kennen (siehe Kap. 3.3) das Ergebnis ($E_0=\hbar\omega/2$), aber dies ist ein guter Test des Näherungsverfahrens.

Als Testwellenfunktion wählen wir

$$\psi_t(x) = Ae^{-bx^2}, \qquad b > 0$$
 (4.120)

mit dem Parameter b > 0. Diese Testfunktion erfüllt die Randbedingungen $\psi_t(\pm \infty) = 0$ und sie ist normierbar, denn

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ |\psi_t|^2 = 1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-2bx^2} = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} , \qquad (4.121)$$
.

so dass wir $A=(2b/\pi)^{1/4}$ wählen. Wir berechnen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi_t^* \hat{H} \psi_t = j_1 + j_2$$

mit

und

$$j_{1} = -\frac{\hbar^{2}}{2m} |A|^{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-bx^{2}} \frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(e^{-bx^{2}}\right)$$
$$j_{2} = \frac{m}{2} \omega^{2} |A|^{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^{2} e^{-2bx^{2}}$$

$$= \frac{m}{2}\omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^2 e^{-2bx^2}$$
$$= \frac{m}{2}\omega^2 |A|^2 \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial b} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{-2bx^2} \right]$$
$$= -\frac{m}{4}\omega^2 |A|^2 \frac{\partial}{\partial b} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2b}} \right] = \frac{m\pi^{1/2}}{4\sqrt{2}}\omega^2 |A|^2 \left[\frac{1}{2}b^{-3/2} \right]$$

Mit $|A|^2 = (2b/\pi)^{1/2}$ ergibt sich

$$j_2 = \frac{m\omega^2}{8b} \; .$$

Für j_1 erhalten wir durch partielle Integration

$$\begin{split} j_1 &= \frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \left[\frac{d}{dx} e^{-bx^2} \right] \left[\frac{d}{dx} e^{-bx^2} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \left[-2bx e^{-bx^2} \right]^2 \\ &= \frac{2b^2 \hbar^2}{m} |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \, x^2 e^{-2bx^2} \\ &= \frac{2b^2 \hbar^2}{m} |A|^2 \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial b} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-2bx^2} \right] \\ &= -\frac{b^2 \hbar^2}{m} |A|^2 \frac{\partial}{\partial b} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2b}} \right] \\ &= \frac{b^2 \hbar^2}{2m} |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} b^{-3/2} = \frac{\pi^{1/2} b^{1/2} \hbar^2}{2^{3/2} m} |A|^2 \; . \end{split}$$

Mit $|A|^2 = (2b/\pi)^{1/2}$ ergibt sich

$$j_1 = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

und wir erhalten den Erwartungswert

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = j_1 + j_2 = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} = \left\langle \hat{H} \right\rangle (b)$$
 (4.122)

als Funktion von b. Wir suchen das Minimum von $<\hat{H}>(b)$. Die erste Ableitung ist

$$\frac{d\left\langle \hat{H}\right\rangle }{db}=\frac{\hbar^{2}}{2m}-\frac{m\omega^{2}}{8b^{2}}$$

4 Näherungsverfahren Schrödinger-Gleichung

und die zweite Ableitung

$$\frac{d^2\left\langle \hat{H}\right\rangle}{db^2} = \frac{m\omega^2}{4b^3} > 0$$

ist positiv für b > 0. Das Minimum tritt auf für

$$\begin{array}{rcl} \frac{\hbar^2}{2m} & = & \frac{m\omega^2}{8b_0^2} \\ b_0 & = & \frac{m\omega}{2\hbar} \end{array}$$

also

und ist gegeben durch

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\min} = \left\langle \hat{H} \right\rangle (b_0) = \frac{\hbar^2 b_0}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b_0} = \frac{\hbar^2 m\omega}{4m\hbar} + \frac{2\hbar m\omega^2}{8m\omega} = \frac{1}{2}\hbar\omega .$$
(4.123)

Damit haben wir sogar den exakten Wert von E_0 gefunden, weil die Testfunktion (4.120) "gut" geraten war. Mit b_0 ist diese

$$\psi_t = A \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right]$$

exakt gleich der Wellenfunktion (3.45) des Grundzustands des linearen harmonischen Oszillators.

4.4.3 Bezug zur Variationsrechnung

Nach Kap. 2.7 ergibt sich die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\psi = E\psi$ als Euler-Lagrange-Gleichung aus der Variation der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} \psi^* \right) \left(\vec{\nabla} \psi \right) + V \psi^* \psi$$

mit der Nebenbedingung $\int d^3x |\psi|^2 = 1$, d.h.

$$\delta I = \delta \int d^3 x \mathcal{L} = 0$$

unter dieser Nebenbedingung.

Es ist aber gerade mit der Nebenbedingung $\int d^3x |\psi|^2 = 1$

$$I = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \int d^3x \psi^* \hat{H} \psi \;,$$

weil mit $\hat{H} = (-\hbar^2/2m) \Delta + V$ nach partieller Integration

$$\int d^3x \psi^* \hat{H}\psi = \int d^3x \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi + V \psi^* \psi \right]$$
$$= \int d^3x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} \psi^* \right) \left(\vec{\nabla} \psi \right) + V \psi^* \psi \right] = \int d^3x \mathcal{L} .$$

Q.E.D.

Bisher haben wir quantenmechanische Systeme mit einer Ortswellenfunktion $\psi(\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N, t)$ beschrieben, die erstens *quadratintegrabel* sein muss, d.h.

$$\int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi^*\left(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t\right) \psi\left(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t\right) < \infty$$

und für die zweitens das Superpositionsprinzip gilt, d.h. mit ψ_1 und ψ_2 ist auch $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ Wellenfunktion und insbesondere quadratintegrabel. Der Raum der Wellenfunktionen ist linear.

Weiterhin existiert eine äquivalente Darstellung im Impulsraum mit der Impulswellenfunktion

$$\Psi(\vec{p}_{1},\ldots,\vec{p}_{N},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \int d^{3}x_{1}\ldots d^{3}x_{N} \ e^{i\vec{p}_{1}\cdot\vec{x}_{1}/\hbar}\ldots e^{i\vec{p}_{N}\cdot\vec{x}_{N}/\hbar}\psi(\vec{x}_{1},\ldots,\vec{x}_{N},t)$$

und in Umkehrung

$$\psi(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_N,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \int d^3p_1\ldots d^3p_N \ e^{-i\vec{p}_1\cdot\vec{x}_1/\hbar}\cdots e^{-i\vec{p}_N\cdot\vec{x}_N/\hbar}\Psi(\vec{p}_1,\ldots,\vec{p}_N,t) \ .$$

Aufgrund des Parseval-Theorems ist auch die Impulswellenfunktion quadratintegrabel,

$$\int d^3 p_1 \dots d^3 p_N \Psi^* \left(\vec{p}_1 \,, \dots \,, \vec{p}_N \,, t \right) \Psi \left(\vec{p}_1 \,, \dots \,, \vec{p}_N, t \right) < \infty$$

Da es noch weitere Darstellungen des quantenmechanischen Zustands gibt, ist die Abstraktion naheliegend, den Zustand ohne bestimmte Darstellung zu beschreiben im Rahmen der Hilbert-Raum Theorie.

5.1 Zustände und Observable im Hilbert-Raum

5.1.1 Ket-Vektor

Wegen des Superpositionsprinzips liegt es nahe, den Zuständen eines physikalischen Systems die Elemente eines abstrakten Vektorraums ("Zustandsraum") zuzuordnen:

1. Postulat: Den Zuständen eines quantenmechanischen Systems werden die Elemente eines abstrakten, linearen Vektorraums, des Zustandsraums, zugeordnet.

Zustand
$$a \rightarrow |a > .$$

Der Uberlagerung zweier Zustände entspricht dann die Linearkombination der Zustandsvektoren

$$|c\rangle = \alpha |a\rangle + \beta |b\rangle . \tag{5.1}$$

Die Uberlagerung eines Zustands mit sich selbst ergibt wieder denselben Zustand. Vektoren gleicher Richtung stellen also den gleichen Zustand dar. Da die Überlagerung auch Phasenanteile enthalten kann, sind die Koeffizienten α und β in Gleichung (5.1) im Allgemeinen komplexe Zahlen.

In Gleichung (5.1) folgen wir der Schreibweise von Dirac und nennen den Zustandsvektor Ket-Vektor. In der Ortsdarstellung entspricht der Ket-Vektor $|a\rangle$ gerade der Ortwellenfunktion $\psi_a(\vec{x}, t)$, in der Impulsdarstellung gerade der Impulswellenfunktion $\Psi_a(\vec{p}, t)$.

Wegen der linearen Superponierbarkeit lassen sich im Zustandsraum auch die Begriffe der *linearen Unabhängigkeit* und der *Basis* (Gesamtheit linearer unabhängiger Zustandsvektoren) verwenden. Insbesondere lässt sich jeder Zustand *a* als Überlagerung einer Reihe von Basisvektoren darstellen:

$$|a\rangle = a_1|b_1\rangle + a_2|b_2\rangle + \dots (5.2)$$

In einer bestimmten Basis ($|b_i >$) kann man also einen Ket-Vektor als Spaltenvektor

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$
(5.3)

schreiben. Die Anzahl der Basisvektoren wird im Allgemeinen nicht endlich sein (sog. Hilbert-Raum). Die Koeffizienten (oder auch Komponenten) a_i sind komplexe Zahlen.

5.1.2 Dualer Vektorraum, Bra-Vektor

Zur Definition einer Metrik ("Längen" und "Winkel") muss man ein Skalarprodukt einführen, also eine invariante, von der Auswahl der Basis unabhängige Bilinearform, die jedem Paar von Zustandsvektoren |a > und |c > eine komplexe Zahl < a|c > zuordnet.

Dazu benötigt man einen weiteren (dualen) Vektorraum. Jedem Zustand a entspricht im dualen Vektorraum wieder ein Zustandsvektor (*Bra-Vektor*) < a| und für die Überlagerung von Zuständen gilt

$$\langle c| = \alpha^x \langle a| + \beta^x \langle b| .$$

$$(5.4)$$

Sowohl Ket-Vektor $|a\rangle$ als auch Bra-Vektor $\langle a|$ sind Bilder desselben Zustands in verschiedenen Vektorräumen. Zum Beispiel: im Ortsraum entspricht $|a\rangle = \hat{\psi}_a(\vec{x},t)$ und $\langle a|=\hat{\psi}_a^*(\vec{x},t)$ der konjugiert komplexen Ortswellenfunktion, im Impulsraum $\langle a|=\Psi_a^*(\vec{p},t)$ der konjugiert komplexen Impulswellenfunktion.

Für die Zerlegung in eine Basis erhält man

$$\langle a| = a_1^* \langle b_1| + a_2^* \langle b_2| + \dots,$$
 (5.5)

wobei die Komponenten im Bra-Raum a_i^* zu denen im Ket-Raum (5.2) konjugiert komplex sind. In Analogie zur Darstellung im Ket-Raum ordnet man einem Bra-Vektor den Zeilenvektor

$$\langle a| = (a_1^*, a_2^*, \cdots)$$
 (5.6)

zu. Einen solchen linearen Vektorraum mit Metrik, der von höchstens abzählbar unendlich vielen Basisvektoren aufgespannt wird, nennt man einen *Hilbert-Raum*.

Das Skalarprodukt zweier Vektoren $|a \rangle = a_1|b_1 \rangle + a_2|b_2 \rangle + \ldots$ und $|c \rangle = c_1|b_1 \rangle + c_2|b_2 \rangle + \ldots$ ist dann definiert durch

$$< a|c> \equiv a_1^*c_1 + a_2^*c_2 + \dots$$
 (5.7)

mit der Eigenschaft

$$\langle a|c\rangle = \langle c|a\rangle^* \tag{5.8}$$

Das Skalarprodukt ist also nicht kommutativ. Während man bei reellen Vektorräumen meist die Symmetrie und damit Kommutativität voraussetzt, wird hier gemäß Gleichung (5.8) seine Hermitezität gefordert.

Weiterhin muss das Skalarprodukt positiv-definit sein:

$$\langle a|a\rangle \geq 0 , \tag{5.9}$$

wobei $\langle a | a \rangle = 0$ nur für den Nullvektor $|0 \rangle$ gilt, dem kein möglicher Zustand entspricht. Das Skalarprodukt ist bezüglich beider Faktoren distributiv:

$$< a|c_1 + c_2 > = < a|c_1 > + < a|c_2 > ,$$

 $< a_1 + a_2|c > = < a_1|c > + < a_2|c > ,$

aber bezüglich des zweiten Faktors linear und des ersten Faktors antilinear, d.h.

$$< a | \gamma c > = \gamma < a | c > ,$$

 $< lpha a | c > = lpha^* < a | c > .$

Wegen der Bilinearität genügt zur Berechnung des Skalarprodukts beliebiger Zustandsvektoren die Kenntnis der Skalarprodukte der Basisvektoren $\langle b_i | b_k \rangle$ in einer gegebenen Darstellung. Sie bilden dort eine hermitesche Matrix (metrischer Tensor).

Mit dem Skalarprodukt lässt sich der Begriff der *Orthogonalität* zweier Zustände einführen: zwei Zustände a und b heißen orthogonal, $a \perp b$, wenn für ihre Zustandsvektoren gilt

$$< a|b>= 0$$
. (5.10)

Weiterhin ist die Norm (Länge) eines Zustandsvektors definiert durch

$$||a|| = \sqrt{\langle a|a\rangle} = \sqrt{a_1^*a_1 + a_2^*a_2 + \dots} .$$
(5.11)

Die Norm ist stets positiv-reell, solange es sich nicht um den Nullvektor handelt, der keinem Zustand entspricht. Im Folgenden werden alle Zustandsvektoren als normiert angenommen:

$$< a | a > = 1$$
.

Aber Hinweis: Die Normierung auf 1 ist nicht in allen Fällen möglich, z.B. bei Zuständen mit positiven Energien wie beim freien Elektron.

Eine Basis von Zustandsvektoren kann durch das Schmidt-Verfahren (siehe Kap. 5.4.2) orthonormiert werden:

$$\langle b_i | b_k \rangle = \delta_{ik} . \tag{5.12}$$

In einer orthonormierten Basis ist der metrische Tensor dann eine Einheitsmatrix. Für die Komponenten eines Ket-Zustandsvektors gilt dann

$$|a\rangle = \sum_{i} a_{i} |b_{i}\rangle = \begin{pmatrix} a_{1} \\ a_{2} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad a_{i} = \langle b_{i} |a\rangle \quad .$$

$$(5.13)$$

Für den adjungierten Bra-Vektor gilt dann

$$\langle a| = \sum_{j} a_{j}^{*} \langle b_{j}| = (a_{1}^{*}, a_{2}^{*}, \ldots)$$
 (5.14)

Zwei Matrizen, die auseinander durch Transposition und Bilden des Konjugiert-Komplexen hervorgehen, nennt man ebenfalls zueinander adjungiert. In diesem Sinne, ist bei endlicher Dimension n, der Zeilenvektor (5.14), der < a| darstellt, das Adjungierte des Spaltenveltors (5.13), der |a > darstellt. Das Skalarprodukt (5.7) zweier Zustandsvektoren lässt sich dann als Produkt aus einem Bra- und einem Ket-Vektor deuten und wird durch das entsprechende Matrizenprodukt dargestellt

$$\langle a|c \rangle = (a_1^*, a_2^*, \ldots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = a_1^* c_1 + a_2^* c_2 + \ldots$$

Seine Schreibweise als eckige Klammer (englisch "Bracket") erklärt Dirac's Namensgebung. Im Folgenden werden Basissysteme, falls nicht anders gesagt, als orthonormiert angenommen.

5.1.3 Observablen

Observablen werden definiert durch Messprozesse. Im Gegensatz zur klassischen Physik kann in der Quantenphysik der Einfluss der Messapparatur auf den untersuchten Zustand des Systems nicht mehr als beliebig klein angenommen werden, da auch diese aus Elementarteilchen bestehen. Der Zustand wird also durch die Messung in der Regel verändert werden. Das hat zur Folge, dass die Reihenfolge verschiedener Messungen von Bedeutung ist. Die Veränderung eines Zustands, also der Übergang in einen anderen, kann als eine Abbildung betrachtet werden, die durch einen Operator bewirkt wird. Einer Observablen wird daher ein linearer Operator zugeordnet, der im Zustandsraum wirkt

Observable
$$A \rightarrow \hat{A}$$
. (5.15)

Die Abbildung eines Zustands a auf einen anderen c wird beschrieben durch

$$a \rightarrow c \stackrel{\circ}{=} |c\rangle = A|a\rangle$$
 (5.16)

Wegen des Superpositionsprinzips muss \hat{A} ein linearer Operator sein:

$$\hat{A}(\beta_1|b_1 > +\beta_2|b_2 >) = \beta_1 \hat{A}|b_1 > +\beta_2 \hat{A}|b_2 >, \qquad (5.17)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})|a> = \hat{A}|a> + \hat{B}|a> .$$
 (5.18)

Alle physikalisch sinnvollen Größen werden also durch lineare Operatoren dargestellt. Von besonderer Bedeutung sind diejenigen Zustände a, die sich bei einem Messprozess nicht ändern, deren Zustandsvektoren |a > also Eigenvektoren des Operators \hat{A} mit dem Eigenwert a sind:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle . \tag{5.19}$$

In diesem Fall hat die physikalische Größe A im Zustand a den wohldefinierten Wert a, der mit ihrem *Messwert* identifiziert wird. Da Messwerte notwendig reelle Zahlen sind, haben nur Operatoren mit reellen Eigenwerten eine direkte physikalische Bedeutung (Observable). Ist ein Zustandsvektor nicht Eigenvektor des Operators \hat{A} , so führt der Messprozess von A zu keinem eindeutigen Ergebnis; die physikalische Größe A ist in diesem Zustand nicht vorhanden. Als Beispiel: befindet sich ein freies Elektron in einem Zustand, in dem es einen wohldefinierten Linearimpuls hat (ebene Welle), so führt der Versuch, seinen Drehimpuls zu messen, zu keinem eindeutigen Ergebnis.

Der Abbildung durch A im Ket-Raum entspricht im Bra-Raum eine solche durch den *adjungierten* Operator \hat{A}^+ :

$$|c\rangle = \hat{A}|a\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad \langle c| = \langle a|\hat{A}^+ . \tag{5.20}$$

Die beiden Transformationen \hat{A} und \hat{A}^+ sind im Allgemeinen nicht identisch. Man kann natürlich die Transformation \hat{A} auch im Bra-Raum ausführen, erhält dabei aber i.A. einen von < c| verschiedenen Bildvektor $< d| = < a|\hat{A}$. Falls dagegen für alle Zustandsvektoren < a| gilt

$$\langle a|\hat{A} = \langle a|\hat{A}^+ \tag{5.21}$$

nennt man den Operator \hat{A} selbst-adjungiert oder hermitesch. Für einen Eigenvektor |a > eines hermiteschen Operators \hat{A} gilt dann

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \iff \langle a|\hat{A}^+ = a^* \langle a|.$$
(5.22)

Wir erhalten dann für die Skalarprodukte

$$< a |A| a > = a < a |a > = a \ < a |\hat{A}^+| a > = a^* < a |a > = a^*$$
 .

und

Die linke Seite der letzten Gleichung ist aber nach Gleichung (5.21) gerade gleich

$$< a|\hat{A}^+|a> = < a|\hat{A}|a> = a$$
,
 $a = a^*$.

so dass

Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind also reell. Da die Ergebnisse von Messprozessen, die Messwerte, reell sein müssen, lautet das 2. Postulat: Den Observablen eines quantenmechanischen Systems werden lineare hermitesche Operatoren zugeordnet, die den Zustandsraum auf sich selbst abbilden.

Wegen der Hermitezität (5.8) des Skalarprodukts

$$\langle a|c \rangle = \langle c|a \rangle$$

gilt für beliebige Operatoren

$$< a|\hat{A}|d> = < d|\hat{A}^+|a>^*$$
 . (5.23)

Für hermitesche Operatoren wird daraus

$$< a|\hat{A}|d> = < d|\hat{A}|a>^{*}$$
 (5.24)

Es gelten folgende Sätze:

Satz 1: Aus der Definition adjungierter Operatoren folgt

$$(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}.$$
 (5.25)

Beweis: Sei $|\tilde{b}\rangle = \hat{B}|b\rangle$. Damit erhalten wir mit (5.8) und (5.20)

$$< a|\hat{A}\hat{B}|b> = < a|\hat{A}|\tilde{b}> = <\tilde{b}|\hat{A}^{+}|a>^{*},$$
(5.26)

weil $\hat{A}^+|a> \deg_{\sim}$ zu $< a|\hat{A}$ adjungierte Operator ist.

Was ist nun $\langle \tilde{b} |$? Für einen beliebigen anderen Zustand f gilt mit (5.8)

$$<\tilde{b}|f>^{*}===^{*},$$
(5.27)

weil nach (5.20) $< b|\hat{B}^+$ adjungiert ist zu $\hat{B}|b>$. Gleichung (5.27) gilt für alle |f>, so dass

$$< \tilde{b}| = < b|\hat{B}^+$$
.

Eingesetzt in Gleichung (5.26)

$$< a | (\hat{A}\hat{B}) | b > = < \tilde{b} | \hat{A}^+ | a >^* = < b | \hat{B}^+ \hat{A}^+ | a >^*$$

Die linke Seite dieser Gleichung ist aber nach (5.8)

$$< a | \left(\hat{A}\hat{B} \right) | b > = < b | \left(\hat{A}\hat{B} \right)^+ | a >^*,$$

weil $< b|(\hat{A}\hat{B})^+$ der zu $(\hat{A}\hat{B})|b>$ adjungierte Operator ist, und wir erhalten

$$< b | \left(\hat{A}\hat{B} \right)^{+} |a>^{*} = < b | \hat{B}^{+}\hat{A}^{+} |a>^{*}$$

 $\hat{B}^{+}\hat{A}^{+} = \left(\hat{A}\hat{B} \right)^{+}.$

oder

Q.E.D.

Satz 2: Die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu zwei verschiedenen Eigenwerten sind zueinander orthogonal.

Beweis: Es gelte $\hat{A} = \hat{A}^+$ und

und

$$\hat{A}|f_1 > = a_1|f_1 >$$

 $\hat{A}|f_2 > = a_2|f_2 >$

mit $a_1 \neq a_2$. Es folgt

un

$$< f_2 | \hat{A}^+ = < f_2 | \hat{A} = a_2^* < f_2 | = a_2 < f_2 |$$

nd damit $a_1 < f_2 | f_1 > = < f_2 | \hat{A} | f_1 > = < f_2 | \hat{A}^+ | f_1 > = a_2 < f_2 | f_1 >$

Für $a_1 \neq a_2$ erhalten wir

$$< f_2 | f_1 >= 0$$

Q.E.D.

Aufgrund ihrer Orthogonalität kann die Gesamtheit der Eigenzustände einer Observablen A, also deren Eigenvektoren, nach entsprechender Orthonormalisierung daher als Basis des Zustandsraums verwandt werden. Je nachdem, welcher Satz von Eigenfunktionen $|a\rangle$ als Basis benutzt wird, gelangt man zur Ortsdarstellung, Impulsdarstellung oder Energiedarstellung usw.

5.1.4 Basis

Es gibt eine Basis von orthonormierten Vektoren |n>, welche ein vollständiges Orthonormalsystem bilden

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} . \tag{5.28}$$

e 1

Ein beliebiger Zustandsvektor |a > lässt sich damit in eine Reihe entwickeln

$$|a\rangle = \sum_{n} a_n |n\rangle ,$$

wobei wegen

$$\langle m|a \rangle = \sum_{n} a_n \langle m|n \rangle = \sum_{n} a_n \delta_{mn} = a_m$$

für die Entwicklungskoeffizienten gilt $a_n = \langle n | a \rangle$. Wir erhalten also

$$|a\rangle = \sum_{n} \langle n|a\rangle |n\rangle$$
 (5.29)

Der Entwicklungskoeffizient $< n|a > = < a|n >^*$ ist die *n*-te Komponente des Zustandsvektors |a >. Die Basisvektoren |n > spannen den Hilbert-Raum auf. Das Skalarprodukt zweier Vektoren

$$|a\rangle = \sum_{n} \langle n|a\rangle |n\rangle$$
$$|b\rangle = \sum_{m} \langle m|b\rangle |m\rangle$$

lässt sich mit

$$| < b | = \sum_{m} b_{m}^{*} < m | = \sum_{m} < b | m > < m |$$

dann ausdrücken durch

$$\langle b|a \rangle = \sum_{m} \langle b|m \rangle \langle m|\sum_{n} \langle n|a \rangle |n \rangle$$

$$= \sum_{m} \sum_{n} \langle b|m \rangle \langle n|a \rangle \langle m|n \rangle$$

$$= \sum_{m} \sum_{n} \langle b|m \rangle \langle n|a \rangle \delta_{mn} = \sum_{n} \langle b|n \rangle \langle n|a \rangle .$$
(5.30)

Für die Norm eines Vektors gilt dann

$$< a|a> = \sum_{n} < a|n> < n|a>$$

 $= \sum_{n} < a|n> < a|n>^{*}$
 $= \sum_{n} |< a|n>|^{2} \ge 0.$ (5.31)

Die Vollständigkeitsrelation (5.28) schreibt sich in der kontinuierlichen Ortsdarstellung als

$$\int d^3x |\vec{x}| < \vec{x} = 1$$
 (5.32)

oder 1-dimensional

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1.$$
(5.33)

Man spricht vom Dazwischenschieben der Eins.

Um für das gleichzeitige Gelten von (5.28) für diskrete und kontinuierliche Eigenwerte Rechnung zu tragen, d.h.

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad \iff \quad \langle n|m\rangle = \delta(n-m) ,$$
 (5.34)

führt man das Symbol

$$\oint dn \left| n \right| < n = 1 \tag{5.35}$$

ein. Darunter versteht man die Summation über den diskreten Teil des Eigenwertspektrums und die Integration über den kontinuierlichen Teil.

5.2 Darstellung von Vektoren

Seien $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ zwei beliebige Vektoren im Hilbert-Raum. Unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation (5.35) können wir sie nach den Komponenten der Basis $|a\rangle$ entwickeln, die wir als Eigenvektoren der Observablen A verstehen:

$$|\psi > = 1|\psi > = \int_{a} |a > \langle a|\psi >$$
 (5.36)

und

$$|\phi > = 1|\phi > = \int_{a}^{a} |a > a|\phi > .$$
 (5.37)

Mit (5.34) erhalten wir für das Skalarprodukt dieser beiden Zustände

$$\langle \psi | \phi \rangle = \oint_{a} \oint_{a'} \langle \psi | a \rangle \langle a | a' \rangle \langle a' | \phi \rangle$$

$$= \oint_{a} \oint_{a'} \langle \psi | a \rangle \delta \left(a - a' \right) \langle a' | \phi \rangle$$

$$= \oint_{a} \langle \psi | a \rangle \langle a | \phi \rangle .$$

$$(5.38)$$

Zur Verdeutlichung: für ein diskretes Spektrum $|a_n \rangle = |n \rangle$ ergibt Gleichung (5.38) gerade Ergebnis (5.30) weil wir für (5.36) und (5.37)

$$\begin{split} |\phi> &= &\sum_{n} < a_{n} |\phi> |a_{n}> = \sum_{n} \phi_{n} |n>, \\ <\psi| &= &\sum_{m} <\psi |a_{m}> < a_{m} | = \sum_{m} \psi_{m}^{*} < m | \end{split}$$

erhalten, so dass

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n} \sum_{m} \psi_m^* \phi_n \langle m | n \rangle = \sum_{n} \psi_n^* \phi_n .$$

Die gleichen Ausdrücke für ein kontinuierliches Eigenwertspektrum lauten

$$\begin{split} |\phi\rangle &= \int da < a |\phi\rangle |a\rangle = \int da \phi(a) |a\rangle, \\ <\psi| &= \int da' <\psi|a'\rangle < a'| = \int da' \psi^* \left(a'\right) < a'|, \\ <\psi|\phi\rangle &= \int da \psi^*(a) \phi(a). \end{split}$$

so dass

Je nachdem, welcher Satz von Eigenfunktionen $|a\rangle$ als Basis benutzt wird, spricht man von der Ortsdarstellung ($\langle x|\psi\rangle$), Energiedarstellung ($\langle E|\psi\rangle$), Impulsdarstellung ($\langle p|\psi\rangle$) usw. des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ im Hilbert-Raum, der in der Schreibweise $|\psi\rangle$ noch darstellungsfrei beschrieben ist. Jede mögliche Entwicklung in eine vollständige, orthonormierte Basis ist eine mögliche Darstellung des Zustands.

5.3 Darstellung von Operatoren

Die Wirkung eines hermiteschen, linearen Operators \hat{F} auf einen Zustand $|\psi\rangle$ überführt diesen in den Zustand $|\phi\rangle$, der ebenfalls dem Hilbert-Raum angehört

$$\hat{F}|\psi\rangle = |\phi\rangle \quad . \tag{5.39}$$

Ist speziell $|\psi\rangle$ gleich einem orthonormierten Basisvektor $|a_m\rangle$ eines diskreten Eigenwertspektrums, so lautet Gleichung (5.39)

$$|\phi_m\rangle = \hat{F}|a_m\rangle \quad . \tag{5.40}$$

Zerlegen wir den Vektor $|\phi_m >$ in die Komponenten der Basis $|a_n >$, erhalten wir

$$|\phi_m \rangle = \sum_n |a_n \rangle \langle a_n | \phi_m \rangle$$

=
$$\sum_n |a_n \rangle \langle a_n | \hat{F} | a_m \rangle$$

=
$$\sum_n |a_n \rangle F_{nm}$$
 (5.41)

mit dem Matrix-Element

$$F_{nm} \equiv \langle a_n | \hat{F} | a_m \rangle \quad . \tag{5.42}$$

Gleichung (5.40) wird damit zu

$$\hat{F}|a_m\rangle = \sum_n F_{nm}|a_n\rangle .$$
(5.43)

Wählen wir speziell $|\psi\rangle$ gleich einem orthonormierten Basisvektor $|a'\rangle$ eines *kontinuierlichen* Eigenwertspektrums, so erhalten wir analog zu (5.43)

$$\hat{F}|a' > = \int da|a > \langle a|\hat{F}|a' >$$

$$= \int da|a > F\left(a, a'\right).$$
(5.44)

Nach dieser Vorüberlegung betrachten wir jetzt Gleichung (5.39) für den Fall eines beliebigen Hilbert-Vektors. Wählen wir eine kontinuierliche Basis $|a'\rangle$, wird aus Gleichung (5.39) durch Dazwischenschieben der Eins (5.32)

$$\begin{split} \hat{F}|\psi> &= \hat{F}\int da'|a'> \langle a'|\psi> \\ &= \hat{F}\int da'|a'>\psi\left(a'\right)\,. \end{split}$$

Mit Gleichung (5.44) für $\hat{F}|a'>$ folgt

$$\begin{split} \hat{F}|\psi > &= \int da \int da' |a > F\left(a, a'\right) \psi\left(a'\right) \\ &= \int da |a > \int da' F\left(a, a'\right) \psi\left(a'\right) \;, \end{split}$$

oder in Bra-Ket-Schreibweise

$$\hat{F}|\psi> = \int da \int da' |a> < a|\hat{F}|a'> < a'|\psi>$$
.

Wir multiplizieren von links mit einem beliebige anderen Bra-Vektor $< \phi |$ und erhalten mit

$$1 = f da |a > < a|$$

für das Skalarprodukt

$$\langle \phi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \phi | 1 \hat{F} 1 | \psi \rangle$$

$$= \iint da \langle \phi | a \rangle \langle a | \hat{F} | a' \rangle da' \langle a' | \psi \rangle$$

$$= \iint da \, da' \, F \left(a, a' \right) \phi^*(a) \psi \left(a' \right) .$$

$$(5.45)$$

Für den Fall einer diskreten Basis wird daraus

$$\langle \phi | \hat{F} | \psi \rangle = \sum_{n} \sum_{m} \phi_n^* F_{nm} \psi_m$$
$$= \sum_{n} \sum_{m} \langle \phi | a_n \rangle \langle a_n | \hat{F} | a_m \rangle \langle a_m | \psi \rangle .$$
(5.46)

Die rechte Seite entspricht gerade der Rechenvorschrift der Multiplikation eines Zeilenvektors (gebildet aus $\langle \phi | a_n \rangle$) mit einer Matrix und einem Spaltenvektor (gebildet aus $\langle a_m | \psi \rangle$). Die Elemente der Matrix (5.42),

$$F_{nm} \equiv < a_n |\hat{F}| a_m > ,$$

heissen Matrix-Elemente des Operators \hat{F} in der *a*-Darstellung. Für das Produkt zweier Operatoren $\hat{C} = \hat{F} \cdot \hat{G}$ erhalten wir für das Matrix-Element in der *a*-Darstellung durch Dazwischenschieben der Eins

$$1 = \int da^{''} \, |a^{''} > < a^{''}|$$

das Ergebnis

$$C(a, a') = \langle a|\hat{C}|a' \rangle = \langle a|\hat{F} \cdot 1 \cdot \hat{G}|a' \rangle$$

= $\int da'' \langle a|\hat{F}|a'' \rangle \langle a''|\hat{G}|a' \rangle$
= $\int da'' F(a, a'') G(a'', a')$ (5.47)

$$C_{mn} = \sum_{l} F_{ml} G_{ln} \tag{5.48}$$

bzw.

im Fall einer diskreten Basis.

Beispiel: Ortsdarstellung $|a\rangle = |x\rangle$. Die Zustände ψ und ϕ werden dann durch die Ortswellenfunktionen $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ und $\phi(x) = \langle x | \phi \rangle$ beschrieben. Mit $1 = \int dx |x\rangle \langle x|$ folgt für das Skalarprodukt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | 1 \psi \rangle = \int dx \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$
$$= \int dx \phi^*(x) \psi(x) .$$
(5.49)

Mit (5.43) für den Ortsoperator $\hat{F} = \hat{x}$ folgt

$$< x|\hat{x}|x'> = < x|x'|x'> = x' < x|x'> = x\delta(x-x')$$
, (5.50)

d.h. der Ortsoperator in Ortsdarstellung ist diagonal. Für Funktionen des Ortsoperators $f(\hat{x})$ erhalten wir mit der Spektralzerlegung

$$f(\hat{x}) = \int dx'' f(x'') |x'' > < x''|$$

den Ausdruck

$$< x|f(\hat{x})|x' > = < x| \int dx'' f(x'') |x'' > < x''|x' >$$

= $< x| \int dx'' f(x'') |x'' > \delta(x'' - x')$
= $< x|f(x')|x' > = f(x)\delta(x - x').$ (5.51)

Die Gleichungen (5.50) und (5.51) gelten für alle Operatoren in ihrer Eigendarstellung.

5.4 Eigenwertgleichung in Matrixform

5.4.1 Säkulargleichung

Die allgemeine Eigenwertgleichung (5.19)

$$\hat{A}|a >= a|a >$$

können wir z.B. in der Basis |n> mit diskretem Spektrum darstellen als

$$\begin{aligned} \hat{A}|a> &= 1\hat{A}1|a> = \sum_{m} \sum_{n} |m> < m|\hat{A}|n> < n|a> \\ &= a\sum_{m} \sum_{n} |m> < m|n> < n|a> \\ &= a\sum_{m} \sum_{n} |m> \delta_{mn} < n|a> = a\sum_{m} |m> < m|a> \end{aligned}$$

oder mit (5.42)

$$\sum_{m} \sum_{n} |m > A_{mn} < n|a >= a \sum_{m} |m > < m|a > .$$
(5.52)

Diese Gleichung gilt für jedes beliebige |m>, so dass

$$\sum_{n} A_{mn} < n | a \rangle = a < m | a \rangle = \sum_{n} a \delta_{nm} < n | a \rangle$$

folgt. Wir erhalten

$$\sum_{n} \left[A_{mn} - a\delta_{mn} \right] < n |a\rangle = 0 \tag{5.53}$$

ein homogenes, lineares Gleichungssystem für die unbekannten Funktionen < n|a >. Eine nichttriviale Lösung dieses Gleichungssystems existiert nur, wenn seine Determinante verschwindet:

$$\det [A_{mn} - a\delta_{mn}] = 0. (5.54)$$

Dies ist eine Bestimmungsgleichung (Säkulargleichung, charakteristische Gleichung) für die Eigenwerte a_i . Die Wurzeln der Säkulargleichung sind die Eigenwerte a_i des Operators \hat{A} für die physikalische Größe A. Die Entwicklungskoeffizienten < n|a > zu einem Eigenwert a_i erhält man durch Einsetzen von a_i in das Gleichungssystem (5.53). Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind dann

$$|a_i\rangle = \sum_n \langle n|a_i\rangle |n\rangle$$
 (5.55)

Auf diese Art ist es möglich, Eigenwerte und Eigenfunktionen zu bestimmen, obwohl wir nur die Matrixelemente des Operators \hat{A} in der $|n\rangle$ -Darstellung kennen, die nicht die Eigendarstellung von \hat{A} ist.

5.4.2 Entartete Eigenwerte, Schmidtsches Orthonormierungsverfahren

Definition: Der Eigenwert A ist m-fach entartet, falls m linear unabhängige Eigenzustände existieren mit

$$A|a^{\mu} >= A|a^{\mu} >, \qquad \mu = 1, 2, \dots, m.$$
(5.56)

Mit dem Schmidt-Verfahren können wir auch dann ein Orthonormalsystem konstruieren. **Verfahren nach Schmidt**: Wir haben drei Mengen von Funktionen:

- (i) die linear unabhängigen Eigenzustände $|a^{\mu}\rangle$, $\mu = 1, \ldots, m$,
- (ii) wir bilden daraus m orthogonale Funktionen u_{μ} ,
- (iii) durch Normalisieren erhalten wir aus den u_{μ} die Funktionen ψ_{μ} des Orthonormalsystems.

Trick: Wir konstruieren sukzessive die Funktion u_k als $|a^k >$ plus einer unbekannten Linearkombination der vorherigen Funktionen ψ^{ν} mit $\nu < k$.

- (1) Die Anwesenheit der neuen Funktion $|a^k\rangle$ garantiert die lineare Unabhängigkeit von u_k von den vorherigen ψ^{ν} .
- (2) Die Forderung nach Orthogonalität zu allen vorherigen ψ^{ν} ergibt genug Bedingungen, um jeden Koeffizienten der Linearkombination zu bestimmen.
- (3) Abschließend wird u_k normiert.
- (4) Wir wiederholen das Verfahren dann für u_{k+1}

Entsprechend dieser Vorschrift beginnen wir mit $\mu = 1$, also der ersten Basisfunktion:

$$u_1 = |a^{(1)} > .$$

Hier gibt es natürlich keine vorherigen Funktionen. Wir normalisieren durch

$$\psi_1 = \frac{|a^{(1)}\rangle}{\langle a^{(1)}|a^{(1)}\rangle}$$

Für $\mu = 2$ setzen wir

$$u_2 = |a^{(2)} > +c_{21}\psi_1(x)|$$

Wir fordern die Orthogonalität von u_2 zu ψ_1 , so dass mit $\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1$ folgt

$$\langle u_2 | \psi_1 \rangle = 0 = \langle a^{(2)} | \psi_1 \rangle + c_{21} \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle a^{(2)} | \psi_1 \rangle + c_{21} c_{21} = -\langle a^{(2)} | \psi_1 \rangle .$$

oder

Damit erhalten wir

$$u_2 = |a^{(2)}\rangle - \langle a^{(2)}|\psi_1 \rangle \psi_1(x)$$

Allgemein ergibt sich also

$$u_i = |a^{(i)} > +c_{i,1}|\psi_1 > +c_{i,2}|\psi_2 > + \ldots + c_{i,i-1}\psi_{i-1}$$

mit den Koeffizienten

$$c_{ij} = - \langle a^{(i)} | \psi_j \rangle$$

5.5 Wechsel der Darstellung, unitäre Transformationen

Es seien ψ_n die Eigenfunktionen zum Operator \hat{L} und ϕ_{ν} die Eigenfunktionen zum Operator \hat{M} mit jeweils diskretem Spektrum.

Jeder andere Operator \hat{F} ist in diesen beiden Basissystemen durch Angabe der Matrixelemente F_{mn} bzw. $F_{\mu\nu}$ gegeben:

$$F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle = \int da \ \langle m|a\rangle \hat{F} \langle a|n\rangle = \int da \ \psi_m^*(a) \hat{F} \psi_n(a) \ , \ (5.57)$$

$$F_{\mu\nu} = \langle \mu | \hat{F} | \nu \rangle = \int da \, \langle \mu | a \rangle \hat{F} \langle a | \nu \rangle = \int da \, \phi^*_{\mu}(a) \hat{F} \phi_{\nu}(a) \,. \tag{5.58}$$

Wir suchen die Transformationsmatrix, die die Matrix (F_{mn}) in die Matrix $(F_{\mu\nu})$ überführt. Dazu entwickeln wir die Funktionen ϕ_{μ} nach den Funktionen ψ_n

$$|\mu\rangle = \phi_{\mu} = \sum_{n} S_{n\mu} \psi_{n} = \sum_{n} S_{n\mu} |n\rangle$$
 (5.59)

und berechnen das Skalarprodukt

$$< m |\mu> = \sum_{n} S_{n\mu} < m |n> = \sum_{n} S_{n\mu} \delta_{mn} = S_{m\mu} .$$
 (5.60)

Setzen wir die Entwicklung (5.59) in Gleichung (5.58) ein, erhalten wir

$$F_{\mu\nu} = <\mu |\hat{F}|\nu > = \sum_{n} S_{n\mu}^{*} < n |\hat{F} \sum_{m} S_{m\nu}|m >$$
$$= \sum_{n} \sum_{m} S_{n\mu}^{*} F_{nm} S_{m\nu} .$$

Da $S^*_{n\mu}=S^+_{\mu n}$ ist (Beweis siehe unten), folgt für die Matrix $(F_{\mu\nu})$

$$(F_{\mu\nu}) = \sum_{n} \sum_{m} (S_{\mu n})^{+} (F_{nm}) (S_{m\nu})$$
(5.61)

oder in Kurz-Schreibweise

$$F_M = S^+ F_L S . ag{5.62}$$

S muss eine unitäre Matrix sein, weil mit der Entwicklung (5.59)

$$\delta_{\mu\nu} = <\mu |\nu> = \sum_{n} S_{n\mu}^{*} < n |\sum_{m} S_{m\nu}|m>$$

= $\sum_{n} \sum_{m} S_{n\mu}^{*} S_{m\nu} \delta_{mn}$
= $\sum_{n} S_{n\mu}^{*} S_{n\nu}$
= $\sum_{n} S_{\mu n}^{+} S_{n\nu} = (S^{+}S)_{\mu\nu}$, (5.63)

d.h. S^+S ist die Einheitsmatrix $I = S^{-1}S$, so dass $S^+ = S^{-1}$; also ist S unitär.

Beweis $S_{n\mu}^* = S_{\mu n}^+$: In einer gegebenen orthonormierten Basis $|b_1 \rangle, |b_2 \rangle, \ldots$ des Ket-Raums wird ein Operator \hat{F} durch eine Matrix F dargestellt:

$$|c\rangle = \hat{F}|a\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Dabei werden die Matrix-Elemente definiert durch

$$F_{ik} = \langle b_i | \hat{F} | b_k \rangle$$

In der dazu adjungierten Basis $< b_1|, < b_2|, \dots$ des Bra-Raums gilt entsprechend

$$< c| = < a | \hat{F}^+ \rightarrow (c_1^*, c_2^*, \ldots) = (a_1^*, a_2^*, \ldots) \begin{pmatrix} F_{11}^* & F_{21}^* & \cdots \\ F_{12}^* & F_{22}^* & \cdots \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Dem adjungierten Operator \hat{F}^+ entspricht also die konjugierte Matrix F_{ji}^* . Q.E.D. Wollen wir in *Umkehrung* der Transformation (5.61) die Matrix (F_{mn}) durch die Matrix $(F_{\mu\nu})$ ausdrücken, so folgt aus (5.62),

$$F_M = S^+ F_L S \; ,$$

mit der Einheitsmatrix I dass

$$SF_M S^+ = SS^+ F_L SS^+ = IF_L I = F_L$$

$$F_L = SF_M S^+.$$
(5.64)

also

Derartige unitäre Transformationen erhalten

- (a) die Normierung eines Zustands,
- (b) algebraische Ausdrücke,
- (c) Kommutatoren,
- (d) Eigenwertspektren,
- (e) Matrixelemente.

Beispielhaft beweisen wir Eigenschaft (d) und überlassen die anderen Beweise dem interessierten Leser (Übungsaufgabe).

Wir betrachten die Eigenwertgleichung

$$L|\psi_n \rangle = L|\psi_n \rangle$$

Durch Anwendung der unitären Transformation S folgt

$$S\hat{L}|\psi_n\rangle = SL|\psi_n\rangle = LS|\psi_n\rangle$$

Durch Dazwischenschieben der Einheitsmatrix $1 = I = S^+S$ auf der linken Seite erhalten wir

$$S\hat{L}1|\psi_n\rangle = S\hat{L}S^+S|\psi_n\rangle = \left(S\hat{L}S^+\right)\left(S|\psi_n\rangle\right) = L\left(S|\psi_n\rangle\right) \ .$$

Mit dem transformierten Zustandsvektor $|\psi_t \rangle = S |\psi_n \rangle$ und dem transformierten (5.62) Operator $\hat{L}_t = S \hat{L} S^+$ schreibt sich diese Gleichung als

$$L_t |\psi_t \rangle = L |\psi_t \rangle$$

Die Eigenwerte L bleiben trotz der unitären Transformation des Operators und der Eigenfunktionen unverändert.

5.6 Messprozess

In den bisherigen Abschnitten dieses Kapitels haben wir im wesentlichen den formalen Apparat der Quantenmechanik zur Verfügung gestellt. Wir wollen jetzt die Beziehung zu den physikalischen Vorgängen genauer diskutieren.

5.6.1 Axiome der Quantenmechanik

Wir beginnen mit der Wiederholung der ersten zwei Postulate:

- 1. Postulat: Zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 ist der Zustand eines physikalischen Systems definiert durch einen Ket-Vektor $|\psi(t_0)\rangle$ im Zustandsraum.
- **2. Postulat**: Jede messbare Größe (Observable) A wird beschrieben durch einen linearen hermiteschen Operator \hat{A} , der auf die Vektoren des Zustandsraums wirkt.

Wenn ein System in einem angegebenen Zustand $|c\rangle$ die Eigenschaft A besitzt, dieser also einer der Eigenzustände $|a_i\rangle$ des Operators \hat{A} ist, wird er durch einen Messprozess nicht verändert, und der Eigenwert a_i ist der Messwert. Handelt es sich dagegen nicht um einen Eigenzustand, so sind in seiner Entwicklung nach den Eigenzuständen von \hat{A} :

$$|c> = \sum_{i} c_{i} |a_{i}> = \sum_{i} \langle a_{i} |c\rangle |a_{i}\rangle$$
 (5.65)

mindestens zwei der Entwicklungskoeffizienten c_i von Null verschieden. Das Resultat des Messprozesses wird dann durch drei weitere Postulate beschrieben:

- **3.** Postulat: Die einzig möglichen Messwerte einer Observablen A sind die Eigenwerte des dazugehörigen Operators \hat{A} .
- **4.** Postulat: Bei der Messung von A im Zustand $|c\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit, den Eigenwert a_i zu erhalten, gleich $p_i = |\langle a_i | c \rangle|^2$.
- **5. Postulat**: Wenn die Messung von A den Wert a_i ergeben hat, ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung der Eigenzustand $|a_i\rangle$.

Durch den Messprozess wird also der Ausgangszustand $|c\rangle$ zerstört (Kollaps der Wellenfunktion) und es entsteht einer der darin enthaltenen Eigenzustände a_i (Filterung). Dieser Endzustand ist aber durch den Ausgangszustand nicht determiniert, sondern nur die Wahrscheinlichkeit p_i seines Auftretens (statistische Kausalität). Bei der Wiederholung der Messung an einer Vielzahl von Systemen, die sich im gleichen Zustand befinden (Ensemble), ist der Mittelwert gegeben durch

$$< A >= \sum_{i} p_{i}a_{i} = \sum_{i} a_{i}| < a_{i}|c > |^{2} = \sum_{i} a_{i} < c|a_{i} > < a_{i}|c >$$
$$= < c|\left(\sum_{i} |a_{i} > a_{i} < a_{i}|\right)|c > = < c|\hat{A}|c >$$
(5.66)

und wird als Erwartungswert bezeichnet. Falls c dagegen ein Eigenzustand a_i ist, ergibt sich erwartungsgemäß

$$==a_i$$
. (5.67)

Die Nichtdeterminiertheit des Messergebnisses und der Einfluss der Beobachtung auf den Zustand des Systems unterscheiden die Quantenmechanik tiefgreifend von der klassischen Physik und haben zu teilweise gewagten metaphysikalisch-philosophischen Interpretationen (z. B. "Schrödingers Katze") geführt.

Außerhalb von Messprozessen kommt es, wie in der klassischen Physik, zu einer zeitlichen Entwicklung des Systemszustands durch Wechselwirkungen im System selbst und mit seiner Umgebung. Nach dem *Kausalitätsprinzip* legt der Zustand des Systems zum Zeitpunkt t_0 den zum späteren Zeitpunkt t eindeutig fest:

6. Postulat (Kausalitätsprinzip): Ist der Zustand zum Zeitpunkt t₀ vollständig bekannt, so ist er für alle späteren Zeitpunkte für gegebene Wechselwirkungen berechenbar aus der Lösung der dynamischen Gleichung, der Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle = \hat{H} |\psi_s(t)\rangle \quad . \tag{5.68}$$

Die zeitliche Entwicklung ist also durch den Hamilton-Operator H festgelegt.

5.6.2 Gleichzeitige Messbarkeit

Da der Zustand eines quantenmechanischen Systems im Allgemeinen durch einen Messprozess verändert wird, ist die Reihenfolge zweier Messungen in der Regel nicht vertauschbar. Dem Nacheinanderausführen von Messprozessen entspricht im Zustandsraum das Produkt der Operatoren:

- 1. Messung $|c > \rightarrow \hat{A}|c >$
- 2. Messung $\hat{A}|c > \rightarrow \hat{B}(\hat{A}|c >) = \hat{B}\hat{A}|c >$

und es gilt im Allgemeinen

$$BA|c > \neq AB|c > . \tag{5.69}$$

Satz: Ein Zustand kann Eigenfunktion mehrerer Operatoren gleichzeitig nur dann sein, wenn die Operatoren vertauschbar sind, d.h.

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right]_{-} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0.$$

Beweis: \hat{A} und \hat{B} seien zwei hermitesche Operatoren. ψ_n bezeichnet die Eigenfunktionen beider Operatoren, d.h. es gilt

$$\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n \tag{5.70}$$

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n \tag{5.71}$$

und

mit den jeweiligen reellen Eigenwerten A_n, B_n . Wir wenden auf (5.70) von links den Operator \hat{A} und (5.71) von links den Operator \hat{B} und bilden die Differenz der Ergebnisse:

$$\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\psi_n=B_n\hat{A}\psi_n-A_n\hat{B}\psi_n=\left(B_nA_n-A_nB_n\right)\psi_n=0.$$

Weil die Eigenfunktionen ψ_n ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, können wir jeden beliebigen Zustandsvektor $\phi = \sum_n a_n \psi_n$ danach entwicken. Damit folgt dann

$$\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\phi=\sum_{n}a_{n}\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\psi_{n}=0.$$

Q. E. D.

Die Umkehrung des Satzes gilt ebenso: kommutieren zwei hermitesche Operatoren, so besitzen sie gemeinsame Eigenfunktionen.

Die Berechnung des Kommutators zeigt, ob zwei Operatoren gemeinsame Eigenfunktionen haben. Ist dies der Fall, dann können die physikalischen Observablen, für die die Operatoren \hat{A} und \hat{B} stehen, gleichzeitig scharf gemessen werden, denn die Messung der Größe A_n reduziert das System auf die Eigenfunktion ψ_n . Ist ψ_n gleichzeitig Eigenfunktion zu \hat{B} , ist B_n der dazu scharfe Eigenwert. Ist ψ_n keine Eigenfunktion zu \hat{B} , lässt sich ψ_n nur als eine Superposition aller Eigenfunktionen zu \hat{B} mit allen möglichen B_n darstellen.

Der Kommutator liefert also eine klare Aussage darüber, ob zwei Operatoren gemeinsame Eigenfunktionen besitzen und damit gleichzeitig scharf messbar sind. Wir kennen bereits die Aussage der Heisenbergschen Unschärferelation (siehe Kap. 2.6)

$$[\hat{p}_j, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{\imath} \delta_{jk} \; .$$

Diese besagt damit, dass z. B. der Impuls eines Teilchens in *x*-Richtung und sein Ort auf der *x*-Achse prinzipiell nicht gleichzeitig scharf gemessen werden können. Natürlich kommutiert jeder Operator mit sich selbst

$$\left[\hat{A},\hat{A}\right]=0$$

und ebenfalls mit jeder Potenz von sich selbst

$$\left[\hat{A},\hat{A}^n\right] = 0.$$
(5.72)

Definiert man die Funktion eines Operators durch die Potenzreihe

$$f\left(\hat{A}\right) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \hat{A}^k , \qquad (5.73)$$

so gilt

$$\left[\hat{A}, f\left(\hat{A}\right)\right] = 0.$$
(5.74)

Kommutierende Operatoren haben zwar im Allgemeinen nicht alle Eigenvektoren gemeinsam, es gibt aber eine Basis des Zustandsraums, die aus gemeinsamen Eigenvektoren besteht. Wenn es entartete Eigenwerte zum Operator \hat{A} gibt, kann man in diesem Fall die

Basisvektoren, die den zu einem entarteten Eigenwert gehörenden Unterraum aufspannen, so auswählen, dass sie gleichzeitig Eigenvektoren eines mit \hat{A} kommutierenden, aber von ihm unabhängigen Operators \hat{B} sind. Bei einem System von s Freiheitsgraden gibt es insgesamt s voneinander unabhängige, miteinander kommutierende Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{Z}$. Ihre gemeinsamen Eigenvektoren zu den Eigenwerten a, b, \dots, z bilden eine Basis des Zustandsraums. Zu jedem s-Tupel (a, b, \dots, z) gehört dabei nur ein Eigenvektor, den wir durch $|a, b, \dots, z\rangle$ bezeichnen. Er ist also durch die Angabe der s Quantenzahlen a, b, \dots, z eindeutig bestimmt.

Beispiel: Ohne Berücksichtigung des Elektronenspins stellt die Relativbewegung des Elektrons im Wasserstoffatom ein System von 3 Freiheitsgraden dar. Ein Satz von 3 kommutierenden, unabhängigen Operatoren wird geliefert durch den Hamilton-Operator \hat{H} , dem Quadrat des Bahndrehimpulses \hat{L}^2 und der z-Komponente \hat{L}_z des Bahndrehimpulses, ein anderer durch die Komponenten des Linearimpulses \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z . Zu jedem Satz von 3 Operatoren gehört eine Basis von Zuständen, die den gesamten Zustandsraum aufspannt, z.B. die Zustandsvektoren |n, l, m >.

6 Quantendynamik

Zeitliche Änderungen von Zuständen lassen sich mit unitären Transformationen beschreiben. Schrödinger-Bild, Heisenberg-Bild und Wechselwirkungs-Bild sind verschiedene solcher Beschreibungen.

6.1 Schrödinger-Bild

Gemäß dem Kausalitätsprinzip (5.68) erfüllt ein zeitabhängiger Zustand $|\psi_s(t)>$ die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle = \hat{H} |\psi_s(t)\rangle .$$
(6.1)

Wir setzen einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator voraus:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0. ag{6.2}$$

Dann lautet die formale Lösung der Schrödinger-Gleichung (6.1)

$$|\psi_s(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\psi_s(t_0)\rangle = \hat{S}(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle, \qquad (6.3)$$

wobei wir die Exponentialfunktion als zeitabhängigen Operator

$$\hat{S}(t,t_0) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$
(6.4)

,

auffassen. Nach Gleichung (6.3) wird der Zustand $|\psi_s(t)\rangle$ dargestellt als Produkt eines zeitabhängigen, unitären Operators $\hat{S}(t,t_0)$ mit der Anfangswellenfuntion $|\psi_s(t_0)\rangle$. Der Operator \hat{S} ist unitär, weil gemäß Kap. 5.5 mit $\hat{S}^+ = \hat{S}^*$ gilt

$$\hat{S}^{+}\hat{S} = \hat{S}^{*}\hat{S} = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_{0})}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_{0})} = 1.$$

Um die Wirkung von \hat{S} auf die Anfangswellenfuntion $|\psi_s(t_0) > zu$ untersuchen, entwickeln wir diese nach den Eigenfunktionen von \hat{H} :

$$|\psi_s(t_0)\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$$
$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle.$$

wobei

Eingesetzt in die formale Lösung (6.3) erhalten wir

$$\begin{aligned} |\psi_{s}(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_{0})}|\psi_{s}(t_{0})\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_{0})\right)^{k} \sum_{n} a_{n}|n\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n} \frac{a_{n}}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_{0})\right)^{k}|n\rangle \end{aligned}$$

6 Quantendynamik

Weil
$$\left(\hat{H}\right)^k |n> = E_n^k |n>$$

folgt

$$|\psi_{s}(t)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n} \frac{a_{n}}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} E_{n} (t-t_{0})\right)^{k} |n\rangle$$

=
$$\sum_{n} a_{n} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n} (t-t_{0})} |n\rangle .$$
(6.5)

Die Lösung (6.5) ist identisch mit der Lösung (2.108) der allgemeinen Schrödinger-Gleichung mit zeitunabhängigem Hamilton-Operator in der Ortsdarstellung. Die zu (6.3) adjungierte Lösung lautet

$$<\psi_s(t)| = <\psi_s(t_0)|e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$
(6.6)

und erfüllt die adjungierte Schrödinger-Gleichung

$$-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t} < \psi_s(t)| = <\psi_s(t)|\hat{H}.$$
(6.7)

Damit und mit der Schrödinger-Gleichung (6.1) erhalten wir für die Änderung eines Matrixelements einer quantenmechanischen Observablen F_s im Schrödinger-Bild

$$\frac{d}{dt} \left\langle \psi_s(t) \left| \hat{F}_s \right| \psi_s(t) \right\rangle \\
= \left[\frac{d}{dt} \langle \psi_s(t) \right| \hat{F}_s |\psi_s(t)\rangle + \left\langle \psi_s(t) \left| \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \right| \psi_s(t) \right\rangle + \left\langle \psi_s(t) \left| \hat{F}_s \left[\frac{d}{dt} |\psi_s(t)\rangle \right] \right. \\
= \left\langle \psi_s(t) \left| \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \right| \psi_s(t) \right\rangle + \left. \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_s(t) \left| \hat{F}_s \hat{H} - \hat{H} \hat{F}_s \right| \psi_s(t) \right\rangle ,$$

also mit dem Kommutator

$$\frac{d}{dt}\left\langle\psi_{s}(t)\left|\hat{F}_{s}\right|\psi_{s}(t)\right\rangle = \left\langle\psi_{s}(t)\left|\frac{\partial\hat{F}_{s}}{\partial t}\right|\psi_{s}(t)\right\rangle + \frac{1}{\imath\hbar}\left\langle\psi_{s}(t)\left|\left[\hat{F}_{s},\hat{H}\right]\right|\psi_{s}(t)\right\rangle.$$
(6.8)

Falls der Operator \hat{F}_s zeitunabhängig ist, d.h. $\partial \hat{F}_s/\partial t = 0$, und mit dem Hamilton-Operator kommutiert, d.h. $[\hat{F}_s, \hat{H}] = 0$, sind alle Matrixelemente von \hat{F}_s Konstanten der Bewegung.

6.2 Heisenberg-Bild

Setzen wir die Lösungen (6.3) und (6.6) in Gleichung (6.8) ein, so erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \left\langle \psi_s\left(t_0\right) \left| e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \hat{F}_s e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \right| \psi_s\left(t_0\right) \right\rangle \\
= \left\langle \psi_s\left(t_0\right) \left| e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \right| \psi_s\left(t_0\right) \right\rangle \\
+ \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_s\left(t_0\right) \left| e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \left(\hat{F}_s\hat{H} - \hat{H}\hat{F}_s\right) e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \right| \psi_s\left(t_0\right) \right\rangle .$$

Wegen Gleichung (5.74) kommutiert \hat{H} mit $e^{\pm i \hat{H}(t-t_0)/\hbar}$, so dass

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}\hat{H}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} - e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{H}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\\ &= e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{H} - \hat{H}e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\\ &= \left[e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar},\hat{H}\right],\\ dass \quad \frac{d}{dt}\left\langle\psi_{s}\left(t_{0}\right)\left|e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\right|\psi_{s}\left(t_{0}\right)\right\rangle\\ &= \left\langle\psi_{s}\left(t_{0}\right)\left|e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\frac{\partial\hat{F}_{s}}{\partial t}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\right|\psi_{s}\left(t_{0}\right)\right\rangle\\ &+\frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi_{s}\left(t_{0}\right)\left|\left[e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar},\hat{H}\right]\right|\psi_{s}\left(t_{0}\right)\right\rangle. (6.9)\end{aligned}$$

Jetzt ist es angebracht, folgende Definitionen einzuführen: als *zeitunabhängige Zustände* definieren wir

$$|\psi_H \rangle \equiv |\psi_s(t_0)\rangle = e^{iH(t-t_0)/\hbar} |\psi_s(t)\rangle = \hat{S}^+(t,t_0) |\psi_s(t)\rangle, \qquad (6.10)$$

als zeitabhängige quantenmechanische Größen=zeitabhängige Operatoren definieren wir

$$\hat{F}_{H}(t) \equiv e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} \hat{F}_{s} e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} = \hat{S}^{+}(t,t_{0}) \hat{F}_{s} \hat{S}(t,t_{0}) .$$
(6.11)

Die Größen $|\psi_H >$ und $\hat{F}_H(t)$ werden oft als Wellenfunktion und Operator im *Heisenberg-Bild* bezeichnet.

Weil $|\psi_H >$ zeitunabhängig ist, können wir die Zeitableitung auf der linken Seite von Gleichung (6.9) in das Matrix-Element hineinziehen und erhalten

$$\left\langle \psi_H \left| \frac{d\hat{F}_H}{dt} \right| \psi_H \right\rangle = \left\langle \psi_H \left| \frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} \right| \psi_H \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi_H \left| \left[\hat{F}_H , \hat{H} \right] \right| \psi_H \right\rangle , \quad (6.12)$$

wobei wir analog zu (6.11) definieren

so

$$\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} \equiv \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\right)_H = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} .$$
(6.13)

Da Gleichung (6.12) für beliebige bra- und ket-Vektoren gilt, muss für die Operatoren selbst gelten

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_H}{\partial t} + \frac{1}{\imath\hbar} \left[\hat{F}_H, \hat{H}\right] \,. \tag{6.14}$$

Diese dynamische Gleichung im Heisenberg-Bild folgt auch aus der zeitlichen Ableitung von Gleichung (6.11).

6.3 Anmerkungen zum Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung eines quantenmechanischen Systems mit der Anfangsbedingung $|\psi(t_0) >$ haben wir also zwei Möglichkeiten:

(i) Schrödinger-Bild : Wir lösen die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (6.1) mit der Anfangsbedingung $|\psi_s(t_0)\rangle$ und berechnen dann mit der Lösung $|\psi_s(t)\rangle$ die Matrixelemente aller quantenmechanischer Operatoren durch $\langle \psi(t)|\hat{F}_s|\psi(t)\rangle$.

Die zeitliche Anderung eines Zustands wird dann durch die Veränderung des Zustands im gleichbleibenden Hilbert-Raum, der durch die Eigenvektoren zeitunabhängiger Operatoren aufgespannt wird, dargestellt.

(ii) Heisenberg-Bild : Der Zustand wird gleich gelassen (= $|\psi(t_0) >$), dagegen verändern sich mit der Zeit die Eigenvektoren (Basisvektoren), die den Hilbert-Raum aufspannnen. Die zeitliche Änderung der Operatoren berechnet sich aus (6.14).

Wir machen eine Reihe von Anmerkungen:

(1) Nach Konstruktion ist klar, dass bei der unitären Transformation $\hat{S} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$ die Matrixelemente erhalten bleiben:

$$\left\langle \psi_s \left| \hat{F}_s \right| \psi_s \right\rangle = \left\langle \psi_H \left| \hat{F}_H \right| \psi_H \right\rangle$$
 (6.15)

(2) Ist speziell $\hat{F}_s = \hat{H}$ so folgt aus der Transformation (6.11), dass der Hamilton-Operator im Heisenberg-Bild gleich dem Hamilton-Operator im Schrödinger-Bild ist und damit zeitunabhängig bleibt:

$$\hat{H}_{H}(t) \equiv e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} = \hat{H}\hat{S}^{+}(t,t_{0})\hat{S}(t,t_{0}) = \hat{H} , \qquad (6.16)$$

weil nach Gleichung (5.74) \hat{H} mit $e^{\pm i \hat{H}(t-t_0)/\hbar}$ kommutiert.

(3) Vetauschungsrelationen bleiben erhalten unter unitären Transformationen. Es ist z.B. $\hat{x}_s \hat{p}_s - \hat{p}_s \hat{x}_s = \hbar \imath$. Wir berechnen mit (6.11)

$$\hat{x}_{H}(t)\hat{p}_{H}(t) - \hat{p}_{H}(t)\hat{x}_{H}(t) = \left(\hat{S}^{+}\hat{x}_{s}\hat{S}\right)\left(\hat{S}^{+}\hat{p}_{s}\hat{S}\right) - \left(\hat{S}^{+}\hat{p}_{s}\hat{S}\right)\left(\hat{S}^{+}\hat{x}_{s}\hat{S}\right) \\
= \hat{S}^{+}\hat{x}_{s}\hat{p}_{s}\hat{S} - \hat{S}^{+}\hat{p}_{s}\hat{x}_{s}\hat{S} \\
= \hat{S}^{+}\left(\hat{x}_{s}\hat{p}_{s} - \hat{p}_{s}\hat{x}_{s}\right)\hat{S} = \hbar\imath.$$
(6.17)

(4) Speziell für die zeitunabhängigen Orts- und Impuls-Operatoren \hat{x}_s und \hat{p}_s gilt $\partial \hat{F}_s / \partial t = 0$. Für $\hat{F}_H = \hat{x}_H$ bzw. $\hat{F}_H = \hat{p}_H$ lautet die dynamische Gleichung (6.14) dann

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{1}{\imath\hbar} \left[\hat{x}_H , \hat{H} \right]$$
(6.18)

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{p}_H , \hat{H} \right] . \tag{6.19}$$

bzw.

Wir berechnen beide Gleichungen für den eindimensionalen Hamilton-Operator, für den gemäß (6.16) gilt

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

Es gilt für den Kommutator

$$\begin{bmatrix} \hat{x}_{H}, \hat{H} \end{bmatrix} = \hat{x}_{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}_{H}$$

$$= e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} \left(\hat{x}_{s}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}_{s} \right) e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar}$$

$$= e^{i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} \left[\hat{x}_{s}, \hat{H} \right] e^{-i\hat{H}(t-t_{0})/\hbar} .$$

Wegen $[\hat{x}_s, V(\hat{x}_s)] = 0$ und (siehe Kap. 2.5)

folgt

$$\begin{bmatrix} \hat{x}_s , \hat{H} \end{bmatrix} = \frac{1}{2m} \begin{bmatrix} \hat{x}_s , \hat{p}_s^2 \end{bmatrix} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_s$$
$$\begin{bmatrix} \hat{x}_H , \hat{H} \end{bmatrix} = \frac{i\hbar}{m} e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \hat{p}_s e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_H$$

Mit

$$\frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{p}_H} = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

erhalten wir dann für Gleichung (6.18)

$$\frac{d\hat{x}_{H}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_{H} = \frac{\hat{p}_{H}}{m} = \frac{\partial \hat{H}_{H}}{\partial \hat{p}_{H}}$$

$$\frac{d\hat{x}_{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}_{H}}{\partial \hat{p}_{H}}.$$
(6.20)

also

Ebenso berechnen wir

$$\begin{bmatrix} \hat{p}_H , \hat{H} \end{bmatrix} = \hat{S}^+ \begin{bmatrix} \hat{p}_s , \hat{H} \end{bmatrix} \hat{S} = \hat{S}^+ \begin{bmatrix} \hat{p}_s , V (\hat{x}_s) \end{bmatrix} \hat{S}$$
$$= \hat{S}^+ \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial}{\partial x} , V(x) \end{bmatrix} \hat{S} = \hat{S}^+ \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial V}{\partial x} \hat{S} = \frac{\hbar}{\imath} \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{x}_H}$$

und erhalten für Gleichung (6.19)

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{x}_H} = -\frac{\partial \hat{H}_H}{\partial \hat{x}_H} \,. \tag{6.21}$$

Die Bewegungsgleichungen (6.20) und (6.21) im Heisenberg-Bild sind formal identisch zu den kanonischen Gleichungen oder Hamiltonschen Gleichungen der klassischen Mechanik, wenn wir diese als Operatorgleichungen auffassen.

6.4 Wechselwirkungs-Bild

Häufig müssen wir wechselwirkende quantenmechanische Systeme untersuchen, bei denen man den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t)$$
 (6.22)

(6.25)

als Summe eines zeitunabhängigen Anteils \hat{H}_0 und eines zeitabhängigen Anteils \hat{W} darstellen kann, da die Wechselwirkung nur für einen gewissen Zeitraum wirkt. Die Schrödinger-Gleichung (6.1) lautet dann hier

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_s(t)\rangle}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(t)\right) |\psi_s(t)\rangle \quad . \tag{6.23}$$

Wir definieren das Wechselwirkungs-Bild (englisch interaction) durch die Transformationsgleichungen

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}|\psi_s(t)\rangle = \hat{S}^+(t,t_0)|\psi_s(t)\rangle$$
(6.24)

und

Durch Vergleich mit den Transformationen (6.10) und (6.11) erkennt man, dass Heisenberg-Bild und Wechselwirkungs-Bild im Fall $\hat{W}(t) = 0$ identisch sind. Aus der Transformationsgleichung (6.24) folgt

 $\hat{F}_{I}(t) \equiv e^{i\hat{H}_{0}(t-t_{0})/\hbar}\hat{F}_{s}e^{-i\hat{H}_{0}(t-t_{0})/\hbar} = \hat{S}^{+}(t,t_{0})\hat{F}_{s}\hat{S}(t,t_{0}) .$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} = i\hbar \left(\frac{i\hat{H}_0}{\hbar} |\psi_I(t)\rangle \right) + i\hbar e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \frac{\partial |\psi_s(t)\rangle}{\partial t} .$$

Nach Einsetzen der Schrödinger-Gleichung (6.23) erhalten wir

$$\begin{split} i\hbar \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} &= -\hat{H}_0 |\psi_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(t)\right) |\psi_s(t)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 |\psi_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(t)\right) e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} |\psi_I(t)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 |\psi_I(t)\rangle + \hat{H}_0 |\psi_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \hat{W}(t) e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} |\psi_I(t)\rangle \,, \end{split}$$

weil \hat{H}_0 mit $e^{\pm i \hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}$ vertauscht. Es folgt dann

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} = \hat{W}_I(t) |\psi_I(t)\rangle$$
(6.26)

mit dem transformierten Wechselwirkungsoperator

$$\hat{W}_{I}(t) \equiv e^{i\hat{H}_{0}(t-t_{0})/\hbar}\hat{W}(t)e^{-i\hat{H}_{0}(t-t_{0})/\hbar} = \hat{S}^{+}(t,t_{0})\,\hat{W}(t)\hat{S}(t,t_{0}) \ . \tag{6.27}$$

6.5 Heisenbergsche Operatormechanik

Aus der Transformationsgleichung (6.25) folgt

$$\frac{d\hat{F}_{I}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}\hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{S} + \hat{S}^{+}\frac{\partial\hat{F}_{s}}{\partial t}\hat{S} - \frac{i}{\hbar}\hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{H}_{0}\hat{S}$$

$$= \frac{\partial\hat{F}_{I}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{0}\hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{S} - \hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{H}_{0}\hat{S}\right]$$

$$= \frac{\partial\hat{F}_{I}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{0}\hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{S} - \hat{S}^{+}\hat{F}_{s}\hat{S}\hat{H}_{0}\right]$$

$$= \frac{\partial\hat{F}_{I}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_{0},\hat{F}_{I}\right],$$

wobei wir nochmal das Vertauschen von $[\hat{H}_0, S] = 0$ und Gleichung (6.25) benutzen. Wir erhalten also

$$\frac{d\hat{F}_I(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_I}{\partial t} + \frac{\imath}{\hbar} \left[\hat{H}_0, \hat{F}_I\right] .$$
(6.28)

Im Wechselwirkungs-Bild ändert sich beides mit der Zeit: sowohl die Zustandsvektoren $|\psi_I(t)\rangle$ mit der vereinfachten dynamischen Gleichung (6.26), in der nur noch der transformierte Wechselwirkungs-Operator \hat{W}_I auftaucht, und die Operatoren \hat{F}_I gemäß der dynamischen Gleichung (6.28), in die nur der zeitunabhängige Hamilton-Operator \hat{H}_0 eingeht.

6.5 Heisenbergsche Operatormechanik

Wir haben bereits festgestellt, dass die Bewegungsgleichungen (6.20) und (6.21) im Heisenberg-Bild formal identisch mit den klassischen kanonischen Gleichungen sind. Hier vermerken wir, dass die dynamischen Gleichungen (6.18) und (6.19) formal identisch mit den Poisson-Klammer-Beziehungen der klassischen Mechanik sind

$$\dot{x} = \{x, H\}, \quad \dot{p} = \{p, H\},$$
(6.29)

wenn wir die Ersetzung

Poisson-Klammer
$$\{A, B\} \iff$$
Kommutator $\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}, \hat{B} \right]$ (6.30)

durchführen. Diese Ersetzung im Heisenberg-Bild entspricht dem Korrespondenzprinzip der Wellenmechanik (vergl. Kap. 1.5.1).

Damit gelangen wir zur folgenden Vorschrift zur Quantisierung klassischer Systeme:

- Man schreibt die kanonischen Gleichungen mittels der Poisson-Klammer in der Form (6.29).
- 2. Man ersetzt die Poisson-Klammer durch den Kommutator gemäß Ersetzung (6.30).
- 3. Man benutzt die quantenmechanischen Operator-Gleichungen

6 Quantendynamik

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \imath \hbar \delta_{ij}, [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$
(6.31)

Weil Vertauschungsregeln gemäß Gleichung (6.17) unter unitären Transformationen erhalten bleiben, gelten die Gleichungen (6.31) nicht nur im Heisenberg-Bild, sondern immer. Die dynamische Gleichung (6.14)

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_H}{\partial t} + \frac{1}{\imath\hbar} \left[\hat{F}_H, \hat{H}\right] ,$$

und die Vertauschungsregeln (6.31) sind die grundlegenden Gleichungen der Heisenbergschen Matrizenmechanik.

6.5.1 Quantenmechanische Beschreibung physikalischer Systeme im Heisenberg-Bild

- 1. Wir wählen die zu untersuchenden Observablen A, B, \ldots aus und berechnen die Vertauschungsrelationen der korrespondierenden Operatoren $[\hat{A}, \hat{B}]$ (*Operatoralgebra*).
- 2. Zur Konstruktion des Hilbert-Raums der Zustände bestimmen wir den maximalen Satz vertauschbarer Operatoren \hat{A}, \hat{B}, \ldots Diese besitzen ein simultanes System von Eigenfunktionen $|a, b, c, \ldots \rangle$, das eine Basis des Zustandsraums aufspannt.
- 3. Das Spektrum der Eigenwerte *a*, *b*, ... der vertauschbaren Operatoren bestimmt sich aus der Lösung der Eigenwertgleichungen z.B.

$$\hat{A}|a, b, c, \ldots \rangle = a|a, b, c, \ldots \rangle$$
 (6.32)

4. Die berechneten Eigenwerte a, b, \ldots entsprechen den Messwerten der Observablen.

6.5.2 Beispiel: Linearer harmonischer Oszillator (V=I)

Die Hamilton-Funktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

führt auf den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

Für die Ortsoperator-Gleichung (6.18) erhalten wir damit (zur Vereinfachung der Schreibweise schreiben wir im folgenden kurz $x = \hat{x}, p = \hat{p}, H = \hat{H}$) unter Verwendung der Vertauschungsrelation (6.31)

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} [H, x] = \frac{i}{2m\hbar} [p^2, x] = \frac{i}{2m\hbar} (p [p, x] + [p, x] p) = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar p) = \frac{p}{m}.$$
(6.33)

Ebenso folgt

$$\dot{p} = \frac{i}{\hbar} [H, p] = \frac{ik}{2\hbar} [x^2, p] = \frac{ik}{2\hbar} (x [x, p] + [x, p] x) = \frac{ik}{2\hbar} (2i\hbar x) = -kx .$$
(6.34)

Als Vertauschungsrelationen erhalten wir also

$$[x,p] = i\hbar$$
, $[H,x] = -i\hbar\frac{p}{m}$, $[H,p] = i\hbar kx$

Kein Paar der Operatoren kommutiert, so dass der Hamilton-Operator selbst einen maximalen Satz von kommutierenden Operatoren darstellt. Die Basis des Zustandsraums sind die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators:

$$H|n\rangle = E|n\rangle \quad . \tag{6.35}$$

Aus Gleichung (6.33) $p = m\dot{x}$ folgt mit Gleichung (6.34) der Ausdruck

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} = -\frac{k}{m}x \;,$$

welcher formal identisch zu der klassischen Bewegungsgleichung des linearen harmonischen Oszillators ist, jetzt aber für Operatoren gilt.

Mit $k = m\omega^2$ schreibt sich der Hamilton-Operator als

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 x^2 . (6.36)$$

Gemäß Kap. 3.3.1 führen wir die Leiter-Operatoren

$$a_{+} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(p + im\omega x \right) , \qquad a_{-} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(p - im\omega x \right)$$

ein und erhalten

$$\begin{aligned} a_{-}a_{+}|n\rangle &= \frac{1}{2m} \left(\left(p - im\omega x \right) \left(p + im\omega x \right) \right) |n\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left(p^{2} + m^{2}\omega^{2}x^{2} + im\omega \left(px - xp \right) \right) |n\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left(p^{2} + m^{2}\omega^{2}x^{2} + im\omega \left(-i\hbar \right) \right) |n\rangle = \left(H + \frac{1}{2}\hbar\omega \right) |n\rangle . \end{aligned}$$

Mit der Energie-Eigenwertgleichung (6.35) erhalten wir

$$a_-a_+|n> = \left(E + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)|n>$$
.

Wie wir in Kap. 3.3.1 gezeigt haben, führt die Lösung dieser Gleichung auf die Quantelung der Energiewerte $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ mit n = 0, 1, 2, ... Wir haben somit eine tiefere Begründung der algebraischen Operator-Methode von Kap. 3.3.1 gegeben.

6.6 Allgemeine Unschärferelation

Seien A, B zwei beliebige Observable mit der Vertauschungsrelation $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$ und den Erwartungswerten $\langle A \rangle$ und $\langle B \rangle$ im Zustand $|\psi \rangle$. Wir beweisen, dass sich die Unschärferelation direkt aus der Vertauschungsrelation ergibt.

6.6.1 Schwartzsche Ungleichung für das Skalarprodukt

f, g, h seien Vektoren im Hilbert-Raum. Sie sind orthogonal zueinander falls $\langle f|g \rangle = 0$ und die Länge eines Vektors ist $||f|| = \sqrt{\langle f|f \rangle}$. Es gilt die *Schwartzsche Ungleichung*:

$$| < f|g > | \le \sqrt{\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle} = ||f|| ||g|| .$$
(6.37)

Beweis: Wir definieren den Vektor

$$h \equiv f - g \frac{\langle g|f \rangle}{\langle g|g \rangle} ,$$

der orthogonal zu g ist, denn

$$\langle g|h \rangle = \langle g|f \rangle - \langle g|g \rangle \frac{\langle g|f \rangle}{\langle g|g \rangle} = 0$$
. (6.38)

Aus

$$f=h+g\frac{< g|f>}{< g|g>}$$

folgt dann mit (6.38)

$$\begin{aligned} < f|f > &= < h + g \frac{< g|f >}{< g|g >} |h + g \frac{< g|f >}{< g|g >} > \\ &= < h|h > + < g|h > \frac{< g|f >^+}{< g|g >} + < h|g > \frac{< g|f >}{< g|g >} + \frac{| < g|f >|^2}{< g|g >} \\ &= < h|h > + \frac{| < g|f >|^2}{< g|g >} \geq \frac{| < g|f >|^2}{< g|g >} , \end{aligned}$$

weil $< h|h > \ge 0$. Wir erhalten

$$\begin{split} | < g |f > |^2 \ = \ | < f |g > |^2 \ \le \ < f |f > < g |g > \\ | < f |g > | \ \le \ \| f \| \| g \| \end{split}$$

oder

Q. E. D.

6.6.2 Ableitung der allgemeinen Unschärferelation

Wir bilden die Unschärfen

$$\Delta A = \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right)^{1/2} , \qquad \Delta B = \left(\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \right)^{1/2}$$

und führen die Größen

$$\tilde{A} = A - < A > , \qquad \quad \tilde{B} = B - < B >$$

 $\min{<\tilde{A}>=<\tilde{B}>=0}$ ein. Wir erhalten für den Kommutator

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}, \tilde{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A, B - \langle B \rangle \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \langle A \rangle, B - \langle B \rangle \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} A, B \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A, \langle B \rangle \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \langle A \rangle, B \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \langle A \rangle, \langle B \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A, B \end{bmatrix} = i\hbar$$

und es ist

$$\Delta \tilde{A} = \left(< \tilde{A}^2 > - < \tilde{A} >^2 \right)^{1/2} = \left(< \tilde{A}^2 > \right)^{1/2}$$
$$= \left(< A^2 > - < A >^2 \right)^{1/2} = \Delta A$$
$$\Delta \tilde{B} = \Delta B .$$

und

Wir wenden die Schwartzsche Ungleichung (6.37) auf $|f\rangle = \tilde{A}|\psi\rangle$ und $|g\rangle = \tilde{B}|\psi\rangle$ an und erhalten

$$\left| \left\langle \psi \right| \tilde{A} \tilde{B} \left| \psi \right\rangle \right|^2 \le \left\langle \psi \left| \tilde{A}^2 \right| \psi \right\rangle \left\langle \psi \left| \tilde{B}^2 \right| \psi \right\rangle = \left(\Delta \tilde{A} \right)^2 \left(\Delta \tilde{B} \right)^2 = \left(\Delta A \right)^2 \left(\Delta B \right)^2 .$$
(6.39)

Wir zerlegen das Operatorprodukt AB in hermiteschen und antihermiteschen Anteil:

$$\tilde{A}\tilde{B} = \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} + \frac{\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}}{2} = \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} + \frac{[A, B]}{2},$$

wobei der erste Term hermitesch ist und der zweite antihermitesch. Mit der Vertauschungsrelation $[A, B] = i\hbar$ folgt

$$\tilde{A}\tilde{B} = \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} + \frac{\imath\hbar}{2}$$

und für den Erwartungswert

$$\left\langle \psi \left| \tilde{A}\tilde{B} \right| \psi \right\rangle = \left\langle \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} \right\rangle + \frac{\imath\hbar}{2} .$$

Für das Betragsquadrat des Erwartungswerts folgt wegen der Hermitezität von $rac{ ilde{A} ilde{B}+ ilde{B} ilde{A}}{2}$

$$\begin{aligned} \left| \langle \psi | \, \tilde{A} \tilde{B} \, | \psi \rangle \right|^2 &= \left(\left\langle \frac{\tilde{A} \tilde{B} + \tilde{B} \tilde{A}}{2} \right\rangle + \frac{i\hbar}{2} \right) \left(\left\langle \frac{\tilde{A} \tilde{B} + \tilde{B} \tilde{A}}{2} \right\rangle^* - \frac{i\hbar}{2} \right) \\ &= \left| \left\langle \frac{\tilde{A} \tilde{B} + \tilde{B} \tilde{A}}{2} \right\rangle \right|^2 + \frac{\hbar^2}{4} \,. \end{aligned}$$

Damit lautet die Ungleichung (6.39)

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \ge \frac{\hbar^2}{4} + \left| \left\langle \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} \right\rangle \right|^2 \ge \frac{\hbar^2}{4}$$

6 Quantendynamik

und es folgt die Unschärferelation

$$(\Delta A) (\Delta B) \ge \frac{\hbar}{2}$$

Als Nachtrag vermerken wir, dass ein Operator M antihermitesch ist, falls

$$< f|M|g> = < g|M^+|f>^* = - < g|M|f>^*$$

also $M^+ = -M$ ist.

6.6.3 Beispiele

- 1. Mit A = x und B = p folgt aus der allgemeinen Unschärferelation (6.6.2) direkt die Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und Impuls.
- 2. Im Vorgriff auf Kap. 7.1 sei $A = \phi$ der Azimuthwinkel in Kugelkoordinaten und $B = L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ die z-Komponente des Bahndrehimpulses. Der nichtverschwindende Kommutator

$$[\phi, L_z] = \imath \hbar$$

zeigt die Unschärfe bei der gleichzeitigen Messung von Azimuthwinkelstellung und z-Komponente des Bahndrehimpulses.

3. Sei B = H gleich dem Hamilton-Operator. Für die Energieunschärfe ΔE folgt aus der Ungleichung (6.39) mit jedem anderen Operator A

$$(\Delta A) (\Delta E) \ge |\langle \psi | AH | \psi \rangle| \ge \frac{1}{2} \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle = \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle| .$$
(6.40)

Nach dem Ehrenfestschen Satz (Kap. 2.5) und der dynamischen Gleichung (6.14) im Heisenberg-Bild gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{\imath}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H} , \hat{A} \right] \right\rangle ,\\ \left\langle \left[\hat{H} , \hat{A} \right] \right\rangle &= -\hbar \imath \frac{d}{dt} \langle A \rangle \\ \left| \left\langle \left[\hat{H} , \hat{A} \right] \right\rangle \right| &= \hbar \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| . \end{aligned}$$

oder

so dass

Für die Ungleichung (6.40) folgt dann

$$(\Delta A) (\Delta E) \ge \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| .$$

Definieren wir

$$\tau_A \equiv \frac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt} < A >\right|}$$

als Zeitintervall, innerhalb dem sich < A > um den Wert ΔA ändert, erhalten wir

$$\tau_A \cdot (\Delta E) \ge \frac{\hbar}{2} . \tag{6.41}$$

Für stationäre Zustände gilt (d/dt) < A >= 0, also $\tau_A = \infty$ und $\Delta E = 0$ (scharfe Energiezustände).

Für zeitlich veränderliche Zustände muss Energieunschärfe vorliegen. So geht z.B. ein angeregter Zustand durch Aussendung elektromagnetischer Strahlung in einen tieferliegenden Energiezustand über. Die charakteristische Zeit dafür ist die Lebensdauer τ ; die Ungleichung (6.41) impliziert dann eine Energieunschärfe des zerfallenden Niveaus von $\Delta E \simeq \hbar/2\tau$ und die Linienstrahlung ist entsprechend verbreitert.

6 Quantendynamik
7.1 Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten

Die zeitabhängige drei-dimensionale Schrödinger-Gleichung (2.7b) in Ortsdarstellung für das Potential V(x, y, z) ist

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(x,y,z)\Psi.$$
(7.1)

Da das Potential zeitunabhängig ist, lautet die allgemeine Lösung gemäß Gleichung (2.107)

$$\Psi\left(\vec{r},t\right) = \oint c_n \psi_n\left(\vec{r}\right) e^{-\imath E_n t/\hbar} , \qquad (7.2)$$

wobei die ortsabhängigen Funktionen $\psi_n(\vec{r})$ die Eigenwertgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_n + V(x,y,z)\psi_n = E_n\psi_n \tag{7.3}$$

erfüllen.

Oftmals ist das Potential nur eine Funktion des Abstands vom Ursprung $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, d.h. $V(\vec{r}) = V(r)$. In diesem Fall gehen wir auf Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ) über mit

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$
, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$. (7.4)

Wir zeigen zunächst, dass der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten (siehe Mechanik-Skript Gleichung 1.11.6.7)

$$\Delta = \vec{\nabla}^2 = \operatorname{div}\left(\operatorname{grad}\right)$$
$$= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \qquad (7.5)$$

sich schreiben lässt als

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2 \hbar^2} , \qquad (7.6)$$

$$\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$
(7.7)

wobei

die Ortsdarstellung des Bahndrehimpulsoperatorquadrats in Kugelkoordinaten ist. *Beweis*: Der Bahndrehimpulsoperator in Ortsdarstellung ist

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{\imath} \left(\vec{r} \times \vec{\nabla} \right) .$$
(7.8)

Mit $\vec{r} = r\vec{e_r}$ und dem Gradienten in Kugelkoordinaten (siehe Mechanik-Skript Gleichung 1.11.6.4)

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\vec{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\vec{e}_\phi$$

folgt für das Kreuzprodukt

$$\vec{r} \times \vec{\nabla} = \begin{vmatrix} \vec{e}_r & \vec{e}_\theta & \vec{e}_\phi \\ r & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} .$$

Mit den Einheitsvektoren (Mechanik-Skript Gleichung 1.11.6.3)

$$\vec{e}_r = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) , \vec{e}_\theta = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta) , \vec{e}_\phi = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$$

folgt für den Bahndrehimpulsoperator (7.8)

$$\hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{\imath} \left[\begin{pmatrix} -\sin\phi\\\cos\phi\\0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\theta} - \begin{pmatrix} \cot\theta\cos\phi\\\cot\theta\sin\phi\\-1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\phi} \right]$$
(7.9)

oder komponentenweise

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\imath} \left[-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right] , \qquad (7.10)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{\imath} \left[\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right] , \qquad (7.11)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} . \tag{7.12}$$

Nützlich auch für später sind

$$\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin\phi \pm i\cos\phi) \frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\phi \pm i\sin\phi)\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right]$$

Mit

$$\begin{aligned} \cos \phi \pm i \sin \phi &= e^{\pm i\phi} \\
\text{folgt} \qquad \hat{L}_{\pm} &= \frac{\hbar}{i} \left[\pm i \left(\cos \phi \pm i \sin \phi \right) \frac{\partial}{\partial \theta} - \left(\cos \phi \pm i \sin \phi \right) \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\
&= \frac{\hbar}{i} \left[\pm i e^{\pm i\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} + i^2 e^{\pm i\phi} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\
&= \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right].
\end{aligned}$$
(7.13)

Aus Gleichung (7.13) erhalten wir

$$\hat{L}_{+}\hat{L}_{-}f = \hbar e^{i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right] \left(-\hbar e^{-i\phi} \right) \left[\frac{\partial f}{\partial\theta} - i\cot\theta \frac{\partial f}{\partial\phi} \right] \\
= \hbar^{2}e^{i\phi} \left[-e^{-i\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} - i\cot\theta \frac{\partial f}{\partial\phi} \right) \right. \\
\left. -i\cot\theta \left(-ie^{-i\phi} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial\theta} - i\cot\theta \frac{\partial f}{\partial\phi} \right) \right] \\
= \hbar^{2} \left[-\frac{\partial^{2}f}{\partial\theta^{2}} + i \left(\frac{\partial\cot\theta}{\partial\theta} \right) \frac{\partial f}{\partial\phi} + i\cot\theta \frac{\partial^{2}f}{\partial\theta\partial\phi} - \cot\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} \right. \\
\left. +i\cot^{2}\theta \frac{\partial f}{\partial\phi} - i\cot\theta \frac{\partial^{2}f}{\partialf\partial\phi} - \cot^{2}\theta \frac{\partial^{2}f}{\partial\phi^{2}} \right] \\
= \hbar^{2} \left[-\frac{\partial^{2}f}{\partial\theta^{2}} + i \frac{\partial f}{\partial\phi} \left(\cot^{2}\theta - \frac{1}{\sin^{2}\theta} \right) - \cot\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} - \cot^{2}\theta \frac{\partial^{2}f}{\partial\phi^{2}} \right] \\
= \hbar^{2} \left[-\frac{\partial^{2}f}{\partial\theta^{2}} - i\frac{\partial f}{\partial\phi} - \cot\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} - \cot^{2}\theta \frac{\partial^{2}f}{\partial\phi^{2}} \right] , \qquad (7.14)$$

also

Unter Ausnutzung der Kommutatorbeziehung (2.55) erhalten wir für

$$\hat{L}_{+}\hat{L}_{-} = \left(\hat{L}_{x} + i\hat{L}_{y}\right)\left(\hat{L}_{x} - i\hat{L}_{y}\right) \\
= \hat{L}_{x}^{2} + \hat{L}_{y}^{2} + i\left(\hat{L}_{y}\hat{L}_{x} - \hat{L}_{x}\hat{L}_{y}\right) \\
= \hat{L}^{2} - \hat{L}_{z}^{2} + i\left[\hat{L}_{y}, \hat{L}_{x}\right] \\
= \hat{L}^{2} - \hat{L}_{z}^{2} - i\left[\hat{L}_{x}, \hat{L}_{y}\right] = \hat{L}^{2} - \hat{L}_{z}^{2} + \hbar\hat{L}_{z}$$
(7.15)

und ebenso für

$$\hat{L}_{-}\hat{L}_{+} = \left(\hat{L}_{x} - i\hat{L}_{y}\right)\left(\hat{L}_{x} + i\hat{L}_{y}\right) = \hat{L}_{x}^{2} + \hat{L}_{y}^{2} + i\left(\hat{L}_{x}\hat{L}_{y} - \hat{L}_{y}\hat{L}_{x}\right)
= \hat{L}^{2} - \hat{L}_{z}^{2} + i\left[\hat{L}_{x}, \hat{L}_{y}\right] = \hat{L}^{2} - \hat{L}_{z}^{2} - \hbar\hat{L}_{z}.$$
(7.16)

Aus Gleichung (7.15) folgt nach Einsetzen der Ergebnisse (7.12) und (7.14)

$$\begin{split} \hat{L}^2 &= \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \\ &= \hbar^2 \left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - i \frac{\partial}{\partial \phi} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ &= \hbar^2 \left[-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \left(1 + \cot^2 \theta\right) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \\ &= \hbar^2 \left[-\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \,. \end{split}$$

Nach Division durch $\hbar^2 r^2$ ergibt sich die Behauptung. Q.E.D.

7.2 Drehimpuls-Operator

Wir bezeichnen jeden Vektoroperator $\hat{\vec{J}}=(\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z)$, dessen Komponenten die Vertauschungsregeln

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = \imath \hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \tag{7.17}$$

erfüllen und hermitesch sind, als Drehimpuls-Operator oder kurz als Drehimpuls.

Der Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ ist ein Beispiel eines Drehimpuls-Operators, der darüber hinaus ein klassisches Analogon besitzt. Der Spin ist ein anderer Drehimpuls-Operator ohne klassisch korrespondierende Größe.

Komponentenweise geschrieben lautet Gleichung (7.17)

$$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = \imath \hbar \hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{J}_z\right] = \imath \hbar \hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = \imath \hbar \hat{J}_y \tag{7.18}$$

und impliziert nach der allgemeinen Unschärferelation (6.39), dass mehrere Drehimpulskomponenten nicht gleichzeitig scharf messbar sind. Wir definieren

$$\hat{J}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

$$\hat{J}_+ \equiv \hat{J}_x + i\hat{J}_y,$$
(7.19)

und

$$\hat{J}_{-} \equiv \hat{J}_{x} - i \hat{J}_{y} . \tag{7.20}$$

Es folgt sofort $(\hat{J}_+)^* = \hat{J}_-$ und $(\hat{J}_-)^* = \hat{J}_+$.

Wir beweisen, dass das Quadrat des Drehimpulses \hat{J}^2 mit jeder Komponente \hat{J}_i kommutiert, d.h.

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J}_i\right] = 0 \qquad \forall i . \tag{7.21}$$

Beweis: Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir $\hat{J}_i = \hat{J}_x$ und schreiben kurz $J_x = \hat{J}_x$. Dann ist mit den Rechenregeln von Kap. 2.4.1 und den Kommutatoren (7.18)

$$\begin{bmatrix} J^2, J_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_x^2, J_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} J_y^2, J_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} J_z^2, J_x \end{bmatrix}$$

= $J_x [J_x, J_x] + [J_x, J_x] J_x + J_y [J_y, J_x] + [J_y, J_x] J_y + J_z [J_z, J_x] + [J_z, J_x] J_z$
= $-i\hbar (J_y J_z + J_z J_y) + i\hbar (J_z J_y + J_y J_z) = 0.$

Q.E.D.

 \hat{J}^2 und jeweils eine Komponente von \hat{J} bilden also ein System von gleichzeitig scharf messbaren Observablen, also \hat{J}^2 und zum Beispiel \hat{J}_z :

$$\hat{J}^2 f = \lambda f$$
 und $\hat{J}_z f = \mu f$. (7.22)

Die möglichen Werte der Eigenwerte λ und μ bestimmen wir nun mit der *Leiter-Operator-Technik* ähnlich wie beim linearen harmonischen Oszillator (vergl. Kap. 3.3.1 und 6.5.2).

7.2.1 Bestimmung der Eigenwerte

Aus den Gleichungen (7.20) folgt mit den Kommutatoren (7.18)

$$\begin{bmatrix} J_z, J_{\pm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_z, J_x \pm i J_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J_z, J_x \end{bmatrix} \pm i \begin{bmatrix} J_z, J_y \end{bmatrix}$$
$$= i\hbar J_y \pm i (-i\hbar J_x) = \pm\hbar (J_x \pm i J_y) = \pm\hbar J_{\pm}$$
(7.23)

und natürlich

$$[J^2, J_{\pm}] = 0. (7.24)$$

Behauptung: Ist f wie in (7.22) eine Eigenfunktion von J^2 und J_z , so ist auch $(J_{\pm}f)$ eine Eigenfunktion.

Beweis: Mit den Gleichungen (7.24) und (7.22) erhalten wir

$$J^{2}(J_{\pm}f) = J_{\pm}(J^{2}f) = J_{\pm}(\lambda f) = \lambda (J_{\pm}f) ,$$

d.h. $(J_{\pm}f)$ ist eine Eigenfunktion von J^2 mit demselben Eigenwert λ . Ebenso folgt mit den Gleichungen (7.22) und (7.23)

$$J_{z} (J_{\pm}f) = (J_{z}J_{\pm} - J_{\pm}J_{z}) f + J_{\pm} (J_{z}f) = [J_{z}, J_{\pm}] f + J_{\pm}(\mu f)$$

= $\pm \hbar J_{\pm}f + \mu J_{\pm}f = (\mu \pm \hbar) (J_{\pm}f) ,$

d.h. $(J_{\pm}f)$ ist eine Eigenfunktion von J_z mit dem *neuen* Eigenwert $(\mu \pm \hbar)$. Q.E.D.

Offensichtlich ist J_+ ein Aufsteige-Operator und J_- ein Absteige-Operator. Wie in Abb. 7.1 veranschaulicht, erhalten wir für einen gebenen Wert von λ_{μ} eine "Leiter" von Zuständen, wobei jede Sprosse um eine Einheit von \hbar von der Nachbarsprosse im Eigenwert von J_z verschieden ist. Durch Anwendung von J_+ "laufen" wir die Leiter herauf; durch Anwendung von J_- "laufen" wir Leiter herunter. Allerdings kann dieser Aufsteige-Prozess nicht für immer ablaufen: irgendwann würden wir einen Zustand erreichen, für den dann die z-Komponente des Drehimpulses größer als der Gesamtdrehimpuls wäre, was nicht möglich ist. Es muss also



Abbildung 7.1: Zur Wirkung der Drehimpuls-Leiter-Operatoren

eine oberste Sprosse f_t geben mit $J_+f_t=0$. Es sei $\hbar j$ der Eigenwert von J_z dieser obersten Stufe, also

$$J_z f_t = \hbar j f_t, \qquad J^2 f_t = \lambda f_t . \tag{7.25}$$

Nun ist nach Gleichungen (7.15)-(7.16)

$$J_{\pm}J_{\mp} = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$$
$$J^2 = J_{\pm}J_{\mp} + J_z^2 \mp \hbar J_z$$

oder

so dass mit Gleichungen (7.25)

$$J^{2}f_{t} = (J_{-}J_{+} + J_{z}^{2} + \hbar J_{z}) f_{t} = (0 + \hbar j J_{z} f_{t} + \hbar^{2} j f_{t})$$

= $(\hbar^{2} j^{2} + \hbar^{2} j) f_{t} = \hbar^{2} j (j + 1) f_{t} .$ (7.26)

Wir erhalten also den Eigenwert λ von J^2 als Funktion des maximalen Eigenwerts von J_z :

$$\lambda = \hbar^2 j(j+1) . \tag{7.27}$$

Ebenso gibt es eine unterste Sprosse f_b mit $J_-f_b = 0$. $\hbar \bar{j}$ bezeichne den Eigenwert von J_z dieser untersten Stufe:

$$J_z f_b = \hbar \bar{j} f_b, \qquad J^2 f_b = \lambda f_b . \tag{7.28}$$

Mit

$$J^{2}f_{b} = \left(J_{+}J_{-} + J_{z}^{2} - \hbar J_{z}\right)f_{b} = \left(0 + \hbar^{2}\bar{j}^{2} - \hbar^{2}\bar{j}\right)f_{b} = \hbar^{2}\bar{j}\left(\bar{j} - 1\right)f_{b}$$

erhalten wir ebenso

$$\lambda = \hbar^2 \overline{j} \left(\overline{j} - 1 \right) \ . \tag{7.29}$$

Das Gleichsetzen von (7.27) und (7.29) ergibt

$$j(j+1) = \overline{j}(\overline{j}-1)$$
, (7.30)

so dass entweder $\overline{j} = j + 1$ ist (Unsinn, denn dann hätte die unterste Stufe einen höheren Eigenwert von J_z als die oberste Stufe), oder

$$\bar{j} = -j . \tag{7.31}$$

Es folgt, dass J_z die Eigenwerte $m\hbar$ hat, wobei

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \tag{7.32}$$

in N ganzen Schritten läuft. Insbesondere ist j = -j + N, so dass j = N/2 ganzzahlig oder halbzahlig ist.

Die Eigenfunktionen sind dann nach (7.22) durch die Drehimpulsquantenzahlen j und m festgelegt gemäß den Eigenwertgleichungen

$$\hat{J}^2 f_j^m = \hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$
(7.33)

und

$$\hat{J}_{z}f_{j}^{m} = \hat{J}_{z}|j, m > = \hbar m|j, m > ,$$
(7.34)

wobei $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ und $m = -j, -j + 1, \ldots, j$. Für gegebenen Wert von j gibt es 2j + 1 verschiedene Werte von m.

Die Eigengleichungen (7.33)–(7.34) mit den entsprechenden Eigenwerten haben wir allein aus der Vertauschungsregel von Drehimpuls-Operatoren abgeleitet ohne die Eigenfunktionen explizit zu berechnen.

7.2.2 Weiterer Beweis der Eigenwerteigenschaften

Aus den Eigenwertgleichungen (7.33)-(7.34) und

$$J_{+}J_{-} = J^{2} - J_{z} (J_{z} - \hbar) ,$$

$$J_{-}J_{+} = J^{2} - J_{z} (J_{z} + \hbar)$$

erhalten wir Hilfsformel 1

$$J_{-}J_{+}|j, m > = J^{2}|j, m > -J_{z} (J_{z} + \hbar) |j, m >$$

= $\hbar^{2} (j(j+1) - m(m+1)) |j, m >$
= $(j-m)(j+m+1)\hbar^{2}|j, m >$ (7.35)

und Hilfsformel 2

$$J_{+}J_{-}|j, m > = J^{2}|j, m > -J_{z} (J_{z} - \hbar)|j, m >$$

= $\hbar^{2} (j(j+1) - m(m-1))|j, m >$
= $(j+m)(j-m+1)\hbar^{2}|j, m >$. (7.36)

Durch Multiplikation von (7.36) mit $\langle j, m |$ und Ausnutzung von $(J_{-})^{*} = J_{+}$ berechnen wir die Norm

$$\langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle = \langle j, m | (J_-)^* J_- | j m \rangle$$

= $||J_-|j, m > ||^2 = \begin{cases} \ge 0 \\ \hbar^2 (j+m)(j-m+1) \end{cases}$,

so dass folgt

$$\begin{cases} m \ge -j \\ m \le j+1 \end{cases}$$
 (7.37)

Ebenso verfahren wir mit (7.35):

$$\langle j, m | J_{-}J_{+} | j, m \rangle = \langle j, m | (J_{+})^{*} J_{+} | j, m \rangle$$

= $\| J_{+} | j, m > \|^{2} = \begin{cases} \geq 0 \\ \hbar^{2} (j-m)(j+m+1) \end{cases} ,$

so dass folgt

$$\begin{cases} m \le j \\ m \ge -(j+1) \end{cases} .$$
(7.38)

Die beiden Egebnisse (7.37)-(7.38) ergeben

$$-j \le m \le j . \tag{7.39}$$

Weiterhin folgt $J_+|j, m \ge 0$ genau wenn j = m (oberste Sprosse) und $J_-|j, m \ge 0$ genau wenn j = -m (unterste Sprosse).

Wir wissen bereits, dass für den Aufsteige-Operator gilt $J_+|j, m > \propto |j, (m+1) >$ und für den Absteige-Operator $J_-|j, m > \propto |j, (m-1) >$. Das wiederholte Anwenden von J_+ erzeugt ..., |j, (j-2) >, |j, (j-1) >, |j, j > bis zum Abbrechen bei j = l.

Das wiederholte Anwenden von J_{-} auf den Zustand $|j, m\rangle$ erzeugt $|j, (m-p)\rangle$ bis zum Abbrechen bei -l. Für m+p=2l, wobei m+p eine ganze Zahl ist, ergeben sich die möglichen Werte von j und m dann zu $j=0,1/2,1,3/2,\ldots$ und $m=-j,-j+1,\ldots,j-1,j$.

7.2.3 Eigenfunktionen des Drehimpuls-Operators in Ortsdarstellung

Wir gehen aus von den darstellungsfreien Eigenwertgleichungen (7.33) und (7.34)

$$\hat{J}^2|l,m> = \hbar^2 l(l+1)|l,m> \ \hat{J}_z|l,m> = \hbar m|l,m> \ .$$

und

Wir erreichen den Übergang in die Ortsdarstellung durch skalare Multiplikation dieser Eigenwertgleichungen mit dem bra-Ortseigenzustand $\langle \vec{r} |$ mit dem Ergebnis

$$\begin{split} \left< \vec{r} \left| \hat{J}^2 \right| l, m \right> &= \hbar^2 l(l+1) \left< \vec{r} |l, m \right> , \\ \left< \vec{r} \left| \hat{J}_z \right| l, m \right> &= \hbar m \left< \vec{r} |l, m \right> . \end{split}$$

Für die Eigenfunktionen in Ortsdarstellung

$$\psi_{lm}\left(\vec{r}\right) \equiv \langle \vec{r}|l,m\rangle \tag{7.40}$$

$$\hat{t}^{2}_{all}\left(\vec{x}\right) = \hbar^{2}\left(\vec{x}\times\vec{\nabla}\right)^{2}_{all}\left(\vec{x}+1\right)_{all}\tag{7.41}$$

folgt

$$\hat{J}^{2}\psi_{lm}\left(\vec{r}\right) = -\hbar^{2}\left(\vec{r}\times\vec{\nabla}\right)^{-}\psi_{lm} = \hbar^{2}l(l+1)\psi_{lm}$$

$$\hat{J}_{z}\psi_{lm}\left(\vec{r}\right) = \frac{\hbar}{-}\left(\vec{r}\times\vec{\nabla}\right) \quad \psi_{lm} = \hbar m\psi_{lm} .$$

$$(7.41)$$

$$\hat{J}_{z}\psi_{lm}\left(\vec{r}\right) = \frac{\hbar}{\imath}\left(\vec{r}\times\vec{\nabla}\right)_{z}\psi_{lm} = \hbar m\psi_{lm} .$$
(7.42)

Mit den Ortsdarstellungen (7.7) und (7.12) erhalten wir $(\hat{J} = \hat{L})$

$$-\frac{1}{\sin^2\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi_{lm}}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial^2\psi_{lm}}{\partial\phi^2} \right] = l(l+1)\psi_{lm} (7.43) - i\frac{\partial\psi_{lm}}{\partial\phi} = m\psi .$$
(7.44)

und

In beiden Gleichungen ist keine r-Abhängigkeit enthalten. Die Lösung der Eigenwertgleichung (7.44) ist

$$\psi_{lm} = e^{im\phi} . \tag{7.45}$$

Wegen der Eindeutigkeit der Wellenfunktion muss

$$\psi_{lm}\left(\phi+2\pi\right) = e^{im\phi+2\pi im} = \psi_{lm}\left(\phi\right) = e^{im\phi}$$

sein, also $e^{2\pi i m} = 1$, d.h. $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ muss eine ganze Zahl sein. Wegen m = $-l, -l+1, \ldots, l$ folgt dann, dass auch $l = 0, 1, 2, \cdots$ eine ganze Zahl sein muss. Dieses Ergebnis der Ganzzahligkeit der Drehimpulsquantenzahlen l und m für den Bahndrehimpuls steht im Gegensatz zum algebraischen Ergebnis für allgemeine Drehimpulse (wie Spin), so dass j und damit m halbzahlig sein können. Wir vermerken, dass das Quadrat $|\psi_{lm}|^2$ der Wellenfunktion unabhängig von m ist.

Zur Lösung der Eigenwertgleichung (7.43) versuchen wir den Separationsansatz

$$\psi_{lm}\left(\theta,\phi\right) = Y\left(\theta\right)Z\left(\phi\right)$$

und erhalten damit

$$\frac{1}{Y(\theta)} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta Y \right] = -\frac{1}{Z(\phi)} \frac{\partial^2 Z}{\partial \phi^2} = m^2 , \qquad (7.46)$$

wobei wir die Separationskonstante in weiser Voraussicht als m^2 schreiben. Für den ϕ -Anteil der Gleichung erhalten wir dann

$$\frac{d^2Z}{d\phi^2} + m^2Z = 0$$

mit den Lösungen $Z(\phi) = e^{im\phi}$ mit $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ als ganze Zahl in Übereinstimmung mit Lösung (7.45). Die Operatoren \hat{L}_z und \hat{L}^2 besitzen also gemeinsame Eigenfunktionen. Für den θ -Anteil von Gleichung (7.46) verbleibt dann

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left[\sin\theta \frac{dY}{d\theta} \right] + \left[l(l+1)\sin^2\theta - m^2 \right] Y = 0.$$
 (7.47)

Wir substituieren $t = \cos \theta$, so dass mit $\theta = \arccos t$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \frac{d \arccos t}{dt} = -\frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \\ \frac{d}{d\theta} &= \frac{1}{\frac{d\theta}{dt}} \frac{d}{dt} = -\sqrt{1-t^2} \frac{d}{dt} \\ \sin \theta \frac{d}{d\theta} &= -\left(1-t^2\right) \frac{d}{dt} \;. \end{aligned}$$

und

und damit

Wir erhalten dann für Gleichung (7.47)

$$(t^{2}-1)\frac{d}{dt}\left[(t^{2}-1)\frac{dY}{dt}\right] + \left[l(l+1)\left(1-t^{2}\right)-m^{2}\right]Y = 0$$
$$\frac{d}{dt}\left[\left(1-t^{2}\right)\frac{dY}{dt}\right] + \left[l(l+1)-\frac{m^{2}}{1-t^{2}}\right]Y = 0.$$
(7.48)

oder

Diese DGL ist uns aus der Elektrodynamik gut bekannt: es handelt sich um die DGL für die verallgemeinerten Legendre-Funktionen $P_l^m(t)$ (siehe Elektrodynamik-Skript Kap. 3.12.5). Diese berechnen sich aus den Legendre-Polynomen gemäß

$$P_l^m(t) = \left(1 - t^2\right)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dt}\right)^{|m|} P_l(t) .$$
(7.49)

Die gemeinsamen Eigenfunktionen der Operatoren \hat{L}_z und \hat{L}^2 sind damit gegeben durch

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = N_{lm}P_l^m(\cos\theta)\,e^{im\phi} \tag{7.50}$$

und werden als Kugelflächenfunktionen bezeichnet. N_{lm} bezeichnet den Normierungsfaktor.

7.3 Legendre-Polynome

Wir definieren die Legendre-Polynome $P_l(\mu)$ über deren erzeugende Funktion

$$T(\mu, s) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2s\mu + s^2}} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^l , \qquad (7.51)$$

d.h. die Legendre-Polynome werden als Entwicklungskoeffizienten der Potenzreihenentwicklung von $T(\mu, s)$ definiert.



Abbildung 7.2: Elektrostatisches Potential einer Punktladung

Die erzeugende Funktion tritt in der Elektrostatik auf bei der Berechnung des Potentials $V(\vec{r})$ am Ort \vec{r} , das durch eine elektrischen Ladung q im Abstand \vec{t} vom Ursprung erzeugt wird (siehe Abb. 7.2):

$$V\left(\vec{r}\right) = \frac{q}{\left|\vec{r} - \vec{t}\right|} \; .$$

Mit dem Kosinussatz ($\mu = \cos \theta$)

$$\left|\vec{r} - \vec{t}\right|^2 = r^2 + t^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{t} = r^2 + t^2 - 2rt\cos\theta = r^2 + t^2 - 2rt\mu$$

folgt mit t = rs

$$V(\vec{r}) = \frac{q}{\sqrt{r^2 + t^2 - 2rt\mu}} = \frac{q}{r\sqrt{1 - 2\mu s + s^2}} = \frac{q}{r} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^l$$

die Multipolentwicklung in Potenzen von s=t/r. Die Legendre-Polynome $P_l(x)=G_l^0(x)$ sind ein Spezialfall der Gegenbauer-Polynome

$$\frac{2^m}{(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} = \frac{\pi^{1/2}}{(m-\frac{1}{2})!} \sum_{l=0}^{\infty} G_l^m(x) t^l .$$
(7.52)

7.3.1 Eigenschaften der Legendre-Polynome

Rekursionsbeziehungen: Wir bilden mit Gleichung (7.51) die partielle Ableitung bezüglich s:

$$\frac{\partial T}{\partial s} = \sum_{l=0}^{\infty} l P_l(\mu) s^{l-1} = \frac{-\frac{1}{2} (-2\mu + 2s)}{(1 - 2\mu s + s^2)^{3/2}} + \sum_{l=0}^{\infty} l P_l(\mu) s^{l-1} = \frac{\mu - s}{(1 - 2\mu s + s^2)^{3/2}} .$$

oder

Wir multiplizieren diese Gleichung mit $(1-2\mu s+s^2)$ und nutzen auf der rechten Seite erneut (7.51):

$$(1 - 2\mu s + s^2) \sum_{l=0}^{\infty} l P_l(\mu) s^{l-1} = (\mu - s) \frac{1}{(1 - 2\mu s + s^2)^{1/2}}$$
$$= (\mu - s) \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^l ,$$

d.h. wir erhalten die Beziehung

$$\left(1 - 2\mu s + s^2\right)\sum_{l=0}^{\infty} lP_l(\mu)s^{l-1} + (s-\mu)\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu)s^l = 0.$$
(7.53)

Wir schreiben diese Identität etwas anders:

$$\sum_{m=0}^{\infty} m P_m(\mu) s^{m-1} - \sum_{n=0}^{\infty} 2\mu n P_n(\mu) s^n + \sum_{l=0}^{\infty} l P_l(\mu) s^{l+1} + \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^{l+1} - \sum_{n=0}^{\infty} \mu P_n(\mu) s^n = 0.$$

Der Koeffizientenvergleich für jede Potenz von $s \mbox{ mit } m = n+1 \mbox{ und } l = n-1$ ergibt

$$(n+1)P_{n+1}(\mu) - 2\mu n P_n(\mu) + (n-1)P_{n-1}(\mu) + P_{n-1}(\mu) - \mu P_n(\mu) = 0$$

(n+1)P_{n+1}(\mu) - (2n+1)\mu P_n(\mu) + n P_{n-1}(\mu) = 0.

Als erste Rekursionsbeziehung erhalten wir

$$(2n+1)\mu P_n(\mu) = (n+1)P_{n+1}(\mu) + nP_{n-1}(\mu) .$$
(7.54)

Differentialgleichung der Legendre-Polynome: Wir bilden mit Gleichung (7.51) die partielle Ableitung bezüglich μ :

$$\frac{\partial T}{\partial \mu} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l'(\mu) s^l = \frac{-\frac{1}{2}(-2s)}{(1-2\mu s+s^2)^{3/2}} = \frac{s}{(1-2\mu s+s^2)^{3/2}}$$

or $(1-2\mu s+s^2) \sum_{l=0}^{\infty} P_l'(\mu) s^l = \frac{s}{(1-2\mu s+s^2)^{1/2}} = s \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^l$.

oder

oder

Dabei ist $P_l^{\prime}(\mu) = dP_l(\mu)/d\mu.$ Wir erhalten also die Identität

$$(1 - 2\mu s + s^2) \sum_{l=0}^{\infty} P'_l(\mu) s^l - s \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\mu) s^l = 0.$$

Wir schreiben diese Identität wieder etwas anders:

$$\sum_{m=0}^{\infty} P'_m(\mu) s^m - \sum_{n=0}^{\infty} 2\mu P'_n(\mu) s^{n+1} + \sum_{l=0}^{\infty} P'_l(\mu) s^{l+2} - \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\mu) s^{n+1} = 0.$$

Der Koeffizientenvergleich für jede Potenz von s mit m = n + 1 und l = n - 1 ergibt

$$P_{n+1}^{'}(\mu) - 2\mu P_{n}^{'}(\mu) + P_{n-1}^{'}(\mu) - P_{n}(\mu) = 0$$

$$P_{n+1}^{'}(\mu) + P_{n-1}^{'}(\mu) = 2\mu P_{n}^{'}(\mu) + P_{n}(\mu) .$$
(7.55)

oder

Wir multiplizieren diese Gleichung mit (2n + 1):

(a)
$$(2n+1)P'_{n+1}(\mu) + (2n+1)P'_{n-1}(\mu) = 2(2n+1)\mu P'_n(\mu) + (2n+1)P_n(\mu)$$

Wir differenzieren die Rekursionsbeziehung (7.54) nach μ :

$$(2n+1)P_{n}(\mu) + (2n+1)\mu P_{n}'(\mu) = (n+1)P_{n+1}'(\mu) + nP_{n-1}'(\mu)$$

und multiplizieren das Ergebnis mit dem Faktor 2:

(b)
$$2(2n+1)P_n(\mu) + 2(2n+1)\mu P'_n(\mu) = 2(n+1)P'_{n+1}(\mu) + 2nP'_{n-1}(\mu)$$
.

Die Addition der Gleichungen (a) und (b) ergibt

$$(2n+1)P'_{n+1} + (2n+1)P'_{n-1} + 2(2n+1)P_n + 2\mu(2n+1)P'_n$$

= $2\mu(2n+1)P'_n + (2n+1)P_n + 2(n+1)P'_{n+1} + 2nP'_{n-1}$

oder nach Ordnen

$$[2(2n+1) - (2n+1)] P_n = [2(n+1) - (2n+1)] P'_{n+1} + [2n - (2n+1)] P'_{n-1} , (2n+1) P_n(\mu) = P'_{n+1}(\mu) - P'_{n-1}(\mu) .$$
(7.56)

also

Lösen wir diese Gleichung nach P_{n+1}^{\prime} auf,

$$P'_{n+1} = (2n+1)P_n + P'_{n-1}$$

und setzen nach (7.55)

$$P_{n-1}' = 2\mu P_n' + P_n - P_{n+1}'$$

ein, so folgt

$$2P'_{n+1} = 2(n+1)P_n + 2\mu P'_n$$
$$P'_{n+1}(\mu) = (n+1)P_n(\mu) + \mu P'_n(\mu) .$$

oder

Ebenso können wir Gleichung (7.56) auch nach
$$P_{n-1}^{\prime}$$
 auflösen,

$$P_{n-1}' = P_{n+1}' - (2n+1)P_n ,$$

und nach (7.57) P_{n+1}^{\prime} einsetzen:

$$P_{n-1}^{'} = (n+1)P_n + \mu P_n^{'} - (2n+1)P_n = \mu P_n^{'} - nP_n .$$

181

(7.57)

Wir erhalten also

$$P_{n-1}'(\mu) = -nP_n(\mu) + \mu P_n'(\mu) .$$
(7.58)

~

Wir setzen in dieser Gleichung n = k + 1, so dass gilt

$$P'_{k}(\mu) = -(k+1)P_{k+1}(\mu) + \mu P'_{k+1}(\mu) .$$

Im letzten Term setzen wir nach (7.57)

$$P'_{k+1} = (k+1)P_k + \mu P'_k$$

ein und erhalten

oder

$$P'_{k} = -(k+1)P_{k+1} + \mu^{2}P'_{k} + \mu(k+1)P_{k}$$
$$(1-\mu^{2})P'_{k} = (k+1)\mu P_{k} - (k+1)P_{k+1}.$$

Für den letzten Term dieser Gleichung gilt mit der Rekursionsbeziehung (7.54)

 $(k+1)P_{k+1} = (2k+1)\mu P_k - kP_{k-1} ,$ $(1-\mu^2)P'_k = kP_{k-1} + \mu P_k [(k+1) - (2k+1)]$ so dass folgt $= kP_{k-1} - k\mu P_k$.

Setzen wir wieder k = n, so erhalten wir

$$(1 - \mu^2)P'_n(\mu) = -n\mu P_n(\mu) + nP_{n-1}(\mu) .$$
(7.59)

Wir differenzieren diese Beziehung nach μ :

$$(1 - \mu^2)P_n'' - 2\mu P_n' = -nP_n - n\mu P_n' + nP_{n-1}'$$

= $-nP_n - n\mu P_n' + n(-nP_n + \mu P_n')$
= $-nP_n - n^2 P_n$,

wobei wir für P'_{n-1} Gleichung (7.58) benutzt haben. Das Umstellen dieser Gleichung ergibt die Legendresche Differentialgleichung

$$(1 - \mu^2) P_n''(\mu) - 2\mu P_n'(\mu) + n(n+1) P_n(\mu) = \frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{d}{d\mu} P_n(\mu) \right] + n(n+1) P_n(\mu) = 0, \qquad (7.60)$$

die eine gewöhnliche lineare Differentialgleichung 2. Ordnung ist. Mit $\mu = \cos \theta$ schreibt sich Gleichung (7.60) als

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{dP_n}{d\theta} \right) + n(n+1)P_n = 0.$$
(7.61)

Ohne Beweis (Übungsaufgabe) geben wir an, dass die zweimalige Anwendung des Binomialsatzes

$$(1+x)^m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m!}{n!(m-n)!} x^m$$

auf die erzeugende Funktion $T(\mu,s)$ die folgende Darstellung ergibt:

$$P_{n}(\mu) = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^{k} \frac{(2n-2k)!}{2^{k}k!(n-k)!(n-2k)!} \mu^{n-2k} , \qquad (7.62)$$
$$\begin{bmatrix} \frac{n}{2} \end{bmatrix} = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{(n-1)}{2} & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases}.$$

wobei

Ohne Beweis geben wir auch die Formel von Rodrigues an:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n .$$
(7.63)

Mit diesen Darstellungen ergibt sich sofort für n = 0, 1, dass

$$P_0(\mu) = (-1)^0 \frac{0!}{1 \cdot 1 \cdot 1} \mu^0 = 1$$
(7.64)

$$P_1(\mu) = (-1)^0 \frac{2!}{2 \cdot 1 \cdot 1! \cdot 1!} \mu = \mu .$$
(7.65)

Aus der Rekursionsbeziehung (7.54) folgen daraus alle höheren Legendre-Polynome für $n \ge 2$; z.B. finden wir aus (7.54) mit n = 1:

$$2P_2 = 3\mu P_1 - P_0 = 3\mu^2 - 1 ,$$

d.h.
$$P_2(\mu) = \frac{1}{2} (3\mu^2 - 1) .$$
(7.66)

Mit n = 2 ergibt diese Rekursionsbeziehung

$$3P_3 = 5\mu P_2 - 2P_1 = \frac{5\mu}{2} (3\mu^2 - 1) - 2\mu ,$$

$$P_3(\mu) = \frac{1}{2} (5\mu^3 - 3\mu) .$$
(7.67)

oder

Orthogonalität: Wir starten von der Legendreschen Differentialgleichung (7.60) für den Index n,

$$\frac{d}{d\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\frac{d}{d\mu}P_n(\mu)\right] + n(n+1)P_n(\mu) = 0,$$

und für den Index $l \neq n$,

$$\frac{d}{d\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\frac{d}{d\mu}P_l(\mu)\right] + l(l+1)P_l(\mu) = 0.$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit $P_l(\mu)$ und die zweite Gleichung mit $P_n(\mu)$ und bilden dann die Differenz der Ergebnisse:

$$= P_{l}(\mu) \frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^{2}) \frac{d}{d\mu} P_{n}(\mu) \right] - P_{n}(\mu) \frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^{2}) \frac{d}{d\mu} P_{l}(\mu) \right]$$

$$= \frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^{2}) P_{l}(\mu) \frac{dP_{n}(\mu)}{d\mu} - (1 - \mu^{2}) P_{n}(\mu) \frac{dP_{l}(\mu)}{d\mu} \right] .$$

Integrieren wir diese Gleichung über μ , so folgt

$$-[n(n+1) - l(l+1)] \int_{-1}^{1} d\mu P_{l}(\mu) P_{n}(\mu)$$

= $\int_{-1}^{1} d\mu \frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^{2}) P_{l}(\mu) \frac{dP_{n}(\mu)}{d\mu} - (1 - \mu^{2}) P_{n}(\mu) \frac{dP_{l}(\mu)}{d\mu} \right]$
= $\left[(1 - \mu^{2}) \left[P_{l}(\mu) \frac{dP_{n}(\mu)}{d\mu} - P_{n}(\mu) \frac{dP_{l}(\mu)}{d\mu} \right] \right]_{-1}^{1} = 0$

aufgrund des Faktors $(1 - \mu^2)$. Für $l \neq n$ folgt daher die *Orthogonalitätsrelation*

$$\int_{-1}^{1} d\mu P_l(\mu) P_n(\mu) = 0 . \qquad (7.68)$$

Übungsaufgabe:

Beweisen Sie die Orthonormalitätsrelation

$$\int_{-1}^{1} d\mu P_n^2(\mu) = \frac{2}{2n+1} . \tag{7.69}$$

7.3.2 Assoziierte Legendre-Polynome

Wir untersuchen jetzt die DGL (7.48)

$$\frac{d}{d\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\frac{dP}{d\mu}\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2}\right]P(\mu) = 0,$$

die symmetrisch in m ist. Für die Lösung setzen wir an

$$P(\mu) = P^{m}(\mu) = (1 - \mu^{2})^{m/2} w_{m}(\mu) , \qquad (7.70)$$

$$\frac{dP^{m}}{d\mu} = (1 - \mu^{2})^{m/2} \frac{dw_{m}}{d\mu} - m\mu (1 - \mu^{2})^{(m/2)-1} w_{m}(\mu) .$$

so dass

Das Einsetzen in die DGL ergibt

$$\frac{d}{d\mu} \left[\left(1 - \mu^2 \right)^{(m/2)+1} \frac{dw_m}{d\mu} - m\mu \left(1 - \mu^2 \right)^{m/2} w_m \right] \\ + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] \left(1 - \mu^2 \right)^{m/2} w_m = 0 ,$$

oder nach Ausdifferenzieren

$$\frac{m+2}{2} (1-\mu^2)^{m/2} (-2\mu) \frac{dw_m}{d\mu} + (1-\mu^2)^{(m/2)+1} \frac{d^2 w_m}{d\mu^2} -m (1-\mu^2)^{m/2} w_m - \mu \frac{m^2}{2} (1-\mu^2)^{(m/2)-1} (-2\mu) w_m - m\mu (1-\mu^2)^{m/2} \frac{dw_m}{d\mu} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2} \right] (1-\mu^2)^{m/2} w_m = 0.$$

7.3 Legendre-Polynome

Wir dividieren durch den Faktor

$$(1-\mu^2)^{(m/2)-1}$$

und erhalten

$$(1-\mu^2)^2 \frac{d^2 w_m}{d\mu^2} - (m+2)\mu (1-\mu^2) \frac{dw_m}{d\mu} - \mu m (1-\mu^2) \frac{dw_m}{d\mu} + w_m \left[-m (1-\mu^2) + m^2 \mu^2 + l(l+1) (1-\mu^2) - m^2 \right] = 0 , (1-\mu^2)^2 \frac{d^2 w_m}{d\mu^2} - \mu (1-\mu^2) (m+2+m) \frac{dw_m}{d\mu} + (1-\mu^2) w_m \left[l(l+1) - m^2 - m \right] = 0 .$$

oder

Nach Division durch
$$(1 - \mu^2)$$
 ergibt sich

$$\left(1-\mu^2\right)\frac{d^2w_m}{d\mu^2} - 2(m+1)\mu\frac{dw_m}{d\mu} + \left[l(l+1) - m(m+1)\right]w_m = 0.$$
 (7.71)

Für m = 0 reduziert sich diese Gleichung auf die Legendresche Differentialgleichung (7.60) für $w_0(\mu)$

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2 w_0}{d\mu^2} - 2\mu \frac{dw_0}{d\mu} + l(l+1)w_0 = 0,$$

$$w_0(\mu) = P_l(\mu)$$

$$P^0(\mu) = P_l(\mu).$$
(7.72)

also und

Differenzieren wir Gleichung (7.71) nach μ , so erhalten wir mit der Notation $w_m' = dw_m/d\mu$, $w_m'' = d^2w_m/d\mu^2$ usw.,

$$\begin{array}{ll} \left(1-\mu^2\right)w_m^{\prime\prime\prime}-2\mu w_m^{\prime\prime}-2(m+1)\mu w_m^{\prime\prime}-2(m+1)w_m^{\prime}+\left[l(l+1)-m(m+1)\right]w_m^{\prime} &= \\ \left(1-\mu^2\right)w_m^{\prime\prime\prime\prime}-2\mu\left[1+m+1\right]w_m^{\prime\prime}+\left[l(l+1)-m(m+1)-2(m+1)\right]w_m^{\prime} &= 0 \ , \end{array} \\ \\ \text{oder} & \left(1-\mu^2\right)w_m^{\prime\prime\prime\prime}-2(m+2)\mu w_m^{\prime\prime\prime}+\left[l(l+1)-(m+1)(m+2)\right]w_m^{\prime} &= 0 \ , \end{array}$$

0

d.h. die Funktion w'_m erfüllt die Differentialgleichung (7.71) für w_{m+1} für m > 0:

$$(1-\mu^2)w_{m+1}'' - 2(m+2)\mu w_{m+1}' + [l(l+1) - (m+1)(m+2)]w_{m+1} = 0.$$

Es ist also

$$w_{m+1} = w'_m = \frac{dw_m}{d\mu}$$
(7.73)

Mit Gleichung (7.72) finden wir dann

$$w_1 = \frac{dw_0}{d\mu} = \frac{dP_l(\mu)}{d\mu},$$

$$w_2 = \frac{dw_1}{d\mu} = \frac{d^2P_l(\mu)}{d\mu^2},$$

$$w_m = \frac{d^mP_l(\mu)}{d\mu^m}.$$

und allgemein

Gemäß Gleichung (7.70) erhalten wir als Lösung für $m \neq 0$ die assoziierten oder zugeordneten Legendre-Funktionen

$$P_l^m(\mu) (\equiv P^m(\mu)) = \left(1 - \mu^2\right)^{|m|/2} \frac{d^m P_l(\mu)}{d\mu^m} .$$
(7.74)

die sich aus den Legendre-Polynomen berechnen lassen. Mit der Formel von Rodrigues (7.63) für $P_l(\mu)$,

$$P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\mu^l} \left(\mu^2 - 1\right)^l \;,$$

folgt die auch für negative Werte von $-l \leq m \leq l$ gültige Beziehung

$$P_l^m(\mu) = \frac{\left(1-\mu^2\right)^{|m|/2}}{2^l l!} \frac{d^{m+l}}{d\mu^{m+l}} \left(\mu^2 - 1\right)^l \,. \tag{7.75}$$

Unter Ausnutzung der Leibnitz-Formel

$$\frac{d^n}{dt^n} \left[A(t)B(t) \right] = \sum_{s=0}^{\infty} \binom{n}{s} \left[\frac{d^{n-s}}{dt^{n-s}} A(t) \right] \left[\frac{d^s}{dt^s} B(t) \right]$$
$$\binom{n}{s} = \frac{n!}{(n-s)!s!}$$

wobei

zeigt man (Übungsaufgabe), dass

$$P_l^{-m}(\mu) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) .$$
(7.76)

Weiterhin gilt die Orthonormalitätsrelation (Übungsaufgabe) für zugeordnete Legendre-Polynome

$$\int_{-1}^{1} dx \ P_p^m(x) P_q^m(x) = \frac{2}{2q+1} \frac{(q+m)!}{(q-m)!} \delta_{p,q} \ . \tag{7.77}$$

Für den Normierungsfaktor der Kugelflächenfunktionen,

$$Y_{lm} = N_{l,m} P_l^m(\cos\theta) \exp(im\phi) \tag{7.78}$$

mit m und l ganzzahlig und $-l \leq m \leq l$, erhalten wir aus der Forderung

$$d\Omega |Y_{l,m}(\mu,\phi)|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\mu |Y_{l,m}(\mu,\phi)|^2 = 1 ,$$

$$N_{l,m} = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} .$$
(7.79)

dass

Es gilt die Orthonormalitätsrelation für Kugelflächenfunktionen

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d\mu \, Y_{l,m}(\mu,\phi) Y_{l',m'}^{*}(\mu,\phi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \,. \tag{7.80}$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sind die normierten Eigenfunktionen der Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z des Bahndrehimpulses in Ortsdarstellung. Wegen der Eindeutigkeit der Eigenfunktionen sind dessen Drehimpulsquantenzahlen m und damit l ganzzahlig im Unterschied zu den erlaubten halbzahligen Quantenzahlen m und j für beliebige Drehimpuls-Operatoren, die sich aus der algebraischen Berechnung ergaben.

Die Natur hat entschieden, dass bei anderen (als dem Bahndrehimpuls) Drehimpulsen, wie etwa dem Spin, halbzahlige Drehimpulsquantenzahlen auftreten. Jedes Elementarteilchen besitzt einen $Spin \hat{\vec{S}}$: einen *intrinsischen* Drehimpuls zusätzlich zum Bahndrehimpuls definiert durch die Vertauschungsrelation (7.17)

$$\left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = \imath \hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k , \qquad (7.81)$$

die wie gezeigt auf die Eigenwertgleichungen

$$\hat{S}^2|s,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m\rangle, \qquad \hat{S}_z|s,m\rangle = \hbar m|s,m\rangle$$
(7.82)

führt mit s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, ... und m = -s, -s+1, ..., s-1, s. Pi-Mesonen besitzen den Spin s = 0, Photonen den Spin s = 1, während Protonen, Neutronen, Elektronen, Leptonen und Quarks den Spin s = 1/2 besitzen.

7.4 Zentralfelder

Bei Zentralfeldern hängt die potentielle Energie $V(\vec{r}) = V(r)$ nur vom Abstand $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ab. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (7.3) lautet dann mit dem Ausdruck (7.6) für den Hamilton-Operator

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_n}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\psi_n = \left(E_n - V(r)\right)\psi_n.$$
(7.83)

In Ortsdarstellung ist

$$\psi_n\left(\vec{r}\right) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi) , \qquad (7.84)$$

wobei nach Gleichung (7.33)

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi) , \qquad -l \le m \le l .$$
 (7.85)

Eingesetzt in Gleichung (7.83) folgt die Gleichung für den Radialteil R(r) zu

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}Y_{lm}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R(r)Y_{lm} = \left(E_n - V(r)\right)R(r)Y_{lm} ,$$

oder nach Division von Y_{lm}

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r) - E\right]R = l(l+1)R.$$
(7.86)

Zur Vereinfachung dieser Gleichung setzen wir

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \qquad (7.87)$$

$$\frac{dR}{dr} = \frac{ru' - u}{r^2}$$

so dass

und

$$\frac{d}{dr}\left(r^{2}\frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(ru^{'}-u\right) = ru^{''}+u^{'}-u^{'} = ru^{''} = r\frac{d^{2}u}{dr^{2}}$$

Wir erhalten dann für Gleichung (7.86)

$$r\frac{d^{2}u}{dr^{2}} - \frac{2mr}{\hbar^{2}}\left[V(r) - E\right]u = l(l+1)\frac{u}{r}, -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}u}{dr^{2}} + \left[V(r) + \frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{l(l+1)}{r^{2}}\right]u(r) = Eu(r).$$
(7.88)

oder

Führen wir das effektive Potential

$$V_{\rm eff}(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$
(7.89)

ein, so ist die radiale Gleichung

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V_{\text{eff}}(r) \right] u(r) = 0$$
(7.90)

formal identisch zur eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (3.1). Der zweite Term im effektiven Potential (7.89) wird *Zentrifugalterm* genannt in Anlehnung an die Behandlung der Relativbewegung des Zwei-Körperproblems der klassischen Mechanik (siehe Mechanik-Vorlesung Kap. 4.2).

Die Normierung des radialen Anteils lautet dann

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1 , \qquad (7.91)$$

weil mit $d^3r = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$ und Gleichungen (7.84) und (7.87)

$$1 = \int d^3 r |\psi_n|^2 = \int_0^\infty dr \ r^2 |R(r)|^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_{lm}|^2 = \int_0^\infty |u(r)|^2 dr$$

unter Ausnutzung von Normierung (7.80).

Zur weiteren Lösung der Radialgleichungen (7.88) oder (7.90) müssen wir die Abhängigkeit V(r) spezifizieren.

7.5 Coulomb-Problem

Wir betrachten die Bewegung eines Elektrons im Coulomb-Feld eines Z-fach geladenen (Q = Ze) Atomkerns, der zunächst im Ursprung ruht (siehe Abb. 7.3):

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} . aga{7.92}$$



Abbildung 7.3: Zum Coulomb-Problem

Im Fall des Wasserstoff-Atoms ist speziell Z = 1. Für das Coulomb-Potential (7.92) lautet die Radialgleichung (7.88)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = Eu(r).$$
(7.93)

Es ist unsere Aufgabe, normierbare Lösungen u(r) dieser Gleichung zu finden und dabei die erlaubten Elektronenenergiewerte E zu bestimmen. Wir werden feststellen, dass das Coulomb-Potential sowohl kontinuierliche Zustände mit positiven (E > 0) Werten der Energie, als auch diskrete Zustände mit negativen (E < 0) Werten der Energie als normierbare Lösungen erlaubt. Die ersteren sind geeignet zur Beschreibung von Elektron-Kern-Streuung; die zweiten werden interpretiert als gebundene Zustände des Elektrons im Feld des Atomkerns. Die Analogie zum Kepler-Problem der klassischen Mechanik ist das Auftreten von gebundenen Ellipsenbahnen und ungebundenen Hyperbelbahnen von Planeten bzw. Kometen im Gravitationspotential des Zentralsterns.

Wir beginnen mit gebundenen Zuständen, d.h. negativen Energiewerten E < 0 und setzen zur Vereinfachung der Notation

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2m_eE}}{\hbar} \ . \tag{7.94}$$

Für E < 0 ist k rein reell. Nach Division von Gleichung (7.93) durch E erhalten wir

$$\frac{1}{k^2}\frac{d^2u}{dr^2} = \left[1 + \frac{l(l+1)}{k^2r^2} - \frac{2m_eZe^2}{k^2\hbar^2r}\right]u \;.$$

Mit den Definitionen

$$\rho \equiv kr, \qquad \rho_0 = \frac{2m_e Z e^2}{k\hbar^2} \tag{7.95}$$

folgt

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u(\rho) .$$
 (7.96)

7.5.1 Lösung mit Kummer-Funktion

Durch die Substitution

$$\rho = \frac{x}{2} \tag{7.97}$$

bringen wir Gleichung (7.96) in die Form

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \left[\frac{1}{4} - \frac{\rho_0}{2x} + \frac{l(l+1)}{x^2}\right]u(x) .$$
(7.98)

Der Vergleich mit Gleichung (4.16)

$$\frac{d^2 M_{\mu,\nu}}{dx^2} = \left[\frac{1}{4} - \frac{\mu}{x} + \frac{\nu^2 - \frac{1}{4}}{x^2}\right] M_{\mu,\nu}(x) \,,$$

zeigt, dass die Lösungen von Gleichung (7.98) Whittaker-Funktionen sind:

$$u(x) = c_1 M_{\mu,\nu}(x) + c_2 W_{\mu,\nu}(x)$$
(7.99)

mit $\mu =
ho_0/2$ und

$$\nu^2 - \frac{1}{4} = l(l+1),$$

 $\nu = l + \frac{1}{2}.$

also

Wir erhalten also

$$u(x) = c_1 M_{\frac{\rho_0}{2}, l+\frac{1}{2}}(x) + c_2 W_{\frac{\rho_0}{2}, l+\frac{1}{2}}(x) .$$
(7.100)

Drücken wir wie in Kap. 4.1.3 die Whittaker-Funktionen durch die Kummer-Funktionen aus, so folgt

$$u(x) = x^{l+1}e^{-x/2} \left[c_1 M \left(l+1 - \frac{\rho_0}{2}, 2(l+1), x \right) + c_2 U \left(l+1 - \frac{\rho_0}{2}, 2(l+1), x \right) \right]$$

und mit $x = 2\rho = 2kr$ die Linearkombination

$$u(r) = r^{l+1}e^{-kr} \left[a_1 M \left(l + 1 - \frac{\rho_0}{2}, 2(l+1), 2kr \right) + a_2 U \left(l + 1 - \frac{\rho_0}{2}, 2(l+1), 2kr \right) \right]$$
(7.101)

mit neuen Konstanten a_1 und a_2 .

Mit den in Kap. 3.6.2 abgeleiteten asymptotischen Entwicklungen für große und kleine Argumente,

$$\begin{split} M(\alpha, \beta, z \gg 1) &\simeq \quad \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)} z^{\alpha-\beta} e^z , \quad U(\alpha, \beta, z \gg 1) \simeq z^{-\alpha} , \\ M(\alpha, \beta, z \ll 1) &\simeq \quad 1 , \qquad \qquad U(\alpha, \beta > 1, z \ll 1) \propto z^{1-\beta} \end{split}$$

betrachten wir das Verhalten der Lösung (7.101) für $r \to 0$ und $r \to \infty$. Für $r \to 0$ erhalten wir

$$u(r \ll 1) \simeq r^{l+1} \left[a_1 + a_2 c_3 r^{1-(2l+2)} \right] = a_1 r^{l+1} + a_2 c_3 r^{-l}$$

Da der zweite Term divergiert und dadurch die Normierung (7.91) unmöglich machen würde, setzen wir $a_2 = 0$ und von der Lösung (7.101) verbleibt

$$u(r) = a_1 r^{l+1} e^{-kr} M\left(l+1-\frac{\rho_0}{2}, 2(l+1), 2kr\right) .$$
(7.102)

Für $r \to \infty$ erhalten wir das Verhalten

00

$$u(r \gg 1) \simeq a_1 r^{l+1} e^{-kr} \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma\left(l+1-\frac{\rho_0}{2}\right)} (2kr)^{-\left(l+1+\frac{\rho_0}{2}\right)} e^{2kr}$$

= $\tilde{a}_1 \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma\left(l+1-\frac{\rho_0}{2}\right)} r^{-\frac{\rho_0}{2}} e^{kr}.$ (7.103)

Diese Funktion divergiert für $r \to \infty$, wenn nicht die Gamma-Funktion im Nenner gegen Unendlich geht. Dies passiert für Argumente der Gamma-Funktion, derart dass

$$l+1-\frac{\rho_0}{2} = 1-n_r, \quad \text{mit} \quad n_r = 1, 2, 3, \dots, \quad (7.104)$$

$$\rho_0 = 2(l+n_r) , \qquad (7.105)$$

also für

wobei die radiale Quantenzahl n_r eine beliebige natürliche Zahl ist. Mit Gleichung (7.95) folgt für die Bedingung (7.105)

$$\frac{2m_e Z e^2}{k\hbar^2} = 2(l+n_r)$$

$$k = k_n = \frac{m_e Z e^2}{\hbar^2 (l+n_r)}.$$
(7.106)

oder

Für Werte von ρ_0 gemäß der Bedingung (7.105) bricht die Kummer-Funktion erster Art ab und wir erhalten die normierbaren Wellenfunktionen

$$u_{n_r}(r) = c_{n_r} r^{l+1} e^{-k_n r} M(1 - n_r, 2(l+1), 2k_n r), \qquad n_r = 1, 2, 3, \dots$$
 (7.107)

Die erlaubten Werte (7.106) für k_n ergeben als erlaubte Energiewerte gemäß Definition (7.94)

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_e} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 (l+n_r)^2}, \qquad n_r = 1, 2, 3, \dots$$
 (7.108)

Wir definieren die Hauptquantenzahl n als

$$n \equiv n_r + l \tag{7.109}$$

und erinnern uns an den Bohr-Radius (2.78)

$$a = r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Damit erhalten wir für die Ergebnisse (7.106) und (7.108)

$$k_n = \frac{Z}{nr_0} \tag{7.110}$$

und

$$E_n = \frac{E_1 Z^2}{n^2}, \qquad E_1 = -\frac{e^2}{2r_0} = -13.6 \text{ eV}$$
 (7.111)

für n = 1, 2, ... Bei gegebener Hauptquantenzahl n sind die gebundenen Energieeigenwerte (7.111) nicht mehr von der Drehimplusquantenzahl l abhängig. Der gesamte Entartungsgrad eines Energieniveaus ist dann (ohne Elektronenspin)

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} 1 = n^2 , \qquad (7.112)$$

d.h. zu jedem Energie
eigenwert gehören n^2 verschiedene Wellenfunktionen, die sich in den Dreh
impulsquantenzahlen l und m unterscheiden.

Mit Gleichungen (7.109) und (7.110) schreibt sich die radiale Wellenfunktion (7.107) als

$$u_{nl}(r) = c_n r^{l+1} e^{-\frac{Zr}{nr_0}} M\left(l+1-n, 2l+2, \frac{2Zr}{nr_0}\right), \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (7.113)

Diese Lösung wird häufig mit den Laguerre-Polynomen

$$L_q^p(t) \equiv (-1)^p \frac{q!}{p!(q-p)!} M(p-q, p+1, t)$$
(7.114)

ausgedrückt. Mit p = 2l + 1 und l + 1 - n = p - q = 2l + 1 - q folgt q = n + l und

$$u_{ne}(r) = d_n r^{l+1} e^{-\frac{Zr}{nr_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{nr_0}\right) .$$
(7.115)

Die Zustände sind gekennzeichnet durch die drei Separationskonstanten n_r, l, m bzw. n, l, m, die ihrerseits die Eigenwerte der drei Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z bestimmen.

7.5.2 Mitbewegung des Atomkerns

Bisher wurde bei der Behandlung des Coulomb-Problems nur die Relativbewegung des Elektrons betrachtet, der Atomkern selbst aber ruht. Macht man die letztere Annahme nicht, so handelt es sich um das quantenmechanische Gegenstück des klassischen Zweikörperproblems, nämlich die Bewegung eines abgeschlossenen Systems von zwei Massenpunkten (Kern und Elektron), deren Wechselwirkung nur vom Abstand abhängt. Die Zahl der Freiheitsgrade des Systems beträgt dann s = 6, und in der Ortsdarstellung werden seine Zustände durch eine Gesamtwellenfunktion beschrieben, die von den sechs Koordinaten $(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$ abhängt. Die stationäre Wellenfunktion erfüllt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} \right) + V \left(\left[(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 \right]^{1/2} \right) \psi = E\psi . \quad (7.116)$$

Wie in der klassischen Mechanik lässt sich das System durch die Transformation auf Schwerpunkts- (\vec{R}) und Relativkoordinaten (\vec{r}) formal in zwei unabhängige Teilsysteme zerlegen: mit

$$\vec{R} \equiv \frac{m_1 \vec{r_1} + m_2 \vec{r_2}}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 \vec{r_1} + m_2 \vec{r_2}}{M}, \qquad \vec{r} \equiv \vec{r_1} - \vec{r_2}$$
(7.117)

gt $\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{M}\vec{r},$ $\vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{M}\vec{r}$ (7.118)

mit der Gesamtmasse $M = m_1 + m_2$. Wir führen ebenfalls die reduzierte Masse

$$\mu^{-1} \equiv m_1^{-1} + m_2^{-1} \tag{7.119}$$

gleichbedeutend mit

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{7.120}$$

ein. Die Hamiltonfunktion des Zweikörperproblems ist dann

$$\begin{split} H &= \frac{m_1}{2}\dot{r}_1^2 + \frac{m_2}{2}\dot{r}_2^2 + V\left(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|\right) \\ &= \frac{m_1}{2}\left[\dot{\vec{R}} + \frac{m_2}{M}\dot{\vec{r}}\right]^2 + \frac{m_2}{2}\left[\dot{\vec{R}} - \frac{m_1}{M}\dot{\vec{r}}\right]^2 + V(r) \\ &= \frac{m_1 + m_2}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{m_1m_2^2 + m_2m_1^2}{2M^2}\dot{\vec{r}}^2 + V(r) \\ &= \frac{M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^2 + V(r) = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{p_r^2}{2\mu} + V(r) \end{split}$$

mit den kanonisch konjugierten Impulsen $P_R = M\dot{R}$ und $p_r = \mu \dot{r}$. Mit dem korrespondenzmäßigen Übergang

$$\hat{P}_R = -i\hbar \vec{\nabla}_R, \qquad \hat{p}_r = -i\hbar \vec{\nabla}_r \tag{7.121}$$

erhalten wir für den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) .$$
(7.122)

193

folgt

Die Schrödinger-Gleichung (7.116) reduziert sich dann auf

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\psi\left(\vec{R},\vec{r}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r\psi\left(\vec{R},\vec{r}\right) + V(r)\psi\left(\vec{R},\vec{r}\right) = E\psi\left(\vec{R},\vec{r}\right) .$$
(7.123)

Der Separationsansatz

$$\psi(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \psi\left(\vec{R}, \vec{r}\right) = \psi_a\left(\vec{R}\right)\psi_b\left(\vec{r}\right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{r^2}} \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\psi_a\left(\vec{R}\right) - E\psi_a\left(\vec{R}\right)\right] = -E_b$$
(7.124)

liefert

$$\psi_a\left(R\right) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r\psi_b\left(\vec{r}\right) + V(r)\psi_b\left(\vec{r}\right)\right], \qquad (7.125)$$

mit der Separationskonstanten $-E_b$. Wir erhalten die beiden Gleichungen

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\psi_a\left(\vec{R}\right) = (E-E_b)\psi_a\left(\vec{R}\right)$$
(7.126)

und

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r\psi_b(\vec{r}) + V(r)\psi_b(\vec{r}) = E_b\psi_b(\vec{r}) . \qquad (7.127)$$

Die erste Gleichung (7.126) beschreibt die freie Bewegung des Massenschwerpunkts mit der kinetischen Energie $(E - E_b)$; die zweite Gleichung (7.127) beschreibt die Bewegung eines fiktiven Massenpunkts mit der reduzierten Masse μ im Zentralfeld V(r). Beide Teilprobleme haben wir schon früher behandelt. Wie wir gesehen haben, ist das erste Teilproblem in kartesischen Koordinaten separabel und das zweite in Kugelkoordinaten. Insgesamt erhalten wir die sechs Bewegungsintegrale $P_{R_x}, P_{R_y}, P_{R_z}, E_b, L^2, L_z$.

Im Sonderfall der Coulomb-Wechselwirkung (7.92) folgt für die Eigenwerte der Energie bei gebundenen Zuständen nach Gleichung (7.108)

$$E_b = E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} , \qquad (7.128)$$

die sich von denen für Systeme mit unendlich schwerem Kern (7.111) nur um den Faktor

$$\frac{\mu}{m_e} = \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_Z}}$$
(7.129)

unterscheiden, was beim Vergleich von leichten zu schwerem Wasserstoff zur Isotopie-Verschiebung der Spektrallinien führt.

7.5.3 Das Spektrum des Wasserstoffatoms

Die in Gleichungen (7.111) und (7.128) berechneten Energieeigenwerte für Z = 1

$$E_n = -\frac{e^2}{2r_0}\frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

geben die Energieniveaus der gebundenen Elektronen im Wasserstoffatom an. Beim Übergang vom Niveau E_i zum Niveau E_f wird vom Wasserstoffatom ein Lichtquant der Energie

$$h\nu = E_i - E_f = \frac{e^2}{2r_0} \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right], \qquad n_f < n_i$$
(7.130)

emittiert. Mit $h = 2\pi\hbar$ und dem Bohrradius (2.77) sowie $\mu \simeq m_e$ folgt

$$\nu = \frac{e^2}{4\pi r_0 \hbar} \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right] = \frac{m_e e^4}{4\pi \hbar^3} \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right]$$

Für die Wellenlänge $\lambda = c/\nu$ des emittierten Photons erhalten wir dann die Rydberg-Formel

$$\frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right] \qquad \iff \qquad \nu = Rc \left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right] , \qquad (7.131)$$

mit der Rydberg-Konstanten

$$R = \frac{m_e e^4}{4\pi c\hbar^3} = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} .$$
 (7.132)

In Abb. 7.4 sind die Energieniveaus und Spektralserien des Wasserstoffatoms (sog. *Grotrian-Diagramm*) dargestellt.



Abbildung 7.4: Energieniveaus und Spektralserien des Wasserstoffatoms

Die Ubergänge zum niedrigsten Niveau $n_f = 1$ liefert die Lyman-Serie mit

$$\nu_L = Rc \left[1 - \frac{1}{n_i^2} \right] \,. \tag{7.133}$$

Die Balmer-Serie ist durch $n_f = 2$ definiert, die Paschen-Serie durch $n_f = 3$, die Brackett-Serie durch $n_f = 4$, die Pfund-Serie durch $n_f = 5$ und die Humphreys-Serie durch $n_f = 6$.

7.5.4 Kontinuumszustände E > 0 im Coulomb-Feld

Für positive Energiewerte E > 0 ist gemäß Notation (7.94)

$$k = \pm \imath \kappa, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$$
 (7.134)

rein imaginär. Die radiale Wellenfunktion (7.103) hat dann das asymptotische Verhalten

$$u(r \to \infty, E > 0) \propto \exp\left[\pm \frac{i\sqrt{2\mu E}}{\hbar}r\right] = \cos\left(\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}r\right) \pm i\sin\left(\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}r\right)$$

und ist oszillierend und insbesondere beschränkt. Aus der Bedingung der Normierbarkeit (7.91) ergeben sich daher keine Einschränkungen hinsichtlich der erlaubten Werte von E > 0. Neben den diskreten, negativen Energieeigenwerten existiert ein Kontinuum von Lösungen mit positiven Energiewerten. Die gebundenen und die ungebundenen Lösungen bilden zusammen den vollständigen Satz der Eigenfunktionen des Hamilton-Operators des Coulomb-Feldes (siehe 7.93).

7.6 Darstellung des Spins

Das Stern-Gerlach-Experiment (1921) der Aufspaltung eines Atomstrahls in einem inhomogenen Magnetfeld, der Einstein-deHaas-Effekt (1915) und der Zeeman-Effekt (1898) sind Schlüsselexperimente für das Auftreten des Spins bei Protonen und Elektronen: diese Teilchen besitzen einen zusätzlichen (zum Bahndrehimpuls) Eigendrehimpuls (Spin).

Der Spin ist als Drehimpulsoperator über die Vertauschungsregel (7.81) definiert, d.h.

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = \imath \hbar \hat{S}_z, \qquad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = \imath \hbar \hat{S}_x, \qquad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = \imath \hbar \hat{S}_y , \qquad (7.135)$$

die auf die Eigenwertgleichungen (7.82) führt:

$$\hat{S}^2|s,m\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m\rangle,$$
(7.136)

$$S_z|s,m> = \hbar m|s,m>$$
. (7.137)

Die möglichen Eigenwerte sind

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$$

 $m = -s, -s + 1, \dots, s$.

und

Mit den Hilfsformeln (7.35) und (7.36) von Kap. 7.2.2 zeigen wir für die Aufsteige- und Absteige-Operatoren

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y ,$$

$$\hat{S}_{\pm} | s, m > = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)} | s, m \pm 1 > .$$
(7.138)

dass

Beweis: Für den Aufsteige-Operator \hat{S}_+ gilt

$$\hat{S}_{+}|s,m>=a_{sm}|s,m+1>$$

mit der Normierungskonstanten $a_{sm}.$ In bra-Darstellung gilt dann

$$< s, m | S_+^* = < s, m+1 | a_{sm}^*$$
.

Unter Verwendung von $\hat{S}^*_+ = \hat{S}_-$ folgt für das Skalarprodukt

$$\left\langle s, m \left| \hat{S}_{+}^{*} \hat{S}_{+} \right| s, m \right\rangle = \left\langle s, m \left| \hat{S}_{-} \hat{S}_{+} \right| s, m \right\rangle$$
$$= \left\langle s, m + 1 \left| a_{sm}^{*} a_{sm} \right| s, m + 1 \right\rangle = \left\| a_{sm} \right\|^{2} .$$
(7.139)

Gemäß (7.35) gilt

$$\hat{S}_{-}\hat{S}_{+}|s,m\rangle = \hbar^{2}(s-m)(s+m+1)|s,m\rangle$$

= $\hbar^{2}[s(s+1)-m(m+1)]|s,m\rangle$

und wir erhalten für (7.139)

$$\begin{aligned} \|a_{sm}\|^2 &= \left\langle s, m \left| \hat{S}_- \hat{S}_+ \right| s, m \right\rangle \\ &= \left\langle s, m \left| \hbar^2 \left[s(s+1) - m(m+1) \right] \right| s, m \right\rangle \\ &= \hbar^2 \left[s(s+1) - m(m+1) \right] , \\ \hat{S}_+ |s, m > &= \hbar \left[s(s+1) - m(m+1) \right]^{1/2} |s, m+1 > \end{aligned}$$

so dass

Der Beweis für \hat{S}_{-} verläuft analog. Q.E.D.

7.6.1 Spin $s = \frac{1}{2}$

Der Fall s = 1/2 ist der wichtigste Fall, da er für normale Materie zutrifft: alle Quarks, Leptonen, Proton, Neutron und Elektron. In diesem Fall gibt es zwei Eigenzustände:

Spin-up-Zustand (\uparrow) $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ mit $s = \frac{1}{2}$ und $m = \frac{1}{2}$, **Spin-down-Zustand** (\downarrow) $\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$ mit $s = \frac{1}{2}$ und $m = -\frac{1}{2}$.

Wir benutzen diese beiden Eigenzustände als Basisvektoren. Dann stellen wir den allgemeinen Zustand eines Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens dar als 2-komponentige Spalten-Matrix (sog. *Spinor*)

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- , \qquad (7.140)$$

also als Überlagerung des Spin-up-Zustands

$$\chi_{+} = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \tag{7.141}$$

und des Spin-down-Zustands

$$\chi_{-} = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \tag{7.142}$$

mit den Entwicklungskoeffizienten a und b.

Die Spin-Operatoren \hat{S}^2 , \hat{S}_z , \hat{S}_{\pm} können wir durch 2×2 -Matrizen darstellen, wie wir anhand der Wirkung auf χ_+ und χ_- sehen. Nach Gleichungen (7.136) und (7.137) gelten

$$\hat{S}^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+, \qquad \hat{S}_z \chi_+ = \frac{1}{2} \hbar \chi_+$$
(7.143)

und

$$\hat{S}^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_-, \qquad \hat{S}_z \chi_- = -\frac{1}{2} \hbar \chi_-. \qquad (7.144)$$

Aus den Gleichungen (7.138) folgt

$$\begin{split} \hat{S}_{+}\chi_{-} &= \hat{S}_{+} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \chi_{+} = \hbar \chi_{+} ,\\ \hat{S}_{-}\chi_{+} &= \hat{S}_{-} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - \left(\frac{1}{2} \right) \cdot \left(-\frac{1}{2} \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}} \chi_{-} = \hbar \chi_{-} ,\\ \hat{S}_{+}\chi_{+} &= \hat{S}_{+} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - \left(\frac{1}{2} \right) \cdot \frac{3}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = 0 \\ \hat{S}_{-}\chi_{-} &= \hat{S}_{-} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot \left(-\frac{3}{2} \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = 0 . \end{split}$$

Mit

und

$$\hat{S}_x = \frac{\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right)}{2}$$
$$\hat{S}_y = \frac{\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right)}{2i}$$

und

erhalten wir dann

$$\hat{S}_{x}\chi_{+} = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{+}\chi_{+} + \hat{S}_{-}\chi_{+} \right) = \frac{\hbar}{2}\chi_{-} ,
\hat{S}_{x}\chi_{-} = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{+}\chi_{-} + \hat{S}_{-}\chi_{-} \right) = \frac{\hbar}{2}\chi_{+} ,
\hat{S}_{y}\chi_{+} = \frac{1}{2i} \left(\hat{S}_{+}\chi_{+} - \hat{S}_{-}\chi_{+} \right) = -\frac{\hbar}{2i}\chi_{-} ,
\hat{S}_{y}\chi_{-} = \frac{1}{2i} \left(\hat{S}_{+}\chi_{-} - \hat{S}_{-}\chi_{-} \right) = \frac{\hbar}{2i}\chi_{+} .$$

In Matrix-Schreibweise erhalten wir also

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

und $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$

Es ist üblich, die letzte Gleichung mittels der Pauli-Spin-Matrizen $\hat{\sigma}$ zu schreiben

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}, \qquad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{7.145}$$

Man erkennt, dass die Matrizen für \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z und \hat{S}^2 in der Tat hermitesch sind, was auch sein muss, da es sich um Observablen handelt. Die Matrizen für \hat{S}_+ und \hat{S}_- sind nicht hermitesch.

Die Eigenvektoren zum Operator \hat{S}_z sind

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} ,$$

mit dem Eigenwert $+\hbar/2$ und

$$\chi_{-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ,$$

mit dem Eigenwert $-\hbar/2$.

Misst man S_z an einem allgemeinen Zustand (7.140), so erhält man den Wert $+\hbar/2$ mit der Wahrscheinlichkeit $|a|^2$ und den Wert $-\hbar/2$ mit der Wahrscheinlichkeit $|b|^2$, wobei

$$|a|^2 + |b|^2 = 1$$

ist, d.h. die Spinoren müssen normalisiert sein.

Was passiert nun bei der Messung von S_x ? Wir berechnen die Eigenwerte λ und die Eigenspinoren ψ von S_x aus

$$S_x\psi = \lambda\psi$$
,

also mit Darstellung (7.145)

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \psi = \lambda \psi = \lambda \hat{I} \psi = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \psi$$
$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \psi = 0.$$

oder

Als charakteristeristische Gleichung (vergl. mit (5.54)) erhalten wir

det
$$\begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = 0$$

mit den Lösungen

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2} . \tag{7.146}$$

 S_x hat also die gleichen Eigenwerte wi
e $S_z.$ Die dazu gehörigen Eigenspinoren folgen aus der Gleichung

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} ,$$
$$\begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$
$$\beta = \pm \alpha .$$

so dass

und

Die normierten Eigenspinoren von S_x sind dann

$$\chi_{+}^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

mit dem Eigenwert $+\hbar/2$ und

$$\chi_{-}^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

mit dem Eigenwert $-\hbar/2$. Auch diese Eigenspinoren spannen den Hilbertraum auf und wir können den allgemeinen Zustand (7.140) ebenfalls darstellen als

$$\chi = \frac{a+b}{\sqrt{2}}\chi_+^{(x)} + \frac{a-b}{\sqrt{2}}\chi_-^{(x)} .$$

Die Wahrscheinlichkeit für S_x den Wert $\frac{\pm\hbar}{2}$ zu messen ist dann $\frac{1}{2}|a+b|^2$; die Wahrscheinlichkeit für S_x den Wert $\frac{-\hbar}{2}$ zu messen ist dann $\frac{1}{2}|a-b|^2$.

7.6.2 Gedankenexperiment zu den Konzepten der Quantenmechanik

Wir nehmen an, dass sich ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen im Spin-up-Zustand χ_+ befindet, d.h. für die Frage, was ist die z-Komponente des Teilchenspinzustandes, so ist die Antwort eindeutig $\frac{+\hbar}{2}$. Wird S_z gemessen, so erhalten wir sicher diesen Wert.

- F: Was ist die x-Komponente des Teilchenspinzustandes?
- **A:** Das können wir nicht eindeutig beantworten. Mit jeweils 50 zu 50-prozentiger Wahrscheinlichkeit werden wir bei dessen Messung die Werte $-\hbar/2$ oder $+\hbar/2$ erhalten.
- F: Das ist eine unbefriedigende Antwort. Heißt das, dass wir den wahren Zustand des Teilchens nicht kennen?
- **A:** Im Gegenteil: wir wissen genau, dass es im Spin-up-Zustand χ_+ ist.
- **F:** Aber warum kann man dann nicht sagen, was der Wert von S_x ist?
- **A:** Das Teilchen hat keinen bestimmten Wert von S_x in diesem Zustand. Sonst wäre ja auch die Unschärferelation verletzt. Das Teilchen kann nicht gleichzeitig einen wohldefinierten Wert von S_x und S_z haben.
- F nimmt das Versuchsexperiment her und **misst** den Wert von S_x ; sagen wir, er erhält $\frac{+\hbar}{2}$.
- **F:** Aha, du irrst dich: das Teilchen hat doch genau den Wert $\frac{\pm\hbar}{2}$ von S_x .
- A: Klar, den hat es jetzt. Aber das beweist nicht, dass es den vor der Messung auch hatte.
- **F:** Das ist doch Haarspalterei. Und überhaupt, was heißt hier Unschärferelation? Ich kenne jetzt beides: S_x und S_z .

- **A:** Tut mir leid, du weißt es nicht. Durch die Messung hast du den Teilchenzustand geändert: es ist jetzt im Zustand $\chi_{+}^{(x)}$. Du kennst jetzt genau den Wert von S_x , aber nicht mehr den Wert von S_z .
- **F:** Aber ich war extrem sorgfältig, das Teilchen nicht zu stören, als ich S_x gemessen habe.
- A: Falls Du mir nicht glaubst, prüfe es doch nach und sieh, was du erhältst.

F kann bei der Messung natürlich wieder $\langle S_z \rangle = \frac{+\hbar}{2}$ erhalten, aber wenn er diese Prozedur oft genug wiederholt, wird er in der Hälfte der Fälle den Wert $\frac{-\hbar}{2}$ erhalten!

Dieses hypothetische Beispiel zeigt wunderbar das Denkkonzept der Qunatenmechanik auf! Aber es ist schwer, dieses ("Teilchen hat keinen wohldefinierten Wert von S_x etc.") einem Laien verständlich zu machen.

7.6.3 Magnetisches Moment

Wir wissen aus der Elektrodynamik (siehe Elektrodynamik-Vorlesung Kap. 4.7), dass mit dem Bahndrehimpuls \vec{L} eines Elektrons das magnetische Moment

$$\vec{\mu}_{\rm Bahn} = -\frac{e}{2m_ec}\vec{L}$$

verbunden ist.

Auch mit dem Spin ist ein magnetisches Moment assoziiert

$$\vec{\mu}_{\rm Spin} = -g \frac{e}{2m_e c} \vec{S} \tag{7.147}$$

mit dem gyromagnetischen Faktor oder Lande-Faktor g. Der Zeeman-Effekt (vergl. Kap. 8.4) zeigt den Wert g = 2 an. Eine genaue Begründung des Wertes von Gleichung (7.147) folgt aus der Dirac-Gleichung, der relativistischen Wellengleichung für Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen, wie wir später zeigen werden. Für das gesamte magnetische Moment des Elektrons erhalten wir dann mit Gleichung (7.147)

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = -\frac{e}{2m_e c} \left(\vec{L} + 2\vec{S} \right) = -\frac{e}{2m_e c} \left(\vec{L} + \hbar \vec{\sigma} \right) \,. \tag{7.148}$$

Die Wechselwirkungsenergie mit einem Magnetfeld \vec{B} ist dann (siehe Kap. 8.4)

$$H_{int} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \mu_B \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \vec{\sigma}\right) \cdot \vec{B}$$
(7.149)

mit dem Bohrschen Magneton

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e c} \,. \tag{7.150}$$

Durch die Wechselwirkungsenergie (7.149) geht der Spin in die Schrödinger-Gleichung ein. In der Wechselwirkungsenergie gehen $\vec{L} + 2\vec{S}$ additiv ein; die relativistische Theorie liefert allerdings eine gegenseitige Beeinflussung von \vec{L} und \vec{S} gemäß der sog. *Spin-Bahn-Kopplung*, die wir zunächst heuristisch, also nicht streng, herleiten.

7.6.4 Heuristische Herleitung der Spin-Bahn-Kopplung

Im Atom bewegt sich das Elektron relativ zum Kern, der das elektrische Feld $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi(\vec{r})$ verursacht mit $\phi(\vec{r}) = -V(\vec{r})/e$. Da sich das Elektron relativ zum Kern bewegt, sieht es in seinem Ruhesystem die transformierten Felder $\vec{E'}$ und $\vec{B'} \simeq -(\vec{v} \times \vec{E})/c$. Benutzen wir dieses Feld für den Spin-Anteil in Gleichung (7.149), so erhalten wir

$$H^{kl}_{\rm \,Spin-Bahn} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}' = \frac{2\mu_B}{\hbar c} \left(\vec{E} \times \vec{v} \right) \cdot \vec{S} \; . \label{eq:Kline}$$

Mit dem Zentralpotential $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$ gilt

$$\vec{E}(r) = -\frac{d\phi}{dr}\vec{e_r} = -\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\vec{r} \,,$$

so dass mit dem nichtrelativistischen Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \vec{r} \times \vec{v}$ folgt

$$\vec{E} \times \vec{v} = -\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \vec{r} \times \vec{v} = -\frac{1}{m_e r} \frac{d\phi}{dr} \vec{L}$$

Wir erhalten

$$H^{kl}_{\rm Spin-Bahn} = -\frac{2\mu_B}{\hbar m_e c} \left(\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\right) \vec{L} \cdot \vec{S}$$
$$= -\frac{e}{m_e^2 c^2} \left(\frac{1}{r}\frac{d\phi}{dr}\right) \vec{L} \cdot \vec{S}$$
$$= \frac{1}{m_e^2 c^2} \left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\right) \vec{L} \cdot \vec{S} .$$
(7.151)

Bis auf einen Faktor 2 ist Gleichung (7.151) gleich dem exakten relativistischen Ergebnis. Den Einfluss dieser zusätzlichen Wechselwirkungsenergie werden wir mittels der Störungsrechnung in Kapitel 8.2 untersuchen.

7.7 Identische Teilchen, Pauli-Prinzip

In Anlehnung an die Diskussion in Kap. 7.5.2 erhält man die Wellenfunktion für ein 2-Teilchen-System $\Psi(\vec{r_1}, \vec{r_2}, t)$ aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi , \qquad (7.152)$$

mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) . \qquad (7.153)$$

Für zeitunabhängige Potentiale ist

$$\Psi\left(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, t\right) = \psi\left(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}\right) e^{-\imath E t/\hbar} , \qquad (7.154)$$

wobei E die Gesamtenergie des Systems ist und

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2\psi + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\psi = E\psi.$$
(7.155)

Wir lösen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (7.155) mit dem Produktansatz

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1) \,\psi_b(\vec{r}_2) \,\,, \tag{7.156}$$

wobei die Indizes a und b die Zustände a und b kennzeichnen.

Die Lösung (7.156) geht von der Unterscheidbarkeit der Teilchen aus: Teilchen 1 ist im Zustand a und Teilchen 2 ist im Zustand b. Klassisch ist die Unterscheidung möglich zum Beispiel bei blauen und roten Billardkugeln. Aber quantenmechanisch sind Elektronen oder andere Elementarteilchen nicht unterscheidbar, d.h. die Lösung

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_2) \,\psi_b(\vec{r}_1) \tag{7.157}$$

durch Austausch von Teilchen 1 und Teilchen 2 beschreibt die völlig gleiche Situation. Als Konsequenz muss der Lösungsansatz der quantenmechanischen Beschreibung zweier ununterscheidbarer Teilchen so abgeändert werden, dass alle physikalischen Größen, die mit diesem Ansatz berechnet werden, durch den in Gedanken vorgenommenen Austausch der beiden Teilchen unverändert bleiben. Offensichtlich gibt es zwei Möglichkeiten.

1. Möglichkeit: Symmetrische Kombination der beiden gleichberechtigten Produktansätze (7.156) und (7.157):

$$\psi_{\text{sym}} = A \left[\psi_a \left(\vec{r}_1 \right) \psi_b \left(\vec{r}_2 \right) + \psi_b \left(\vec{r}_1 \right) \psi_a \left(\vec{r}_2 \right) \right]$$
(7.158)

mit der Normierungskonstante A. Dieser Ansatz erinnert an die Argumentation beim Doppelspaltexperiment (Kap. 1.6): wenn zwei Realisierungen des Experiments in verschiedener Art nicht unterschieden werden können, so tritt Interferenz auf, die als Überlagerung der Wellenfunktionen gedeutet werden kann. Die symmetrische Wellenfunktion (7.158) bleibt bei einem Austausch der beiden Teilchen völlig ungeändert.

Die Wellenfunktion selbst kann aber nicht beobachtet werden, sondern nach Bornscher Deutung das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi|^2$. Deshalb existiert als

2. Möglichkeit: Antisymmetrische Kombination

$$\psi_{\text{antisym}} = A \left[\psi_a \left(\vec{r_1} \right) \psi_b \left(\vec{r_2} \right) - \psi_b \left(\vec{r_1} \right) \psi_a \left(\vec{r_2} \right) \right] \,. \tag{7.159}$$

Auch diese stellt einen Ansatz dar, der die Ununterscheidbarkeit der Elementarteilchen berücksichtigt.

Die Theorie erlaubt also zwei Arten von identischen Teilchen:

Bosonen mit symmetrischer Wellenfunktion (7.158) wie etwa Photonen und Mesonen,

Fermionen mit antisymmetrischer Wellenfunktion (7.159) wie etwa Protonen und Elektronen.

Die relativistische Quantenmechanik zeigt, dass Bosonen einen ganzzahligen Spin oder Spin Null haben und Fermionen haben halbzahligen Spin.

Aus der Antisymmetrie ihrer Wellenfunktionen folgt sofort als wichtige Eigenschaft der Fermionen das *Paulische Ausschlussprinzip*: Zwei identische Fermionen (z.B. Elektronen) können sich nicht im gleichen Zustand befinden.

Denn mit $\psi_a = \psi_b$ wäre die antisymmetrische Wellenfunktion (7.159)

$$\psi_{\text{antisym}} = A \left[\psi_a \left(\vec{r_1} \right) \psi_a \left(\vec{r_2} \right) - \psi_a \left(\vec{r_1} \right) \psi_a \left(\vec{r_2} \right) \right] = 0.$$

Dies formulieren wir allgemeiner mit dem Austausch-Operator \hat{P} , der definiert ist durch

$$\hat{P}f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f(\vec{r}_2, \vec{r}_1) .$$
(7.160)

Daraus folgt sofort

$$\hat{P}^2 f(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \hat{P} \left[\hat{P} f(\vec{r_1}, \vec{r_2}) \right] = \hat{P} f(\vec{r_2}, \vec{r_1}) = f(\vec{r_1}, \vec{r_2}) ,$$

also $\hat{P}^2 = 1$, so dass die Eigenwerte von \hat{P} gleich ± 1 sind.

Sind zwei Teilchen identisch ($m_1 = m_2$), so ist der Hamilton-Operator (7.153) wegen $V(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = V(\vec{r_2}, \vec{r_1})$ identisch bezüglich Teilchen 1 und 2, so dass der Kommutator

$$\left[\hat{P},\hat{H}\right] = 0.$$
(7.161)

 \hat{P} und \hat{H} sind gleichzeitig scharf messbare Observable und man kann ein gemeinsames System von Eigenfunktionen finden: entweder **symmetrische** zum Eigenwert +1

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

für Bosonen, oder antisymmetrische zum Eigenwert -1

$$\psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right) = -\psi\left(\vec{r}_2, \vec{r}_1\right)$$

für Fermionen.

Startet ein System in einem dieser Zustände, so bleibt es in diesem Zustand. Sei etwa für Bosonen $\hat{P}\psi(t_0) = \psi(t_0)$. Im Schrödinger-Bild folgt dann für spätere Zeiten mit (7.161)

$$\hat{P}\psi(t) = \hat{P}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\hat{P}\psi(t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) = \psi(t) .$$

Und für Fermionen $\hat{P}\psi(t_0) = -\psi(t_0)$ analog

$$\hat{P}\psi(t) = \hat{P}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\hat{P}\psi(t_0) = -e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) = -\psi(t) .$$
7.8 Periodisches System

Ein neutrales Atom mit der Ladungszahl Z besteht aus einem schweren Kern mit der Masse M und der Ladung Ze und Z Elektronen mit der Masse m_e und der Ladung -e. Nach der Separation der Kernbewegung (siehe Kap. 7.5.2) lautet der Hamilton-Operator der Relativbewegung der Elektronen in Ortsdarstellung

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{Z} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_j^2 - \frac{Ze^2}{r_j} \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|} , \qquad (7.162)$$

mit den Relativkoordinaten $\vec{r_j}$ in Bezug auf den Atomkern. Der erste Term beschreibt die kinetische Energie der Elektronen, der zweite die potentielle Energie im Feld des Atomkerns und der dritte die gegenseitige Abstoßung der Elektronen. Der Faktor (1/2) im dritten Term tritt auf, weil bei der Summation jedes Paar zweimal gezählt wird. Der Hamilton-Operator geht ein in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_Z) = E\psi(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_Z)$$
 (7.163)

Weil die Elektronen identische Fermionen sind, sind nur solche Lösungen (mit Ort und Spin)

$$\psi\left(\vec{r}_{1},\ldots,\vec{r}_{Z}\right)\chi\left(\vec{S}_{1},\ldots,\vec{S}_{Z}\right)$$
(7.164)

akzeptabel, die antisymmetrisch beim Austausch zweier beliebiger Elektronen sind. Die Schrödinger-Gleichung (7.163) ist nur für Z = 1 geschlossen lösbar (oder für 1-Elektronen-Atome (vergl. Coulomb-Problem Kap. 7.5)). Für $Z \ge 2$ gibt es **keine** exakte Lösung wegen der Schwierigkeiten durch den Abstoßterm im Hamilton-Operator (7.162).

7.8.1 Helium (Z = 2)

Vernachlässigen wir den Abstoßterm, lautet der Hamilton-Operator (7.162) für Helium

$$\hat{H} \simeq \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \right] \,. \tag{7.165}$$

Für diese Näherung separiert die Schrödinger-Gleichung und wir erhalten die Wellenfunktion als Produkt zweier "Wasserstoff"-Wellenfunktionen

$$\psi\left(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}\right) = \psi_{nlm}\left(\vec{r}_{1}\right)\psi_{n'l'm'}\left(\vec{r}_{2}\right) \tag{7.166}$$

mit dem Bohrradius $a_{He} = r_0/2$ und der Bohr-Energie $E_{He} = 4E_{n_r}$ wegen des Faktors $Z^2 = 4$ in (7.108). Die Gesamtenergie wäre $E_{He} = 4(E_n + E_{n'})$ wobei $E_n = -13.6/n^2$ eV. Nach (7.84), (7.87) und (7.113) ist

$$\psi_{nlm} = R_n(r)Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\phi) ,$$

$$\psi_{100} = c_1 e^{-2r/r_0} P_0(\theta) = \sqrt{\frac{8}{\pi r_0^3}} e^{-2r/r_0} .$$
(7.167)

so dass

Damit erhalten wir für den He-Grundzustand

$$\psi_0(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \psi_{100}(\vec{r_1}) \psi_{100}(\vec{r_2}) = \frac{8}{\pi r_0^3} e^{-2(r_1 + r_2)/r_0}$$
(7.168)

(7.169)

mit der Energie

Da ψ_0 nach Gleichung (7.168) **symmetrisch** ist, muss gemäß Gleichung (7.164) der Spin-Zustand **antisymmetrisch**, d.h. Singlet-Zustand, sein. Der Grundzustand ist also in Singlet-Konfiguration mit gegensätzlich ($\uparrow \downarrow$) ausgerichteten Spins. **Experimentell** bestätigte sich der Singlet-Zustand des Grundzustands des Heliums, jedoch wurde der Grundzustandsenergiewert zu $E_0 = -78.975$ eV gemessen, in großer Abweichung von (7.169). Mit einer Störungsrechnung unter Berücksichtigung des Abstoßterms erhält man einen verbesserten theoretischen Wert für E_o (Übungsaufgabe).

 $E_0 = 8(-13.6) \text{ eV} \simeq -109 \text{ eV}$.

Betrachten wir jetzt die angeregten Zustände von Helium: wir haben ein Elektron im Wasserstoff-ähnlichen Grundzustand ψ_{100} , das andere im angeregten Zustand ψ_{nlm} , so dass der Ortsanteil der Gesamtwellenfuntion durch das Produkt $\psi_{100}\psi_{nlm}$ gegeben ist. Wir können dann

- symmetrische Ortswellenfunktionen mit antisymmetrischen Spinzuständen (sog. Singlet-Zustände) kombinieren und erhalten sog. Parahelium-Zustände, oder
- antisymmetrische Ortswellenfunktionen mit symmetrischen Spinzuständen (sog. Triplet-Zustände) kombinieren und erhalten sog. Orthohelium-Zustände.

In dieser Terminologie ist der Grundzustand natürlich Parahelium, während die angeregten Zustände in beiden Formen, Orthohelium und Parahelium, vorkommen.

7.8.2 Metalle (Z > 2)

Die Konstruktion der Zustände für schwere Kerne (Z > 2) verläuft ähnlich wie bei Helium. Vernachlässigen wir wieder den Elektronen-Abstoßungsterm, dann besetzen die einzelnen Elektronen wasserstoffähnliche Zustände (n, l, m) im Feld des Atomkerns, sog. *Orbitale.* Wären die Elektronen Bosonen oder unterscheidbare Teilchen, so würden sie alle den Grundzustand (1, 0, 0) einnehmen und Chemie wäre langweilig!

Aber Elektronen sind identische Fermionen, so dass immer 2 das gleiche Orbital besetzen können, eins mit Spin \uparrow $(+\frac{1}{2})$, das andere mit Spin \downarrow $(-\frac{1}{2})$.

Es gibt n^2 wasserstoffähnliche Wellenfunktionen (alle mit der gleichen Energie E_n) für vorgegebenes n:

- die n = 1 Schale bietet Platz für 2 Elektronen,
- die n = 2 Schale bietet Platz für 8 Elektronen,
- die n = 3 Schale bietet Platz für 18 Elektronen,
- die n-te Schale bietet Platz für $2n^2$ Elektronen.

Jede horizontale Zeile des Periodensystems korrespondiert zum Ausfüllen einer Schale: ohne Abstoßungsterm:

- 1. Zeile hat Länge 2,
- 2. Zeile hat Länge 8,
- 3. Zeile hat Länge 18,
- 4. Zeile hat Länge 32,
- 5. Zeile hat Länge 50.

In Wirklichkeit sind die ersten fünf Zeilen in Abweichung davon 2, 8, 8, 18 und 18 Elemente lang, was am nichtberücksichtigten Abstoßungsterm liegen muss.

Mit Helium ist die n = 1 Schale gefüllt. Das nächste Atom **Lithium** mit Z = 3 muss ein Elektron in die n = 2 Schale platzieren. Für n = 2 kann l = 0, 1 sein; welchen Wert von l nimmt das dritte Elektron an? Ohne Abstoßung durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung, haben beide l-Zustände die gleiche Energie E_n . Aber der Abstoßungsterm bevorzugt den kleineren l-Wert, da der durch den Drehimpuls verursachte Zentrifugalterm im effektiven Potential (7.89) das dritte Elektron weiter vom Kern weg bewegt, so dass die inneren Elektronen das Kernpotential besser abschirmen. Das 3. Elektron im Lithium besetzt also das Orbital (2, 0, 0).

Beryllium (Z = 4) geht ins gleiche Orbital, aber mit "entgegengesetztem" Spin. Bor (Z = 5) muss das l = 1 Orbital ausnutzen usw. bis zum Neon (Z = 10), dann ist die n = 2 Schale voll.

Für die nächste Zeile im Periodensystem fangen wir an, die n = 3 Schale zu füllen: 2 Atome (Natrium und Magnesium) mit l = 0 und 6 Atome (Aluminium bis Argon) mit l = 1. Danach sollte es 10 Atome mit n = 3 und l = 2 geben, aber die Abschirm-Effekte sind so stark, dass man bereits Überlappung mit der nächsten Schale hat.

Abschließend erwähnen wir die spektroskopische Notation für atomare Zustände:

 $\begin{aligned} - & l = 0 \text{ heißt "s" ("scharfer" Zustand),} \\ - & l = 1 \text{ heißt "p" ("prinzipal"),} \\ - & l = 2 \text{ heißt "d" ("diffus"),} \\ - & l = 3 \text{ heißt "f" ("fundamental"),} \\ - & danach alphabetisch \\ - & l = 4 \iff g, \\ - & l = 5 \iff h, \\ - & l = 6 \iff i. \end{aligned}$

Der Zustand eines speziellen Elektrons wird repräsentiert durch das Paar (nl). Die Quantenzahl m wird nicht aufgeführt, aber mit einem Exponent wird die Zahl der Elektronen in einem bestimmten Zustand angedeutet.

Beispiel: $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ zeigt an: 2 Elektronen im Orbital (1,0,0), 2 Elektronen im Orbital (2,0,0) und 2 Elektronen in irgendeiner Kombination der Orbitale (2,1,1), (2,1,0) oder (2,1,-1). Es handelt sich also um den Grundzustand von Kohlenstoff.

7 Dreidimensionale Quantensysteme

Nur in wenigen Fällen ist die Schrödinger-Gleichung

$$\imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

geschlossen lösbar, weil der Hamilton-Operator \hat{H} oft zu kompliziert ist. In solchen Fällen versucht man die Zerlegung

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

in einen Störoperator \hat{V} und einen ungestörten Hamilton-Operator \hat{H}_0 , der nicht explizit von der Zeit abhängt, und für den die Schrödinger-Gleichung lösbar ist:

$$\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$$

mit ungestörten Energiewerten E_n^0 und ungestörten Wellenfunktionen ψ_n^0 . Fallunterscheidung:

- 1. Der Störoperator \hat{V} ist nicht explizit von der Zeit t abhängig. Dann gelangt man zur *zeitunabhängigen Störungstheorie* und erhält eine Veränderung der stationären Zustände und Energieniveaus.
- 2. Der Störoperator \hat{V} ist explizit von der Zeit t abhängig. Das System ist dann sicher nicht abgeschlossen. Es liegt oft die zeitweise Wechselwirkung mit einem äußeren Feld, meist elektromagnetischer Strahlung, vor. Dann gelangt man zur *zeitabhängigen Störungstheorie*. In diesem Fall ist die Veränderung der Zustände und Energieniveaus i.A. vernachlässigbar, allerdings erhält man statt dessen Übergänge zwischen stationären ungestörten Niveaus.

8.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Unter dem Einfluss der Störung gehen die ungestörten Energieniveaus E_n^0 über in die gestörten E_n . Dabei sind wieder zwei Fälle zu unterscheiden. Wegen der Symmetrie des Systems können einzelne oder alle ungestörte Energieniveaus entartet sein. Diese Entartung kann durch die Störung ganz oder teilweise aufgehoben werden, so dass es zu einer Aufspaltung kommt.

8.1.1 Nicht-entarteter Eigenwert

Gesucht sind die Lösungen ψ_n der exakten (gestörten) Schrödinger-Gleichung, die wir durch den ket-Vektor $|n\rangle$ mit einer Quantenzahl n kennzeichnen können, da der Zustand nichtentartet ist:

$$\hat{H}|n >= \left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)|n >= E_n|n > .$$
 (8.1)

Bekannt sind die Lösungen $\psi^0_n = |n^0> {\rm der}$ ungestörten Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \quad . \tag{8.2}$$

Die Voraussetzung einer kleinen Störung wird dadurch erfüllt, dass man

$$\hat{V} = \lambda \hat{W} \tag{8.3}$$

setzt und den Fall $\lambda \ll 1$ betrachtet. Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle . \tag{8.4}$$

Zu deren Lösung entwickeln wir |n > und E_n in Potenzreihen in λ :

$$|n \rangle = |n^{0} \rangle + \lambda |n^{1} \rangle + \lambda^{2} |n^{2} \rangle + \dots , \qquad (8.5)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots .$$
 (8.6)

Durch Gleichung (8.5) sind die $|n^p>$ noch nicht vollständig festgelegt; daher fordern wir noch zusätzlich

$$\left\langle n^0 | n^p \right\rangle = 0, \qquad p \ge 1 . \tag{8.7}$$

Einsetzen von (8.5)-(8.6) in die Schrödinger-Gleichung (8.4) liefert dann

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_0 + \lambda \hat{W} \end{pmatrix} \left(|n^0 \rangle + \lambda |n^1 \rangle + \lambda^2 |n^2 \rangle + \dots \right)$$

= $\left(E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \right) \left(|n^0 \rangle + \lambda |n^1 \rangle + \lambda^2 |n^2 \rangle + \dots \right)$

und nach Ordnen nach Potenzen von λ

$$\hat{H}_{0}|n^{0} > + \lambda \left(\hat{H}_{0}|n^{1} > +\hat{W}|n^{0} >\right) + \lambda^{2} \left(\hat{H}_{0}|n^{2} > +\hat{W}|n^{1} >\right) + \dots \\
= E_{n}^{0}|n^{0} > +\lambda \left(E_{n}^{0}|n^{1} > +E_{n}^{1}|n^{0} >\right) \\
+ \lambda^{2} \left(E_{n}^{0}|n^{2} > +E_{n}^{1}|n^{1} > +E_{n}^{2}|n^{0} >\right) + \dots .$$
(8.8)

Die niedrigste Ordnung λ^0 :

$$\hat{H}_0|n^0>=E_n^0|n^0>$$

entspricht gerade dem ungestörten Fall (8.2). Die erste Ordnung λ^1 liefert

$$\hat{H}_0|n^1 > +\hat{W}|n^0 > = E_n^0|n^1 > +E_n^1|n^0 >$$
(8.9)

und in 2. Ordnung λ^2 erhalten wir

$$\hat{H}_0|n^2 > +\hat{W}|n^1 > = E_n^0|n^2 > +E_n^1|n^1 > +E_n^2|n^0 > .$$
(8.10)

Wir multiplizieren Gleichung (8.9) mit $< n^0$ mit dem Ergebnis

$$< n^{0} |\hat{H}_{0}|n^{1} > + < n^{0} |\hat{W}|n^{0} > = E_{n}^{0} < n^{0} |n^{1} > + E_{n}^{1} < n^{0} |n^{0} >$$
$$= E_{n}^{0} < n^{0} |n^{1} > + E_{n}^{1} ,$$
(8.11)

da die $|n^0>$ normiert ($\langle n^0|n^0>=1$) sind. Weil \hat{H}_0 hermitesch ist, gilt

$$< n^{0}|\hat{H}_{0}|n^{1}> = < n^{0}\hat{H}_{0}|n^{1}> = E_{n}^{0} < n^{0}|n^{1}>$$

 $V E^1 = \langle m^0 | \hat{V} | m^0 \rangle$

und wir erhalten aus Gleichung (8.11)

$$E_n^1 = \langle n^0 | \hat{W} | n^0 \rangle \tag{8.12}$$

oder

$$\lambda E_n^1 = \langle n^0 | \hat{V} | n^0 \rangle .$$
 (8.13)

Die Potenzreihe (8.6) bis zur ersten Ordnung im Störparameter λ ergibt dann

$$E_n \simeq E_n^0 + \langle n^0 | \hat{V} | n^0 \rangle,$$
 (8.14)

nach Fermi's Aussage, eine der wichtigsten Formeln der Quantenmechanik. Bemerkenswert ist, dass zur Berechnung der 1. Korrektur des Eigenwerts nur die ungestörten Zustandsvektoren $|n^0 >$ nötig sind.

Die Korrektur 1. Ordnung des Zustandsvektors folgt ebenfalls aus Gleichung (8.9). Stellt man diese um zu

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^0\right)|n^1 > = -\left(\hat{W} - E_n^1\right)|n^0 > , \qquad (8.15)$$

so erhalten wir eine inhomogene Differentialgleichung zur Bestimmung von $|n^1>$, weil mit (8.12) die rechte Seite bekannt ist.

Die ungestörten Zustandsvektoren $|n^0 >$ bilden ein vollstandiges Orthonormalsystem, d.h. wir können entwickeln

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle$$
 . (8.16)

Der Term m=n ist nicht nötig, denn wenn $|n^1>$ (8.15) erfüllt, so erfüllt auch $|n^1>$ $+\alpha | n^0 >$ diese Gleichung und wir können mit α den m = n-Term subtrahieren. Setzen wir die Entwicklung (8.16) ein, so folgt für (8.15)

$$\sum_{m \neq n} \left(\hat{H}_0 - E_n^0 \right) c_m | m^0 \rangle = - \left(\hat{W} - E_n^1 \right) | n^0 \rangle ,$$

so dass nach Multiplikation mit $< k^0$

$$\sum_{m \neq n} c_m < k^0 | \left(\hat{H}_0 - E_n^0 \right) | m^0 > = - < k^0 | \left(\hat{W} - E_n^1 \right) | n^0 >$$

 ${\rm Mit}\; \hat{H}_0|m^0>=E^0_m|m^0>{\rm erhalten\; wir}$

$$\sum_{m \neq n} c_m < k^0 | (E_m^0 - E_n^0) | m^0 > = \sum_{m \neq n} c_m (E_m^0 - E_n^0) \delta_{km}$$
$$= - < k^0 | \hat{W} | n^0 > + E_n^1 < k^0 | n^0 >$$
$$= - < k^0 | \hat{W} | n^0 > + E_n^1 \delta_{kn}$$

oder für alle $k \neq n$

$$c_k \left(E_k^0 - E_n^0 \right) = - \langle k^0 | \hat{W} | n^0 \rangle$$

Mit k = m folgt

$$c_m = -\frac{\langle m^0 | \hat{W} | n^0 \rangle}{E_m^0 - E_n^0}, \qquad \forall m \neq n.$$

Die Entwicklung (8.16) wird dann zu

$$|n^{1}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{0} | \hat{W} | n^{0} \rangle}{E_{n}^{0} - E_{m}^{0}} | m^{0} \rangle \quad .$$
(8.17)

Die Potenzreihe (8.5) bis zur ersten Ordnung im Störparameter λ ergibt dann

$$|n \rangle \simeq |n^{0} \rangle + \lambda |n^{1} \rangle = |n^{0} \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{0} | V | n^{0} \rangle}{E_{n}^{0} - E_{m}^{0}} | m^{0} \rangle .$$
(8.18)

Die Summe erstreckt sich über alle von $|n^0\rangle$ verschiedenen Zustände und kann auch Integrale über kontinuierliche Bereiche enthalten. Dies kann zu Konvergenzproblemen führen und macht eine Aufsummation in geschlossener Form in der Regel unmöglich. Die Beiträge der übrigen Zustände enthalten aber im Nenner den Energieabstand $E_n^0 - E_m^0$ und werden mit großem energetischen Abstand klein, so dass man sich häufig auf benachbarte Energieniveaus beschränken kann.

In der Störungstheorie 2. Ordnung multipliziert man Gleichung (8.10) mit < $n^0|$ mit dem Ergebnis

$$< n^{0} | \left(\hat{H}_{0} - E_{n}^{0} \right) | n^{2} > + < n^{0} | \hat{W} | n^{1} > - E_{n}^{1} < n^{0} | n^{1} > = E_{n}^{2} < n^{0} | n^{0} > = E_{n}^{2} .$$

$$(8.19)$$

Der dritte Term verschwindet wegen Forderung (8.7). Auch der erste Term verschwindet wegen der Hermitezität von \hat{H}_0 :

$$< n^{0} | \left(\hat{H}_{0} - E_{n}^{0} \right) | n^{2} > = < n^{0} | \hat{H}_{0} | n^{2} > -E_{n}^{0} < n^{0} | n^{2} >$$
$$= < n^{0} \hat{H}_{0} | n^{2} > -E_{n}^{0} < n^{0} | n^{2} >$$
$$= \left(E_{n}^{0} - E_{n}^{0} \right) < n^{0} | n^{2} > = 0 .$$

Gleichung (8.19) ergibt dann

$$E_n^2 = < n^0 |\hat{W}| n^1 >$$

8.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

und nach Einsetzen von Ergebnis (8.17)

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} < n^0 |\hat{W} \frac{< m^0 |\hat{W}| n^0 >}{E_n^0 - E_m^0} |m^0 > = \sum_{m \neq n} \frac{|< m^0 |\hat{W}| n^0 > |^2}{E_n^0 - E_m^0} .$$
(8.20)

Es handelt sich also wieder um die gleiche Summation wie bei der Korrektur der Wellenfunktion.

8.1.2 Entarteter Eigenwert

Die Eigenwerte von \hat{H}_0 sind jetzt durch n nicht mehr eindeutig gekennzeichnet; wir brauchen (mindestens) einen weiteren Operator \hat{L} , der mit \hat{H}_0 kommutiert und dessen Eigenwerte durch l bezeichnet werden. Die gemeinsamen Eigenfunktionen $|n, l^0 > \text{von } \hat{H}_0$ und \hat{L} bilden dann eine Basis des zu E_n^0 gehörenden Unterraums

$$\hat{H}_0|n, l^0 > = E_n^0|n, l^0 >, \qquad l = 1, 2, \dots, N.$$

Die Eigenfunktionen |n, k > des gestörten Hamilton-Operators \hat{H} erfüllen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}|n,k\rangle = \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}\right)|n,k\rangle = E_{nk}|n,k\rangle$$
(8.21)

und gehen für verschwindende Störung $\lambda \to 0$ über in die Eigenfunktionen $|n, k^0 > \text{von } \hat{H}_0$ zum Eigenwert E_n^0 . Diese lassen sich daher darstellen als

$$|n,k^{0}\rangle = \sum_{l=1}^{N} c_{kl}|n,l^{0}\rangle$$
 (8.22)

Durch Reihenentwicklung nach dem Störparameter λ :

$$|n,k\rangle = |n,k^{0}\rangle + \lambda |n,k^{1}\rangle + \lambda^{2} |n,k^{2}\rangle + \dots,$$

$$E_{nk} = E_{n}^{0} + \lambda E_{nk}^{1} + \lambda^{2} E_{nk}^{2} + \dots$$

und Einsetzen in die Eigenwertgleichung (8.21) ergibt sich

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}) (|n, k^0 > + \lambda | n, k^1 > + \lambda^2 | n, k^2 > + \dots)$$

= $(E_n^0 + \lambda E_{nk}^1 + \lambda^2 E_{nk}^2 + \dots)$
 $\times (|n, k^0 > + \lambda | n, k^1 > + \lambda^2 | n, k^2 > + \dots) .$

Die niedrigste Ordnung λ^0 :

$$\hat{H}_0|n,k^0>=E_n^0|n,k^0>$$

entspricht gerade wieder dem ungestörten Fall. Die erste Ordnung λ^1 liefert

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^0\right)|n, k^1 > + \left(\hat{W} - E_{nk}^1\right)|n, k^0 > = 0.$$
(8.23)

Die Multiplikation mit $< n, l^0$ | liefert

$$\begin{split} \left(\left\langle n, l^{0} \left| \hat{H}_{0} \right| n, k^{1} \right\rangle - E_{n}^{0} \left\langle n, l^{0} | n, k^{1} \right\rangle \right) + \left\langle n, l^{0} \left| \hat{W} \right| n, k^{0} \right\rangle - \left\langle E_{nk}^{1} \left\langle n, l^{0} | n, k^{0} \right\rangle \\ \left(\left\langle n, l^{0} \hat{H}_{0} \left| n, k^{1} \right\rangle - E_{n}^{0} \left\langle n, l^{0} \right| n, k^{1} \right\rangle \right) + \left\langle n, l^{0} \left| \hat{W} \right| n, k^{0} \right\rangle - \left\langle E_{nk}^{1} \left\langle n, l^{0} | n, k^{0} \right\rangle \\ \left(E_{n}^{0} - E_{n}^{0} \right) \left\langle n, l^{0} \left| n, k^{1} \right\rangle + \left\langle n, l^{0} \right| \hat{W} \left| n, k^{0} \right\rangle - \left\langle E_{nk}^{1} \left\langle n, l^{0} \right| n, k^{0} \right\rangle \\ \left\langle n, l^{0} \left| \hat{W} \right| n, k^{0} \right\rangle - \left\langle E_{nk}^{1} \left\langle n, l^{0} \right| n, k^{0} \right\rangle \\ = \left\langle n, l^{0} \left| \hat{W} \right| n, k^{0} \right\rangle - \left\langle E_{nk}^{1} \left\langle n, l^{0} \right| n, k^{0} \right\rangle \\ = 0 \, . \end{split}$$

Das Einsetzen der Entwicklung (8.22) liefert das lineare, homogene Gleichungssystem

$$\sum_{\bar{l}=1}^{N} c_{k\bar{l}} \left\langle n, l^{0} \left| \hat{W} \right| n, \bar{l}^{0} \right\rangle = c_{kl} E_{nk}^{1}$$

$$(8.24)$$

für die Koeffizienten c_{kl} . Nichttriviale Lösungen existieren nur, wenn die dazugehörende Säkulardeterminate verschwindet:

$$\begin{vmatrix} w_{11} - E_{nk}^{1} & w_{12} & \dots & w_{1N} \\ w_{21} & w_{22} - E_{nk}^{1} & \dots & w_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{N1} & w_{N2} & \dots & w_{NN} - E_{nk}^{1} \end{vmatrix} = 0 ,$$

$$(8.25)$$

wobei wir die Abkürzung

$$w_{l\bar{l}} = \left\langle n, l^0 \left| \hat{W} \right| n, \bar{l}^0 \right\rangle$$

verwenden. Die Gleichung (8.25) vom Grade N hat N Lösungen E_{nk}^1 für k = 1, 2, ..., N. Da \hat{W} hermitesch ist, sind sie alle reell, aber nicht notwendig verschieden. Die Entartung wird durch die Störung in der Regel nur teilweise aufgehoben.

Zu jeder Lösung E_{nk}^1 gehört ein Satz von N Koeffizienten c_{kl} für l = 1, ..., N, wobei wegen der Normierung gilt

$$\sum_l c_{kl}^2 = 1 \; . \label{eq:ckl}$$

Durch geeignete Auswahl der Basisvektoren kann man erreichen, dass $|n, k^0 \rangle = |n, l^0 \rangle$. In dieser speziellen Basis wird Gleichung (8.24) einfach zu

$$E_{nk}^{1} = \left\langle n, k^{0} \left| \hat{W} \right| n, \bar{k}^{0} \right\rangle .$$

Multiplizieren wir Gleichung (8.23) von links mit $< m, \bar{k}^0$, $m \neq n$, erhalten wir

$$0 = \left\langle m, \bar{k}^{0} \left| \left(\hat{H}_{0} - E_{n}^{0} \right) \right| n, k^{1} \right\rangle + \left\langle m, \bar{k}^{0} \left| \left(\hat{W} - E_{nk}^{1} \right) \right| n, k^{0} \right\rangle$$

$$= \left\langle m, \bar{k}^{0} \left| \hat{H}_{0} \right| n, k^{1} \right\rangle - \left| E_{n}^{0} \left\langle m, \bar{k}^{0} \right| n, k^{1} \right\rangle + \left\langle m, \bar{k}^{0} \left| \hat{W} \right| n, k^{0} \right\rangle - E_{nk}^{1} \delta_{mn} .$$

Lässt man hier \hat{H}_0 nach links wirken, so folgt wegen seiner Hermitezität und $m \neq n$

$$\begin{split} \left(E_m^0 - E_n^0 \right) \left\langle m, \bar{k}^0 | n, k^1 \right\rangle + \left\langle m, \bar{k}^0 \left| \hat{W} \right| n, k^0 \right\rangle &= 0 , \\ \text{dass} & \left\langle m, \bar{k}^0 | n, k^1 \right\rangle &= \left. \frac{\left\langle m, \bar{k}^0 \left| \hat{W} \right| n, k^0 \right\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right. \end{split}$$

so dass

Das Einsetzen in die Reihenentwicklung von |n,k> nach $|n,k^0>$ ergibt dann bis auf Terme 2. Ordnung in λ

$$|n,k\rangle \simeq \sum_{m} \sum_{\bar{k}} \langle m,\bar{k}^{0} | n,k\rangle | m,k^{0} \rangle$$

= $|n,k^{0}\rangle + \sum_{m\neq n} \sum_{\bar{k}} \frac{\langle m,\bar{k}^{0} | \hat{V} | n,k^{0} \rangle}{E_{n}^{0} - E_{m}^{0}} | m,\bar{k}^{0} \rangle$ (8.26)

Im Vergleich zu Gleichung (8.18) im nicht-entarteten Fall erhalten wir die zusätzliche Summation über \bar{k} .

8.2 Anwendung: Feinstruktur von Wasserstoff

Bisher haben wir das Wasserstoffatom (siehe Kap. 7.5) mit dem ungestörten Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r}$$
(8.27)

berechnet. Die Feinstruktur wird jetzt durch die drei Korrekturen:

- 1. relativistische Korrektur
- 2. Spin-Bahn-Kopplung (vergl. Kap. 7.6.4)
- 3. Darwin-Term

hervorgerufen, von denen wir hier die ersten beiden genauer betrachten.

8.2.1 Relativistische Korrektur des Hamilton-Operators

Der erste Term des Hamilton-Operators (8.27) repräsentiert die kinetische Energie ($\mu = m_e$)

$$T = \frac{m_e}{2}v^2 = \frac{p^2}{2m_e}$$
(8.28)

nach dem korrespondenzmäßigen Übergang $p \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ in der Ortsdarstellung. Gleichung (8.28) ist aber der klassische nichtrelativistische Ausdruck für die kinetische Energie. Der

korrekte speziell-relativistische Ausdruck lautet

$$T = (\gamma - 1) m_e c^2 = m_e c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} - 1 \right] ,$$

$$T = E - m_e c^2$$

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4}$$

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 = m_e c^2 \left[\sqrt{1 + \left(\frac{p}{m_e c}\right)^2} - 1 \right] . \quad (8.29)$$

Für kleine Werte von $x=(p/m_ec)^2\ll 1$ benutzen wir die Entwicklung

$$\sqrt{1+x} \simeq 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8}$$

und erhalten

oder mit und

$$T \simeq m_e c^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{m_e c} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{p}{m_e c} \right)^4 - 1 \right] = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \,. \tag{8.30}$$

In niedrigster Ordnung erhalten wir als relativistische Korrektur zum klassischen Ausdruck (8.28)

$$T_r = -\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}$$

und damit nach dem korrespondenzmäßigen Übergang als Korrektur des Hamilton-Operators

$$\hat{H}_r = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} \,. \tag{8.31}$$

Nach Gleichung (8.14) ergibt sich für die Störung der Energie
eigenwerte dann aufgrund der Hermitezität von \hat{p}^2

$$E_{r}^{1} = E_{n}^{1} - E_{n}^{0} = \left\langle \hat{H}_{r} \right\rangle = \left\langle n^{0} \left| \hat{H}_{r} \right| n^{0} \right\rangle$$
$$= -\frac{1}{8m_{e}^{3}c^{2}} \left\langle n^{0} \left| \hat{p}^{4} \right| n^{0} \right\rangle$$
$$= -\frac{1}{8m_{e}^{3}c^{2}} \left\langle n^{0} \hat{p}^{2} \right| \hat{p}^{2} n^{0} \right\rangle .$$
(8.32)

Die Schrödinger-Gleichung für das ungestörte Problem lautet

$$\hat{p}^2 \left| n^0 \right\rangle = 2m_e \left(E_n^0 - V \right) \left| n^0 \right\rangle$$

so dass für Gleichung (8.32) folgt

$$E_r^1 = E_n^1 - E_n^0 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left\langle \left(E_n^0 - V\right)^2 \right\rangle \\ = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[\left(E_n^0\right)^2 - 2E_n^0 \left\langle V \right\rangle + \left\langle V^2 \right\rangle \right] \,.$$

 ${\rm Mit}\ V(r)=-e^2/r\ {\rm erhalten}\ {\rm wir}$

$$E_r^1 = E_n^1 - E_n^0 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[\left(E_n^0 \right)^2 + 2E_n^0 e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right] , \qquad (8.33)$$

wobei die Erwartungswerte < 1/r > und $< 1/r^2 >$ mithilfe der ungestörten Ortswellenfunktionen $< \vec{r} | n^0 > = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ berechnet werden.

Für die ungestörten Wellenfunktionen gilt die *Kramers-Relation* (Beweis als Übungsaufgabe) für die Erwartungswerte (mit Bohrradius (2.78) $a = r_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$)

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1) a \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} \left[(2l+1)^2 - s^2 \right] a^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0.$$
 (8.34)

Für s = 0 erhält man daraus sofort

$$\frac{1}{n^2} = a \langle r^{-1} \rangle$$
$$\frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{an^2}.$$

oder

Für $< 1/r^2 >$ ergibt sich (ohne Beweis)

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{\left(l + \frac{1}{2}\right)n^3 a^2}$$

Für die Energiekorrektur (8.33) finden wir dann

$$E_r^1 = E_n^1 - E_n^0 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[\left(E_n^0\right)^2 + 2E_n^0 \frac{e^2}{n^2 a} + \frac{e^4}{\left(l + \frac{1}{2}\right)n^3 a^2} \right] ,$$

$$\frac{1}{a} = \frac{1}{r_0} = -\frac{2E_1}{e^2} = -\frac{2E_n^0 n^2}{e^2}$$

so dass mit

wir nach Gleichung (7.111) erhalten

$$E_r^1 = E_n^1 - E_n^0 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[\left(E_n^0 \right)^2 - 4 \left(E_n^0 \right)^2 + \frac{4n}{l + \frac{1}{2}} \left(E_n^0 \right)^2 \right]$$
$$= -\frac{\left(E_n^0 \right)^2}{2m_e c^2} \left[\frac{4n}{l + \frac{1}{2}} - 3 \right].$$
(8.35)

Die relative Korrektur E_r^1/E_n^0 ist von der Größenordnung $E_n^0/(m_ec^2) \simeq \alpha_f^2$.

8.2.2 Spin-Bahn-Kopplung

Mit dem Potential $V(r) = -e^2/r$ erhalten wir für den Spin-Bahn-Kopplungs-Wechselwirkungs-Hamilton-Operator (7.151)

$$\hat{H}_{\rm S-B} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr}\right) \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} .$$
(8.36)

Mit diesem Beitrag kommutiert der Gesamt-Hamilton-Operator $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{Spin-Bahn}}$ nicht mehr mit dem Bahndrehimpuls-Operator $\hat{\vec{L}}$ und dem Spin $\hat{\vec{S}}$, so dass Spin und Bahndrehimpuls getrennt nicht mehr Erhaltungsgrößen sind. Aber: $\hat{H}_{\text{Spin-Bahn}}$ kommutiert mit $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{\vec{S}}^2$ und dem **Gesamtdrehimpuls**

$$\vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S} , \qquad (8.37)$$

so dass diese Größen erhalten bleiben.

Oder anders ausgedrückt: Die Eigenzustände von \hat{L}_z und \hat{S}_z sind keine "guten" ungestörten Zustände für die zeitunabhängige Störungstheorie. Gute Zustände sind die Eigenzustände von $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{\vec{S}}^2$, $\hat{\vec{J}}^2$ und \hat{J}_z ! Mit

$$\hat{\vec{J}}^2 = (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}) (\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}) = \hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{S}}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \left[\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2 \right] ,$$

folgt

so dass die Eigenwerte von $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}$ gleich sind zu

$$\frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right]$$

mit s = 1/2. Mit dem Erwartungswert (aus der Kramers-Beziehung (8.34))

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)n^3a^3}$$

folgt mit Gleichung (8.36) nach Gleichung (8.14) für die Störung der Energieeigenwerte durch Spin-Bahn-Kopplung

$$E_{\rm S-B}^{1} = E_{n}^{1} - E_{n}^{0} = \left\langle \hat{H}_{\rm S-B} \right\rangle = \frac{e^{2}}{2m_{e}^{2}c^{2}} \frac{\hbar^{2}}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)n^{3}a^{3}} \\ = \frac{\hbar^{2}e^{2}}{4n^{3}a^{3}m_{e}^{2}c^{2}} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}$$

Mit

und

 $\begin{array}{rcl} \hbar^2 &=& m_e e^2 a \\ \frac{1}{a} &=& -\frac{2E_n^0 n^2}{e^2} \end{array}$

ergibt sich

$$E_{\rm S-B}^{1} = E_{n}^{1} - E_{n}^{0} = \frac{\left(E_{n}^{0}\right)^{2}}{m_{e}c^{2}} \frac{n\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]}{l\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+1\right)}$$
(8.38)

als Energiekorrektur durch Spin-Bahn-Kopplung. Die relative Korrektur E_{S-B}^1/E_n^0 ist wieder von der Größenordnung $E_n^0/(m_ec^2) \simeq \alpha_f^2$.

8.2.3 Feinstrukturformel

Die Summe der Korrekturen (8.35) und (8.38) ergibt die Feinstrukturformel

$$E_{\rm fs}^{1} = E_{r}^{1} + E_{\rm S-B}^{1} = \frac{\left(E_{n}^{0}\right)^{2}}{2m_{e}c^{2}} [3 + \chi(j)]$$

$$\chi(j) = \frac{2n \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]}{l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1)} - \frac{4n}{l + \frac{1}{2}}.$$
(8.39)

mit

Für die möglichen $j\text{-Werte}~j=l\pm(1/2)$ berechnen wir

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1 & \text{für } j = l - \frac{1}{2} \end{cases},$$

so dass in beiden Fällen

$$\begin{split} \chi\left(l+\frac{1}{2}\right) &= \frac{2n}{\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+1\right)} - \frac{4n}{l+\frac{1}{2}} = \frac{2n}{l+\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{l+1} - 2\right] \\ &= -\frac{2n(2l+1)}{\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+1\right)} = -\frac{4n}{l+1} = -\frac{4n}{j+\frac{1}{2}} \\ \chi\left(l-\frac{1}{2}\right) &= -\frac{2n}{l\left(l+\frac{1}{2}\right)} - \frac{4n}{l+\frac{1}{2}} = -\frac{2n}{l+\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{l} + 2\right] \\ &= -\frac{2n(2l+1)}{\left(l+\frac{1}{2}\right)l} = -\frac{4n}{l} = -\frac{4n}{j+\frac{1}{2}} \,. \end{split}$$

und

Damit erhalten wir für die Feinstrukturformel (8.39) von Heisenberg und Jordan

$$E_{\rm fs}^1 = \frac{\left(E_n^0\right)^2}{2m_e c^2} \left[3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}}\right] \,. \tag{8.40}$$

Mit dem Bohrradius (2.77), der Feinstrukturkonstante (2.78) und Gleichungen (7.111) gilt

$$E_n^0 = E_1/n^2$$

$$\frac{E_1}{2m_ec^2} = -\frac{e^2}{4m_ec^2a} = -\frac{e^4}{4\hbar^2c^2} = -\frac{1}{4}\alpha_f^2 .$$

Wir erhalten damit

und

$$E_{\rm fs}^1 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left[-\frac{\alpha_f^2}{4n^2} \right] \left[3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}} \right] = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \frac{\alpha_f^2}{n^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \,. \tag{8.41}$$

Für den korrigierten Energieeigenwert gilt dann

$$E_{nj} = E_n^0 + E_{\rm fs}^1 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha_f^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] .$$
(8.42)

Wir bemerken:



Abbildung 8.1: Energie-Niveaus von Wasserstoff mit Feinstruktur (schematisch)

- 1. Die Feinstruktur bricht die Entartung in l des Wasserstoffatoms. Die korrigierten Energiewerte (8.42) werden durch die Hauptquantenzahl n und die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j bestimmt. Schematisch ist die Feinstrukturaufspaltung der Energieniveaus von Wasserstoff für $n \leq 4$ in Abb. 8.1 gezeigt.
- 2. Die Quantenzahlen m_l und m_s für Bahndrehimpuls bzw. Spin sind nicht länger gute Quantenzahlen.
- 3. Gute Quantenzahlen sind n, l, s, j und m_j .
- 4. Größenordnungsmäßig ist die ungestörte Bohr-Energie (7.111) $E_n^0 \simeq \alpha_f^2 m_e c^2$ und die Feinstrukturkorrektur von der Ordnung $\alpha_f^4 m_e c^2$. Von kleinerer Ordnung sind die sog. "Lamb-Shift" $\mathcal{O}(\alpha_f^5 m_e c^2)$ von der Quantisierung des Coulomb-Feldes und die sog. "Hyperfeinstruktur" $\mathcal{O}((m_e/m_p)\alpha_f^4 m_e c^2)$ durch die Wechselwirkung der Dipolmomente von Elektron und Proton.

8.3 Anwendung: Stark-Effekt

Der Stark-Effekt bezeichnet die Aufspaltung der Spektrallinien des Wasserstoffatoms im äußeren elektrischen Feld. O. B. d. A. wählen wir die *z*-Achse parallel zur Richtung des äußeren elektrischen Felds $\vec{E} = F\vec{e}_z$ und erhalten dann für die potentielle Energie des Elektrons in diesem Feld

$$U_p = e\vec{E} \cdot \vec{z} = eFz = eFr \cos\theta = eFr\mu$$

mit $z = r \cos \theta = r \mu$ in Kugelkoordinaten. Der Gesamt-Hamilton-Operator lautet dann in Ortsdarstellung

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + eFr\mu$$
(8.43)

mit dem Stör-Operator

$$\hat{V} = eFr\mu . \tag{8.44}$$

8.3.1 Nicht-entarteter Grundzustand $|n, l, m\rangle = |1, 0, 0\rangle$

Als erstes betrachten wir den ungestörten nicht-entarteten Grundzustand

$$\left|n^{0}
ight
angle = \left|n,\;l,\;m
ight
angle = \left|1,\;0,\;0
ight
angle$$
 .

In Ortsdarstellung ist dessen ungestörte Eigenfunktion mit Gleichung (7.113)

$$\langle \vec{r} | 1, 0, 0 \rangle = \psi_{100} \left(\vec{r} \right) = Y_{00} \frac{u_{10}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

mit dem Bohrradius $a = r_0 = \hbar^2/(m_e e^2).$

Gleichung (8.14) ergibt dann für die Energieverschiebung 1. Ordnung

$$\begin{split} E_{100}^{(1)} &= \langle 1, \ 0, \ 0 \left| eFr\mu \right| 1, \ 0, \ 0 \rangle &= \frac{eF}{\pi a^3} \int d^3r \ r\mu e^{-2r/a} \\ &= \frac{2eF}{a^3} \int_0^\infty dr \ r^3 e^{-2r/a} \int_{-1}^1 d\mu \ \mu = 0 \ . \end{split}$$

Bei nicht-entarteten Zuständen existiert kein Stark-Effekt 1. Ordnung.

Für die Energiekorrektur 2. Ordnung erhalten wir mit Gleichungen (8.6) und (8.20)

$$E_{100}^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle m^0 | \hat{V} | n^0 \rangle \right|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

= $e^2 F^2 \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle m^0 | r\mu | n^0 \rangle \right|^2}{E_n^0 - E_m^0},$ (8.45)

d.h. hier brauchen wir die Matrixelemente < n, l, $m|r\mu|1$, 0, 0 >. Im Ortsraum ist $\psi_{nlm} = Y_{lm}u_{nl}/r$, $\psi_{100} = Y_{00}u_{10}/r$, so dass mit $\mu = (4\pi/3)^{1/2}Y_{10}$ folgt

$$\langle n, l, m | r \mu | 1, 0, 0 \rangle = \int d^3 r \, \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}^*(\theta, \phi) \, r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \phi) \, \frac{u_{10}(r)}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

= $\frac{\delta_{m0} \delta_{l1}}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr \, r u_{n1}(r) u_{10}(r) \, .$ (8.46)

Da wegen der Orthonormalität (7.80) der Kugelflächenfunktionen nur die Zustände l = 1 und m = 0 beitragen, erhalten wir für die Energiekorrektur 2. Ordnung

$$E_{100}^{(2)} = e^2 F^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|\langle n, 1, 0 | r\mu | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0}$$

$$\simeq e^2 F^2 \frac{|\langle 2, 1, 0 | r\mu | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0}.$$
(8.47)

Nach Gleichung (8.46) ist

$$<2, 1, 0|r\mu|1, 0, 0> = \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr \ r u_{21}(r) u_{10}(r)$$
 (8.48)

Aus Gleichung (7.113)

$$u_{nl}(r) = c_{nl}r^{l+1}e^{-\frac{r}{na}}M\left(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{na}\right)$$

bestimmen wir

$$u_{10}(r) = c_{10} r e^{-r/a}, \qquad u_{21}(r) = c_{21} r^2 e^{-r/2a}.$$

Die Normierungsbedingung (7.91) liefert

$$c_{10}^2 \int_0^\infty dr \ r^2 e^{-2r/a} = 1, \qquad c_{21}^2 \int_0^\infty dr \ r^4 e^{-r/a} = 1.$$

Mit dem Integral (Gradshteyn & Ryzhik 1965)

$$\int_0^\infty dx \ x^{\nu-1} e^{-\mu x} = \frac{\Gamma[\nu]}{\mu^{\nu}}, \qquad \text{für} \qquad \Re \mu > 0, \ \Re \nu > 0 \tag{8.49}$$

berechnen wir

$$c_{10} = 2a^{-3/2}, \qquad c_{21} = (24)^{-1/2}a^{-5/2}$$

Für Gleichung (8.48) erhalten wir nach Verwendung des Integrals (8.49)

$$\begin{aligned} \langle 2, 1, 0 | r \mu | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} c_{10} c_{21} \int_0^\infty dr \ r^4 e^{-3r/2a} \\ &= 24 \frac{c_{10} c_{21}}{\sqrt{3}} \left(\frac{2a}{3}\right)^5 = \frac{2^{15/2}}{3^5} a \ , \end{aligned}$$

so dass für die Energiekorrektur (8.47) gilt

$$E_{100}^{(2)} \simeq \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{e^2 F^2 a^2}{E_1^0 - E_2^0} \; .$$

Mit

und

$$E_1^0 = E_1$$

$$E_2^0 = \frac{E_1}{4}$$

$$E_1^0 - E_2^0 = \frac{3E_1}{4} = -\frac{3e^2}{8a} = -\frac{3e^2}{2^3a}$$

folgt

und wir finden

$$E_{100}^{(2)} \simeq -\frac{2^{18}}{3^{11}}a^3F^2 = -1.48a^3 \left|\vec{E}\right|^2$$
 (8.50)

Dieser *quadratische Stark-Effekt* führt zur Absenkung der Energieniveaus, da Gleichung (8.50) ein negatives Vorzeichen aufweist. Die exakte nicht-störungstheoretische Berechnung des quadratischen Stark-Effekts durch Separation der Schrödinger-Gleichung mit dem gesamten Hamilton-Operator (8.43) in parabolischen Koordinaten bestätigt das Ergebnis (8.50) mit dem exakten Vorfaktor 2.25 statt 1.48.

8.3.2 Entarteter Zustand n = 2

Ohne Spin ist der Entartungsgrad (7.112) $g_2 = N = 4$ und die vier ungestörten Zustände sind

$$|n, l^0 > \hat{=} |2, l, m > = |2, 0, 0 >, |2, 1, -1 >, |2, 1, 0 >, |2, 1, 1 > .$$

Gemäß Kap. 8.1.2 müssen wir mit dem Stör-Operator $\hat{V} = eFr\mu$ die Größen (8.24)

$$w_{l\bar{l}} = \left\langle n, l^0 \left| \hat{V} \right| n, l^{\bar{0}} \right\rangle$$

in der in diesem Fall 4×4 -Determinante (8.25) in dieser Basis berechnen:

- 1. Wie in Kap. 8.3.1 gezeigt, verschwinden die Diagonalelemente w_{ll} ,
- 2. weil der Stör-Operator \hat{V} mit \hat{L}_z kommutiert, $|\hat{V}, \hat{L}_z] = 0$, verschwinden die Matrix-Elemente zwischen Zuständen mit verschiedenen Quantenzahlen m. m ist auch mit Störung eine gute Quantenzahl,
- 3. weil die Störmatrix mit \hat{V} hermitesch ist, muss nur ein Matrix-Element w_{01} nach Gleichung (8.24) berechnet werden.

In Ortsdarstellung erhalten wir

$$\begin{split} w_{01} &= \left\langle 2, \ 0, \ 0 \left| \hat{V} \right| 2, \ 1, \ 0 \right\rangle \\ &= eF \int d^3 r \ \psi_{200}^* r \mu \psi_{210} \\ &= 2\pi eF \int_{-1}^1 d\mu \ \int_0^\infty dr \ r^2 \frac{u_{20}(r)}{r} Y_{00}^* r \mu \frac{u_{21}(r)}{r} Y_{10} \\ &= 2\pi eF \int_{-1}^1 d\mu \ \int_0^\infty dr \ u_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} r \mu u_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mu \\ &= \frac{eF \sqrt{3}}{2} \int_{-1}^1 d\mu \ \mu^2 \int_0^\infty dr \ r u_{20}(r) u_{21}(r) \\ &= \frac{eF}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr \ r u_{20}(r) u_{21}(r) \ . \end{split}$$

Es war

und

$$u_{21}(r) = c_{21}r^2 e^{-r/2a} = \frac{1}{\sqrt{24a^5}}r^2 e^{-r/2a}$$
$$u_{20} = c_{20}r e^{-r/2a} M\left(-1, 2, \frac{r}{a}\right)$$
$$= c_{20}r e^{-r/2a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)_n}{(2)_n} \frac{(r/a)^n}{n!}$$
$$= c_{20}r e^{-r/2a} \left[1 + \frac{(-1)_1}{(2)_1} \left(\frac{r}{a}\right) + 0\right]$$
$$= c_{20}r e^{-r/2a} \left[1 - \frac{r}{2a}\right],$$

weil $(-1)_2 = (-1)(-1+1) = 0$. Die Normierungsbedingung (7.91) liefert unter Ausnutzung des Integrals (8.49)

$$1 = c_{20}^2 \int_0^\infty dr \ r^2 e^{-r/a} \left[1 - \frac{r}{2a} \right]^2$$

= $c_{20}^2 a^3 \int_0^\infty dt \ t^2 e^{-t} \left(1 - \frac{t}{2} \right)^2$
= $c_{20}^2 a^3 \int_0^\infty dt \ t^2 e^{-t} \left(1 - t + \frac{t^2}{4} \right)$
= $c_{20}^2 a^3 \left[\Gamma(3) - \Gamma(4) + \frac{\Gamma(5)}{4} \right] = 2c_{20}^2 a^3 ,$

so dass $c_{20} = (2a^3)^{-1/2}$. Wir erhalten damit

$$w_{01} = \frac{eFc_{21}c_{20}}{\sqrt{3}} \int_{0}^{\infty} dr \, r^{4} \left[1 - \frac{r}{2a}\right] e^{-r/a}$$

$$= \frac{eFc_{21}c_{20}a^{5}}{\sqrt{3}} \int_{0}^{\infty} dt \, t^{4} \left(1 - \frac{t}{2}\right) e^{-t}$$

$$= \frac{eFc_{21}c_{20}a^{5}}{\sqrt{3}} \left(\Gamma(5) - \frac{1}{2}\Gamma(6)\right)$$

$$= -\frac{36eFa^{5}}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{24a^{5}}\sqrt{2a^{3}}} = -\frac{36}{\sqrt{144}}eFa = -3eFa .$$
(8.51)

Für die Säkulardeterminante (8.25) folgt

$$0 = \begin{vmatrix} -E^{1} & 0 & -3eFa & 0\\ 0 & -E^{1} & 0 & 0\\ -3eFa & 0 & -E^{1} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -E^{1} \end{vmatrix} = -E^{1} \begin{vmatrix} -E^{1} & 0 & -3eFa\\ 0 & -E^{1} & 0\\ -3eFa & 0 & -E^{1} \end{vmatrix}$$
$$= -E^{1} \left[-(E^{1})^{3} + E^{1}(3eFa)^{2} \right] = (E^{1})^{2} \left[(E^{1})^{2} - (3eaF)^{2} \right]$$
(8.52)

mit den vier Lösungen

$$E_1^1 = +3eFa, \qquad E_2^1 = -3eFa, \qquad E_3^1 = 0, \qquad E_4^1 = 0, \qquad (8.53)$$

so dass eine Teilentartung der Zustände mit $m = \pm 1$ bleibt. Wie in Abb. 8.2 skizziert, wird



Abbildung 8.2: Aufspaltung des n = 2-Niveaus des Wasserstoffatoms im elektrischen Feld (schematisch)

das ursprünglich 4-fach entartete n = 2 Niveau in drei verschiedene Niveaus aufgespalten. Durch Einsetzen der Eigenwerte (8.53) in das Gleichungssystem (8.24) bestimmen wir die Amplituden c_{kl} , normieren diese und erhalten als neue Basisvektoren $|n, k^0 \rangle = |2, k^0 \rangle$:

$$k = 1 \rightarrow |a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle]$$

$$k = 2 \rightarrow |b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle]$$

$$k = 3 \rightarrow |c\rangle = |2, 1, 1\rangle, \qquad k = 4 \rightarrow |d\rangle = |2, 1, -1\rangle.$$
(8.54)

Diese Zustände stimmen mit den exakten Lösungen |n, k, m > der Schrödinger-Gleichung in parabolischen Koordinaten überein. Ihre Energieaufspaltung ist in Abb. 8.3 dargestellt. Die



Abbildung 8.3: Energieaufspaltung des n = 2-Niveaus des Wasserstoffatoms durch den linearen Stark-Effekt nur für m = 0

gestörten Zustände (8.54) mit m = 0 sind Linearkombinationen aus 2s und 2p; für diese ist l keine gute Quantenzahl mehr, weil der Stark-Störoperator (8.44) zwar mit \hat{L}_z aber nicht mit \hat{L}^2 vertauscht:

$$\left[\hat{V}, \hat{L}^2\right] \neq 0, \qquad \left[\hat{V}, \hat{L}_z\right] = 0$$

d.h. bei Vorliegen eines äußeren elektrischen Felds sind gleichzeitig mit der Energieaufspaltung nur die z-Komponente, aber nicht das Betragsquadrat des Bahndrehimpulses scharf meßbar. Die parabolischen Quantenzahl k hingegen sind gute Quantenzahlen mit und ohne äußeres elektrisches Feld.

8.4 Anwendung: Zeeman-Effekt

Der Zeeman-Effekt bezeichnet die Aufspaltung der Spektrallinien des Wasserstoffatoms im externen magnetischen Feld $\vec{B}_{\rm ex} = \operatorname{rot} \vec{A}$. Für das Vektorpotential des externen Magnetfelds wählen wir die Coulomb-Eichung div $\vec{A} = 0$.

8.4.1 Zeeman-Störoperator

Mit der Hamilton-Funktion des Elektrons (q = -e) im externen Magnetfeld (siehe Elektrodynamik-Vorlesung Kap. 5.8)

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{x})$$

folgt nach korrespondenzmäßigem Übergang $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ für den Hamilton-Operator

$$\hat{H}\psi = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{\imath} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \psi + V(\vec{x}) \psi$$

$$= \frac{1}{2m_e} \left[\left(-\hbar^2 \Delta + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) \psi + \frac{\hbar e}{\imath c} \left(\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{A} \psi \right) + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi \right) \right] + V\psi . \quad (8.55)$$

Mit den Regeln zur Divergenzbildung und aufgrund der Coulomb-Eichung ist

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{A}\psi \right) + \vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi = \psi \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi + \vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi = 2\vec{A} \cdot \vec{\nabla}\psi$$

und wir erhalten für den Hamilton-Operator (8.55)

$$\ddot{H} = \ddot{H}_0 + \ddot{H}' + \ddot{V}_Z$$
 (8.56)

mit dem ungestörten Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(\vec{x}),$$
 (8.57)

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2$$
(8.58)

und dem Zeeman-Störoperator

$$\hat{V}_Z = -\frac{i\hbar e}{m_e c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} . \qquad (8.59)$$

Wir beweisen zunächst, dass das konstante externe Magnetfeld $\vec{B}_{\rm ex}=\vec{B}=const.$ durch das Vektorpotential

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \tag{8.60}$$

dargestellt wird, wobei \vec{r} den Ortsvektor bezeichnet. Beweis: Die Darstellung (8.60) lautet komponentenweise

$$A_k = \frac{1}{2} \epsilon_{kst} B_s x_t \; ,$$

so dass mit $B_s = const.$

$$\begin{pmatrix} \operatorname{rot} \vec{A} \end{pmatrix}_{i} = \epsilon_{ijk} \partial_{j} A_{k} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{kst} \partial_{j} (B_{s} x_{t})$$
$$= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{kst} (B_{s} \delta_{jt}) = \frac{1}{2} B_{s} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ksj} = \frac{1}{2} B_{s} (2\delta_{si}) = B_{i}$$

Q.E.D.

Setzen wir die Darstellung (8.60) in den Zeeman-Störoperator (8.59) ein, so erhalten wir mit der Rechenregel der zyklischen Vertauschbarkeit des Spatprodukts und $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$:

$$\hat{V}_{Z} = -\frac{i\hbar e}{2m_{e}c} \left(\vec{B} \times \vec{r}\right) \cdot \vec{\nabla} = -\frac{i\hbar e}{2m_{e}c} \left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right) \cdot \vec{B}
= -\frac{e}{2m_{e}c} \left(\vec{r} \times i\hbar \vec{\nabla}\right) \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_{e}c} \left(\vec{r} \times \vec{p}\right) \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_{e}c} \hat{\vec{L}} \cdot \vec{B}_{ex}$$
(8.61)

mit dem Bahndrehimpuls-Operator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$. Mit dem magnetischen Dipolmoment des Elektrons durch die Bahnbewegung (siehe Kap. 7.6.3)

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e c}\vec{L} \tag{8.62}$$

schreibt sich der Zeeman-Störoperator (8.61) als

$$\hat{V}_Z = -\hat{\vec{\mu}}_L \cdot \vec{B}_{\text{ex}} . \tag{8.63}$$

8.4.2 Ohne Spin-Berücksichtigung

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit legen wir das externe Feld in Richtung der z-Achse $\vec{B}_{ex} = B\vec{e}_z$ und betrachten die Coulomb-Wechselwirkung mit $V(\vec{x}) = -Ze^2/r$. Unter Vernachlässigung des Operators \hat{H}' (Begründung in Kap. 8.4.3) erhalten wir für den Hamilton-Operator (8.56) mit Gleichung (8.61)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_Z = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_e c}\hat{L}_z .$$
(8.64)

 \hat{H}_0 , $\hat{\vec{L}}^2$ und \hat{L}_z haben das vollständige System gemeinsamer Eigenfunktionen $\psi = |n, l, m >$ (siehe Kap. 7.5). Die Energie-Eigenwerte E_0^{nl} des ungestörten Hamilton-Operators \hat{H}_0 sind von m unabhängig und (2l+1)-fach entartet; die Quantenzahl m läuft von $m = -l, -l + 1, \ldots, l$.

Nach Gleichung (8.64) ist der Gesamt-Hamilton-Operator \hat{H} die Summe von \hat{H}_0 und \hat{L}_z . Er besitzt also dieselben Eigenfunktionen ψ . Mit $\hat{L}_z \psi = m \hbar \psi$ sind die Energie-Eigenwerte des Gesamt-Hamilton-Operators zum Vektor ψ dann

$$\hat{H}\psi = \hat{H}_0\psi + \frac{eB}{2m_ec}\hat{L}_z\psi = \left(E_0^{nl} + \frac{eB}{2m_ec}m\hbar\right)\psi = E^{nlm}\psi,$$

$$E^{nlm} = E_0^{nl} + m\mu_BB, \qquad m \in [-l,l]$$
(8.65)

also

mit dem Bohrschen Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_ec} \,. \tag{8.66}$$

Die Energieniveaus werden also nur verschoben. Weil m alle ganzzahhligen Werte von -l bis +l durchlaufen kann, wird unter dem Einfluss des externen Magnetfelds \vec{B}_{ex} jedes Energieniveau E_0^{nl} in (2l + 1)-äquidistante Niveaus aufgespalten, wie wir in Abb. 8.4 für das l = 2-Niveau illustrieren. Als Ergebnisse notieren wir:



Abbildung 8.4: Zeeman-Effekt ohne Spin-Berücksichtigung beim l = 2-Energieniveau

(1) Jedes ungestörte Niveau E_0^{nl} spaltet sich in ein Multiplett aus (2l+1) äquidistanten Niveaus auf.

- (2) Diese verteilen sich zu beiden Seiten von E_0^{nl} so, dass der Mittelwert ihrer Abstände zu E_0^{nl} Null ist.
- (3) Der Abstand zweier benachbarter Niveaus $\mu_B B_{ex}$ ist von der Art des Atoms unabhängig und proportional zu B_{ex} .

Diese Ergebnisse werden vom Experiment bestätigt, aber mit zwei wichtigen Abweichungen:

- (a) bei Atomen mit ungeradem Z sind die Multipletts alle gradzahlig, so als wenn l halbzahlig wäre.
- (b) Der Abstand benachbarter Niveaus eines Multipletts ist $g\mu_B B_{ex}$, wobei der Lande-Faktor g (siehe Kap. 7.6.3) von einem Multiplett zum anderen starkt schwankt.

Wie wir gleich zeigen werden, sind diese Abweichungen starke Hinweise auf die Existenz des Spins!

8.4.3 Begründung: Vernachlässigung des Operators \hat{H}'

Wir berechnen den Operator (8.58) für homogene Magnetfelder mit der Darstellung (8.60):

$$\hat{H}'\psi = \frac{e^2}{2m_ec^2}\vec{A}^2\psi = \frac{e^2}{8m_ec^2}\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2\psi = \frac{e^2}{8m_ec^2}\left[B^2r^2 - \left(\vec{B}\cdot\vec{r}\right)^2\right]\psi.$$

Mit $\vec{B}_{ex} = B\vec{e}_z$ in z-Richtung folgt

$$\hat{H}'\psi = \frac{e^2}{8m_ec^2} \left[\left(x^2 + y^2 + z^2\right) B^2 - B^2 z^2 \right] \psi = \frac{e^2}{8m_ec^2} \left(x^2 + y^2\right) B^2 \psi .$$
(8.67)

Wir erhalten dann für das Verhältnis des Operators (8.67) zum Zeeman-Störoperator \hat{V}_Z in Gleichung (8.64)

$$V_{1} \equiv \frac{\left|\left\langle \hat{H}' \right\rangle\right|}{\left|\left\langle \hat{V}_{Z} \right\rangle\right|} = \frac{\left(e^{2}/8m_{e}c^{2}\right)\left\langle \left(x^{2}+y^{2}\right)\right\rangle B^{2}}{\left(e/2m_{e}c\right)\left\langle \hat{L}_{z} \right\rangle B} = \frac{e}{4c}\frac{\left\langle x^{2}+y^{2} \right\rangle B}{\left\langle \hat{L}_{z} \right\rangle}$$

 $\operatorname{Mit} < \hat{L}_z > \simeq \hbar$ und dem Bohrradius $< x^2 + y^2 > \simeq a^2$ finden wir

$$V_1 \simeq \frac{e}{4c} \frac{a^2 B}{\hbar} = \frac{a^2 \alpha_f}{4e} B = 1.06 \cdot 10^{-10} B(\text{Gauss}) .$$
(8.68)

Solange die externen Magnetfeldstärken viel kleiner als 10^{10} Gauss sind (Ausnahme Pulsare in der Astrophysik) und $\langle \hat{L}_z \rangle \neq 0$, dürfen wir den Operator \hat{H}' vernachlässigen.

Als zweites berechnen wir das Verhältnis des Zeeman-Störoperators zur Coulomb-Wechselwirkung

$$V_{2} \equiv \frac{\left|\left\langle \hat{V}_{Z} \right\rangle\right|}{\left|\left\langle \hat{V} \right\rangle\right|} = \frac{\left(e/2m_{e}c\right)\left\langle \hat{L}_{z} \right\rangle B}{\left|-Ze^{2}\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle\right|} \simeq \frac{\left(e\hbar/2m_{e}c\right)B}{(Ze^{2}/a)} = \frac{a\hbar B}{2m_{e}ce}$$
$$= \frac{a^{2}\alpha_{f}}{2e}B = 2V_{1} = 2.12 \cdot 10^{-10}B(\text{Gauss}) , \qquad (8.69)$$

das für Labor-Magnetfelder ebenfalls sehr klein ist und damit die störunstheoretische Rechnung rechtfertigt.

8.4.4 Mit Spin-Berücksichtigung

Bei Berücksichtigung des Spins ergibt sich nach Gleichung (7.147) das zusätzliche magnetische Dipolmoment

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m_e c} \vec{S} . \tag{8.70}$$

Für den Zeeman-Störoperator (8.61) erhalten wir dann

$$\hat{V}_Z = -\left(\hat{\vec{\mu}}_L + \hat{\vec{\mu}}_S\right) \cdot \vec{B}_{\text{ex}} = \frac{e}{2m_e c} \left(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}\right) \cdot \vec{B}_{\text{ex}} .$$
(8.71)

Der Effekt durch diesen Zeeman-Störoperator konkurriert mit der Feinstruktur-Korrektur durch Spin-Bahn-Kopplung durch das "interne" Magnetfeld $\vec{B}_{\rm int}$ des Atoms, hervorgerufen durch die Bewegung des atomaren Elektrons. Nach Gleichung (8.36) ist

$$\hat{H}_{\rm S-B} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} .$$
(8.72)

Wir unterscheiden drei Fälle:

- (1) Schwacher Zeeman-Effekt: Für $B_{ex} \ll B_{int}$ dominiert bei der Korrektur die Feinstruktur und wir behandeln den Zeeman-Störoperator \hat{V}_Z als kleine zusätzliche Störung dazu.
- (2) Starker Zeeman-Effekt = Paschen-Back-Effekt: Für $B_{ex} \gg B_{int}$ dominiert die Korrektur durch das externen Magnetfeld und die Feinstruktur ist eine kleine zusätzliche Störung dazu. Wir starten dann von der im Kap. 8.4.2 behandelten Zeeman-Korrektur ohne Spin.
- (3) Intermediärer Fall: $B_{\rm ex} \simeq B_{\rm int}$

Die Stärke des internen Magnetfelds schätzen wir mit $\langle r \rangle \simeq a$ und $\langle \hat{\vec{L}} \rangle = \langle \hat{\vec{S}} \rangle \simeq \hbar$ in den Gleichungen (8.71) und (8.72) ab:

$$\left|\left\langle \hat{V}_Z \right\rangle\right| \simeq \frac{3eh}{2m_e c} B_{\text{ex}}, \qquad \left|\left\langle \hat{H}_{\text{S}-\text{B}} \right\rangle\right| \simeq \frac{e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2 a^3}.$$
 (8.73)

Für deren Verhältnis erhalten wir dann

$$V_{3} \equiv \frac{\left|\left\langle \hat{H}_{\mathrm{S-B}} \right\rangle\right|}{\left|\left\langle \hat{V}_{Z} \right\rangle\right|} = \frac{e^{2}\hbar^{2}}{2m_{e}^{2}c^{2}a^{3}}\frac{2m_{e}c}{3ehB_{\mathrm{ex}}} = \frac{e\hbar}{3m_{e}ca^{3}B_{\mathrm{ex}}} = \frac{B_{\mathrm{int}}}{B_{\mathrm{ex}}} ,$$

$$B_{\mathrm{int}} = \frac{e\hbar}{3m_{e}ca^{3}} = 4.32 \cdot 10^{4} \,\mathrm{Gauss} . \qquad (8.74)$$

also

8.4.5 Paschen-Back-Effekt

Für $B_{\text{ex}} \gg B_{\text{int}}$ dominiert der Zeeman-Effekt. Wir legen wieder $\vec{B}_{\text{ex}} \| \vec{e}_z$. Gute Quantenzahlen sind hier n, l, m_l und m_s . Nach Gleichung (8.71) ist dann $(B = B_{ex})$

$$\hat{V}_Z = \frac{eB}{2m_ec} \left(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z \right)$$

und mit $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_Z$ folgt sofort

$$\hat{H} |n, l, m_l, m_s\rangle = \hat{H}_0 |n, l, m_l, m_s\rangle + \frac{eB}{2m_e c} \left(\hat{L}_z |n, l, m_l, m_s\rangle + 2\hat{S}_z |n, l, m_l, m_s\rangle \right)$$

$$= \left(E_0^{nl} + \frac{eB}{2m_e c} [m_l \hbar + 2m_s \hbar] \right) |n, l, m_l, m_s\rangle .$$

Wir erhalten also mit Gleichung (8.66) die Aufspaltung

$$E^{nlm_lm_s} = E_0^{nl} + \mu_B B_{\text{ex}}(m_l + 2m_s) .$$
(8.75)

Wie in Kap. 8.2 können wir darauf die Feinstruktur als Störungsrechnung anwenden und erhalten als Korrektur (siehe Gleichung (8.41))

$$E_{\rm fs} = \frac{13.6 \text{ eV}}{n^3} \alpha_f^2 \left(\frac{3}{4n} - \left[\frac{l(l+1) - m_l m_s}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \right] \right) \,. \tag{8.76}$$

Der Fall l = 0 ist ein Sonderfall: in diesem Fall ist die eckige Klammer in Gleichung (8.76) gleich 1.

8.4.6 Schwacher Zeeman-Effekt

Für $B_{\text{ex}} \ll B_{\text{int}}$ dominiert die Feinstruktur. Die guten Quantenzahlen sind jetzt n, l, j = l+s und m_j .

In 1. Ordnung ist nach Gleichung (8.14) die Zeeman-Korrektur zur Energie

$$E_Z^1 = \langle n, l, j, m_j | \hat{V}_Z | n, l, j, m_j \rangle .$$
(8.77)

Wir legen wieder $\vec{B}_{ex} \parallel \vec{e}_z$, so dass wir mit $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ für den Operator (8.71) erhalten:

$$\hat{V}_{Z} = \frac{eB}{2m_{e}c} \left(\hat{L}_{z} + 2\hat{S}_{z} \right) = \frac{eB}{2m_{e}c} \left(\hat{J}_{z} + \hat{S}_{z} \right) .$$
(8.78)

Für das gesamte oder effektive magnetischen Dipolmoment (7.148)

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e c} \left(\vec{J} + \vec{S} \right)$$
(8.79)

fordern wir die Gültigkeit der Beziehung

$$\vec{\mu} = g\vec{J} \,. \tag{8.80}$$

Das Skalarprodukt mit \vec{J} liefert

$$g\vec{J}\cdot\vec{J} = gJ^2 = \vec{\mu}\cdot\vec{J} = -\frac{e}{2m_ec}\left(J^2 + \vec{S}\cdot\vec{J}\right) ,$$

$$g = -\frac{e}{2m_ec}\left(1 + \frac{\vec{S}\cdot\vec{J}}{J^2}\right) .$$
(8.81)

so dass

Mit

gilt

$$\begin{array}{rcl} \vec{L} &=& \vec{J}-\vec{S} \\ L^2 &=& J^2+S^2-2\vec{J}\cdot\vec{S} \end{array}$$

und somit für die entsprechenden Operatoren

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{J}} = \frac{1}{2} \left[\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1) \right] \,.$$

Eingesetzt in Gleichung (8.81) folgt

$$g = -\frac{e}{2m_ec} \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right) .$$
(8.82)

Für die z-Komponente gilt nach Gleichungen (8.79) und (8.80)

$$\begin{split} \mu_z &= g J_z &= -\frac{e}{2m_e c} (J_z + S_z) \\ \hat{J}_z + \hat{S}_z &= -\frac{2m_e c}{e} g \hat{J}_z \; . \end{split}$$

so dass

Wir erhalten damit für den Operator (8.78)

$$\hat{V}_Z = -\frac{eB}{2m_e c} \frac{2m_e c}{e} g\hat{J}_z = -Bg\hat{J}_z , \qquad (8.83)$$

,

so dass für die Energiekorrektur (8.77) gilt

$$E_Z^1 = \left\langle n, l, j, m_j \left| -Bg\hat{J}_z \right| n, l, j, m_j \right\rangle$$

= $-Bg\hbar m_j = \frac{eB\hbar m_j}{2m_e c} \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right) ,$ (8.84)

wobei wir Gleichung (8.82) eingesetzt haben. Wir definieren den *Landefaktor*

$$G \equiv 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} .$$
(8.85)

Damit und dem Bohrschen Magneton (7.150) schreibt sich die Energiekorrektur (8.84) kurz als

$$E_Z^1 = \frac{eB\hbar}{2m_e c} Gm_j = \mu_B Bm_j G . \qquad (8.86)$$

Der Vergleich mit dem früheren Ergebnis (8.87) ohne Spin-Berücksichtigung,

$$E_Z^1 = \mu_B Bm , \qquad (8.87)$$

zeigt eine deutlich andere Abhängigkeit von den Quantenzahlen und erklärt die in Kap. 8.4.2 beschriebenen experimentellen Abweichungen (a) und (b).

Ergebnis (8.86) zeigt, dass die (2j + 1)-fache Entartung im Fall der Feinstruktur völlig aufgehoben wird. Dieser Fall $G \neq 1$ wird auch als *anomaler Zeeman-Effekt* bezeichnet. Der Fall ohne Spin (8.65 und 8.87) wird als *normaler Zeeman-Effekt* G = 1 bezeichnet und man erhält ihn streng genommen nur für Spin Null.

8.5 Zeitabhängige Störungstheorie

Wir betrachten jetzt den Fall, dass das quantenmechanische System mit einem zeitabhängigen Störpotential $\hat{V}(q_i, t)$ wechselwirkt,

$$\hat{H}(q_i, t) = \hat{H}_0(q_i) + \hat{V}(q_i, t) ,$$
 (8.88)

so dass die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(q_i, t)\rangle}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right) |\Psi(q_i, t)\rangle \tag{8.89}$$

lautet. Dabei soll der ungestörte Hamilton-Operator \hat{H}_0 zeitlich konstant sein.

Wir setzen voraus, dass der zeitabhängige Anteil $\hat{V}(q_i, t)$ im Hamilton-Operator (8.88) klein gegenüber \hat{H}_0 ist und als Störung betrachtet werden kann. Weiterhin sei $\hat{V}(q_i, t) = 0$ für Zeiten $t \leq t_0$.

Für $t \leq t_0$ befindet sich das System in Zustand $|\Psi^0(t)>$, welcher der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi^{0}(q_{i},t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{0} |\Psi^{0}(q_{i},t)\rangle$$
(8.90)

genügt. Mit Einschalten der Störung entwickelt sich daraus ein Zustand $|\Psi(t)\rangle$, der die Schrödinger-Gleichung (8.89) und die Anfangsbedingung

$$|\Psi(q_i,t)\rangle = |\Psi^0(q_i,t)\rangle \quad \text{für} \quad t \le t_0 \tag{8.91}$$

erfüllen muss.

Die Störungstheorie wird am besten im Wechselwirkungsbild (siehe Kap. 6.4) durchgeführt. Dazu transformieren wir die Wellenfunktion $|\Psi(q_i, t)\rangle$ und den Störoperator $\hat{V}(q_i, t)$ gemäß Gleichungen (6.24) und (6.25):

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle_{I} &= e^{iH_{0}t/\hbar} |\Psi(q_{i},t)\rangle \\ \hat{V}_{I}(t) &= e^{i\hat{H}_{0}t/\hbar} \hat{V}(q_{i},t) e^{-i\hat{H}_{0}t/\hbar} \end{aligned}$$

und erhalten (siehe Gleichung (6.26)) als transformierte Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle_I}{\partial t} = \hat{V}_I(t) |\Psi(t)\rangle_I \quad . \tag{8.92}$$

Die Zeitintegration ergibt die Integralgleichung

$$|\Psi(t)\rangle_{I} = |\Psi(t_{0})\rangle_{I} + \frac{1}{\imath\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \, \hat{V}_{I}\left(t'\right) |\Psi\left(t'\right)\rangle_{I} \quad . \tag{8.93}$$

Diese ergibt durch iteratives Einsetzen (sog. Neumann-Reihe) die Reihenentwicklung

$$\Psi(t) >_{I} = |\Psi(t_{0}) >_{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \, \hat{V}_{I}\left(t'\right) |\Psi(t_{0}) >_{I} \\
+ \frac{1}{(i\hbar)^{2}} \int_{t_{0}}^{t} dt' \int_{t_{0}}^{t} dt'' \, \hat{V}_{I}\left(t'\right) \hat{V}_{I}\left(t''\right) |\Psi(t_{0}) >_{I} + \dots \quad (8.94)$$

Diese Lösung erlaubt bei genügend kleiner Störung, den Zustand in beliebiger Ordnung im Störoperator zu berechnen. Oftmals kann die Reihe bereits nach dem ersten Term abgebrochen werden.

8.5.1 Übergänge 1. Ordnung

Das System sei anfangs im Eigenzustand

$$|m(t)\rangle = e^{-\iota H_0 t/\hbar} |m\rangle = e^{-\iota E_m t/\hbar} |m\rangle$$

des ungestörten Hamilton-Operators \hat{H}_0 . Wir berechnen die Wahrscheinlichkeit, nach der Wirkung von $\hat{V}(q_i, t)$ das System zur Zeit t im Zustand

$$|n(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

zu finden. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für diesen Übergang ist

$$< n(t)|\Psi(t)> = < n|e^{iH_0t/\hbar}|\Psi(t)> = < n|\Psi(t)>_I$$
 (8.95)

Setzen wir den Anfangszustand

$$|\Psi^{0}(t)\rangle_{I} = e^{i\hat{H}_{0}t/\hbar}|m(t)\rangle = |m\rangle$$

in die Reihenentwicklung (8.94) ein, so erhalten wir in 1. Ordnung in $\hat{V}_I(t)$

$$|\Psi(t)\rangle_{I} = |m\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \, \hat{V}_{I}\left(t'\right) |m\rangle . \qquad (8.96)$$

Für die Übergangsamplitude (8.95) folgt dann

$$< n(t)|\Psi(t) > = \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' < n|\hat{V}_I(t')|m >$$

$$= \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' < n|e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar} \hat{V}(t') e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar}|m >$$

$$= \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{\frac{i(E_n - E_m)t'}{\hbar}} < n|V(t')|m >$$

$$= \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} < n|V(t')|m >, \qquad (8.97)$$

8.5 Zeitabhängige Störungstheorie

wobei wir die sog. Bohrsche Frequenz

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$$

eingeführt haben. Die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{nm}(t)$ von $|m\rangle$ in einen anderen ($n \neq m$) orthogonalen Zustand $|n\rangle$ ist dann durch das Betragsquadrat

$$P_{nm}(t) = |\langle n(t)|\Psi(t)\rangle|^2 = |\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \ e^{i\omega_{nm}t'} \langle n|V\left(t'\right)|m\rangle|^2$$
(8.98)

gegeben.

8.5.2 Mathematische Zwischenbetrachtung

Für das Folgende nützlich ist der Beweis, dass die in Abb. 8.5 gezeigte Funktion

$$F(x,\epsilon) \equiv \frac{\epsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\epsilon)}{x^2}$$
(8.99)

im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ eine Darstellung der δ -Funktion ist, d.h.

$$\lim_{\epsilon \to 0} F(x,\epsilon) = \delta(x) . \tag{8.100}$$

Zum Beweis zeigen wir



Abbildung 8.5: Verlauf der Funktion (8.99)

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ F(x,\epsilon) = 1$$
 (8.101)

$$I_2 = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ F(x,\epsilon) g(x) = g(0)$$
(8.102)

und

für eine beliebige wohldefinierte Testfunktion g(x). Mit der Substitution $x = \epsilon t$ folgt für das Integral (8.101)

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ F(x,\epsilon) = \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \frac{\sin^2(x/\epsilon)}{x^2}$$
$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ \frac{\sin^2 t}{t^2} = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} dt \ \frac{\sin^2 t}{t^2} \ .$$

Partielle Integration ergibt

$$I_1 = \frac{2}{\pi} \left[-\frac{\sin^2 t}{t} \Big|_0^\infty + 2 \int_0^\infty dt \, \frac{\sin t \cos t}{t} \right] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dt \, \frac{\sin 2t}{t} \, .$$

 $\mathsf{Mit} \; \mathsf{dem} \; \mathit{Trick}$

$$\frac{1}{t} = \int_0^\infty du \, e^{-ut}$$

für $t>0\ {\rm folgt}$

wobei

$$I_{1} = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} du \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-ut} \sin 2t = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} du \, j(u) ,$$

$$j(u) = \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-ut} \sin 2t = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-ut} \left[e^{2it} - e^{-2it} \right]$$

$$= \frac{1}{2i} \left[\int_{0}^{\infty} dt \, e^{-(u-2i)t} - \int_{0}^{\infty} dt \, e^{-(u+2i)t} \right]$$

$$= \frac{1}{2i} \left[\frac{e^{-(u-2i)t}|_{0}^{\infty}}{-(u-2i)} + \frac{e^{-(u+2i)t}|_{0}^{\infty}}{(u+2i)} \right]$$

$$= \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{u-2i} - \frac{1}{u+2i} \right] = \frac{1}{2i(u^{2} - 4i^{2})} \left[(u+2i) - (u-2i) \right]$$

$$= \frac{4i}{2i(u^{2} + 4)} = \frac{2}{4 + u^{2}} .$$

Damit folgt

$$I_1 = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty du \, \frac{1}{4+u^2} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty du \, \frac{1}{1+(u/2)^2}$$
$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dv \, \frac{1}{1+v^2} = \frac{2}{\pi} \arctan(v)|_0^\infty = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2} = 1 ,$$

womit die erste Behauptung (8.101) gezeigt ist. Zum Beweis der Beziehung (8.102) benutzen wir das asymptotische Verhalten

$$F(x,\epsilon) = \begin{cases} \simeq \frac{1}{\epsilon\pi} & \text{ für } |x| \le \frac{\pi\epsilon}{2} \\ \le \frac{\epsilon}{\pi x^2} & \text{ für } |x| > \frac{\pi\epsilon}{2} \end{cases}$$

Für genügend kleine Werte von ϵ ist die Änderung der Testfunktion g(x) im effektiven Integrationsintervall $[-\pi\epsilon/2, \pi\epsilon/2]$ vernachlässigbar, und g(x) ist praktisch gleich g(0). Somit ergibt sich

$$I_{2} = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ F(x,\epsilon)g(x)$$

$$\simeq \lim_{\epsilon \to 0} \left(\frac{1}{\epsilon \pi} \int_{-\pi\epsilon/2}^{\pi\epsilon/2} dx \ g(x) + \frac{\epsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{-\pi\epsilon/2} dx \ \frac{g(x)}{x^{2}} + \frac{\epsilon}{\pi} \int_{\pi\epsilon/2}^{\infty} dx \ \frac{g(x)}{x^{2}} \right)$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon \pi} 2 \frac{\pi\epsilon}{2} g(0) = g(0)$$
(8.103)

Q. E. D.

8.5.3 Goldene Regel

Wir betrachten zunächst eine Störung, die zur Zeit t = 0 eingeschaltet wird und sich dann nicht mehr ändert (mit Heaviside-Sprungfunktion Θ),

$$\hat{V}(t) = V\Theta(t) . \tag{8.104}$$

Für Gleichung (8.98) erhalten wir dann

$$P_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \ e^{i\omega_{nm}t'} < n|V|m > |^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |(e^{i\omega_{nm}t} - 1) \frac{1}{i\omega_{nm}} < n|V|m > |^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2 \omega_{nm}^2} (e^{i\omega_{nm}t} - 1) (e^{-i\omega_{nm}t} - 1) | < n|V|m > |^2$$

$$= \frac{|< n|V|m > |^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin(\omega_{nm}t/2)}{\omega_{nm}/2}\right]^2.$$
(8.105)

Identifizieren wir

$$=rac{1}{t}, \qquad x=rac{\omega_{nm}}{2},$$

 ϵ

so können wir die Funktion

$$\sin^2\left(\frac{\omega_{nm}t}{2}\right) = \frac{\pi t \omega_{nm}^2}{4} F\left(\frac{\omega_{nm}}{2}, \frac{1}{t}\right)$$
(8.106)

mit der Funktion (8.99) ausdrücken. Dann gilt nach Gleichung (8.100) für große Zeiten

$$\lim_{t \to \infty} \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{nm}t}{2}\right)}{\frac{\omega_{nm}}{2}} \right]^2 = \pi t \delta\left(\frac{\omega_{nm}}{2}\right) = 2\pi t \delta\left(\omega_{nm}\right) . \tag{8.107}$$

Für lange Zeiten erhalten wir dann für die Übergangswahrscheinlichkeit (8.105)

$$P_{nm}(t) = 2\pi t \frac{|\langle n|V|m \rangle|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{nm})$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar^2} \delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar}\right) |\langle n|V|m \rangle|^2$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n|V|m \rangle|^2. \qquad (8.108)$$

Daraus ergibt sich die Übergangsrate, also die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, zu

$$\Gamma_{mn} = \frac{P_{nm}(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta \left(E_n - E_m \right) | < n |V| m > |^2 .$$
(8.109)

Möchten wir Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum von Endzuständen behandeln, ist die Übergangsrate in eine Gruppe von Zuständen von Interesse. Wir nehmen an, dass das Matrixelement für alle Endzustände gleich ist (dies ist oftmals aber nicht immer gegeben) und führen die Zustandsdichte $\rho(E_n)$ der Endzustände ein: $\rho(E_n)dE_n$ gibt die Zahl der Zustände im Intervall dE_n an. Dann ist die Übergangsrate in diese Menge von Zuständen

$$\sum_{n} \Gamma_{mn} = \int dE_n \rho(E_n) \Gamma_{mn}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|m \rangle|^2 \int dE_n \rho(E_n) \delta(E_n - E_m)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|m \rangle|^2 \rho(E_m) . \qquad (8.110)$$

Die Energie des in das Matrixelement von (8.110) eingehenden Endzustands |n > muss gleich E_m sein.

Die Formeln (8.109) und (8.110) und deren Analoga (siehe Gleichung 8.113)) für periodisch variierende Störpotentiale $\hat{V}(t)$ wurden von Pauli (1928) hergeleitet und werden wegen ihrer vielfältigen Anwendungen nach Fermi als *Goldene Regel* bezeichnet.

8.5.4 Periodische Störung

Als weiteres Beispiel diskutieren wir den Fall, dass die zur Zeit t = 0 eingeschaltete Störung periodisch mit der Zeit variiert. Allgemein ist

$$\hat{V}(t) = \Theta(t) \left[\hat{F}^- e^{-\imath \omega t} + \hat{F}^+ e^{\imath \omega t} \right] .$$
(8.111)

Für die Übergangsamplitude (8.97) folgt dann

$$< n(t)|\Psi(t) > = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{nm} - \omega)t'} < n|\hat{F}^-|m\rangle + e^{i(\omega_{nm} + \omega)t'} < n|\hat{F}^+|m\rangle \right] . \quad (8.112)$$

Wegen der unterschiedlichen Frequenzen im Argument der Exponentialfunktionen tragen die gemischten Terme im Absolutbetragsquadrat von (8.112) nichts bei, so dass für lange Zeiten

$$| < n(t) | \Psi(t) > |^{2} = \frac{2\pi t}{\hbar^{2}} \left[\delta(\omega_{nm} - \omega) | < n | \hat{F}^{-} | m > |^{2} + \delta(\omega_{nm} + \omega) | < n | \hat{F}^{+} | m > |^{2} \right] .$$

Für die Übergangsrate erhalten wir

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta \left(E_n - E_m - \hbar \omega \right) | < n |\hat{F}^-|m > |^2 + \delta \left(E_n - E_m + \hbar \omega \right) | < n |\hat{F}^+|m > |^2 \right].$$
(8.113)

(b)

(a)



Abbildung 8.6: induzierte Emission (a) und Absorption (b)

Offensichtlich gibt es Übergänge nur in zwei Fällen (siehe auch Abb. 8.6):

- (a) bei *induzierter Emission*, wenn das quantenmechanische System die Energie $\hbar\omega$ an das anwesende Störfeld F abgibt ($E_n = E_m \hbar\omega$). Dies ist nur für einen anfänglich angeregten Zustand möglich,
- (b) bei Absorption, wenn das quantenmechanische System die Energie $\hbar\omega$ aus dem anwesenden Störfeld F aufnimmt und dadurch einen höheren Energiezustand $E_n = E_m + \hbar\omega$ einnimmt.
- In Analogie zu Gleichung (8.110) erhalten wir für die induzierte Emissionsrate

$$w_{m \to n} = \frac{2\pi}{\hbar} | < n |\hat{F}^+|m > |^2 \rho(E_n)|_{E_n = E_m - \hbar\omega}$$
(8.114)

und für die Absorptionsrate

$$w_{m \to n} = \frac{2\pi}{\hbar} | < n |\hat{F}^-|m > |^2 \rho(E_n)|_{E_n = E_m + \hbar\omega} .$$
(8.115)

Wegen

gilt

$$\begin{array}{rcl} < n |\hat{F}^{+}|m> &=& < m |\hat{F}^{-}|n>^{*} \\ | < n |\hat{F}^{+}|m>|^{2} &=& < n |\hat{F}^{+}|m> < n |\hat{F}^{+}|m>^{*} \\ &=& < m |\hat{F}^{-}|n>^{*} < m |\hat{F}^{-}|n> = | < m |\hat{F}^{-}|n>|^{2} \end{array}$$

und wir erhalten das Prinzip der detaillierten Bilanz

Induzierte Emissionsrate _	Absorptionsrate	(8 116)
Dichte der Endzustände	Dichte der Endzustände	(0.110)
In diesem Kapitel untersuchen wir die Wechselwirkung eines atomaren Systems mit einem elektromagnetischen Strahlungsfeld ohne Quantisierung (sog. *zweite Quantisierung*) des Strahlungsfelds, d.h. die Bewegung der atomaren Teilchen wird quantisiert, aber das elektromagnetische Feld wird klassisch betrachtet. Dies bezeichnet man als *semiklassische Näherung*). Der entgegengesetzte Fall, der das Strahlungsfeld quantisiert und das Materiefeld klassisch beschreibt, wird in der *Quantenoptik* betrachtet (siehe etwa Merzbacher, Kap. 23.4).

Der Nachteil dieser semiklassischen Theorie ist, dass so die spontane Emission nicht vollständig quantenmechanisch behandelt werden kann. In voller Quantenelektrodynamik bildet das Strahlungsfeld ein System, auf das der andere Partner (das Atom) der Wechselwirkung einwirken kann und in diesem Übergänge hervorrufen kann. Insbesondere kann es zu Übergängen des Strahlungsfeld aus dessen Grundzustand (=Vakuumszustand), für welchen im klassischen Sinn primär kein Feld und somit keine Wechselwirkung mit den atomaren Teilchen vorhanden ist, in einen angeregten Feldzustand kommen. Dies führt zu *spontaner* Emission aus einem angeregten Atomzustand.

9.1 Grundgleichungen

Der Hamilton-Operator für ein Teilchen mit der Ladung q in einem elektromagnetischen Feld, das durch das Vektorpotential \vec{A} beschrieben wird, lautet gemäß Gleichung (8.55)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\imath\hbar q}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{q}{mc}\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}} + V, \qquad (9.1)$$

wobei die Coulomb-Eichung div $\vec{A} = 0$ gelten soll und das skalare Potential Φ verschwindet. Wir betrachten genügend kleine Feldstärken, so dass der quadratische Term \vec{A}^2 im Hamilton-Operator (8.55) vernachlässigt werden kann. Die Coulomb-Eichung darf benutzt werden, wenn das elektromagnetische Feld keine Quellen in der Nähe des Atoms besitzt. Die *quellfreien* Maxwell-Gleichungen lauten

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}\left(\vec{r},t\right) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = 0 , \qquad (9.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r},t) = 0, \qquad (9.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}\left(\vec{r},t\right) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = 0 , \qquad (9.4)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} \left(\vec{r}, t \right) = 0 . \tag{9.5}$$

Die letzte Maxwell-Gleichung erlaubt die Einführung des Vektorpotentials

$$\vec{B}\left(\vec{r},t\right) = \operatorname{rot}\vec{A}\left(\vec{r},t\right) \ . \tag{9.6}$$

Setzen wir diese Beziehung in das Induktionsgesetz (9.2) ein, so folgt

$$\operatorname{rot}\left[\vec{E}\left(\vec{r},t\right)+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}\right]=0\;,$$

mit der allgemeinen Lösung dieser Gleichung

$$\vec{E}\left(\vec{r},t\right) = -\vec{\nabla}\Phi\left(\vec{r},t\right) - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}, \quad \text{wegen rot grad} = 0.$$
(9.7)

Gleichung (9.7) ist die Potentialdarstellung des elektrischen Felds mit dem *skalaren Potential* $\Phi(\vec{r},t)$ und dem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r},t)$.

Nach Einsetzen der Darstellung (9.7) erhalten wir für Gleichung (9.3)

$$-\vec{\nabla}^{2}\Phi\left(\vec{r},t\right) - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = 0$$

$$\Delta\Phi\left(\vec{r},t\right) + \frac{1}{c}\frac{\partial\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\left(\vec{r},t\right)\right)}{\partial t} = 0.$$
(9.8)

oder

Für Gleichung (9.4) folgt ebenso

$$\vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\left(\vec{r},t\right)\right) + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left[\vec{\nabla}\Phi\left(\vec{r},t\right) + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}\right] = 0.$$

Mit rot rot = grad div – Δ erhalten wir

$$\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\left(\vec{r},t\right)\right) - \Delta\vec{A}\left(\vec{r},t\right) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t^2} + \vec{\nabla}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}\right) = 0.$$
(9.9)

Wir definieren den d'Alembert-Operator oder Quabla durch

$$\Box \equiv \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tag{9.10}$$

und erhalten

$$\underline{\Box}\vec{A}\left(\vec{r},t\right) - \vec{\nabla}\left[\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\left(\vec{r},t\right) + \frac{1}{c}\frac{\partial\Phi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}\right] = 0.$$
(9.11)

Mit der Coulomb-Eichung

$$\operatorname{div}\vec{A}\left(\vec{r},t\right) = 0 \tag{9.12}$$

und der Wahl $\Phi(\vec{r},t) = 0$ bleibt nur noch die Potentialgleichung (9.11) in der Form

$$\square \vec{A}(\vec{r},t) = 0 \tag{9.13}$$

übrig und die Potentialdarstellungen (9.6) und (9.7) reduzieren sich auf

$$\vec{B}\left(\vec{r},t\right) = \operatorname{rot}\vec{A}\left(\vec{r},t\right), \qquad \vec{E}\left(\vec{r},t\right) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}.$$
(9.14)

Die semiklassische Theorie beschreibt korrekt den Einfluss eines externen Strahlungsfelds auf das atomare Teilchen (Absorption und stimulierte (=induzierte) Emission), aber nicht den Einfluss des atomaren Teilchens auf das Strahlungsfeld (spontane Emission). Bei Quantisierung wird das Strahlungsfeld als Ansammlung von quantisierten Oszillatoren dargestellt, wobei der *n*-te angeregte Zustand des Oszillators *n* Photonen im elektromagnetischen Feld beschreibt. Für große Werte von *n* (viele Photonen oder intensiver Strahl) kann dieses so quantisierte Feld auch klassisch beschrieben werden. Der Hamilton-Operator (9.1) ist linear in \vec{A} , so dass die Ergebnisse des intensiven Strahls auch für einen schwachen Strahl gelten müssen.

Diese Betrachtung gilt nicht für spontane Emission. Diese Emission tritt auch ohne Vorhandensein eines externen Strahlungsfelds auf: eine beschleunigte Ladung strahlt unabhängig von der Anwesenheit eines externen Felds. Zumindest ein Strahlungsquant muss emittiert werden. Deshalb ist dieser Effekt nicht linear in \vec{A} und wird daher nicht durch den Hamilton-Operator (9.1) erfasst.

9.2 Absorption und induzierte Emission

Wir müssen nun das externe Strahlungsfeld spezifizieren, d.h. Lösungen der Potentialgleichung (9.13) angeben. Wir betrachten zwei Arten von externen Feldern:

- (a) monochromatische ebene Wellen,
- (b) die inkohärente Überlagerung ebener Wellen mit unterschiedlicher Frequenz.

9.2.1 Monochromatische externe Felder

Eine ebene monochromatische elektromagnetische transversale Welle mit dem Wellenzahlvektor $\vec{k} = k\vec{e_y}$ parallel zur *y*-Achse und der Dispersionsrelation $\omega = ck$ wird beschrieben durch das Vektorpotential

$$\vec{A}(\vec{r},t) = A_0 \vec{e}_z e^{\imath (ky - \omega t)} + A_0^* \vec{e}_z e^{-\imath (ky - \omega t)} , \qquad (9.15)$$

mit der komplexen Amplitudenfunktion A_0 . Für die dazugehörigen elektrischen und magnetischen Feldstärken (9.14) folgt

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} \left[A_0 \vec{e}_z e^{i(ky-\omega t)} - A_0^* \vec{e}_z e^{-i(ky-\omega t)} \right]$$
(9.16)

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \operatorname{rot}\vec{A}(\vec{r},t) = \begin{vmatrix} \vec{e_x} & \vec{e_y} & \vec{e_z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & A_0 e^{\imath(ky-\omega t)} + A_0^* e^{-\imath(ky-\omega t)} \end{vmatrix} \\ = \vec{e_x} \left[\imath k A_0 e^{\imath(ky-\omega t)} - \imath k A_0^* e^{-\imath(ky-\omega t)} \right].$$
(9.17)

Wir wählen die Anfangszeit t = 0 derart, dass die konstante Amplitudenfunktion A_0 rein imaginär wird und setzen

$$\imath \omega A_0 = \frac{\epsilon}{2}, \qquad \imath k A_0 = \frac{\beta}{2}.$$
 (9.18)

Dies bedeutet, dass die Konstanten ϵ und β rein reell sind und

$$\frac{\epsilon}{\beta} = \frac{\omega}{k} = c \; .$$

Dadurch erhalten wir

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \frac{\epsilon}{2c}\vec{e}_z \left[e^{\imath(ky-\omega t)} + e^{-\imath(ky-\omega t)}\right] = \frac{\epsilon}{c}\cos(ky-\omega t)\vec{e}_z \tag{9.19}$$

und

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \frac{\beta}{2}\vec{e}_x \left[e^{\imath(ky-\omega t)} + e^{-\imath(ky-\omega t)}\right] = \beta\cos(ky-\omega t)\vec{e}_x .$$
(9.20)

Für den Poynting-Vektor folgt

$$\vec{S}(\vec{r},t) = \frac{c}{4\pi} \vec{E}(\vec{r},t) \times \vec{B}(\vec{r},t)$$
$$= \frac{\epsilon\beta}{4\pi} \cos^2(ky - \omega t) \vec{e}_z \times \vec{e}_x$$
$$= \frac{\epsilon\beta}{4\pi} \cos^2(ky - \omega t) \vec{e}_y .$$

Gemittelt über eine Periode $2\pi/\omega$ ergibt sich mit der Substitution $\tau = ky - \omega t$

$$\begin{split} \langle \vec{S} \rangle &= \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt \ \vec{S} \left(\vec{r}, t \right) = \frac{\epsilon \beta}{4\pi} \frac{\omega}{2\pi} \vec{e}_y \int_0^{2\pi/\omega} dt \ \cos^2(ky - \omega t) \\ &= \frac{\epsilon \beta \omega}{8\pi^2} \vec{e}_y \left(-\frac{1}{\omega} \int_{ky}^{ky - 2\pi} d\tau \cos^2 \tau \right) = \frac{\epsilon \beta}{8\pi^2} \vec{e}_y \left(\frac{\tau}{2} \Big|_{ky - 2\pi}^{ky} \right) \\ &= \frac{\epsilon \beta}{8\pi} \vec{e}_y = \frac{\epsilon^2}{8\pi c} \vec{e}_y \;. \end{split}$$

Nach Gleichung (9.18a) ist

$$\frac{\epsilon^2}{4} = (\imath \omega A_0) \cdot (-\imath \omega A_0^*) ,$$

$$\vec{I} = \left\langle \vec{S} \right\rangle = \frac{\omega^2}{2\pi c} |A_0|^2 \vec{e}_y . \qquad (9.21)$$

so dass

gleich der Strahlungsintensität I in erg cm⁻² s⁻¹ ist. Der Photonenfluss, d.h. die Zahl der Photonen pro Flächeneinheit und Sekunde, ist $N = |I|/\hbar\omega$, so dass nach Gleichung (9.21)

$$|A_0|^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} |I| = \frac{2\pi \hbar c}{\omega} N .$$
 (9.22)

Wir lassen jetzt die Beschränkung auf Ausbreitung entlang der *y*-Achse fallen und erhalten für allgemeine Ausbreitungsrichtung das Vektorpotential einer ebenen monochromatischen elektromagnetischen transversalen Welle zu

$$\vec{A}(\vec{r},t) = 2\Re \vec{A}_0(\vec{r}) e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} = \vec{A}_0(\vec{r}) e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} + \vec{A}_0^*(\vec{r}) e^{-i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} , \qquad (9.23)$$

mit $\omega = kc$ und $\vec{A_0} \cdot \vec{k} = 0$. Wir schreiben zusätzlich noch

$$\vec{A}_0(\vec{r}) = A_0(\vec{r})\vec{\mathcal{P}},$$
 (9.24)

wobei $\vec{\mathcal{P}}$ ein Einheitsvektor ist, der die Polarisation der Welle beschreibt. Setzen wir den Ausdruck (9.23) für das Vektorpotential in den Hamilton-Operator (9.1) ein, so erhalten wir für den zeitabhängigen Störoperator

$$\hat{W}(\vec{r},t) = \frac{i\hbar q}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = \frac{i\hbar q}{mc} \left[\vec{A}_0(\vec{r}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + \vec{A}_0^*(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right] \cdot \vec{\nabla}
= \frac{i\hbar q \vec{A}_0(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{mc} \cdot \vec{\nabla} e^{-i\omega t} + \frac{i\hbar q \vec{A}_0^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{mc} \cdot \vec{\nabla} e^{i\omega t} .$$
(9.25)

Setzen wir

$$\hat{F} = \frac{\imath \hbar q \vec{A}_0\left(\vec{r}\right) e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}}}{mc} \cdot \vec{\nabla} = -\frac{q}{mc} \vec{A}_0\left(\vec{r}\right) e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{p} , \qquad (9.26)$$

so erkennen wir, dass der Störoperator (9.25) genau die Form der periodischen Störung (8.111) hat. Wenn das quantenmechanische System anfänglich im Zustand $|m\rangle$ ist und die Störung (9.25) zur Zeit t = 0 eingeschaltet wird, ergeben Gleichungen (8.112) und (8.113) die Übergangsraten für stimulierte Emission und Absorption nach langen Zeiten zu

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\delta(\omega_{nm} - \omega) | < n | \hat{F} | m > |^2 + \delta(\omega_{nm} + \omega) | < n | \hat{F}^+ | m > |^2 \right] .$$
(9.27)

9.2.2 Absorption

Bei Absorption ist $\omega_{nm} = \omega$, d.h. der Anfangszustand nimmt ein Photon gemäß $E_n = E_m + \hbar \omega$ aus dem Strahlungsfeld auf. Für die Absorptionsrate folgt aus den Gleichungen (9.24)–(9.27)

$$w_a = \frac{2\pi}{\hbar^2} | < n |\hat{F}|m > |^2 \delta(\omega_{nm} - \omega)$$

= $\frac{2\pi}{\hbar^2} | < n | \frac{\imath \hbar q A_0(\vec{r})}{mc} e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} |m > |^2 \delta(\omega_{nm} \omega) .$

In Ortsdarstellung und mit Gleichung (9.22) finden wir

$$w_{a} = w_{a}(m \to n) = \frac{2\pi}{\hbar^{2}} \frac{\hbar^{2}q^{2}}{m^{2}c^{2}} \frac{2\pi cI(\omega)}{\omega^{2}} \delta(\omega_{nm} - \omega) \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\mathcal{P}}\cdot\vec{\nabla}\psi_{m}^{0} \right|^{2} \\ = \frac{4\pi^{2}q^{2}I(\omega_{nm})}{m^{2}c\omega_{nm}^{2}} \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\mathcal{P}}\cdot\vec{\nabla}\psi_{m}^{0} \right|^{2} .$$
(9.28)

Diese Rate beschreibt die Rate des Übergangs von einem anfänglich niedrigeren Energiezustand |m > zu einem höheren Zustand |n > durch Aufnahme eines Quants der Energie $\hbar \omega$ durch Absorption aus dem Strahlungsfeld.

9.2.3 Induzierte Emission

Bei induzierter oder stimulierter Emission ist $\omega_{nm} = -\omega$, d.h. der Anfangszustand gibt ein Photon gemäß $E_n = E_m - \hbar \omega$ an das vorhandene Strahlungsfeld ab. Für die induzierte Emissionsrate folgt ebenso aus den Gleichungen (9.24)–(9.27)

$$\begin{split} w_i &= \frac{2\pi}{\hbar^2} | < n |\hat{F}^+|m > |^2 \delta(\omega_{nm} + \omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar^2} | < n | \frac{-i\hbar q A_0^*\left(\vec{r}\right)}{mc} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} |m > |^2 \delta(\omega_{nm} + \omega) \;. \end{split}$$

In Ortsdarstellung und mit Gleichung (9.22) finden wir

$$w_{i} = \frac{2\pi}{\hbar^{2}} \frac{\hbar^{2} q^{2}}{m^{2} c^{2}} \frac{2\pi c I(\omega)}{\omega^{2}} \delta(\omega_{nm} + \omega) \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} \psi_{m}^{0} \right|^{2} \\ = \frac{4\pi^{2} q^{2} I(-\omega_{nm})}{m^{2} c \omega_{nm}^{2}} \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} \psi_{m}^{0} \right|^{2} .$$
(9.29)

Zum Vergleich mit der Absorptionsrate (9.28) schreiben wir diese Rate um, um den Übergang von einem anfänglich höheren Zustand $|N\rangle$ auf ein niedrigeres Niveau $|M\rangle$ durch Abgabe eines Quants der Energie $\hbar\omega$ zu beschreiben. Mit

$$m = N$$
und
$$n = M$$
und
$$-\omega_{nm} = -\omega_{MN} = \omega_{NM}$$
gilt dann
$$w_i = w_i (N \to M)$$

$$= \frac{4\pi^2 q^2 I(\omega_{NM})}{m^2 c \omega_{NM}^2} \left| \int d^3 r \ \psi_M^{0*} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} \psi_N^0 \right|^2 . \quad (9.30)$$

Mit partieller Integration folgt

$$\left|\int d^3r \ \psi_M^{0*} e^{-\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} \psi_N^0 \right|^2 = \left| -\int d^3r \ \psi_N^{0*} e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} \psi_M^0 \right|^2$$

weil für transversale ($\vec{\mathcal{P}} \perp \vec{k}$) Wellen

$$\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\nabla} e^{-\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \propto \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{k} e^{-\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} = 0$$

Setzen wir abschließend wieder N = n und M = m, so folgt aus den Gleichungen (9.28) und (9.30)

$$w_i(n \to m) = w_a(m \to n) \tag{9.31}$$

nochmals das *Prinzip der detaillierten Bilanz*: Die Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeiteinheit für Absorption und induzierte Emission sind gleich.

9.2.4 Nicht-monochromatische externe Felder

Wir untersuchen jetzt die inkohärente Überlagerung von i Frequenzkomponenten

$$\omega_i \in \left[\omega - \frac{\Delta \omega}{2}, \omega + \frac{\Delta \omega}{2}\right]$$

in einem engen Intervall $\Delta \omega \ll \omega$ um die Zentralfrequenz ω , d.h.

$$\vec{A}(\vec{r},t) = 2\Re \sum_{i} \vec{A}_{i}(\vec{r}) e^{i(\Theta_{i}-\omega_{i}t)}, \qquad \vec{A}_{i}(\vec{r}) = \vec{C}_{i}e^{i\vec{k}_{i}\cdot\vec{r}}, \qquad (9.32)$$

wobei Θ_i die Phasen der einzelnen Wellen bezeichnet. Die dazugehörenden elektromagnetischen Felder erhalten wir dann mit

$$-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}e^{-\imath\omega_i t} = \frac{\imath\omega_i}{c}e^{-\imath\omega_i t} = \imath k_i e^{-\imath\omega_i t}$$

zu

$$\vec{E}(\vec{r},t) = 2\Re \sum_{i} \vec{E}_{i}(\vec{r}) e^{i(\Theta_{i}-\omega_{i}t)}, \qquad \vec{E}_{i} = ik_{i}\vec{C}_{i}e^{i\vec{k}_{i}\cdot\vec{r}}$$
$$\vec{B}(\vec{r},t) = 2\Re \sum_{i} \vec{B}_{i}(\vec{r}) e^{i(\Theta_{i}-\omega_{i}t)}, \qquad \vec{B}_{i} = i\vec{k}_{i}\times\vec{C}_{i}e^{i\vec{k}_{i}\cdot\vec{r}}.$$

und

Da wir ein enges Frequenzintervall betrachten, ersetzen wir die Amplituden $\vec{C}_i \simeq \vec{C}_0$ durch die mittleren Werte, also auch

$$k_i \vec{C}_i \simeq k \vec{C}_0, \qquad \vec{k}_i \times \vec{C}_i \simeq \vec{k} \times \vec{C}_0.$$

Allerdings ersetzen wir nicht $\exp(-\imath\omega_i t)$ durch $\exp(-\imath\omega t)$, da wir den Fall langer Zeiten $t \to \infty$ betrachten. Damit ergibt sich

$$\vec{A}(\vec{r},t) \simeq 2\Re \vec{A}_0 R(t), \qquad \vec{A}_0(\vec{r}) = \vec{C}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$
(9.33)

$$\vec{E}(\vec{r},t) \simeq 2\Re \vec{E}_0 R(t), \qquad \vec{E}_0(\vec{r}) = ik \vec{C}_0 e^{ik\cdot\vec{r}}, \qquad (9.34)$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) \simeq 2\Re \vec{B}_0 R(t), \qquad \vec{B}_0(\vec{r}) = \imath \vec{k} \times \vec{C}_0 e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}}, \qquad (9.35)$$

mit

$$R(t) = \sum_{i} \exp(i(\Theta_i - \omega_i t)) .$$
(9.36)

Der Poynting-Vektor ist dann

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{B} = \frac{c}{2\pi} \Re \vec{E}_0 R(t) \times \left(\vec{B}_0 R(t) + \vec{B}_0^* R(t)^* \right) \\ = \frac{c}{2\pi} \Re \left(\left(\vec{E}_0 \times \vec{B}_0 \right) R^2(t) + \left(\vec{E}_0 \times \vec{B}_0^* \right) |R(t)|^2 \right) .$$
(9.37)

Um die Strahlungsintensität zu ermitteln, benötigen wir das zeitliche Mittel von Gleichung (9.37), d.h.

$$\langle R^2(t) \rangle = \sum_i \sum_j e^{i(\Theta_i + \Theta_j)} \left\langle e^{-i(\omega_i + \omega_j)t} \right\rangle , \left\langle |R(t)|^2 \right\rangle = \sum_i \sum_j e^{i(\Theta_i - \Theta_j)} \left\langle e^{-i(\omega_i - \omega_j)t} \right\rangle .$$

Für genügend lange Zeiten ist

$$\begin{cases} e^{-i(\omega_i + \omega_j)t} \rangle &= 0 \\ \left\langle e^{-i(\omega_i - \omega_j)t} \right\rangle &= \delta_{ij} \\ \left\langle R^2(t) \right\rangle &= 0 \end{cases}$$

und so dass

und

$$\langle |R(t)|^2 \rangle = \sum_i \sum_j e^{i(\Theta_i - \Theta_j)} \delta_{ij} = \sum_i 1$$

Für die Intensität des Strahlungsfelds finden wir dann

$$I = \left\langle \vec{S} \right\rangle = \frac{c}{2\pi} \Re \left(\vec{E}_0 \times \vec{B}_0^* \right) \sum_i 1 \, .$$

Es ist

$$\begin{aligned} \Re \left(\vec{E}_0 \times \vec{B}_0^* \right) &= \Re \left[k \vec{C}_0 \times \left(\vec{k} \times \vec{C}_0^* \right) \right] \\ &= k \Re \left[\vec{C}_0 \times \left(\vec{k} \times \vec{C}_0^* \right) \right] \\ &= k \Re \left[\vec{k} \left(\vec{C}_0 \cdot \vec{C}_0^* \right) - \vec{C}_0^* \left(\vec{C}_0 \cdot \vec{k} \right) \right] = k \vec{k} \left| \vec{C}_0 \right|^2 ,\end{aligned}$$

wegen $\vec{C}_0 \perp \vec{k}$. Es folgt für die Intensität

$$I = \frac{c}{2\pi} k\vec{k} \left| \vec{C}_0 \right|^2 \sum_i 1 \,. \tag{9.38}$$

Die Zahl der Frequenzkomponenten im Strahl ist $\sum_i 1 = n(\omega)\Delta\omega$, wobei $n(\omega)$ die Zahl der Frequenzkomponenten pro Frequenzeinheit bezeichnet. Genauso schreiben wir $|I| = I(\omega)\Delta\omega$ in Gleichung (9.38), wobei $I(\omega)$ die differentielle Intensität pro Frequenzeinheit ist. Es folgt

$$I(\omega) = \frac{c}{2\pi} k^2 \left| \vec{C}_0 \right|^2 n(\omega)$$

$$k = \frac{\omega}{c}$$

$$I(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi c} \left| \vec{C}_0 \right|^2 n(\omega) . \qquad (9.39)$$

Für die differentielle Photonen-Anzahldichte pro Flächeneinheit, Zeiteinheit und Frequenzeinheit gilt dann

$$N(\omega) = \frac{I(\omega)}{\hbar\omega} = \frac{\omega}{2\pi\hbar c} \left| \vec{C}_0 \right|^2 n(\omega)$$

$$\left| \vec{C}_0 \right|^2 n(\omega) = \frac{2\pi\hbar c}{N(\omega)} N(\omega) .$$
(9.40)

oder

$$\left|\vec{C}_{0}\right|^{2} n(\omega) = \frac{2\pi nc}{\omega} N(\omega) . \qquad (9.41)$$

Wir wiederholen jetzt die Störungsrechnung, wobei im Stör-Operator (9.25) der Ausdruck (9.33) für \vec{A} benutzt wird. Wir erhalten

$$\hat{W} = -\frac{q}{mc}\vec{C}_0 e^{\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{p} \sum_i e^{\imath(\Theta_i - \omega_i t)} - \frac{q}{mc}\vec{C}_0^* e^{-\imath \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{p} \sum_i e^{\imath\Theta_i - \imath\omega_i t} .$$

Für die Übergangsamplitude 1. Ordnung (8.97) folgt damit

$$\langle n(t) | \Psi(t) \rangle = \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{t} dt' e^{i\omega_{nm}t'} \left\langle n \left| W(t') \right| m \right\rangle$$

$$= \delta_{nm} - \sum_{i} \frac{q e^{i\Theta_{i}}}{i\hbar mc} \int_{0}^{t} dt' e^{i(\omega_{nm}-\omega_{i})t'} \left\langle n \left| \vec{C}_{0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle$$

$$- \sum_{i} \frac{q e^{-i\Theta_{i}}}{i\hbar mc} \int_{0}^{t} dt' e^{i(\omega_{nm}+\omega_{i})t'} \left\langle n \left| \vec{C}_{0}^{*} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle .$$

$$(9.42)$$

Die Zeitintegration ergibt

$$\begin{split} \langle n(t) | \Psi(t) \rangle &= \delta_{nm} + \sum_{i} \frac{q e^{i\Theta_{i}}}{\hbar mc} \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega_{i})t} - 1}{(\omega_{nm} - \omega_{i})} \left\langle n \left| \vec{C}_{0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle \\ &+ \sum_{i} \frac{q e^{-i\Theta_{i}}}{\hbar mc} \frac{e^{i(\omega_{nm} + \omega_{i})t} - 1}{(\omega_{nm} + \omega_{i})} \left\langle n \left| \vec{C}_{0}^{*} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle \;. \end{split}$$

Bei der Berechnung der Übergangsraten nehmen wir an, dass $\Delta \omega$ genügend klein ist, so dass es zu keiner Überlappung von Absorption und induzierter Emission kommt. Für die Absorptionswahrscheinlichkeit erhalten wir dann

$$P_{a} = \sum_{i} \sum_{j} \frac{q^{2}}{\hbar^{2} m^{2} c^{2}} e^{i(\Theta_{i} - \Theta_{j})} \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle \right|^{2} \right.$$

$$\times \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega_{i})t} - 1}{(\omega_{nm} - \omega_{i})} \frac{e^{-i(\omega_{nm} - \omega_{j})t} - 1}{(\omega_{nm} - \omega_{j})}$$

$$(9.43)$$

und die induzierte Emissionswahrscheinlichkeit ist

$$P_{i} = \sum_{i} \sum_{j} \frac{q^{2}}{\hbar^{2}m^{2}c^{2}} e^{-i(\Theta_{i}-\Theta_{j})} \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0}^{*}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\cdot\vec{p} \right| m \right\rangle \right|^{2} \right.$$

$$\times \frac{e^{i(\omega_{nm}+\omega_{i})t}-1}{(\omega_{nm}+\omega_{i})} \frac{e^{-i(\omega_{nm}+\omega_{j})t}-1}{(\omega_{nm}+\omega_{j})} . \qquad (9.44)$$

Jetzt nutzen wir die Annahme der Nichtkohärenz der Strahlung, d.h. es existiert keine Phasenbeziehung der Strahlungskomponenten. Die Nichtkohärenz von Strahlung ist i.A. erfüllt, wenn viele Atome unabhängig voneinander strahlen. In diesem Fall erhalten wir als Phasenmittelung

$$\left\langle \sum_{i} \sum_{j} e^{+i(\Theta_{i} - \Theta_{j})} \right\rangle_{\text{Phase}} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\phi \sum_{i} \sum_{j} e^{+i(\Theta_{i} - \Theta_{j})\phi} = \delta_{ij} .$$
(9.45)

Mit $\sum_i = \int d\omega_i n(\omega_i)$ folgt dann für die Absorptionwahrscheinlichkeit (9.43)

$$P_{a} = \sum_{i} \frac{q^{2}}{\hbar^{2}m^{2}c^{2}} \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\cdot\vec{p} \right| m \right\rangle \right|^{2} \left(\frac{\left| e^{i\left(\omega_{nm}-\omega_{i}\right)t}-1 \right|}{\omega_{nm}-\omega_{i}} \right)^{2} \right.$$
$$= \frac{4q^{2}}{\hbar^{2}m^{2}c^{2}} \int d\omega_{i}n(\omega_{i}) \frac{\sin^{2}\frac{\left(\omega_{nm}-\omega_{i}\right)t}{2}}{\left(\omega_{nm}-\omega_{i}\right)^{2}} \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\cdot\vec{p} \right| m \right\rangle \right|^{2}.$$

Für große Zeiten benutzen wir die Ersetzung (8.107)

$$\lim_{t \to \infty} \left[\frac{\sin\left((\omega_{nm} - \omega_i) t/2 \right)}{(\omega_{nm} - \omega_i)/2} \right]^2 = \pi t \delta\left(\frac{\omega_{nm} - \omega_i}{2} \right) = 2\pi t \delta(\omega_{nm} - \omega_i) ,$$

und erhalten als Absorptionsrate

$$w_{a} = \frac{P_{a}}{t} = \frac{2\pi q^{2}}{\hbar^{2} m^{2} c^{2}} \int d\omega_{i} n(\omega_{i}) \delta(\omega_{nm} - \omega_{i}) \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{p} \right| m \right\rangle \right|^{2} \right.$$

$$= \frac{2\pi q^{2}}{m^{2} c^{2}} n(\omega_{nm}) \left| \left\langle n \left| \vec{C}_{0} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \nabla \right| m \right\rangle \right|^{2} .$$
(9.46)

Wir schreiben wieder

 $\vec{C}_0 = C_0 \vec{\mathcal{P}} \; ,$

wobei $\vec{\mathcal{P}}$ ein Einheitsvektor ist, der die Polarisation der Welle beschreibt. Nach Gleichung (9.41) gilt weiterhin

$$|C_0|^2 n(\omega_{nm}) = \frac{2\pi\hbar c}{\omega_{nm}} N(\omega_{nm}) ,$$

so dass wir in Ortsdarstellung für die Absorptionsrate (9.46)

$$w_{a} = \frac{2\pi q^{2}}{m^{2}c^{2}} |C_{0}|^{2} n(\omega_{nm}) \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\mathcal{P}}\cdot\nabla\psi_{m}^{0} \right|^{2} \\ = \frac{(2\pi q)^{2}\hbar N(\omega_{nm})}{m^{2}c\omega_{nm}} \left| \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\mathcal{P}}\cdot\nabla\psi_{m}^{0} \right|^{2}$$
(9.47)

erhalten. Ebenso folgt für die induzierte Emissionsrate

$$w_{i} = \frac{(2\pi q)^{2} \hbar N(\omega_{nm})}{m^{2} c \omega_{nm}} \left| -\int d^{3}r \; \psi_{m}^{0} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\mathcal{P}} \cdot \nabla \psi_{n}^{0*} \right|^{2} = w_{a} \;.$$
(9.48)

Mit $|I| = N/\hbar\omega$ stimmen diese Raten mit denen der monochromatischen Approximation (siehe Raten (9.28) und (9.30)) überein.

9.3 Elektrische Dipol-Approximation

Die Übergangsraten (9.47) und (9.48) enthalten den Ausdruck

$$J = \int d^3r \ \psi_n^{0*} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\mathcal{P}}\cdot\nabla\psi_m^0 \ . \tag{9.49}$$

Wir entwickeln die Exponentialfunktion für kleine Argumente gemäß

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \simeq 1 + i\vec{k}\cdot\vec{r} + \frac{1}{2}(i\vec{k}\cdot\vec{r})^2 + \dots$$
 (9.50)

Diese Entwicklung ist gerechtfertigt, weil auf atomaren Skalen nach Gleichungen (7.110)-(7.111)

$$\vec{k} \cdot \vec{r} \simeq ka_0 = \frac{r_0}{Z} \cdot \frac{\Delta E}{\hbar c} \simeq \frac{r_0}{Z\hbar c} \frac{Z^2 e^2}{2r_0} = \frac{e^2}{2\hbar c} Z = \frac{Z\alpha_f}{2} \ll 1$$
(9.51)

zumindest für leichte Atome mit kleinem Z. Die Terme in der Reihe (9.50) geben der Reihe nach elektrische Dipol-Übergänge, magnetische Dipol-Übergänge, elektrische Quadrupol-Übergänge usw.

In der *elektrischen Dipol-Approximation* wird nur der erste Term der Entwicklung (9.50) berücksichtigt, d.h.

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \simeq 1 \ . \tag{9.52}$$

Ergeben sich damit verschwindende Übergangsraten, muss man höhere Terme der Entwicklung (9.51) mitnehmen. Dies führt dann auf sog. *verbotene* Übergänge, weil deren Raten um den Faktor $(ka_0)^{-2}$, der in der Regel $\ll 1$ ist, kleiner sind als die Dipol-Übergänge, die auch als *erlaubte* Übergänge bezeichnet werden. Als *streng-verboten* wird der Fall bezeichnet, in dem der Ausdruck (9.49) ohne Näherungen verschwindet.

Anstatt der Reihe (9.50) ist es auch üblich, nach Legendre-Polynomen zu entwickeln. Mit $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos \theta$ und den sphärischen Besselfunktionen $j_l(r)$ gilt die Entwicklung

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

= $j_0(kr) + 3ij_1(kr) P_1(\cos\theta) - 5j_2(kr) P_2(\cos\theta)$. (9.53)

Diese ist oft geeigneter, da die ungestörten Wellenfunktionen ψ^0_n und ψ^0_m ebenfalls Legendre-Polynome enthalten.

Mit der elektrischen Dipol-Approximation (9.52) erhalten wir für den Ausdruck (9.49)

$$J \simeq J_d = \int d^3r \; \psi_n^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \nabla \psi_m^0 = \frac{\imath}{\hbar} \int d^3r \; \psi_n^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{p} \psi_m^0 \;. \tag{9.54}$$

Wir betrachten den Kommutator

$$[\vec{r}, \vec{p}^2] = \vec{p} [\vec{r}, \vec{p}] + [\vec{r}, \vec{p}] \vec{p} = 2\imath\hbar\vec{p}.$$

Mit dem ungestörten Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{0} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{2} + V(\vec{r}) \left[\vec{r}, \hat{H}_{0}\right] = \frac{1}{2m}\left[\vec{r}, \vec{p}^{2}\right] + \left[\vec{r}, V(\vec{r})\right] = \frac{\imath\hbar}{m}\vec{p} \frac{\imath}{\hbar}\vec{p} = \frac{m}{\hbar^{2}}\left[\vec{r}, \hat{H}_{0}\right] .$$
(9.55)

folgt oder

Eingesetzt in Gleichung (9.54) finden wir

$$J_{d} = \frac{m}{\hbar^{2}} \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \left(\vec{r} \hat{H}_{0} - \hat{H}_{0} \vec{r} \right) \psi_{m}^{0}$$

$$= \frac{m}{\hbar^{2}} \int d^{3}r \left[\psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \hat{H}_{0} \psi_{m}^{0} - \psi_{n}^{0*} \hat{H}_{0} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \psi_{m}^{0} \right]$$

$$= \frac{m}{\hbar^{2}} \int d^{3}r \left[\psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} E_{m} \psi_{m}^{0} - E_{n} \psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \psi_{m}^{0} \right]$$

$$= \frac{m}{\hbar^{2}} (E_{m} - E_{n}) \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \psi_{m}^{0}$$

$$= -\frac{m}{\hbar} \omega_{nm} \int d^{3}r \ \psi_{n}^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \psi_{m}^{0} . \qquad (9.56)$$

Es folgt für die Raten (9.47) und (9.48) in Dipol-Näherung

$$w_a = w_i = \frac{(2\pi q)^2 \omega_{nm} N(\omega_{nm})}{\hbar c} \left| \int d^3 r \ \psi_n^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{r} \psi_m^0 \right|^2 \ .$$

Mit

$$I(\omega_{nm}) = \hbar \omega_{nm} N(\omega_{nm})$$

$$w_a = w_i = w = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} I(\omega_{nm}) \left| \int d^3 r \ \psi_n^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{D} \psi_m^0 \right|^2, \qquad (9.57)$$

ergibt sich

$$\vec{D} = e\vec{r} = \sum_{j} e_{j}\vec{r}_{j} , \qquad (9.58)$$

falls das System aus j atomaren Elektronen besteht. Für unpolarisiertes Licht von Atomen mit Zufallsrichtungen mittelt man die Raten (9.57) über alle Winkel:

$$\left\langle \left| \int d^3 r \; \psi_n^{0*} \vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{D} \psi_m^0 \right|^2 \right\rangle = \frac{1}{3} \left| D_{nm} \right|^2 \; ,$$

weil $< \cos^2 \theta >= 1/3$. Dabei ist

$$|D_{nm}|^2 = \left| \int d^3r \; \psi_n^{0*} \vec{D} \psi_m^0 \right|^2 \; .$$

Für unpolarisiertes Licht erhalten wir damit

$$w_{Av} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 c} I(\omega_{nm}) \left| \int d^3 r \ \psi_n^{0*} \vec{D} \psi_m^0 \right|^2$$

$$= \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2 c} I(\omega_{nm}) \left| \int d^3 r \ \psi_n^{0*} \vec{r} \psi_m^0 \right|^2$$

$$= \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2 c} I(\omega_{nm}) \left| \langle \vec{r} \rangle \right|_{nm}^2 . \qquad (9.59)$$

9.4 Spontane Emission

Wir betrachten das thermische Gleichgewicht zwischen Atomen und einem Strahlungsfeld, das durch Absorption und Emission von Photonen der Frequenz $\omega_{fn} = (E_f - E_n)/\hbar > 0$, d.h. $E_f > E_n$, zustande kommt. Zwei der drei möglichen Prozesse, nämlich Absorption und induzierte Emision, sind proportional zur Energiedichte pro Frequenzeinheit des externen Strahlungsfelds

$$\rho(\omega_{fn}) = \frac{I(\omega_{fn})}{c} = \frac{\hbar\omega_{fn}N(\omega_{fn})}{c}.$$

Der dritte Prozess, *spontane Emission*, findet auch bei Abwesenheit eines Strahlungsfelds statt, ist also unabhängig von $\rho(\omega_{fn})$.

Die Rate der Übergänge in den Atomen durch Absorption $n \rightarrow f$ ist

$$\frac{dN}{dt}(n \to f) = B_{nf} N(n) \rho(\omega_{fn}) , \qquad (9.60)$$

wobei N(n) die Zahl der Atome im Zustand n ist. Die Rate der Übergänge in den Atomen durch Emission $f \rightarrow n$ ist

$$\frac{dN}{dt}(f \to n) = B_{fn}N(f)\rho(\omega_{fn}) + A_{fn}N(f) . \qquad (9.61)$$

 A_{fn} und B_{fn} sind die *Einstein-Koeffizienten* für spontane und induzierte Übergangswahrscheinlichkeiten. Das Prinzip der detaillierten Bilanz (9.31) ergab $B_{fn} = B_{nf}$. Im Gleichgewicht gilt

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt}(f \to n) &= \frac{dN}{dt}(n \to f) ,\\ \text{also} & B_{fn}N(n)\rho(\omega_{fn}) &= B_{fn}N(f)\rho(\omega_{fn}) + A_{fn}N(f) ,\\ \text{oder} & B_{fn}\rho(\omega_{fn})\left[N(n) - N(f)\right] &= A_{fn}N(f) . \end{aligned}$$

Wir erhalten für die differentielle Energiedichte des Strahlungsfelds

$$\rho(\omega_{fn}) = \frac{\frac{A_{fn}}{B_{fn}}}{\frac{N(n)}{N(f)} - 1} .$$
(9.62)

Nach der statistischen Mechanik gilt im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T für die Anzahl der Atome die Boltzmann-Verteilung

$$\frac{N(n)}{N(f)} = e^{-\frac{\left(E_n - E_f\right)}{k_B T}} = \exp\left(\frac{\hbar\omega_{fn}}{k_B T}\right)$$
(9.63)

und für die differentielle Energiedichte des Strahlungsfelds das Plancksche Strahlungsgesetz

$$\rho(\omega_{fn}) = \frac{\hbar \omega_{fn}^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{fn}}{k_B T}} - 1} .$$
(9.64)

Setzen wir die Boltzmann-Verteilung (9.63) in Gleichung (9.62) ein, so folgt

$$\rho(\omega_{fn}) = \frac{\frac{A_{fn}}{B_{fn}}}{e^{\frac{\hbar\omega_{fn}}{k_BT}} - 1} .$$

$$(9.65)$$

Damit Gleichung (9.65) mit Gleichung (9.64) übereinstimmt, muss gelten

$$A_{fn} = \frac{\hbar\omega_{fn}^3}{\pi^2 c^3} B_{fn} = \frac{\hbar\omega_{fn}^3}{\pi^2 c^3} B_{nf} .$$
(9.66)

Dieser universelle Zusammenhang zwischen den Einstein-Koeffizienten gilt unabhängig vom Vorliegen des thermischen Gleichgewichts. Nach Gleichung (9.59) ist

$$B_{fn}\rho(\omega_{fn}) = B_{fn}\frac{I(\omega_{fn})}{c} = w_{Av} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2 c}I(\omega_{fn}) |\langle \vec{r}_{fn} \rangle|^2 ,$$

$$B_{fn} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle \vec{r}_{fn} \rangle|^2 .$$
(9.67)

so dass

Eingesetzt in Gleichung (9.66) ergibt sich

$$A_{fn} = \frac{\hbar\omega_{fn}^3}{\pi^2 c^3} \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle \vec{r}_{fn} \rangle|^2 = \frac{4e^2 \omega_{fn}^3}{3c^3\hbar} |\langle \vec{r}_{fn} \rangle|^2 = \frac{4\omega_{fn}^3}{3c^3\hbar} \left| \left\langle \vec{D}_{fn} \right\rangle \right|^2 \,. \tag{9.68}$$

Die Formeln (9.67) und (9.68) gelten in der elektrischen Dipol-Approximation, d.h. die Wellenlänge der Strahlung muss viel größer als der Atomdurchmesser sein.

9.4.1 Lebensdauer angeregter Zustände

Aufgrund der spontanen Emission verringert sich die Zahl von Atomen im angeregten Energiezustand (siehe Gleichung (9.61)) gemäß

$$\frac{dN_f}{dt} = -A_{fn}N_f \; ,$$

so dass ähnlich wie beim radioaktiven Zerfall

$$N_f(t) = N_f(0)e^{-A_{fn}t} = N_f(0)e^{\frac{-t}{\tau}}, \qquad (9.69)$$

mit der Lebensdauer $\tau = 1/A_{fn}$. Bei mehreren Zerfallszuständen $(f \rightarrow n_1, n_2, n_3, ...)$ ist

$$\tau = \frac{1}{A_{fn_1} + A_{fn_2} + A_{fn_3} + \dots} \; .$$

9.4.2 Linienverbreiterung

Gemäß Gleichung (9.69) entvölkern sich im Allgemeinen die Anfangs- (m) und die End-Zustände (n) durch spontane Emission. Die entsprechenden ungestörten Wellenfunktionen sind dann

$$\Psi_n^0(t) = u_n e^{\frac{-iE_n t}{\hbar} - \frac{\phi_n t}{2}}, \qquad \Psi_m^0(t) = u_m e^{\frac{-iE_m t}{\hbar} - \frac{\phi_m t}{2}}, \qquad (9.70)$$

mit den spontanen Emissionsraten ϕ_n und ϕ_m . Berechnen wir mit dieser veränderten Zeitabhängigkeit die Übergangsamplitude 1. Ordnung (8.97), so folgt etwa für Absorption

$$\langle n(t) | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle u_n \left| \frac{iq\hbar}{mc} \vec{A} \cdot \nabla \right| u_m \right\rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{nm} - \omega)t' - (\phi_n + \phi_m)t'/2}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left\langle u_n \left| \frac{iq\hbar}{mc} \vec{A} \cdot \nabla \right| u_m \right\rangle \frac{e^{[i(\omega_{nm} - \omega) - (\phi_n + \phi_m)/2]t} - 1}{[i(\omega_{nm} - \omega) - (\phi_n + \phi_m)/2]}$$

$$= -\frac{1}{\hbar} \left\langle u_n \left| \frac{iq\hbar}{mc} \vec{A} \cdot \nabla \right| u_m \right\rangle \frac{e^{[i(\omega_{nm} - \omega) - (\phi_n + \phi_m)/2]t} - 1}{\omega_{nm} - \omega + \frac{i}{2}(\phi_n + \phi_m)} \right.$$

Für das Betragsquadrat folgt die veränderte Zeitabhängigkeit

$$\begin{aligned} \left| \langle n(t) | \Psi(t) \rangle \right|^{2} &= \frac{\left| \langle n | \hat{F} | m \rangle \right|^{2}}{\hbar^{2}} \\ &\times \left(\frac{e^{[i(\omega_{nm} - \omega) - (\phi_{n} + \phi_{m})/2]t} - 1}{\omega_{nm} - \omega + \frac{i}{2}(\phi_{n} + \phi_{m})} \frac{e^{[-i(\omega_{nm} - \omega) - (\phi_{n} + \phi_{m})/2]t} - 1}{\omega_{nm} - \omega - \frac{i}{2}(\phi_{n} + \phi_{m})} \right) \\ &= \frac{\left| \langle n | \hat{F} | m \rangle \right|^{2}}{\hbar^{2}} \frac{1}{(\omega_{nm} - \omega)^{2} + \frac{1}{4}(\phi_{n} + \phi_{m})^{2}} \\ &\times \left(1 - 2e^{-\frac{1}{2}(\phi_{n} + \phi_{m})t} \cos(\omega_{nm} - \omega)t + e^{-(\phi_{n} + \phi_{m})t} \right) . \end{aligned}$$
(9.71)

Anstatt für große Zeiten linear in t zu divergieren, erhalten wir im Grenzfall $t \to \infty$ den endlichen Ausdruck

$$\lim_{t \to \infty} |\langle n(t) | \Psi(t) \rangle|^2 = \frac{\left| \langle n | \hat{F} | m \rangle \right|^2}{\hbar^2} \cdot \mathcal{L}(\omega) .$$
(9.72)

0

Diese Gleichung enthält als zusätzliche Frequenzabhängigkeit das Lorentz-Profil

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{1}{(\omega_{nm} - \omega)^2 + \frac{1}{4}(\phi_n + \phi_m)^2} \,. \tag{9.73}$$

9.5 Auswahlregeln

9.5.1 Wasserstoffähnliche Atome

Wir berechnen die Matrixelemente für das elektrische Moment eines Elektrons, das sich in einem Zentralkraftfeld bewegt. In diesem Fall sind die Ortswellenfunktionen der stationären

Zustände (siehe Kap. 7)

$$\psi_{nlm}^0(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{\imath m\phi} .$$
(9.74)

Gemäß Gleichung (9.68) benötigen wir die Matrixelemente von $|\langle \vec{r} \rangle|_{fn}^2$, also $|\langle x \rangle|_{fn}^2$, $|\langle y \rangle|_{fn}^2$ und $|\langle z \rangle|_{fn}^2$ für zwei beliebige Anfangs- und End-Zustände n = (n, l, m) und f = (n', l', m'). Anstatt die Matrixelemente von x, y und z ist es praktischer, die der Kombinationen

$$\xi = x + iy = r \sin \theta e^{i\phi},$$

$$\eta = x - iy = r \sin \theta e^{-i\phi}$$

und von $z = r \cos \theta$ zu berechnen. Wir erhalten mit Gleichung (9.74)

$$\begin{aligned} |\langle \xi \rangle|^{2}_{nlm,n'l'm'} &= \int_{0}^{\infty} dr \, r^{2} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_{0}^{2\pi} d\phi \, \psi^{0*}_{n'l'm'} \xi \psi^{0}_{nlm} \\ &= \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_{0}^{\pi} d\theta \, \sin^{2}\theta P_{l}^{m}(\cos\theta) P_{l'}^{m'}(\cos\theta) \\ &\times \int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{i(m-m')\phi+i\phi} \,, \end{aligned}$$
(9.75)
$$|\langle \eta \rangle|^{2}_{nlm,n'l'm'} &= \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_{0}^{\pi} d\theta \, \sin^{2}\theta P_{l}^{m}(\cos\theta) P_{l'}^{m'}(\cos\theta) \end{aligned}$$

$$|_{nlm,n'l'm'}^{2} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_{0}^{\pi} d\theta \, \sin^{2} \theta P_{l}^{m}(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \\ \times \int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{i(m-m')\phi - i\phi}$$
(9.76)

und
$$|\langle z \rangle|^{2}_{nlm,n'l'm'} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_{0}^{\pi} d\theta \, \sin \theta \cos \theta P_{l}^{m}(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \times \int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{i(m-m')\phi} \,.$$
 (9.77)

Die Integrale über ϕ ergeben

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{i(m-m')\phi \pm i\phi} = 2\pi \delta_{m,m'\mp 1}$$

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{i(m-m')\phi} = 2\pi \delta_{m,m'} \, .$$

und

Mit den Bezeichnungen

$$I_{n,l,n',l'} \equiv \int_{0}^{\infty} dr \, r^{3} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) , \qquad (9.78)$$

$$S_{ll'}^{mm'} \equiv \int_0^{\pi} d\theta \, \sin^2 \theta P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \tag{9.79}$$

$$C_{ll'}^{mm'} \equiv \int_0^{\pi} d\theta \,\sin\theta\cos\theta P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^{m'}(\cos\theta) \,. \tag{9.80}$$

und

erhalten wir dann

$$|\langle \xi \rangle|^{2}_{nlmn'l'm'} = 2\pi I_{n,l,n'l'} S^{mm'}_{ll'} \delta_{m,m'-1} , \qquad (9.81)$$

$$|\langle \eta \rangle|^{2}_{nlmn'l'm'} = 2\pi I_{n,l,n',l'} S^{mm}_{ll'} \delta_{m,m'+1}$$
(9.82)

und

$$|\langle z \rangle|^{2}_{nlm,n'l'm'} = 2\pi I_{n,l,n'l'} C_{ll'}^{mm'} \delta_{m,m'} . \qquad (9.83)$$

Bezüglich der Quantenzahlmgilt also als erste Auswahlregel, dass erlaubte elektrische Dipol-Übergänge nur möglich sind für

$$m' - m = \pm 1$$
 oder 0. (9.84)

Die Auswahlregel (9.84) ist leicht zu verstehen, da das Photon den Spin 1 hat, d.h. sein Wert der Quantenzahl m ist -1,0 oder 1. Die Erhaltung der z-Komponente des Drehimpulses erfordert, dass das Atom das abgibt, was das Photon mitnimmt.

Jetzt betrachten wir die Auswahlregeln bezüglich l. Wir beginnen mit $C_{ll'}^{mm'}$. Aufgrund Gleichung (9.83) interessiert nur der Fall m = m'. Mit $x = \cos \theta$ folgt

$$C_{ll'}^{mm} = \int_0^\pi d\theta \,\sin\theta \cos\theta P_l^m(\cos\theta) P_{l'}^m(\cos\theta) = \int_{-1}^1 dx \, x P_l^m(x) P_{l'}^m(x) \,. \tag{9.85}$$

Zur Auswertung dieses Integrals nutzen wir die Rekursionsformel

$$xP_{l}^{m} = \frac{l-m+1}{2l+1}P_{l+1}^{m} + \frac{l+m}{2l+1}P_{l-1}^{m} , \qquad (9.86)$$

für die assoziierten Legendre-Funktionen, die aus der Rekursionsformel (7.54)

$$x \cdot (2l+1)P_l = (l+1)P_{l+1} + lP_{l-1} ,$$

für Legendre-Polynome folgt (siehe z.B. Arfken). Mit der Orthonormalität der assoziierten Legendre-Funktionen erhalten wir dann für Gleichung (9.85)

$$C_{ll'}^{mm} = \frac{l-m+1}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx P_{l+1}^{m}(x) P_{l'}^{m}(x) + \frac{l+m}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx P_{l-1}^{m}(x) P_{l'}^{m}(x)$$

= $\frac{l-m+1}{2l+1} \delta_{l+1,l'} + \frac{l+m}{2l+1} \delta_{l-1,l'}$. (9.87)

Nur für

$$l' = l \pm 1 \tag{9.88}$$

ergibt sich ein von Null verschiedener Wert.

Ebenso berechnen wir das Integral $S_{ll'}^{mm'}$, wobei wegen der Gleichungen (9.81) und (9.82) nur der Fall $m' = m \pm 1$ interessiert. Wir finden

$$S_{ll'}^{m,m\pm 1} = \int_{-1}^{1} dx \sqrt{1 - x^2} P_l^m(x) P_{l'}^{m\pm 1}(x) .$$
(9.89)

 $S^{m,r}_{ll'}$

 $S^{m,r}_{ll'}$

Mit den Rekursionsformeln

$$(1-x^2)^{1/2}P_l^{m-1} = \frac{1}{2l+1}P_{l-1}^m - \frac{1}{2l+1}P_{l+1}^m$$
(9.90)

und
$$(2l+1)(1-x^2)^{1/2}P_l^{m+1} = (l-m)(l-m+1)P_{l+1}^m -(l+m)(l+m+1)P_{l-1}^m$$
 (9.91)

folgt

$$\begin{split} {}^{n-1} &= \frac{1}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx \, P_{l}^{m}(x) P_{l'-1}^{m}(x) \\ &\quad -\frac{1}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx \, P_{l}^{m}(x) P_{l'+1}^{m}(x) \\ &= \frac{1}{2l+1} \left[\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1} \right] \\ {}^{n+1} &= \frac{(l-m)(l-m+1)}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx \, P_{l}^{m}(x) P_{l'+1}^{m}(x) \\ &\quad -\frac{(l+m)(l+m+1)}{2l+1} \int_{-1}^{1} dx \, P_{l}^{m}(x) P_{l'-1}^{m}(x) \\ &= \frac{(l-m)(l-m+1)}{2l+1} \delta_{l,l'+1} \end{split}$$

und

$$-\frac{2l+1}{(l+m)(l+m+1)}\delta_{l,l'-1}$$
(9.93)

Nur für $l^{'}=l\pm 1$ sind $S^{m,m-1}_{ll^{'}}$ und $S^{m,m+1}_{ll^{'}}$ verschieden von Null.



Abbildung 9.1: Erlaubte Übergänge im Wasserstoff-Atom

Als Auswahlregel für die Bahndrehimpulsquantenzahl für erlaubte elektrische Dipol-Übergänge erhalten wir in allen Fällen

$$l' - l = \pm 1 . (9.94)$$

Auch diese Auswahlregel ist wieder leicht mit dem Spin 1 des Photons zu verstehen.

Auswahlregeln für die radiale Quantenzahl $n_r = n - l - 1$ bestehen nicht.

Als Ergebnis ist festzuhalten, dass nicht alle elektrischen Dipol-Übergänge durch spontane Emission erlaubt sind: einige sind durch Auswahlregeln verboten. Wir wenden unsere Ergebnisse auf die vier niedrigsten Niveaus des Wasserstoffatoms ohne Feinstrukturaufspaltung an (siehe Abb. 9.1):

- 1. Erlaubte Übergänge sind nur zwischen den Serien (auf die jeweilige Nachbarserie), aber nicht innerhalb der einzelnen Serien möglich wegen $l l' = \pm 1$. Damit erklärt die Quantenmechanik die Egebnisse der optischen Spektroskopie.
- 2. Der 2s-Zustand (ψ_{200}) ist *metastabil*. Er kann sich durch erlaubte Übergänge nicht entvölkern, da es keinen Zustand mit niedrigerer Energie mit l = 1 gibt. Seine Lebensdauer ist viel länger als die der 2p-Zustände (ψ_{211} , ψ_{210} und ψ_{21-1}). Metastabile Zustände zerfallen durch verbotene Übergänge mit entsprechend längerer Zerfallszeit oder nach Stößen mit anderen Atomen.

9.5.2 Lebensdauer des 2p-Zustands

Wir benutzen ohne Beweis

$$\begin{split} \left\langle n', l+1, m | z | n, l, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} \left\langle n', l+1 | r | n, l \right\rangle \\ \left\langle n', l-1, m | z | n, l, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} \left\langle n', l-1 | r | n, l \right\rangle \\ \left\langle n', l+1, m \pm 1 | x \pm i y | n, l, m \right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{(l \pm m+2)(l \pm m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} \left\langle n', l+1 | r | n, l \right\rangle \\ \left\langle n', l-1, m \pm 1 | x \pm i y | n, l, m \right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{(l \mp m)(l \mp m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} \left\langle n', l-1 | r | n, l \right\rangle \\ \end{split}$$
bei
$$\begin{split} \left\langle n, l | r | n', l' \right\rangle \equiv I_{n,l,n',l'} = \int_{0}^{\infty} dr \, r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \end{split}$$

wobe

nach Gleichung (9.78). Für ein gegebenes Niveau (n, l) müssen wir dann über alle möglichen erlaubten Übergänge nach Gleichung (9.84) summieren, wobei hier wieder anstelle der Matrixelemente für $|\langle x \rangle|^2$, $|\langle y \rangle|^2$ und $|\langle z \rangle|^2$ die zuvor eingeführten Kombinationen

$$\left|\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(x+\imath y)\right\rangle\right|^2, \left|\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(x-\imath y)\right\rangle\right|^2 \operatorname{und}\left|\langle z\rangle\right|^2$$

benutzt werden. Dabei muss beachtet werden, dass aufgrund der Kommutatorrelationen $[L_z, Z] = 0$ und $[L_z, x \pm \imath y] = \pm \hbar (x + \imath y)$ die folgenden Zuordnungen gelten:

$$z : m' = m$$

 $x + iy : m' = m + 1$
 $x - iy : m' = m - 1$

Man erhält also Ergebnisse, die unabhängig von \boldsymbol{m} sind

$$\begin{split} &\sum_{m'} \left| \left\langle n', l+1, m' \left| \vec{r} \right| n, l, m \right\rangle \right|^2 \\ &= \left| \left\langle n', l+1, m+1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (x+iy) \right| n, l, m \right\rangle \right|^2 + \left| \left\langle n', l+1, m \left| z \right| n, l, m \right\rangle \right|^2 \\ &+ \left| \left\langle n', l+1, m-1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (x-iy) \right| n, l, m \right\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \left| \left\langle n', l+1 \left| r \right| n, l \right\rangle \right|^2 + \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)} \left| \left\langle n', l+1 \left| r \right| n, l \right\rangle \right|^2 \\ &+ \frac{1}{2} \frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \left| \left\langle n', l+1 \left| r \right| n, l \right\rangle \right|^2 \\ &= \frac{l+1}{2l+1} \left| \left\langle n', l+1 \left| r \right| n, l \right\rangle \right|^2 \end{split}$$

und
$$\sum_{m'} \left| \left\langle n', l-1, m' | \vec{r} | n, l, m \right\rangle \right|^2 = \frac{l}{2l-1} \left| \left\langle n', l-1 | r | n, l \right\rangle \right|^2$$

Mit diesen Summen berechnet sich der Einstein-Koeffizient für spontane Emission (9.68)

$$A_{fn} = \frac{4e^2\omega_{fn}^3}{3c^3\hbar} \left| \langle \vec{r}_{fn} \rangle \right|^2 \; .$$

Für das 2p-Niveau (n = 2, l = 1) verbleibt als einziger erlaubter Übergang (siehe Abb. 9.1) der nach 1s (n = 1, l = 0). Wir erhalten dann mit der ersten obigen Summe

$$\sum_{m'} \left| \left\langle 2, 1, m' \left| \vec{r} \right| 1, 0, m \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle 2, 1 \left| r \right| 1, 0 \right\rangle \right|^2 = I_{2,1,1,0}^2 ,$$

$$A_{2p,1s} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{c^3 \hbar} I_{2,1,1,0}^2 , \qquad (9.95)$$

so dass

$$\omega = \omega_{2p,1s} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{-3E_1}{4\hbar} = \frac{3}{8} \frac{e^2}{\hbar a_0} . \quad (9.96)$$

mit

9.5 Auswahlregeln

Mit den radialen Wellenfunktionen

$$R_{1s}(r) = R_{10}(r) = \frac{u_{10}}{r} = \frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-r/a_0}$$
$$R_{2p}(r) = R_{21}(r) = \frac{u_{21}}{r} = \frac{1}{\sqrt{24}a_0^{5/2}} r e^{-r/2a_0}$$

und

erhalten wir

$$I_{2,1,1,0} = \int_0^\infty dr \, r^3 R_{21}(r) R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{6}a_0^4} \int_0^\infty dr \, r^4 e^{\frac{-3r}{2a_0}} \, .$$

Mit der Substitution $x = 3r/2a_0$ und dem Integral (8.49) folgt

$$I_{2,1,1,0} = \frac{1}{2^{1/2} 3^{1/2} a_0^4} \frac{2^5}{3^5} a_0^5 \int_0^\infty dx \, x^4 e^{-x} = \frac{2^{9/2}}{3^{11/2}} a_0 \Gamma(5) = 24 a_0 \frac{2^{9/2}}{3^{11/2}} = \frac{2^{15/2}}{3^{9/2}} a_0 \; .$$

Es folgt für den Koeffizienten (9.95)

$$A_{2p,1s} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{c^3 \hbar} \frac{2^{15}}{3^9} a_0^2 = \frac{2^{17}}{3^{10}} \frac{e^2 a_0^2 \omega^3}{c^3 \hbar} \,.$$

Mit der Frequenz (9.96) und der Feinstrukturkonstante $\alpha_f = e^2/(\hbar c)$ erhalten wir

$$A_{2p,1s} = \frac{2^{17}}{3^{10}} \frac{e^2}{\hbar c^3} \frac{3^3}{2^9} \frac{e^6}{\hbar^3 a_0^3} a_0^2 = \frac{2^8}{3^7} \frac{e^8}{c^3 \hbar^4 a_0}$$

= $\frac{2^8}{3^7} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a_0} = \frac{2^8}{3^7} \alpha_f^4 \frac{c}{a_0} = 1.88 \cdot 10^9 \,\mathrm{s}^{-1} \,.$ (9.97)

Die Lebensdauer beträgt dann

$$\tau_{2p \to 1s} = 5.3 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{s} \,. \tag{9.98}$$

9.5.3 Laporte's Auswahlregel

Die Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$ lässt sich leichter durch die Regel von Laporte beweisen. Diese besagt: es gibt keine Übergänge zwischen Zuständen der gleichen Parität.

Mit Parität +1 bezeichnet man Zustände, für die die Summe $\sum_i l_i$ über alle Elektronen der Konfiguration gleich einer geraden Zahl ist. Parität -1 bezeichnet Zustände, für die die Summe $\sum_i l_i$ über alle Elektronen der Konfiguration gleich einer ungeraden Zahl ist.

Elektromagnetische Wechselwirkungen sind symmetrisch gegenüber den Raumspiegelungen durch die Transformationen $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Bei Parität +1 gilt für die Wellenfunktion $\psi \rightarrow \psi$, bei Parität -1 gilt $\psi \rightarrow -\psi$.

Betrachten wir das elektrische Dipolmoment eines Systems aus j Elektronen

$$\vec{D}_{fn} = e \int d^3 r \psi_f^{0*} \sum_j \vec{r}_j \psi_n^0 .$$
(9.99)

Spiegeln wir alle Koordinaten $\sum_{j} \vec{r}_{j} \rightarrow -\sum_{j} \vec{r}_{j}$ und bleibt das Produkt $\psi_{f}^{0*}\psi_{n}^{0}$ dabei unverändert, weil die Zustände f und n die gleiche Parität haben, so ist das Integral (9.99) gleich seinem Negativen und damit gleich Null. Es kann also nur elektrische Dipol-Übergänge geben, wenn die Zustände f und n unterschiedliche Parität haben, d.h. der Unterschied $\Delta l = \pm \cdot$ (ungerade Zahl). Da ein einzelnes Photon den Spin 1 hat, muss diese ungerade Zahl gleich 1 sein und wir erhalten die Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$.

9.5.4 Viel-Elektronen Systeme

Der Vollständigkeit wegen, notieren wir die Auswahlregeln für die Drehimpulse \vec{L} , \vec{S} und $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$:

- 1. Die Übergänge von J = 0 zu J = 0 sind verboten, weil das Photon den Spin 1 hat.
- 2. Bei L S-Kopplung erlaubt sind $\Delta S = 0$, $\Delta L = 0, \pm 1$ und $\Delta J = 0, \pm 1$ außer von J = 0 auf J = 0.

9.5.5 Absolute Übergangsraten und Oszillatorstärke

Die Übergangsrate durch spontane Emission vom Zustand k nach n ist nach Gleichung (9.68)

$$A_{kn} = \frac{4e^2 \omega_{kn}^3}{3c^3 \hbar} |\langle \vec{r}_{kn} \rangle|^2 .$$
 (9.100)

Wir definieren die Oszillatorstärke

$$f_{kn} \equiv \frac{2m\omega_{kn}}{\hbar} |\langle \vec{r}_{kn} \rangle|^2 , \qquad (9.101)$$

$$A_{kn} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{kn}^2}{mc^3} f_{kn} . \qquad (9.102)$$

Summieren wir Gleichung (9.102) über alle Zustände n mit Energien kleiner als der Anfangszustand k, so erhalten wir die *Gesamtübergangsrate oder absolute Übergangsrate* für die Entvölkerung des Zustands k durch spontane Emission zu

$$\beta_k = \sum_{E_n < E_k} A_{kn} = (\tau_k)^{-1} \tag{9.103}$$

und die Lebenszeit $\tau_k = \beta_k^{-1}$ des Zustands.

9.6 Photoelektrischer Effekt

Wie in Kap. 1.2.1 diskutiert, entsteht der photoelektrische Effekt beim Stoß eines Photons mit der Frequenz ω mit einem im Atom gebundenen Elektron der Energie B. Das Elektron entkommt dann mit der kinetischen Energie

$$E_{f,kin} = \hbar\omega - B . \tag{9.104}$$

Wir wollen diesen Prozess jetzt quantitativ beschreiben.

Die Bindungsenergie in einem wasserstoffähnlichen Atom der Ladungszahl Z ist $B = -E_n$, wobei E_n durch Gleichung (7.108) gegeben ist

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \,.$$

Wir beschränken unsere Untersuchung auf Elektronen im Grundzustand (n = 1) auf der sog. *K*-Schale, wo der Einfluss der anderen Elektronen im Vergleich zum anziehenden Kern klein ist. In diesem Fall ist

$$B = \frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{Z^2}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 m_e c^2 = \frac{Z^2}{2} \alpha_f^2 m_e c^2 .$$

Für nahezu alle Elemente können wir dann Photonenfrequenzen mit

$$2B \ll \hbar \omega \ll m_e c^2 \tag{9.105}$$

betrachten, so dass die kinetische Energie $E_{f,kin} = p_f^2/(2m_e) = (\hbar k_f)^2/2m_e$ des ausgestossenen Elektrons viel größer als B ist. Aus

$$\frac{(\hbar k_f)^2}{2m_e} \gg B = \frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{Z^2 e^2}{2a_0}$$

folgt mit dem Bohr-Radius (2.78), $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$, dass

$$k_f^2 \gg \frac{Z^2 m_e e^2}{a_0 \hbar^2} = \frac{Z^2}{a_0^2},$$

 $(a_0 k_f)^2 \gg Z^2.$ (9.106)

also

In diesem Fall dürfen wir die zeitunabhängige Orts-Wellenfunktion des ausgestossenen Elektrons im betrachteten Volumen V als freie ebene Welle approximieren (*Bornsche Näherung*):

$$u_f(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} = \frac{e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} .$$
(9.107)

Weiterhin nehmen wir o.B.d.A. an, dass die Strahlung parallel zur z-Achse propagiert und so polarisiert ist, dass das elektrische Feld $\mathcal{P} \propto \vec{e}_x$ parallel zur *x*-Achse ist. Das Matrix-Element (9.26) für den Übergang $1 \rightarrow f$ ist dann

$$\left\langle f\left|\hat{F}\right|1\right\rangle =-\frac{\imath e\hbar}{m_{e}c}\int d^{3}r\,u_{f}^{*}e^{\imath\omega z/c}A_{0}\frac{\partial\psi_{0}}{\partial x}$$

Nach Einsetzen der Wellenfunktion (9.107) und partieller Integration bezüglich x finden wir

$$\left\langle f \left| \hat{F} \right| 1 \right\rangle = -\frac{ie\hbar}{m_e c \sqrt{V}} \int dx dy dz \ A_0 e^{i\left(\frac{\omega z}{c} - \vec{k}_f \cdot \vec{r}\right)} \frac{\partial \psi_0}{\partial x}$$

$$= \frac{ie\hbar}{m_e c \sqrt{V}} \int dx dy dz \ A_0 \left[-ik_{fx} \right] e^{i\left(\frac{\omega z}{c} - \vec{k}_f \cdot \vec{r}\right)} \psi_0$$

$$= \frac{e\hbar A_0 k_{fx}}{m_e c V^{1/2}} \int d^3 r \ \psi_0 e^{i\left(\frac{\omega z}{c} - \vec{k}_f \cdot \vec{r}\right)} .$$

$$(9.108)$$

Nach Fermi's Goldener Regel (8.110) erhalten wir damit die Übergangsrate für den Photo-Effekt zu

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \rho\left(k_f\right) \left| \left\langle f \left| \hat{F} \right| 1 \right\rangle \right|^2 , \qquad (9.109)$$

wobei $\rho(k_f)$ die Anzahldichte der Endzustände darstellt. In einem kubischen Volumen $V = L^3$ endlicher Länge L sind die erlaubten Werte (wegen den Randbedingungen an der Kastenoberfläche) durch $k_x = 2\pi n_x/L$, $k_y = 2\pi n_y/L$ und $k_z = 2\pi n_z/L$ gegeben, wobei n_x, n_y, n_z positive und negative ganze Zahlen sind. Die Zahl der Zustände zwischen k und k + dk ist dann durch

$$\frac{V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z$$

gegeben. In Kugelkoordinaten schreiben wir dies als

$$\rho(k)dE_k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk \sin\theta d\theta d\phi \,.$$

Aus

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{(2m_e)}$$
$$\frac{dE_k}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_e},$$

folgt

so dass

$$\rho(k)dE_k = \rho(k)\frac{\hbar^2 k}{m_e}dk = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk\sin\theta d\theta d\phi ,$$

also für $k = k_f$

$$\rho(k_f) = \frac{m_e k_f L^3}{8\pi^3 \hbar^2} \sin\theta d\theta d\phi = \frac{m_e k_f V}{8\pi^3 \hbar^2} \sin\theta d\theta d\phi . \qquad (9.110)$$

Für die Rate (9.109) folgt damit

$$w = \frac{m_e k_f V}{4\pi^2 \hbar^3} \left| \left\langle f \left| \hat{F} \right| 1 \right\rangle \right|^2 \sin \theta d\theta d\phi .$$
(9.111)

Der differentielle Wirkungsquerschnitt für den Photoeffekt berechnet sich aus der Rate (9.111) und dem Photonenfluss (9.22)

$$\begin{split} N(\omega) &= \frac{I(\omega)}{\hbar\omega} = \frac{\omega |A_0|^2}{2\pi\hbar c} \\ \text{zu} \qquad &\sigma(\theta,\phi) &= \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{w}{N(\omega)d\Omega} \\ &= \frac{w}{N(\omega)\sin\theta d\theta d\phi} = \frac{2\pi\hbar cw}{\omega |A_0|^2\sin\theta d\theta d\phi} \\ &= \frac{2\pi\hbar c}{\omega |A_0|^2} \frac{m_e k_f V}{4\pi^2\hbar^3} \frac{e^2\hbar^2 |A_0|^2 k_{fx}^2}{m_e^2 c^2 V} \left| \int d^3r \,\psi_0 e^{i\left(\frac{\omega z}{c} - \vec{k}_f \cdot \vec{r}\right)} \right|^2 \\ &= \frac{e^2 k_f k_{fx}^2}{2\pi m_e c\omega} \left| \int d^3r \,\psi_0 e^{i\left(\frac{\omega z}{c} - \vec{k}_f \cdot \vec{r}\right)} \right|^2 \,. \end{split}$$

Mit dem Impuls $\hbar \vec{q}$ des Atoms,

$$\vec{q} = \frac{\omega}{c}\vec{e}_z - \vec{k}_f$$

erhalten wir

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{e^2 k_f k_{fx}^2}{2\pi m_e c \omega} \left| \int d^3 r \, \psi_0 e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \right|^2 \,. \tag{9.112}$$

Mit $\vec{q}\cdot\vec{r}=qr\mu$ folgt für das verbleibende Integral

$$h = \int d^{3}r \,\psi_{0} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

= $2\pi \int_{-1}^{1} d\mu \int_{0}^{\infty} dr \, r^{2} \psi_{0} e^{iqr\mu}$
= $2\pi \int_{0}^{\infty} dr \, r^{2} \psi_{0} \int_{-1}^{1} d\mu e^{iqr\mu}$
= $2\pi \int_{0}^{\infty} dr \, r^{2} \psi_{0} \frac{1}{iqr} \left(e^{iqr} - e^{-iqr} \right)$
= $\frac{4\pi}{q} \int_{0}^{\infty} dr \, r \psi_{0} \sin(qr) .$

Einsetzen der Wellenfunktion des Grundzustands

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} , \qquad a = \frac{a_0}{Z}$$

führt dann auf

$$h = \frac{4\pi^{1/2}}{qa^{3/2}}h_1 \; ,$$

wobei mit $\eta=1/a$

mit

$$\begin{split} h_1 &= \int_0^\infty dr \ r \sin(qr) e^{-\eta r} = -\frac{\partial}{\partial \eta} h_2(\eta) \\ h_2(\eta) &= \int_0^\infty dr \ \sin(qr) e^{-\eta r} = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dr \ e^{-\eta r} \left[e^{iqr} - e^{-iqr} \right] \\ &= \frac{1}{2i} \left[\int_0^\infty dr \ e^{-(\eta - iq)r} - \int_0^\infty dr \ e^{-(\eta + iq)r} \right] \\ &= \frac{1}{2i} \left[\frac{e^{-(\eta - iq)r} |_0^\infty}{-(\eta - iq)} - \frac{e^{-(\eta + iq)r} |_0^\infty}{-(\eta + iq)} \right] \\ &= \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{\eta - iq} - \frac{1}{\eta + iq} \right] = \frac{1}{2i(\eta^2 - i^2q^2)} \left[(\eta + iq) - (\eta - iq) \right] \\ &= \frac{2iq}{2i(\eta^2 + q^2)} = \frac{q}{\eta^2 + q^2} \,. \end{split}$$

Es folgt

$$h_{1} = -\frac{\partial}{\partial \eta}h_{2}(\eta) = -\frac{\partial}{\partial \eta}\frac{q}{\eta^{2} + q^{2}} = q(q^{2} + \eta^{2})^{-2}(2\eta)$$
$$= \frac{2\eta q}{(q^{2} + \eta^{2})^{2}} = \frac{2qa^{3}}{(1 + q^{2}a^{2})^{2}}$$
$$h = \frac{8\pi^{1/2}a^{3/2}}{(1 + q^{2}a^{2})^{2}}.$$

und

Für den Wirkungsquerschnitt (9.112) finden wir

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{e^2 k_f k_{fx}^2}{2\pi m_e c \omega} \frac{64\pi a^3}{(1+q^2 a^2)^4} = \frac{32e^2 a^3 k_f k_{fx}^2}{m_e c \omega (1+q^2 a^2)^4} \,. \tag{9.113}$$

Dabei ist

$$k_{fx} = k_f \sin \theta \cos \phi$$

die x-Komponente des Wellenzahlvektors \vec{k}_f des ausgestoßenen Elektrons. Aus der Impulserhaltung

und

folgt

 $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_f$ $\vec{k} = k\vec{e_z}$ $q^2 = k^2 + k_f^2 - 2kk_f \cos \theta$ $= k_f^2 \left[1 + \left(\frac{k}{k_f}\right)^2 - 2\frac{k}{k_f}\cos\theta \right] \,.$ (9.114)

Wegen Bedingung (9.105) gilt

$$\begin{split} \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} &= \hbar\omega - B \simeq \hbar\omega \;, \\ \omega &\simeq \; \frac{\hbar k_f^2}{2m_e} \end{split}$$

so dass

und damit

$$\frac{k}{k_f} = \frac{\omega}{ck_f} \simeq \frac{\hbar k_f}{2m_e c} = \frac{v_f}{2c} \ll 1 \; .$$

Für Gleichung (9.114) finden wir dann mit $v = v_f$

$$q^2 \simeq k_f^2 \left[1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right]$$

Es folgt dann nach Gleichung (9.106)

$$\begin{aligned} q^2 a^2 &= \frac{q^2 a_0^2}{Z^2} &\simeq \quad \frac{k_f^2 a_0^2}{Z^2} \gg 1 \\ 1 &+ q^2 a^2 &\simeq \quad q^2 a^2 = a^2 k_f^2 \left[1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right] \,. \end{aligned}$$

so dass

Mit diesen Näherungen erhalten wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt (9.113) für den Photoeffekt

$$\sigma(\theta,\phi) \simeq \frac{32e^2a^3k_f^3\sin^2\theta\cos^2\phi}{m_e c\omega(ak_f)^8 \left[1-\frac{v}{c}\cos\theta\right]^4}$$

$$= \frac{32e^2\sin^2\theta\cos^2\phi}{m_e c\omega(ak_f)^5 \left[1-\frac{v}{c}\cos\theta\right]^4}$$

$$= \frac{32e^2Z^5\sin^2\theta\cos^2\phi}{m_e c\omega(a_0k_f)^5 \left[1-\frac{v}{c}\cos\theta\right]^4}.$$
(9.115)

Mit

$$a_0 k_f = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \sqrt{\frac{2m_e \omega}{\hbar}} = \frac{2^{1/2} \hbar (\hbar \omega)^{1/2}}{m_e^{1/2} e^2} = \frac{2^{1/2}}{\alpha_f} \left(\frac{\hbar \omega}{m_e c^2}\right)^{1/2}$$

und dem Thomson-Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_T = 8\pi r_e^2 / 3 = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m_e^2 c^4} = 6.65 \cdot 10^{-25} \,\mathrm{cm}^2 \tag{9.116}$$

erhalten wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma\left(\theta,\phi\right) = \frac{3}{2^{1/2}\pi} \sigma_T Z^5 \alpha_f^4 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{\left[1 - \frac{v}{c}\cos\theta\right]^4} \,. \tag{9.117}$$

Unter Vernachlässigung des Terms

$$\frac{v}{c}\cos\theta \ll 1$$

für nichtrelativistische Elektronen ergibt sich mit

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{0}^{\pi} d\theta \sin^{3} \theta \cos^{2} \phi = \int_{0}^{2\pi} d\phi \cos^{2} \phi \int_{-1}^{1} dx \ (1 - x^{2})$$
$$= 2\pi \int_{0}^{1} dx \ (1 - x^{2}) = \frac{4\pi}{3}$$

der totale Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma_{PE}(1s) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \sigma(\theta, \phi) = 2^{3/2} \sigma_T Z^5 \alpha_f^4 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar \omega}\right)^{7/2} . \tag{9.118}$$

Bei Berücksichtigung von zwei Elektronen auf der K-Schale mit unterschiedlichem Spin sind die Wirkungsquerschnitte (9.115) und (9.118) mit einem Faktor 2 zu multiplizieren. Die starke Frequenz- und Ladungszahl-Abhängigkeit

$$\sigma_{PE}(1s) \propto Z^5 \left(\frac{m_e c^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2}$$

erklärt den experimentellen Befund.

10 Streutheorie

10.1 Klassische Streutheorie

Wir untersuchen die Streuung eines Teilchens der Energie E an einem Streuzentrum (siehe Abb. 10.1). Ohne Beeinflussung durch das Streuzentrum, würde das Teilchen im Abstand b, dem sog. Stoßparameter, am Streuzentrum vorbeifliegen. Aufgrund der Wechselwirkung mit dem Streuzentrum wird es gestreut und fliegt unter dem Streuwinkel θ davon. Die Aufgabe der Streutheorie ist es, für gegebenen Stoßparameter b den Streuwinkel θ zu berechnen.



Abbildung 10.1: Das klassische Streuproblem zur Erklärung des Stoßparameters b und des Streuwinkels θ

Beispiel: Als Beispiel betrachten wir die elastische Streuung an einer harten Kugel (z.B. Billardkugel) mit dem Radius R (Abb. 10.2)

Aus Abb. 10.2 erhalten wir sofort, dass in Abhängigkeit vom Winkel α der Stoßparameter durch

$$b = R \sin \alpha$$

gegeben ist. Weiterhin gilt für den Streuwinkel $\theta = \pi - 2\alpha$, so dass

$$\alpha = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \; .$$

Wir finden also

$$b = R \sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = R \sin\frac{\pi}{2} \cos\frac{\theta}{2} = R \cos\frac{\theta}{2}.$$

10 Streutheorie



Abbildung 10.2: Elastische Streuung an einer harten Kugel

Invertieren wir diese Gleichung, so folgt

$$\theta = \begin{cases} 2 \arccos\left(\frac{b}{R}\right) & \text{für } b \le R \\ 0 & sonst \end{cases}$$

Verallgemeinern wir von diesem einfachen Beispiel: Teilchen, die durch die infinitesimal kleine Kreisscheibenfläche $d\sigma$ einfliegen (siehe Abb. 10.3), werden in das dazugehörende infinitesimal kleine Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreut. Je größer $d\sigma$ ist, desto größer ist $d\Omega$. Der Proportionalitätsfaktor

$$D(\theta) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} \tag{10.1}$$

wird als *differentieller (Streu)-Wirkungsquerschnitt* bezeichnet. Aus Abb. 10.3 lesen wir ab:

$$\begin{aligned} d\sigma &= |b\,db\,d\phi| \\ \mathrm{und} & d\Omega &= |\sin\theta\,d\theta\,d\phi| \,. \end{aligned}$$

Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt (10.1) ergibt sich damit

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = D(\theta) = \left| \frac{b}{\sin \theta} \left(\frac{db}{d\theta} \right) \right|$$
(10.2)



Abbildung 10.3: Einfliegende Teilchen durch die Fläche $d\sigma$ werden in das Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreut

Für obiges Beispiel der elastischen Streuung ergibt sich aus $b = R \cos(\theta/2)$ mit

dass

$$\begin{aligned} \frac{db}{d\theta} &= -\frac{R}{2}\sin\frac{\theta}{2} \\ D(\theta) &= \left| \frac{R\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin\theta}\frac{R}{2}\sin\frac{\theta}{2} \right| \\ &= \frac{R^2}{2}\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin\theta} = \frac{R^2}{4} , \end{aligned}$$

unabhängig von θ , weil $\sin \theta = 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)$. Für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma \equiv \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int d\Omega D(\theta)$$
(10.3)

ergibt sich bei elastischer Streuung klassisch

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{R^2}{4} = \pi R^2$$
(10.4)

gerade der geometrische Wirkungsquerschnitt, der gleich der Querschnittsfläche der harten Kugel ist.

Diskutieren wir abschließend den Zusammenhang mit Messgrößen: im Streuexperiment haben wir einen einlaufenden Strahl von Teilchen mit gleichförmiger Intensität (oder Luminosität) \mathcal{L} =Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeiteinheit und Einheitsfläche. Die Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit durch die Fläche $d\sigma$ einlaufen (und dadurch in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreut werden) ist dann

$$dN = \mathcal{L}d\sigma = \mathcal{L}D(\theta)d\Omega ,$$

$$D(\theta) = \frac{1}{\mathcal{L}}\frac{dN}{d\Omega} .$$
(10.5)

so dass

10 Streutheorie

Zur Messung des differentiellen Wirkungsquerschnitts müssen wir mit einem Teilchendetektor die Zahl der Teilchen dN, die in das Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreut werden, zählen und diese Zahl durch $d\Omega$ und \mathcal{L} teilen.

Zur klassischen Berechnung des Rutherford'schen Streu-Wirkungsquerschnitts verweisen wir auf Kapitel 4.8 der Mechanik-Vorlesung.

10.2 Quantenmechanische Streutheorie

Im quantenmechanischen Fall betrachten wir eine einlaufende ebene Welle $\psi(z) = Ae^{ikz}$, die in positive z-Richtung läuft, die dann auf ein Streupotential trifft und auslaufende Kugelwellen erzeugt (siehe Abb. 10.4).



Abbildung 10.4: Streuung von Wellen: eine einlaufende ebene Welle erzeugt auslaufende Kugelwellen

Wir suchen also nach Lösungen der Schrödinger-Gleichung der allgemeinen Form

$$\psi(r,\theta) \simeq A\left(e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right)$$
(10.6)

für große r. Die Kugelwelle muss den Faktor (1/r) beinhalten, damit $|\psi(r, \theta)|^2$ endlich bleibt. Die Wellenzahl

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \tag{10.7}$$

ist durch die Energie E des einlaufenden Teilchens bestimmt. Wir nehmen hierbei an, dass das Streutarget symmetrisch in ϕ ist und im Ursprung unseres Koordinatensystems platziert ist.

Es ist unsere Aufgabe die Streuamplitude $f(\theta)$ zu bestimmen. Diese bestimmt die Wahrscheinlichkeit der Streuung in den Winkel θ und damit den differentiellen Wirkungsquerschnitt. Die Wahrscheinlichkeit, dass das einlaufende Teilchen mit der Geschwindigkeit v im

Zeitintervall dt durch die kleine Fläche $d\sigma$ läuft, ist

$$dP = |\psi_{\text{einfall}}|^2 \, dV = |A|^2 \, (vdt) d\sigma \,. \tag{10.8}$$

Aber dies ist gleich der Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen später durch den Raumwinkel $d\Omega$ austritt:

$$dP = |\psi_{\text{streu}}|^2 \, dV = \frac{|A|^2 \, |f|^2}{r^2} (v dt) r^2 d\Omega \,. \tag{10.9}$$

Das Gleichsetzen von Gleichungen (10.8) und (10.9) ergibt sofort

$$A|^{2} (vdt)d\sigma = |A|^{2} |f|^{2} (vdt)d\Omega ,$$

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^{2} .$$
(10.10)

oder

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist gleich dem Betragsquadrat der Streuamplitude. Wir untersuchen im Folgenden zwei Methoden zur Berechnung der Streuamplitude $f(\theta)$:

- (a) die Partialwellenmethode und
- (b) die Bornsche Näherung.

Wie wir zeigen werden, ist die Partialwellenmethode besonders gut bei kleinen Teilchenenergien, während die Bornsche Näherung gut bei hohen Teilchenenergien geeignet ist.

10.3 Partialwellenmethode

10.3.1 Zerlegung nach Partialwellen

In Kap. 7 haben wir gezeigt, dass für sphärisch-symmetrische Potentiale V(r) die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung separable Lösungen der Form

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{10.11}$$

erlaubt, wobei $Y_{lm}(\theta, \phi)$ Kugelflächenfunktionen sind, und der radiale Anteil u(r) = rR(r) die Gleichung (7.88) erfüllt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = Eu.$$
(10.12)

Für sehr große Abstände r verschwindet das Streupotential V(r) und der Zentrifugalterm ist vernachlässigbar. Mit Gleichung (10.7) reduziert sich Gleichung (10.12) dann auf

$$\frac{d^2u}{dr^2} \simeq -\frac{2mE}{\hbar^2}u = -k^2u , \qquad (10.13)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$u(r) = Ce^{\imath kr} + De^{-\imath kr} . (10.14)$$

10 Streutheorie

Der erste Term dieser Lösung beschreibt eine auslaufende Kugelwelle und der zweite Term eine einlaufende Kugelwelle. Für die Streuwelle bei großem Abstand r muss daher D = 0 gesetzt werden und wir erhalten

$$R(r) \simeq \frac{e^{ikr}}{r} , \qquad (10.15)$$

in Übereinstimmung mit dem Streuansatz (10.6). Den Gültigkeitsbereich dieser Lösung bezeichnen wir als Fernbereich $kr \gg 1$.



Abbildung 10.5: Streu
ung an einem lokalisierten Potential. Das Steupotential wirkt nur im kleinen schwarzen Streuber
eich; im Zwischenbereich ist V=0aber der Zentrifugalter
m wirkt. Im Fernbereich gilt $kr\gg 1$

Das Streupotential V(r) soll stark lokalisiert sein, d.h. es wirkt nur bei sehr kleinen Abständen r (siehe Abb. 10.5). Im Zwischenbereich ist V = 0, aber der Zentrifugalterm in Gleichung (10.12) wirkt. Diese Betrachtung gilt nur, wenn das Potential V(r) stärker als $1/r^2$ abfällt, also nicht für Coulomb-Streuung. Ist $V(r) \propto r^{-\beta}$, so muss $\beta > 2$ sein. Im Zwischenbereich wird aus Gleichung (10.12)

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0.$$
(10.16)

Substituieren wir x = kr, so folgt

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]u(x) = 0.$$
 (10.17)

Mit dem Lösungsansatz

erhalten wir

und

$$\begin{split} u(x) &= x^{1/2}F(x) \\ \frac{du}{dx} &= \frac{1}{2}x^{-1/2}F + x^{1/2}\frac{dF}{dx} = x^{1/2}\left[\frac{dF}{dx} + \frac{1}{2x}F\right] \\ \frac{d^2u}{dx^2} &= -\frac{1}{4x^{3/2}}F + \frac{1}{2}x^{-1/2}\frac{dF}{dx} + \frac{1}{2}x^{-1/2}\frac{dF}{dx} + x^{1/2}\frac{d^2F}{dx^2} \\ &= x^{1/2}\left[\frac{d^2F}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dF}{dx} - \frac{1}{4x^2}F\right] \,. \end{split}$$

Eingesetzt in Gleichung (10.17) ergibt sich

$$\frac{d^2F}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dF}{dx} + \left[-\frac{1}{4x^2} + 1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]F = 0,$$

$$\frac{d^2F}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dF}{dx} + \left[1 - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{x^2}\right]F = 0.$$
 (10.18)

oder

Vergleichen wir dies mit der Differentialgleichung für Bessel-Funktionen

$$\frac{d^2 Z_{\nu}}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dZ_{\nu}}{dx} + \left[1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right] Z_{\nu} = 0 , \qquad (10.19)$$

so ist in unserem Fall $\nu = l + (1/2)$ und wir erhalten als Lösungen

$$F(x) = Z_{l+(\frac{1}{2})}(x)$$
.

Zwei linear unabhängige Lösungen der Besselschen Differentialgleichung (10.18) sind die Besselfunktionen $J_{\nu}(x)$ und $J_{-\nu}(x)$, oder Linearkombinationen daraus wie die Neumann-Funktion

$$N_{\nu}(x) = \frac{\cos(\nu\pi)J_{\nu}(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}$$
(10.20)

und die Hankel-Funktionen erster und zweiter Art

$$H_{\nu}^{(1)}(x) = J_{\nu}(x) + i N_{\nu}(x) \tag{10.21}$$

$$H_{\nu}^{(2)}(x) = J_{\nu}(x) - iN_{\nu}(x) . \qquad (10.22)$$

und

Die jeweiligen Randbedingungen des physikalischen Problems und das asymptotische Verhalten dieser Funktionen entscheiden darüber, welche Linearkombinationen man wählt.

10.3.2 Exkurs über Besselfunktionen

Für ganzzahlige Indizes $\nu = n$ gilt die Reihendarstellung

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(n+s)!} (\frac{x}{2})^{n+2s} .$$
 (10.23)

10 Streutheorie

Die Reihendarstellung gilt auch für negative Indizes:

$$J_{-n}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(s-n)!} (\frac{x}{2})^{2s-n} .$$
 (10.24)

Weil $(s-n)! \rightarrow \infty$ für s = 0, 1, ..., n-1, startet die Reihe mit nichtverschwindenden Termen bei s = n, so dass wir s durch s + n ersetzen können mit dem Ergebnis

$$J_{-n}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^{s+n}}{s!(s+n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2s} .$$
 (10.25)

Es folgt, dass J_n und J_{-n} nicht unabhängig voneinander sind, sondern dass

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$$
.

Für nichtganzzahlige Indizes ν definieren die Gleichungen (10.23) und (10.24) gemäß

$$J_{\nu}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(\nu+s)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu+2s}$$
(10.26)

$$J_{-\nu}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(s-\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s-\nu}$$
(10.27)

die voneinander linear unabhängigen Besselfunktionen. Für halbzahlige Indizes ist

$$J_{n+\frac{1}{2}}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s! \left(s+n+\frac{1}{2}\right)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+n+\frac{1}{2}}$$

Mit der Duplikationsformel der Gamma-Funktion

$$z!\left(z+\frac{1}{2}\right)! = 2^{-2z-1}\pi^{1/2}(2z+1)!$$
(10.28)

angewandt auf z = s + n folgt

$$\begin{split} (s+n)! \left(s+n+\frac{1}{2}\right)! &= \frac{\pi^{1/2}}{2^{2s+2n+1}} (2s+2n+1)! \;, \\ \text{oder} & \left(s+n+\frac{1}{2}\right)! \;\; = \;\; \frac{\pi^{1/2} (2s+2n+1)!}{2^{2s+2n+1} (s+n)!} \;, \\ \text{so dass} & J_{n+\frac{1}{2}}(x) \;\; = \;\; \pi^{-1/2} \sum^{\infty} \frac{(-1)^s 2^{2s+2n+1} (s+n)!}{s! (2s+2n+1)!} \frac{x^{2s+n+\frac{1}{2}}}{2^{2s+n+\frac{1}{2}}} \end{split}$$

$$\begin{aligned} x) &= \pi^{-1/2} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s 2^{2s+2n+1} (s+n)!}{s! (2s+2n+1)!} \frac{x^{2s+n+\frac{1}{2}}}{2^{2s+n+\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{2^{n+\frac{1}{2}}}{\pi^{1/2}} x^{n+\frac{1}{2}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+n)!}{s! (2s+2n+1)!} x^{2s} . \end{aligned}$$
(10.29)
Wir definieren die sphärischen Besselfunktionen 1. Art durch

$$j_n(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+\frac{1}{2}}(x)$$
 (10.30)

und erhalten nach Gleichung (10.29) deren Reihendarstellung zu

$$j_n(x) = (2x)^n \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+n)!}{s! (2s+2n+1)!} x^{2s} .$$
 (10.31)

Mit Gleichung (10.20)

$$N_{\nu}(x) = \frac{\cos(\nu\pi)J_{\nu}(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}$$
$$\nu = n + \frac{1}{2}$$

folgt für

aus
$$\cos\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\right] = 0$$

und
$$\sin \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \right] = (-1)^n$$
$$N_{n + \frac{1}{2}}(x) = (-1)^{n+1} J_{-n - \frac{1}{2}}(x) .$$

Nach Gleichung (10.27) ist

$$J_{-n-\frac{1}{2}}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s! \left(s - n - \frac{1}{2}\right)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s - n - \frac{1}{2}}$$

und wir erhalten für die sphärischen Besselfunktionen 2. Art

$$n_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{n+\frac{1}{2}}(x) = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \frac{2^{n+\frac{1}{2}}}{x^{n+\frac{1}{2}}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s! \left(s-n-\frac{1}{2}\right)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s}$$
$$= (-1)^{n+1} \frac{2^n \pi^{1/2}}{x^{n+1}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s! \left(s-n-\frac{1}{2}\right)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s} .$$
(10.32)

Wenden wir die Duplikationsformel (10.28) an auf z=s-n-1/2, folgt

$$(s-n)!\left(s-n-\frac{1}{2}\right)!=\frac{\pi^{1/2}}{2^{2s-2n}}(2s-2n)!$$

Für Gleichung (10.32) finden wir damit

$$n_n(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^n x^{n+1}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-n)!}{s! (2s-2n)!} x^{2s} .$$
(10.33)

Daraus berechnen sich die dazugehörenden sphärischen Hankel-Funktionen

$$h_n^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}(x) = j_n(x) + in_n(x)$$
(10.34)

und

$$h_n^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)}(x) = j_n(x) - in_n(x) .$$
 (10.35)

Als erstes berechnen wir $j_0(x)$ und $n_0(x)$. Für n = 0 ergeben die Gleichungen (10.31) und (10.33)

$$j_0(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s s!}{s!(2s+1)!} x^{2s} = \frac{1}{x} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(2s+1)!} x^{2s+1} = \frac{\sin x}{x}$$
(10.36)

und

$$n_0(x) = \frac{-1}{x} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s s!}{s! (2s)!} x^{2s} = \frac{-1}{x} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{(2s)!} x^{2s} = -\frac{\cos x}{x} .$$
(10.37)

Für die dazugehörenden sphärischen Hankel-Funktionen erhalten wir

$$h_0^{(1)}(x) = j_0 + in_0 = \frac{\sin x - i\cos x}{x} = \frac{-i}{x}(\cos x + i\sin x) = -\frac{ie^{ix}}{x}$$
(10.38)

und
$$h_0^{(2)}(x) = j_0 - in_0 = \frac{\sin x + i\cos x}{x} = \frac{i}{x}(\cos x - i\sin x) = \frac{ie^{-ix}}{x}$$
. (10.39)

Offensichtlich haben diese Funktionen das richtige asymptotische Verhalten, um mit x = kr aus- bzw. einlaufende Kugelwellen darzustellen.

Die sphärischen Besselfunktionen für höhere Indizes $n \ge 1$ berechnet man aus Rekursionsbeziehungen. Es ergeben sich (Beweis durch vollständige Induktion, Übungsaufgabe) die sog. Rayleigh-Formeln

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{\sin x}{x}\right) , \qquad (10.40)$$

$$n_n(x) = -(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{\cos x}{x}\right) , \qquad (10.41)$$

$$h_n^{(1)}(x) = -i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{e^{ix}}{x}\right)$$
(10.42)

und

$$h_n^{(2)}(x) = i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{e^{-ix}}{x}\right) .$$
 (10.43)

Die sphärischen Hankel-Funktionen verhalten sich für große Argumente $x\gg 1$ asymptotisch wie

$$h_n^{(1)}(x \gg 1) \simeq \frac{1}{x} \exp\left(i\left[x - \frac{\pi}{2}(n+1)\right]\right)$$
 (10.44)

$$h_n^{(2)}(x \gg 1) \simeq \frac{1}{x} \exp\left(-i\left[x - \frac{\pi}{2}(n+1)\right]\right)$$
 (10.45)

und

10.3.3 Radiallösung

Aus den Ergebnissen von Kap. 10.3.2 folgt, dass Gleichung (10.18) durch

$$F(x) = AH_{l+1/2}^{(1)}(x) + BH_{l+1/2}^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{2x}{\pi}} \left(Ah_l^{(1)}(x) + Bh_l^{(2)}(x)\right)$$
(10.46)

gelöst wird, mit beliebigen Konstanten A und B. Damit folgt für

$$u(x) = x^{1/2} F(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} x \left(A h_l^{(1)}(x) + B h_l^{(2)}(x) \right)$$
(10.47)

und für den radialen Anteil mit x = kr

$$R(r) = \frac{u(kr)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \left(A h_l^{(1)}(kr) + B h_l^{(2)}(kr) \right) .$$
(10.48)

Aufgrund des asymptotischen Verhaltens (10.45) für $kr \gg 1$ setzen wir B = 0 und erhalten mit der neuen Konstanten

$$C = \sqrt{\frac{2}{\pi}} kA$$

als Radiallösung

$$R(r) = \frac{u(kr)}{r} = Ch_l^{(1)}(kr) , \qquad (10.49)$$

mit dem richtigen asymptotischen Verhalten (siehe Gleichung (10.44))

$$R\left(r\gg\frac{1}{k}\right)\propto\frac{e^{\imath kr}}{r}$$

als auslaufende Kugelwelle für $kr \gg 1$.

Die exakte Lösung der Wellenfunktion im Außenbereich, d.h. Zwischenbereich und Fernbereich, wo das Streupotential V(r) = 0 verschwindet, ist dann gemäß Gleichung (10.11) mit neuer Konstante A und Entwicklungskoeffizienten $C_{l,m}$

$$\psi(r,\theta,\phi) = A \left[e^{ikz} + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{l,m} h_l^{(1)}(kr) Y_{lm}(\theta,\phi) \right] .$$
(10.50)

Für $kr \gg 1$ folgt aus Gleichung (10.44)

$$h_l^{(1)}(kr) \simeq \frac{1}{kr} e^{ikr} e^{-\frac{\pi}{2}(l+1)i} = \frac{(-i)^{l+1}}{kr} e^{ikr} ,$$

$$\psi(r \gg \frac{1}{k}, \theta, \phi) \simeq A \left[e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] , \qquad (10.51)$$

so dass

mit der Streuamplitude

$$f(\theta,\phi) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} (-i)^{l+1} C_{l,m} Y_{lm}(\theta,\phi) .$$
 (10.52)

Wir notieren, dass die Lösung (10.51) von der Form (10.6) ist. Weiterhin können wir nach Gleichung (10.52) die Streuamplitude $f(\theta, \phi)$ aus den Partialwellenamplituden $C_{l,m}$ berechnen!

Der differentielle Streu-Wirkungsquerschnitt (10.10) ergibt sich damit zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (i)^{l-l'} C^*_{l,m} C_{l',m'} Y^*_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi) .$$
(10.53)

Für den totalen Wirkungsquerschnitt (10.3) erhalten wir damit

$$\sigma = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (i)^{l-l'} C_{l,m}^* C_{l',m'} \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi)$$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (i)^{l-l'} C_{l,m}^* C_{l',m'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} |C_{l,m}|^2.$$
(10.54)

Für von ϕ unabhängige Kugelflächenfunktionen bleiben wegen $Y_{lm}\propto e^{\imath m\phi}$ nur Terme mit m=0 übrig. Weil

$$Y_{l0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

erhalten wir bei Azimuthsymmetrie im Außenbereich anstatt Lösung (10.50)

$$\psi(r,\theta) \simeq A \left[e^{\imath k z} + \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} C_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos\theta) \right] , \qquad (10.55)$$

mit der Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^{l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} C_l P_l(\cos\theta)$$
(10.56)

und dem totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} |C_l|^2 .$$
 (10.57)

Den Beitrag zur Streuamplitude (10.56) für l = 0 bezeichnet man als *s*-*Streuung*, den für l = 1 als *p*-*Streuung* usw. in Anlehnung an die entsprechende Serienbezeichnung (siehe Kap. 7.8.2) bei wasserstoffähnlichen Atomen.

Es verbleibt nur noch, die Partialwellenamplituden C_l oder $C_{l,m}$ zu bestimmen durch Anpassen der externen Lösung (10.55) bzw. (10.50) an die Lösung im Streubereich mit den in Kap. 3.1 diskutierten Randbedingungen (Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung). Bisher haben wir Kugelkoordinaten für die Streuwellen, aber kartesische Koordinaten für die einfallende Wellenfunktion e^{ikz} verwendet. Wir wollen nun auch diese in Kugelkoordinaten ausdrücken.

Die Lösung e^{ikz} erfüllt die Schrödinger-Gleichung für V = 0. Andererseits ist aber nach Gleichung (10.11) und (10.48) die allgemeine Lösung für V = 0 darstellbar als

$$\sum_{l,m} \left[A_{lm} j_l(kr) + B_{lm} n_l(kr) \right] Y_{lm}(\theta, \phi) .$$
 (10.58)

Insbesondere können wir e^{ikz} so darstellen. e^{ikz} ist endlich bei r = z = 0, während $n_l(kr)$ nach Gleichung (10.33) für $r \to 0$ divergiert. Wir setzen in der Entwicklung (10.58) daher den Koeffizienten $B_{lm} = 0$. Weil $z = r \cos \theta$ keine ϕ -Abhängigkeit aufweist, benötigen wir nur Terme mit m = 0, so dass

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

Man erhält (Übungsaufgabe) $A_l = i^l(2l+1)$ und damit

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) . \qquad (10.59)$$

Damit wird aus der Wellenfunktion im Außenbereich (10.55)

$$\psi\left(r \gg \frac{1}{k}, \theta\right) \simeq A \sum_{l=0}^{\infty} \left[i^l (2l+1) j_l(kr) + \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} C_l h_l^{(1)}(kr) \right] P_l(\cos\theta) .$$
(10.60)

10.3.4 Beispiel: Streuung an harter Kugel

Als erstes Beispiel betrachten wir das Streupotential

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{für} \quad r \le a \\ 0 & \text{für} \quad r > a \end{cases}$$
(10.61)

Gemäß Kap. 3.2 ist die Randbedingung an die Lösung (10.60)

$$\psi(a,\theta) = 0 \tag{10.62}$$

und wir erhalten für alle Werte von θ die Bedingung

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[i^l (2l+1) j_l(ka) + \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} C_l h_l^{(1)}(ka) \right] P_l(\cos \theta) = 0 ,$$

also

$$C_l = -i^l \sqrt{4\pi (2l+1)} \frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} .$$
(10.63)

Für den totalen Wirkungsquerschnitt (10.57) ergibt sich

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left| \frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} \right|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)} , \qquad (10.64)$$

wobei wir $h_l^{(1)} = j_l + \imath n_l$ ausgenutzt haben.

Im Grenzfall von Wellenlängen $\lambda = 2\pi/k$ groß gegen den Kugelradius a, d.h. $ka \ll 1$, gilt mit $x = ka \ll 1$

$$\frac{j_l(x)}{h_l^{(1)}(x)} = \frac{j_l(x)}{j_l(z) + in_l(x)} \simeq -i\frac{j_l(x)}{n_l(x)}$$

weil nach Gleichungen (10.31) und (10.33) für kleine $x j_l(x) \ll n_l(x)$. Es ist

$$j_l(x \ll 1) \simeq 2^l x^l \frac{l!}{(2l+1)!}$$

$$n_l(x \ll 1) \simeq \frac{(-1)^{l+1}}{2^l} \frac{(-l)!}{(-2l)!} x^{-(l+1)} = -\frac{(2l)!}{2^l l!} x^{-l-1}.$$

und

Für das Verhältnis folgt

$$\frac{j_l(x \ll 1)}{n_l(x \ll 1)} \simeq 2^l x^l \frac{l!}{(2l+1)!} \left(-\frac{2^l l! x^{l+1}}{(2l)!} \right)$$
$$= -\frac{2^{2l} (l!)^2 x^{2l+1}}{(2l)! (2l+1)!}$$
$$= -\frac{x^{2l+1}}{2l+1} \left[\frac{2^l l!}{(2l)!} \right]^2.$$

In diesem Grenzfall finden wir für den Wirkungsquerschnitt (10.64)

$$\sigma(ka \ll 1) \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \left[\frac{2^l l!}{(2l)!} \right]^4 (ka)^{4l+2}.$$

Offensichtlich ist nur der l = 0 Term relevant (s-Streuung) und der quantenmechanische totale Wirkungsquerschnitt

$$\sigma(ka \ll 1) \simeq 4\pi a^2 = 4 \cdot (\pi a^2)$$
 (10.65)

,

ist viermal größer als der klassische geometrische Wirkungsquerschnitt (10.4). Den Grenzfall $ka \gg 1$ behandeln wir in Kap. 10.3.6 nach Einführung der Streuphase.

10.3.5 Streuphasendarstellung, Optisches Theorem

Die vollständige Lösung (10.60) im Außenbereich lässt sich schreiben als

$$\psi\left(r \gg \frac{1}{k}, \theta\right) \simeq A \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[j_l(kr) + \gamma_l h_l^{(1)}(kr) \right] P_l(\cos\theta) , \qquad (10.66)$$
$$C_l = i^l \sqrt{4\pi (2l+1)} \gamma_l$$

wobei

gesetzt wurde, also

$$\gamma_l = i^{-l} \frac{C_l}{\sqrt{4\pi(2l+1)}} \,. \tag{10.67}$$

Für die Streuamplitude (10.56) folgt dann

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^{l+1} i^l \sqrt{4\pi (2l+1)} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \gamma_l P_l(\cos \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(-i\gamma_l) P_l(\cos \theta) .$$
(10.68)

Wir definieren die Streuphase δ_l durch die Forderung

so dass

$$\begin{aligned}
-i\gamma_l &= e^{i\delta_l} \sin \delta_l , \qquad (10.69) \\
\gamma_l &= i e^{i\delta_l} \sin \delta_l \\
&= \frac{1}{2} \left[e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l} \right] e^{i\delta_l} \\
&= \frac{1}{2} \left[e^{2i\delta_l} - 1 \right] . \qquad (10.70)
\end{aligned}$$

Als Definitionsgleichung der Streuphase erhalten wir also

$$\delta_l \equiv \frac{1}{2i} \ln\left[1 + 2\gamma_l\right] \,. \tag{10.71}$$

Mit Gleichung (10.69) ergibt sich für die Streuamplitude (10.68)

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) . \qquad (10.72)$$

Für den totalen Wirkungsquerschnitt (10.57) finden wir mit den Gleichungen (10.67) und (10.69)

$$\sigma = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} |C_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |\gamma_l|^2$$
$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l . \qquad (10.73)$$

Benutzt man für die Vorwärtsrichtung $\theta = 0$, so dass $P_l(\cos \theta) = P_l(1) = 1$, so folgt aus Gleichung (10.72) für die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung

$$f(\theta = 0) = f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$
$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\cos \delta_l + i \sin \delta_l\right] \sin \delta_l ,$$

also insbesondere für deren Imaginärteil

$$\Im f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Der Vergleich mit Gleichung (10.73) ergibt das optische Theorem

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im f(0) . \tag{10.74}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist proportional zum Imaginärteil der Streuamplitude in Vorwärtsrichtung.

10.3.6 Zurück zur Streuung an harter Kugel

Wir beginnen mit der Bemerkung, dass klassisch keine Streuung stattfindet, wenn der Stoßparameter b größer als die effektive Reichweite R_0 des Potentials V(r) ist. Da das Potential ein Zentralpotential ist, ist der klassische Bahndrehimpuls eine Erhaltungsgröße:

const. =
$$\left| \vec{L} \right| = \left| \vec{r} \times \vec{p} \right| = b p_{\infty} = b \sqrt{2mE}$$
,

wobei p_{∞} den Teilchenimpuls in großen Entfernungen zum Streuzentrum bezeichnet. Die Bedingung für klassische Streuung $b \le R_0$ impliziert dann

$$\left| \vec{L} \right| \le R_0 \sqrt{2mE} \ . \tag{10.75}$$

Übertragen wir diesen Ausdruck mit dem Korrespondenzprinzip auf die Quantenmechanik, $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, so erhalten wir mit Gleichung (10.7)

$$l \le \sqrt{l(l+1)} \le \frac{R_0}{\hbar} \sqrt{2mE} = kR_0$$
 . (10.76)

Wir untersuchen jetzt den Grenzfall $ka \gg 1$ des totalen Wirkungsquerschnitts (10.64). Dazu benutzen wir die aus Gleichungen (10.44)–(10.45) folgende asymptotische Entwicklung für große Argumente $ka = x \gg 1$

$$j_l(x \gg 1) \simeq \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right)$$
 (10.77)

und Gleichung (10.44) selbst

$$h_l^{(1)}(x \gg 1) \simeq \frac{(-i)}{x} e^{i\left(x - \frac{l\pi}{2}\right)}$$
 (10.78)

Für das Verhältnis folgt

$$\frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} \simeq \frac{\sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)}{-ie^{i\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)}} = i\sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)e^{-i\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)}.$$

10.3 Partialwellenmethode

Damit erhalten wir nach Gleichung (10.63)

$$C_l = -i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \frac{j_l(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} \simeq -i^{l+1} \sqrt{4\pi(2l+1)} \sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) e^{-i\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)}$$

und mit Beziehung (10.67)

$$\gamma_l(ka \gg 1) = i^{-l} \frac{C_l}{\sqrt{4\pi(2l+1)}} \simeq -ie^{-i(ka - \frac{l\pi}{2})} \sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) \,.$$

Wir multiplizieren mit (-i) und verwenden Gleichung (10.70)

$$-i\gamma_l = -e^{-i\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)} \sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) = \sin\left(\frac{l\pi}{2} - ka\right) e^{i\left(\frac{l\pi}{2} - ka\right)} = e^{i\delta_l} \sin\delta_l \;.$$

Es folgt

$$\delta_l = \frac{l\pi}{2} - ka . \tag{10.79}$$

Mit der Begrenzung (10.76) folgt für den totalen Wirkungsquerschnitt (10.73) in diesem Grenzfall

$$\sigma(ka \gg 1) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \sin^2 \delta_l , \qquad (10.80)$$

wobei l_0 die maximale positive ganze Zahl ist, für die ($R_0 = a$)

$$\sqrt{l_0(l_0+1)} = kR_0 = ka \gg 1 \tag{10.81}$$

ist, d.h. $l_0 \gg 1$. Setzen wir Gleichung (10.79) in Gleichung (10.80) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} \sigma(ka \gg 1) &\simeq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \sin^2\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} \left(l \sin^2\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) + (l+1) \sin^2\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)\right) \,. \end{aligned}$$

Wir verwenden

$$\sin x = \cos \left(x - \frac{\pi}{2}\right) ,$$

so dass
$$\sin^2 \left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) = \cos^2 \left(ka - \frac{(l+1)\pi}{2}\right)$$

und
$$\sigma(ka \gg 1) = \frac{4\pi}{k^2} [I_1 + I_2] , \qquad (10.82)$$

mit den Summen

$$I_{1} = \sum_{l=0}^{l_{0}} (l+1) \cos^{2} \left(ka - \frac{(l+1)\pi}{2} \right)$$

$$= (l_{0}+1) \cos^{2} \left(ka - \frac{(l_{0}+1)\pi}{2} \right)$$

$$+ \sum_{l=0}^{l_{0}-1} (l+1) \cos^{2} \left(ka - \frac{(l+1)\pi}{2} \right)$$

$$I_{2} = \sum_{l=0}^{l_{0}} l \sin^{2} \left(ka - \frac{l\pi}{2} \right) = \sum_{l=1}^{l_{0}} l \sin^{2} \left(ka - \frac{l\pi}{2} \right) , \qquad (10.84)$$

(10.84)

und

da in der letzen Summe der Term mit l=0 verschwindet. Im zweiten Term von Summe (10.83) setzen wir L = l + 1 und erhalten

$$I_{1} + I_{2} = (l_{0} + 1)\cos^{2}\left(ka - \frac{(l_{0} + 1)\pi}{2}\right) + \sum_{L=1}^{l_{0}} L\cos^{2}\left(ka - \frac{L\pi}{2}\right) + \sum_{l=1}^{l_{0}} l\sin^{2}\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right).$$

Die beiden letzten Terme in dieser Gleichung lassen sich mit L = l zusammenfassen mit dem Ergebnis

$$I_{1} + I_{2} = (l_{0} + 1)\cos^{2}\left(ka - \frac{(l_{0} + 1)\pi}{2}\right) + \sum_{l=1}^{l_{0}}l$$
$$\times \left[\sin^{2}\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) + \cos^{2}\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right)\right]$$
$$= (l_{0} + 1)\cos^{2}\left(ka - \frac{(l_{0} + 1)\pi}{2}\right) + \sum_{l=1}^{l_{0}}l.$$

Im letzten Term verwenden wir die berühmte Gauß-Summenformel

$$\sum_{l=1}^{l_0} l = \frac{1}{2} l_0 \left(l_0 + 1 \right) \;,$$

so dass der Wirkungsquerschnitt (10.82) zu

$$\sigma(ka \gg 1) = \frac{4\pi}{k^2} \left[\frac{1}{2} l_0 \left(l_0 + 1 \right) + \left(l_0 + 1 \right) \cos^2 \left(ka - \frac{\left(l_0 + 1 \right) \pi}{2} \right) \right] \,.$$

wird. Der zweite Term ist von der Ordnung $\mathcal{O}(l_0)$ und damit vernachlässigbar klein gegen den ersten, da $l_0 \gg 1$. Es folgt

$$\sigma(ka \gg 1) \simeq \frac{2\pi}{k^2} l_0 \left(l_0 + 1 \right) = \frac{2\pi}{k^2} \left[\sqrt{l_0 \left(l_0 + 1 \right)} \right]^2 \simeq \frac{2\pi}{k^2} (ka)^2 = 2\pi a^2 .$$
 (10.85)

Im Grenzfall $ka \gg 1$ ist der quantenmechanische Wirkungsquerschnitt zweimal größer als der klassische geometrische Wirkungsquerschnitt (10.4).

10.3.7 Integraldarstellung für Streuphasen

Die Berechnung der Streuphasen ist allgemein äußerst schwierig. Wir leiten deshalb eine alternative Integraldarstellung der Streuphasen her.

Die allgemeine Lösung des Streuproblems führte uns auf die radiale Funktion

$$u_l(r) = rR_l(r) \; ,$$

mit der Differentialgleichung (10.12)

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l(r) = 0.$$
(10.86)

 u_l erfüllt die Randbedingung $u_l(0) = 0$ und hat nach Gleichungen (10.60) und (10.66) für $r \to \infty$ das asymptotische Verhalten

$$u_{l}\left(r \gg \frac{1}{k}\right) \simeq i^{l}(2l+1)rI_{1}(r) ,$$

$$I_{1}(r) = j_{l}(kr) + \gamma_{l}h_{l}^{(1)}(kr)$$

$$= j_{l}(kr) + ie^{i\delta_{l}}\sin\delta_{l}h_{l}^{(1)}(kr) . \qquad (10.87)$$

Mit den Entwicklungen (10.77) und (10.78)

$$j_l(kr \gg 1) \simeq \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$
$$h_l^{(1)}(kr \gg 1) \simeq \frac{(-i)}{kr} e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}$$

und

erhalten wir

$$I_{1}(r) = \frac{1}{kr} \left(\sin(kr - \frac{l\pi}{2}) - \frac{i}{2} (e^{2i\delta_{l}} - 1)e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right)$$

$$= \frac{1}{kr} \left(\frac{-i}{2} \left(e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) - \frac{i}{2} \left(e^{2i\delta_{l}} - 1 \right) e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right)$$

$$= -\frac{i}{2kr} \left[e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \left(1 + e^{2i\delta_{l}} - 1 \right) - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right]$$

$$= -\frac{i e^{i\delta_{l}}}{2kr} \left[e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l})} \right]$$

$$= \frac{e^{i\delta_{l}}}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l}\right) .$$

Damit folgt für die Entwicklung (10.87)

$$u_l\left(r \gg \frac{1}{k}\right) \simeq \frac{i^l}{k} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \,. \tag{10.88}$$

Im Grenzfall verschwindenden Potentials V = 0 lautet die zu (10.86) analoge Differentialgleichung

$$\frac{d^2 u_l^{(0)}}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l^{(0)} = 0.$$
(10.89)

Die Lösung mit der Randbedingung (!) $u_l^{(0)}(r=0) = 0$ ist nach Gleichung (10.49)

$$u_l^{(0)}(r) = \imath^l (2l+1)rj_l(kr) . (10.90)$$

Für große Argumente verhält sich die Lösung nach Gleichung (10.77) wie

$$u_l^{(0)}\left(r \gg \frac{1}{k}\right) \simeq \frac{i^l}{k}(2l+1)\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \,. \tag{10.91}$$

Multiplizieren wir Gleichung (10.86) mit $u_l^{(0)}(r)$ und Gleichung (10.89) mit $u_l(r)$ und bilden die Differenz der Ergebnisse, so finden wir

$$\begin{split} u_l^{(0)} \frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l^{(0)} u_l \\ &- u_l \frac{d^2 u_l^{(0)}}{dr^2} - \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l^{(0)} u_l = \\ &u_l^{(0)} \frac{d^2 u_l}{dr^2} - u_l \frac{d^2 u_l^{(0)}}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) u_l^{(0)} u_l = 0 \;. \end{split}$$

Wir integrieren diese Beziehung über alle r:

$$\int_{0}^{\infty} dr \left[u_{l}^{(0)} \frac{d^{2} u_{l}}{dr^{2}} - u_{l} \frac{d^{2} u_{l}^{(0)}}{dr^{2}} \right] = \frac{2m}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\infty} dr \, V(r) u_{l}^{(0)} u_{l} \,. \tag{10.92}$$

Wir integrieren partiell auf der linken Seite der Gleichung:

$$\begin{split} LHS &= \int_0^\infty dr \, \left[u_l^{(0)} \frac{d^2 u_l}{dr^2} - u_l \frac{d^2 u_l^{(0)}}{dr^2} \right] \\ &= \left[u_l^{(0)} \frac{d u_l}{dr} - u_l \frac{d u_l^{(0)}}{dr} \right]_0^\infty - \int_0^\infty dr \, \left[\frac{d u_l^{(0)}}{dr} \frac{d u_l}{dr} - \frac{d u_l}{dr} \frac{d u_l^{(0)}}{dr} \right] \\ &= \lim_{r \to \infty} \left[u_l^{(0)} \frac{d u_l}{dr} - u_l \frac{d u_l^{(0)}}{dr} \right] \,, \end{split}$$

wobei wir die Randbedingungen

$$u_l(r=0) = u_l^{(0)}(r=0) = 0$$

benutzt haben. Setzen wir die asymptotischen Entwicklungen (10.88) und (10.91) ein, so folgt

$$\begin{split} LHS &= \left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 e^{i\delta_l} \\ &\lim_{r \to \infty} \left[k\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - k\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] \\ &= ke^{i\delta_l} \left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 \\ &\lim_{r \to \infty} \left[\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\left(\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\cos\delta_l - \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\sin\delta_l\right) - \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\left(\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\cos\delta_l + \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\sin\delta_l\right)\right] \\ &= ke^{i\delta_l} \left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 \lim_{r \to \infty} \left[-\sin^2\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\sin\delta_l - \cos^2\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\sin\delta_l\right] \\ &= -ke^{i\delta_l}\sin\delta_l \left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 \,. \end{split}$$

Eingesetzt in Gleichung (10.92) erhalten wir

$$-ke^{i\delta_l}\sin\delta_l\left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr \ V(r)u_l^{(0)}(r)u_l(r) \ ,$$

und nach Einsetzen der Lösung (10.90)

$$-ke^{i\delta_l}\sin\delta_l\left(\frac{(2l+1)i^l}{k}\right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}i^l(2l+1)\int_0^\infty dr \ V(r) \left[rj_l(kr)\right]u_l(r) ,$$
$$i^l(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr \ V(r) \left[krj_l(kr)\right]u_l(r) .$$
(10.93)

oder

Diese Beziehung ist exakt, aber noch keine vollständige Lösung, da wir die Radiallösung $u_l(r)$ im Integral nicht kennen.

Die Bornsche Näherung für die Streuphasen besteht nun darin, die Radiallösung $u_l(r)$ im Integral in Gleichung (10.93) durch die Funktion $u_l^{(0)}(r)$ nach Gleichung (10.91) zu ersetzen. Diese Näherung ist gut erfüllt, wenn das Streupotential "genügend klein" ist. Dann ist auch die Streuphase $\delta_l \ll 1$ sehr klein und in niedrigster Ordnung gilt

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l = \cos\delta_l\sin\delta_l + i\sin^2\delta_l \simeq \left(1 - \frac{\delta_l^2}{2}\right)\delta_l + i\delta_l^2 \simeq \delta_l ,$$

so dass $i^l(2l+1)\delta_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2}i^l(2l+1)\int_0^\infty dr \,V(r)kr^2j_l^2(kr) ,$
also $\delta_l \simeq -\frac{2m}{\hbar^2k}\int_0^\infty dr \,V(r)\left[krj_l(kr)\right]^2 .$ (10.94)

also

Für große Teilchenenergien, also große Werte von $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, ist die Näherung (10.94) gut erfüllt, weil der Term $[krj_l(kr)]^2$ für alle Argumente beschränkt ist. Die rechte Seite von Näherung (10.94) ist dann in jedem Fall klein für schwache Potentiale mit

$$\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr \ |V(r)| \ll 1 \ . \tag{10.95}$$

Bei großen Teilchenenergien und schwachen Streupotentialen ist die Bornsche Streuphasen-Näherung für alle Drehimpulsquantenzahlen l akzeptabel. Bei hohen Energien spürt das einfallende Teilchen das schwache Potential kaum noch und die Näherung $u_l(r) \simeq u_l^{(0)}(r)$ wird vertretbar.

Bei kleinen Teilchenenergien ist die Bornsche Näherung (10.94) problematisch. Für kleine Argumente $kr = x < \sqrt{l(l+1)}$ gilt $xj_l(x) \propto x^{l+1}$. Damit das Integral (10.94) klein ist, muss $krj_l(kr)$ innerhalb der Reichweite R_0 des Streupotentials klein bleiben, d.h.

$$kR_0 < \sqrt{l(l+1)}$$

Weil k klein ist, sind damit auch die resultierenden l-Werte klein. Unsere Diskussion in Kap. 10.3.6 hat aber gezeigt, dass kleine l-Werte bei der Streuung eher unbedeutend sind.

10.3.8 Anwendung: Streuung langsamer Teilchen am Potentialtopf

Wir betrachten die Streuung am drei-dimensionalen Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}$$
(10.96)

Wir interessieren uns für ungebundene Teilchenenergiezustände mit E > 0. Mit

$$q^{2} = \begin{cases} k_{0}^{2} = \frac{2m(E+V_{0})}{\hbar^{2}} & \text{für} \quad r \leq a \\ k^{2} = \frac{2mE}{\hbar^{2}} & \text{für} \quad r > a \end{cases}$$
(10.97)

lautet die Radialgleichung (10.12)

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(q^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0.$$
(10.98)

Für $R_l(r) = u(r)/r$ folgt mit der Randbedingung $R_l(r=0)$ endlich

$$R_l(r) = \begin{cases} a_l j_l(k_0 r) & \text{für} \quad r \le a \\ \alpha_l j_l(kr) + \beta_l n_l(kr) & \text{für} \quad r > a \end{cases},$$
(10.99)

mit den Konstanten a_l , α_l und β_l . Für $r \to \infty$ ergibt sich das Verhalten

$$R_l(r \to \infty) \to \frac{1}{kr} \left[\alpha_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - \beta_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right]$$
 (10.100)

(10.103)

Andererseits soll allgemein mit der Streuphase δ_l Gleichung (10.88) gelten, d.h.

$$R_l(r \to \infty) = \frac{u_l\left(r \gg \frac{1}{k}\right)}{r} \simeq \frac{\imath^l}{kr} (2l+1)e^{\imath\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$$
$$= \frac{\imath^l}{kr} (2l+1)e^{\imath\delta_l} \left[\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\cos\delta_l + \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\sin\delta_l\right] .(10.101)$$

Der Koeffizientenvergleich mit Lösung (10.100) ergibt

 $1 dR_l$

$$\begin{aligned}
\alpha_l &= i^l (2l+1) e^{i\delta_l} \cos \delta_l \\
\beta_l &= -i^l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l .
\end{aligned}$$
(10.102)
(10.103)

und

Für das Verhältnis der Koeffizienten folgt dann sofort

$$\frac{\beta_l}{\alpha_l} = -\frac{\sin \delta_l}{\cos \delta_l} = -\tan \delta_l . \qquad (10.104)$$

Die Anpassung der Lösungen (10.99) für r = a über die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung

liefert mit

und

$$\begin{array}{rcl}
\overline{R_{l}} & \overline{dr} |_{r=a} \\
j_{l}^{'} &= & \frac{dj_{l}}{dz} \\
n_{l}^{'} &= & \frac{dn_{l}}{dz} \\
k_{0} \frac{j_{l}^{'}(k_{0}a)}{j_{l}(k_{0}a)} &= & k \frac{\alpha_{l}j_{l}^{'}(ka) + \beta_{l}n_{l}^{'}(ka)}{\alpha_{l}j_{l}(ka) + \beta_{l}n_{l}(ka)} = k \frac{j_{l}^{'}(ka) + \frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}}n_{l}^{'}(ka)}{j_{l}(ka) + \frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}}n_{l}(ka)} \quad (10.105)
\end{array}$$

eine Gleichung, die den Koeffizienten a_l nicht enthält. a_l wird über die Normierung der Lösung für $r \leq a$ ermittelt. Wir lösen Gleichung (10.105) nach β_l/α_l auf:

$$k_{0}j_{l}^{'}(k_{0}a)\left[j_{l}(ka) + \frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}}n_{l}(ka)\right] = kj_{l}(k_{0}a)\left[j_{l}^{'}(ka) + \frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}}n_{l}^{'}(ka)\right],$$

also
$$\frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}}\left[kj_{l}(k_{0}a)n_{l}^{'}(ka) - k_{0}n_{l}(ka)j_{l}^{'}(k_{0}a)\right] = k_{0}j_{l}^{'}(k_{0}a)j_{l}(ka) - kj_{l}(k_{0}a)j_{l}^{'}(ka),$$

so dass
$$\frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}} = \frac{k_{0}j_{l}^{'}(k_{0}a)j_{l}(ka) - kj_{l}(k_{0}a)j_{l}^{'}(ka)}{kj_{l}(k_{0}a)n_{l}^{'}(ka) - k_{0}n_{l}(ka)j_{l}^{'}(k_{0}a)}.$$

Für Gleichung (10.104) finden wir damit

$$\tan \delta_{l} = -\frac{\beta_{l}}{\alpha_{l}} = \frac{k j_{l} (k_{0}a) j_{l}'(ka) - k_{0} j_{l}'(k_{0}a) j_{l}(ka)}{k j_{l} (k_{0}a) n_{l}'(ka) - k_{0} n_{l} (ka) j_{l}'(k_{0}a)} .$$
(10.106)

Damit sind alle Streuphasen $\delta_l = \delta_l(E, V_0)$ in diesem Fall vollständig bestimmt.

Im *Grenzfall* langsamer Teilchen $ka \ll 1$, aber nicht $k_0a \ll 1$, folgt mit den Entwicklungen (10.31) und (10.33)

$$\begin{split} j_l(x \ll 1) &\simeq 2^l x^l \frac{l!}{(2l+1)!} , \quad n_l(x \ll 1) \simeq -\frac{(2l)!}{2^l l!} x^{-l-1} ,\\ \text{so dass} & \tan \delta_l &\simeq \frac{k j_l \, (k_0 a) \, 2^l (ka)^{l-1} \frac{l! \cdot l}{(2l+1)!} - k_0 j_l^{'} \, (k_0 a) \, 2^l (ka)^l \frac{l!}{(2l+1)!}}{k j_l \, (k_0 a) \, \frac{(2l)!}{2^l l!} (l+1) (ka)^{-l-2} + k_0 j_l^{'} \, (k_0 a) \, \frac{(2l)!}{2^l l!} (ka)^{-l-1}} . \end{split}$$

Nach Ordnen und Kürzen erhalten wir

$$\tan \delta_l \simeq \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l)! (2l+1)!} (ka)^{2l+1} \hat{P}_l(k_0 a) , \qquad (10.107)$$

mit der Abkürzung

$$\hat{P}_l(z) \equiv \frac{lj_l(z) - zj'_l(z)}{(l+1)j_l(z) + zj'_l(z)} \,. \tag{10.108}$$

Der Sonderfall, dass der Nenner der Funktion (10.108) gegen Null geht, führt auf sog. *Resonanzstreuung*, die wir getrennt in Kap. 10.3.9 untersuchen.

Hier nehmen wir zunächst an, dass sich die Funktion $\hat{P}_l(k_0a)$ in Gleichung (10.107) gutartig, d.h. nicht divergent, verhält. Gemäß Gleichung (10.107) ist im betrachteten Fall langsamer Teilchen $ka \ll 1$ dann auch $\tan \delta \ll 1$, so dass mit

$$\tan \delta_l \simeq \delta_l \simeq \sin \delta_l$$

in diesem Grenzfall folgt

$$\begin{split} \frac{\delta_{l+1}}{\delta_l} &\simeq \frac{2^{2(l+1)}}{2^{2l}} \frac{((l+1)!)^2}{(l!)^2} \frac{(2l)!}{(2l+2)!} \frac{(2l+1)!}{(2l+3)!} (ka)^2 \\ &= 4(l+1)^2 \frac{1}{(2l+2)(2l+1)} \frac{1}{(2l+3)(2l+2)} (ka)^2 \\ &= \frac{(ka)^2}{(2l+1)(2l+3)} < \frac{(ka)^2}{(2l+1)^2} \ll 1 \,. \end{split}$$

Dies impliziert

$$\frac{\sin^2 \delta_{l+1}}{\sin^2 \delta_l} < \frac{(ka)^2}{(2l+1)^2} \ll 1 , \qquad (10.109)$$

so dass s-Streuung mit l = 0 dominiert.

Der totale Wirkungsquerschnitt ist dann nach Gleichung (10.73) gegeben durch

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 . \tag{10.110}$$

Für δ_0 erhalten wir mit der Darstellung (10.36)

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$
, $j'_0(x) = \frac{\cos x}{x} - \frac{\sin x}{x^2}$,

10.3 Partialwellenmethode

aus Gleichung (10.107)

$$\tan \delta_{0} = (ka)\hat{P}_{0}(k_{0}a) = ka \left[\frac{\frac{\sin(k_{0}a)}{k_{0}a} - \cos(k_{0}a)}{\frac{\sin(k_{0}a)}{k_{0}a} + \cos(k_{0}a) - \frac{\sin(k_{0}a)}{k_{0}a}} \right]$$
$$= \frac{ka}{\cos(k_{0}a)} \left[\frac{\sin(k_{0}a)}{k_{0}a} - \cos(k_{0}a) \right]$$
$$= \frac{k}{k_{0}} \tan(k_{0}a) - ka ,$$
$$\frac{k}{k_{0}} \tan(k_{0}a) = \tan(\delta_{0}) + ka .$$
(10.111)

oder

Es gilt für $ka \ll 1$ und $\tan \delta_0 \ll 1$

$$\tan(\delta_0 + ka) = \frac{\tan(\delta_0) + \tan(ka)}{1 + \tan(\delta_0)\tan(ka)} \simeq \tan(\delta_0) + ka$$

so dass aus Gleichung (10.111) folgt

$$\delta_0 + ka \simeq \arctan\left(\frac{k}{k_0}\tan(k_0a)\right)$$

also bis auf ganzzahliges Vielfaches von π (wegen der Periodizität der Tangens-Funktion)

$$\delta_0 \simeq \arctan\left(\frac{k}{k_0}\tan(k_0a)\right) - ka + (n\pi) . \tag{10.112}$$

10.3.9 Resonanzstreuung langsamer Teilchen am tiefen, breiten Potentialtopf

Weil die sphärischen Besselfunktionen $j_l(x)$ oszillierende Funktionen mit Nullstellen sind, kann der Nenner der Funktion (10.108)

$$\hat{P}_{l}(k_{0}a) = \frac{lj_{l}(k_{0}a) - k_{0}aj'_{l}(k_{0}a)}{(l+1)j_{l}(k_{0}a) + k_{0}aj'_{l}(k_{0}a)}$$
(10.113)

für bestimmte Teilchenenergiewerte über das Argument

$$k_0 a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m \left(E + V_0\right)}$$

Null werden, so dass die Funktion (10.108) dort divergiert. Diese Resonanzenergien E_R sind also definiert durch

$$\left[(l+1)j_l(k_0a) + k_0aj'_l(k_0a) \right] \Big|_{[E=E_R]} = 0.$$
(10.114)

Wir betrachten den Spezialfall eines tiefen, breiten Potentialtopfs mit

$$k_0 a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m \left(E + V_0\right)} \gg l \qquad (l \ge 1) .$$
 (10.115)

Aus der asymptotischen Entwicklung (10.77) für große Argumente

$$\begin{aligned} j_l \left(k_0 a \gg 1 \right) &\simeq \quad \frac{1}{k_0 a} \sin \left(k_0 a - \frac{l \pi}{2} \right) \\ \text{folgt} & \quad j_l^{'} \left(k_0 a \gg 1 \right) &\simeq \quad -\frac{1}{(k_0 a)^2} \sin \left(k_0 a - \frac{l \pi}{2} \right) + \frac{1}{k_0 a} \cos \left(k_0 a - \frac{l \pi}{2} \right) \;, \end{aligned}$$

so dass wir für Bedingung (10.114) erhalten:

$$0 = \frac{l+1}{k_0 a} \sin\left(k_0 a - \frac{l\pi}{2}\right) - \frac{1}{k_0 a} \sin\left(k_0 a - \frac{l\pi}{2}\right) + \cos\left(k_0 a - \frac{l\pi}{2}\right) \\ = \frac{l}{k_0 a} \sin\left(k_0 a - \frac{l\pi}{2}\right) + \cos\left(k_0 a - \frac{l\pi}{2}\right) .$$

Mit

$$\sin\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = \cos x , \qquad \cos\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin x$$
$$x + \frac{\pi}{2} = k_0 a - \frac{l\pi}{2} .$$

für

also

$$\begin{aligned} x + \frac{\pi}{2} &= k_0 a - \frac{i\pi}{2} , \\ x &= k_0 a - \frac{(l+1)\pi}{2} \end{aligned}$$

folgt
$$0 = \frac{l}{k_0 a} \cos\left(k_0 a - \frac{(l+1)\pi}{2}\right) - \sin\left(k_0 a - \frac{(l+1)\pi}{2}\right) ,$$

oder $\tan Z = \tan\left(k_0 a - \frac{(l+1)\pi}{2}\right) = \frac{l}{k_0 a} \ll 1$ (10.116)

gemäß Bedingung (10.115). Das Argument der Tangens-Funktion muss gegen 1 klein sein $Z \ll 1$. Jetzt berücksichtigen wir noch die Periodizität der Tangens-Funktion. Es gilt wegen $\tan n\pi = 0$

$$\tan \left(Z \pm n\pi \right) = \frac{\tan Z \mp \tan \left(n\pi \right)}{1 \mp \tan Z \tan n\pi} = \tan Z \; .$$

Aus Gleichung (10.116) finden wir damit

$$\tan Z = \tan \left(Z \pm n\pi \right) \simeq Z \pm n\pi = \frac{l}{k_0 a},$$

 $k_0 a - \frac{(l+1)\pi}{2} \pm n\pi = \frac{l}{k_0 a},$

oder

d.h.
$$k_0 a = \pi \left(n + \frac{l+1}{2} \right) + \frac{l}{k_0 a}$$
.

Der letzte Term ist klein gegen 1, negative Werte von n scheiden aus wegen $k_0 a \gg l$. Als Bedingung für Resonanzstreuung erhalten wir damit

$$k_0 a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m \left(E_R + V_0\right)} \simeq \left(n + \frac{l+1}{2}\right) \pi , \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (10.117)

10.3.10 Breit-Wigner-Formel für Resonanzstreuung

Wir untersuchen den Energiebereich um die Resonanzenergien E_R genauer durch Taylorentwicklung des Nenners der Funktion $\hat{P}_l(k_0a)$ um E_R , d.h. wir entwickeln in Gleichung (10.113)

$$(l+1)j_l(k_0a) + k_0aj'_l(k_0a) \simeq 0 + (E - E_R) \left[(l+1)\frac{d}{dE}j_l(k_0a) + k_0a\frac{d}{dE}j'_l(k_0a) \right] \Big|_{E=E_R}$$

Im Zähler von $\hat{P}_l(k_0 a)$ ersetzen wir E durch E_R . In Analogie zu Gleichung (10.107) definieren wir dann

$$\gamma_{l} \equiv \frac{2^{2l}(l!)^{2}}{(2l)!(2l+1)!} \left[\frac{lj_{l}(k_{0}a) - k_{0}aj_{l}^{'}(k_{0}a)}{(l+1)\frac{d}{dE}j_{l}(k_{0}a) + k_{0}a\frac{d}{dE}j_{l}^{'}(k_{0}a)} \right]_{E=E_{R}}$$
(10.118)

Damit gilt in der Nähe der Resonanz nach Gleichung (10.107)

$$\tan \delta_l \simeq \gamma_l \frac{(ka)^{2l+1}}{E - E_R} \,. \tag{10.119}$$

Wir erhalten dann aus Gleichung (10.73)

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$
 (10.120)

für die Partialwirkungsquerschnitte σ_l

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l}$$

Das Einsetzen von Gleichung (10.119) ergibt

$$\sigma_l = \frac{4\pi (2l+1)}{k^2} \frac{\gamma_l^2 \frac{(ka)^{4l+2}}{(E-E_R)^2}}{1 + \frac{\gamma_l^2 (ka)^{4l+2}}{(E-E_R)^2}} ,$$

oder die Breit-Wigner-Formel

$$\sigma_l = \frac{4\pi (2l+1)}{k^2} \frac{\gamma_l^2 (ka)^{4l+2}}{\left(E - E_R\right)^2 + \gamma_l^2 (ka)^{4l+2}} , \qquad (10.121)$$

die in Abb. 10.6 skizziert ist.

Der Partialwirkungsquerschnitt wird maximal bei der Resonanzenergie mit

$$\sigma_l^{max} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \tag{10.122}$$



Abbildung 10.6: Verhalten der Breit-Wigner-Formel für die Partialwirkungsquerschnitte der Resonanzstreuung

und hat die Halbwertsbreite

$$\frac{\Delta E_L}{2} = E_1 - E_2$$

$$\frac{\sigma_l^{max}}{2} = \sigma_l^{max} \frac{\gamma_l^2 (ka)^{4l+2}}{(E_{1,2} - E_R)^2 + \gamma_l^2 (ka)^{4l+2}}$$

wobei

Dies ergibt

$$(E_{1,2} - E_R)^2 + \gamma_l^2 (ka)^{4l+2} = 2\gamma_l^2 (ka)^{4l+2} ,$$

$$(E_{1,2} - E_R)^2 = \gamma_l^2 (ka)^{4l+2} ,$$

oder

$$E_{1,2} = E_R \pm |\gamma_l| (ka)^{2l+1}$$

Für die Halbwertsbreite folgt

$$\Delta E_L = E_1 - E_2 = 2 |\gamma_l| (ka)^{2l+1} . \qquad (10.123)$$

Wegen $ka \ll 1$ ist die Halbwertsbreite klein und der Resonanzwirkungsquerschnitt (10.120) scharf um E_R begrenzt.

Partialwirkungsquerschnitte $\sigma_{l'}$, deren Quantenzahlen l' nicht die Resonanzbedingung (10.117) erfüllen, liefern vernachlässigbar kleine Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt (10.120).

10.4 Bornsche Näherung

Als zweite Methode zur Berechnung der Streuamplitude $f(\theta, \phi)$ behandeln wir die Bornsche Näherung. Weil wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung benutzen wollen, erweist es

sich als sinnvoll, das Problem auf eine äquivalente Integralgleichung zu reduzieren, die die gewünschten Randbedingungen bereits enthält.

10.4.1 Integralform der Schrödinger-Gleichung

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

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

lässt sich mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ in der Form einer inhomogenen linearen Differentialgleichung 2. Ordnung schreiben als

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = Q , \qquad (10.124)$$

mit dem Quellterm oder der Inhomogenität

$$Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V \psi , \qquad (10.125)$$

der seinerseits von ψ abhängt.

Mithilfe der Methode der Green'schen Funktion erhält man eine spezielle formale Lösung von Gleichung (10.124) zu

$$\psi_s\left(\vec{r}\right) = \int d^3 r_0 \ G\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) Q\left(\vec{r}_0\right) \ . \tag{10.126}$$

Dabei ist die Greensche Funktion $G(\vec{r},\vec{r}_0)$ definiert als Lösung von

$$\nabla^2 G + k^2 G = \delta^3 \left(\vec{r} - \vec{r_0} \right) . \tag{10.127}$$

Setzen wir nämlich die Lösung (10.126) in Gleichung (10.124) ein, so folgt unter Verwendung von Gleichung (10.127)

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi_s + k^2 \psi_s &= \int d^3 r_0 \, \nabla_r^2 G\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) Q\left(\vec{r}_0\right) + \int d^3 r_0 \, k^2 G\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) Q\left(\vec{r}_0\right) \\ &= \int d^3 r_0 \, Q\left(\vec{r}_0\right) \left[\nabla_r^2 G\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) + k^2 G\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) \right] \\ &= \int d^3 r_0 \, Q\left(\vec{r}_0\right) \delta^3\left(\vec{r} - \vec{r}_0\right) = Q\left(\vec{r}\right) \end{aligned}$$

Q.E.D.

Durch Addition der Lösung $\psi_0(\vec{r})$ der zugehörigen homogenen Differentialgleichung

$$\nabla^2 \psi_0(\vec{r}) + k^2 \psi_0(\vec{r}) = 0 ,$$

erhält man die vollständige Lösung von Gleichung (10.124) zu

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \psi_s(\vec{r})$$

= $\psi_0(\vec{r}) + \int d^3 r_0 G(\vec{r}, \vec{r}_0) Q(\vec{r}_0)$
= $\psi_0(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r_0 G(\vec{r}, \vec{r}_0) V(\vec{r}_0) \psi(\vec{r}_0)$. (10.128)

 $G(\vec{r}, \vec{r_0})$ ist anschaulich die Lösung des Streuproblems für eine fiktive punktförmige Streuquelle bei $\vec{r_0}$. Durch entsprechende Superposition (Integration über $\vec{r_0}$) und Wichtung $(V(\vec{r_0})\psi(\vec{r_0}))$ erhält man daraus die Lösung der Integralgleichung. In der Lösung (10.128) müssen $\psi(\vec{r_0})$ und $G(\vec{r}, \vec{r_0})$ den Randbedingungen entsprechend festgelegt werden. Für die homogene Lösung $\psi_0(\vec{r_0})$ ist das einfach und eindeutig: wir wollen eine einlaufende ebene Welle haben, d.h.

$$\psi_0\left(\vec{r}\right) = e^{ikz} \ . \tag{10.129}$$

10.4.2 Bestimmung der Green's-Funktion

Weil k eine Konstante ist, bietet sich hier zur Bestimmung der Greenschen Funktion die Fourier-Transformation von Gleichung (10.127) an. *Allgemein* lässt sich die Greensche Funktion aus zwei linear unabhängigen Lösungen der homogenen Gleichung unter Beachtung der Sprung-Bedingung für dG/dr bei $r = r_0$ konstruieren (siehe z. B. Buch von Arfken). Wir schreiben

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s \ g(\vec{s}) \exp\left(i\vec{s}\cdot\vec{r}\right) \ , \tag{10.130}$$

mit der Fourier-Transformierten $g(\vec{s})$. Dann erhalten wir

$$\begin{split} \left(\nabla^2 + k^2\right) G\left(\vec{r}\right) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s \, \left[\left(\nabla^2 + k^2\right) e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} \right] g\left(\vec{s}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s \, \left(k^2 - s^2\right) e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} g\left(\vec{s}\right) \, . \end{split}$$

Andererseits ist

$$\delta^3 \left(\vec{r} \right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3s \; e^{i \vec{s} \cdot \vec{r}} \; ,$$

so dass Gleichung (10.127) mit $\vec{r}_0 = 0$ (o.B.d.A.), ansonsten mit $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}_0$, lautet

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s \, \left(k^2 - s^2\right) e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} g\left(\vec{s}\right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3s \, e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} \, .$$

Es folgt

$$g(\vec{s}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - s^2} .$$
 (10.131)

Eingesetzt in Gleichung (10.130) folgt für die Green's-Funktion

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3s \ e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} \frac{1}{k^2 - s^2} \ . \tag{10.132}$$

Bezüglich der \vec{s} -Integration ist \vec{r} eine Konstante. Führen wir Kugelkoordinaten (s, θ, ϕ) gemäß Abb. 10.7 ein mit $\vec{e}_z \parallel \vec{r}$, so ist $\vec{s} \cdot \vec{r} = sr \cos \theta$ und die ϕ -Integration in Gleichung (10.132) ergibt einfach den Faktor 2π :

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty ds \ s^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{e^{isr \cos \theta}}{k^2 - s^2} \ .$$



Abbildung 10.7: Zur $\vec{s}\text{-Integration}$

Die θ -Integration ergibt

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin \theta e^{isr \cos \theta} = -\frac{e^{isr \cos \theta}}{isr} \Big|_0^{\pi}$$
$$= \frac{1}{isr} \Big[e^{isr} - e^{-isr} \Big] = \frac{2\sin(sr)}{sr} \,.$$

Es verbleibt

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r} \int_0^\infty ds \ s \frac{\sin(sr)}{k^2 - s^2}$$

= $\frac{1}{2\pi^2 r} \frac{1}{2} \left[\int_0^\infty ds \ s \frac{\sin(sr)}{k^2 - s^2} + \int_{-\infty}^0 ds \ s \frac{\sin(sr)}{k^2 - s^2} \right]$
= $\frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty ds \ s \frac{\sin(sr)}{k^2 - s^2}.$ (10.133)

Mit

und

$$\sin(sr) = \frac{1}{2i} \left[e^{isr} - e^{-isr} \right]$$
$$\frac{s}{k^2 - s^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{k - s} - \frac{1}{k + s} \right]$$

erhalten wir

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{16i\pi^2 r} \left[\int_{-\infty}^{\infty} ds \left(\frac{1}{k-s} - \frac{1}{k+s} \right) e^{irs} - \int_{-\infty}^{\infty} ds \left(\frac{1}{k-s} - \frac{1}{k+s} \right) e^{-irs} \right] \\ = \frac{1}{16i\pi^2 r} \left[\int_{-\infty}^{\infty} ds \left(\frac{1}{k-s} - \frac{1}{k+s} \right) e^{irs} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{1}{k+x} - \frac{1}{k-x} \right) e^{irx} \right] \\ = \frac{i}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} ds \left(\frac{1}{s-k} + \frac{1}{s+k} \right) e^{irs} .$$
(10.134)

Die verbleibenden Integrale werden mit dem Residuensatz für geschlossene Integrationswege C ausgewertet:

$$\oint_C \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0) , \qquad (10.135)$$

wenn der einfache Pol z_0 innerhalb des vom Integrationsweg eingeschlossenen Gebiets liegt; falls nicht, ist die rechte Seite von Gleichung (10.135) gleich Null. Wir schreiben Gleichung (10.134) als

$$G(\vec{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r} (J_+ + J_-) , \qquad (10.136)$$

mit

$$J_{\pm} = \int_{-\infty} ds \, \frac{e}{s \pm k} \tag{10.137}$$

und fassen s als komplexe Variable auf. Wie in Abb. 10.8 skizziert, schließen wir den Integrationsweg C durch einen Halbkreis in der *oberen* Halbebene.





Mit

$$s = \Re s + i\Im s$$
$$e^{irs} = e^{-r\Im s}e^{ir\Re s}$$

300

ist

Für $\Im s \to \infty$ liefert der Halbkreis dann keinen Beitrag zum Integral.

Die Darstellung (10.137) ist noch formaler Natur, da für $s = \pm k$ der Integrand eine einfache Singularität hat. Das Integral (10.137) ist an diesen Stellen nicht definiert und solange bedeutungslos, bis Regeln zur Behandlung dieser Singularitäten gegeben werden. Diese Regeln können jedoch nicht aus der Mathematik kommen, sondern müssen aus physikalischen Betrachtungen abgeleitet werden.



Abbildung 10.9: Integrationswege C_1, C_2, C_3 und C_4

Wir benutzen hier einen phänomenologischen Weg, um die Integrale (10.137) auszuwerten: Im singulären *s*-Integral werden die Integrationswege deformiert, um den Singularitäten auszuweichen, und danach wird der Grenzübergang vollzogen. Wir betrachten in Abb. 10.8 die komplexe *s*-Ebene und zeichnen dort die möglichen Umgehungswege ein, d.h. um die Pole werden kleine Kreise mit dem Radius ρ ausgeschnitten. Es gibt dann die in Abb. 10.9 gezeigten vier Integrationswege C_1 , C_2 , C_3 und C_4 . Nachdem auf diesen Wegen die Integration durchgeführt wurde, kann der Grenzübergang $\rho \rightarrow 0$ vollzogen werden. Alle möglichen Wege, d.h. alle Grenz-Prozesse, besitzen eine mathematisch-physikalische Bedeutung. Entsprechend

den vier möglichen Wegen, ergeben sich vier verschiedene Werte der Integrale. Weg 1: Wir erhalten $J_+ = J_- = 0$

Weg 2: Wir erhalten $J_+ = 0$ und

$$J_{-} = 2\pi i e^{irk} G^{(2)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{irk}}{r} .$$

und damit

Das gleiche Ergebnis erhalten wir auch, wenn wir statt der Deformierung des Integrationswegs den Pol verschieben. Für Gleichung (10.133) gilt

$$G^{(2)} = \lim_{\epsilon \to 0} G_{\epsilon} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{-i}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} ds \, \frac{s e^{irs}}{(k+i\epsilon)^2 - s^2}$$
$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i}{4\pi^2 r} \int_C ds \, \frac{s e^{irs}}{(s+k+i\epsilon)(s-k-i\epsilon)}$$

Nur der Pol bei $s_p=k+\imath\epsilon$ liegt innerhalb des geschlossenen Integrationswegs C und mit dem Residuensatz folgt

$$G^{(2)} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i}{4\pi^2 r} \frac{2\pi i \left(k + i\epsilon\right)}{2 \left(k + i\epsilon\right)} e^{i r \left(k + i\epsilon\right)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i r k}}{r} \,.$$

Weg 3: Wir erhalten $J_{-} = 0$ und

$$J_{+} = 2\pi i e^{-irk}$$
$$G^{(3)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-irk}}{r}.$$

und damit

Weg 4: Wir erhalten

und damit

$$J_{\pm} = 2\pi i e^{\pm i r k}$$

$$G^{(4)} = -\frac{1}{4\pi r} \left(e^{i r k} + e^{-i r k} \right) = -\frac{\cos(kr)}{2\pi r}$$

Zusammengefasst also

$$G\left(\vec{r}\right) = -\frac{1}{4\pi r} \begin{cases} 0 & \text{Weg 1:} \\ e^{\imath kr} & \text{Weg 2: auslaufende Green's-Funktion} \\ e^{-\imath kr} & \text{Weg 3: einlaufende Green's-Funktion} \\ 2\cos(kr) & \text{Weg 4: stehende Wellen-Green's-Funktion} \end{cases}$$
(10.138)

10.4.3 Bornsche Darstellung der Streuamplitude

Aufgrund der Forderung, Lösungen der Form (10.6)

$$\psi \simeq A \left[e^{\imath k z} + f\left(\theta, \phi\right) \frac{e^{\imath k r}}{r} \right]$$

zu finden, wählen wir als Green's-Funktion mit der richtigen physikalischen Randbedingung die auslaufende Green's-Funktion

$$G^{(2)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r} e^{ikr} . \qquad (10.139)$$

Einsetzen von Gleichung (10.129) und Gleichung (10.139) in Gleichung (10.128) ergibt die zu lösende Integralgleichung, die nun bereits die richtigen Randbedingungen enthält, und damit äquivalent zur Schrödinger-Gleichung mit den physikalisch richtigen Randbedingungen ist:

$$\psi\left(\vec{r}\right) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_0 \, V\left(\vec{r_0}\right) \psi\left(\vec{r_0}\right) \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r_0}|}}{|\vec{r} - \vec{r_0}|} \,. \tag{10.140}$$

Erfüllt diese Darstellung tatsächlich die Form (10.6)? Der erste Term ist okay. Für den zweiten gilt für große r:

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r_0}| &= \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r_0}} \\ &\simeq r\sqrt{1 - \frac{2\vec{r} \cdot \vec{r_0}}{r^2}} \simeq r\left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r_0}}{r^2}\right) \\ &= r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r_0}}{r} = r - \vec{e_r} \cdot \vec{r_0} \;, \end{aligned}$$

wobei $\vec{e_r}$ den Einheitsvektor in \vec{r} -Richtung bezeichnet. Für $r \to \infty$ erhalten wir damit die Darstellung

$$\psi(\vec{r}) \to e^{\imath k z} - \frac{e^{\imath k r}}{r} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r_0 \, V(\vec{r}_0) \, \psi(\vec{r}_0) \, e^{-\imath k(\vec{e}_r \cdot \vec{r}_0)} \,, \tag{10.141}$$

die tatsächlich von der Form (10.6) ist. Es ergibt die bislang noch exakte Integralgleichung für die Streuamplitude:

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_0 \ V(\vec{r_0}) \ \psi(\vec{r_0}) \ e^{-ik(\vec{e_r}\cdot\vec{r_0})} \ . \tag{10.142}$$

Diese Darstellung gilt für die Ortsdarstellung; in allgemeiner Notation ist

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left\langle e^{ik(\vec{e_r}\cdot\vec{r_0})} \left| V\psi\left(\vec{r_0}\right) \right\rangle , \qquad (10.143)$$

wobei $e^{ik(\vec{e_r}\cdot\vec{r_0})}$ die freie ebene Wellenlösung der Schrödinger-Gleichung bezeichnet.

10.4.4 Erste Bornsche Näherung

Diese Näherung folgt der Neumannschen Reihe zur Lösung von Integralgleichungen der Art (10.140). In 0.ter Näherung vernachlässigen wir den Integralterm in Gleichung (10.140) und erhalten $\psi^{(0)} = e^{ikz}$. Setzen wir dies auf der rechten Seite von Gleichung (10.140) ein, so finden wir in 1. Näherung

$$\psi^{(1)}\left(\vec{r}\right) \simeq e^{\imath k z} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r_0 \, V\left(\vec{r}_0\right) e^{\imath k z_0} \frac{e^{\imath k |\vec{r} - \vec{r}_0|}}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \,. \tag{10.144}$$

Höhere Näherungen bringen nicht mehr viel genauere Ergebnisse. Mit

und
$$ec{k} = kec{e}_r$$

 $kz_0 = ec{k}'\cdotec{r}_0$, $ec{k}' = kec{e}_z$,

folgt für die Streuamplitude

$$f^{(1)}(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_0 V(\vec{r}_0) e^{i\left(\vec{k}' - \vec{k}\right) \cdot \vec{r}_0} . \qquad (10.145)$$

In erster Bornscher Näherung ist die Streuamplitude im wesentlichen gleich der Fouriertransformierten $V(\vec{q})$, $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$, des Streupotentials!

Wir beschränken uns im Folgenden auf zentralsymmetrische Potentiale

$$V(\vec{r}_0) = V(|\vec{r}_0|) = V(r_0).$$
(10.146)



Abbildung 10.10: Zur Wahl des Vektors \vec{q}

Gemäß Abb. 10.10 gibt der Winkel ϕ für zentralsymmetrische Potentiale die Richtung von $\vec{k'}$ relativ zu \vec{k} an. Bei elastischer Streuung ist $|\vec{k'}| = |\vec{k}| = k$ und deshalb nach Abb. 10.10

$$\frac{q}{2} = k \sin \frac{\theta}{2}$$
, $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$.

Legen wir die Polarachse parallel zu \vec{r}_0 , so folgt für das Integral in Gleichung (10.145)

$$\int d^{3}r_{0} V(\vec{r}_{0}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{0}} = \int d^{3}r_{0} V(\vec{r}_{0}) e^{iqr_{0}\cos\theta}$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{1} d\mu \int_{0}^{\infty} dr_{0}r_{0}^{2}V(r_{0}) e^{iqr_{0}\mu}$$

$$= 2\pi \int_{0}^{\infty} dr_{0}r_{0}^{2}V(r_{0}) \frac{e^{iqr_{0}\mu}}{iqr_{0}} \Big|_{-1}^{1}$$

$$= \frac{2\pi}{iq} \int_{0}^{\infty} dr_{0}r_{0}V(r_{0}) \Big[e^{iqr_{0}} - e^{-iqr_{0}}\Big]$$

$$= \frac{4\pi}{q} \int_{0}^{\infty} dr_{0}r_{0}V(r_{0})\sin(qr_{0}) ,$$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^{2}q} \int_{0}^{\infty} dr_{0}r_{0}V(r_{0})\sin(qr_{0}) . \qquad (10.147)$$

In erster Bornscher Näherung ist die Streuamplitude nur abhängig vom Impulsübertrag $q = 2k\sin(\theta/2)$. Der Nachteil der Näherung (10.147) ist, dass $f^{(1)}(\theta)$ rein reell ist, wodurch das optische Theorem (10.74) nicht zur Berechnung des totalen Wirkungsquerschnitts genutzt werden kann.

10.4.5 Beispiel: Abgeschirmtes Coulombpotential=Yukawa-Potential

Wir betrachten speziell das Streupotential

$$V(r) = \beta \frac{e^{-\mu r}}{r} .$$
 (10.148)

Für $\mu = 0$ und $\beta = q_1 q_2$ handelt es sich um das Coulomb-Potential. Damit erhalten wir

$$V(q) = \int_0^\infty dr_0 r_0 V(r_0) \sin(qr_0) = \beta \int_0^\infty dr_0 e^{-\mu r_0} \sin(qr_0) \; .$$

Dieses Integral haben wir in Kap. 9.6 berechnet als

$$h_2(\eta) = \int_0^\infty dr \, \sin(qr) e^{-\eta r} = \frac{q}{q^2 + \eta^2} \, .$$

Mit $\eta = \mu$ finden wir

$$V(q) = \beta h_2(\mu) = \frac{\beta q}{q^2 + \mu^2} ,$$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 (q^2 + \mu^2)} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \left[\mu^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right]} .$$
(10.149)

so dass

so dass

Für das Coulomb-Potential

folgt

und mit

$$\mu = 0, \qquad \beta = q_1 q_2$$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2mq_1 q_2}{4\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{q_1 q_2}{4E \sin^2 \frac{\theta}{2}}.$$
(10.150)

Gemäß Gleichung (10.10) erhalten wir für den Rutherford-Wirkungsquerschnitt

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Coulomb}} \simeq \left|f^{(1)}(\theta)\right|^2 = \left[\frac{q_1q_2}{4E\sin^2\frac{\theta}{2}}\right]^2 \,. \tag{10.151}$$

Im Gegensatz zu Gleichung (10.149) wird der Rutherford-Wirkungsquerschnitt (10.151) singulär für $\theta \rightarrow 0$.

10.4.6 Bornsche Reihe

Die formale Lösung der Integralgleichung (10.140)

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\vec{r}) , \qquad (10.152)$$

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = e^{ikz} ,$$

mit

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_0 V(\vec{r}_0) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_0|}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \psi^{(n-1)}(\vec{r}_0)$$
(10.153)

wird *Bornsche Reihe* genannt. Man erhält die *n*-te Näherung, wenn die Reihe (10.152) nach dem *n*-ten Summanden abgebrochen wird.

Wir können die Integralform (10.128) der Schrödinger-Gleichung auch in der Form

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int d^3 r_0 g(\vec{r} - \vec{r}_0) V(\vec{r}_0) \psi(\vec{r}_0)$$
(10.154)

schreiben, wobei ψ_0 die einlaufende Welle ist und die Green's-Funktion

$$g(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} G(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}$$
(10.155)

den Faktor $2m/\hbar^2$ enthält. In Kurzform gilt also

$$\psi = \psi_0 + \int g V \psi \ . \tag{10.156}$$

Setzen wir diesen Ausdruck für ψ im Integral ein, so folgt

$$\psi = \psi_0 + \int g V \psi_0 + \int g V g V \psi \; .$$

Wiederholen wir diese Prozedur, so erhalten wir als formale Lösung die iterative Bornsche Reihenlösung (10.152) geschrieben in Kurzform als

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int gVgV\psi_0 + \int gVgVgV\psi_0 + \dots + \int (gV)^n\psi_0 + \dots \quad (10.157)$$

In jedem Term taucht nur noch ψ_0 zusammen mit immer höheren Potenzen von (gV) auf. Die 1. Bornsche Näherung bricht die Reihe (10.157) nach dem zweiten Glied ab, aber jetzt ist klar, wie man höhere Näherungen berechnet. Abb. 10.11 zeigt, wie man die Bornsche



Abbildung 10.11: Diagramm zur Bornschen Reihenlösung

Reihenlösung (10.157) diagrammmäßig repräsentieren kann. In nullter Ordnung existiert kein Einfluss des Streupotentials V. In 1. Ordnung wird das Teilchen einmal durch V gestreut und propagiert anschließend in eine neue Richtung. In 2. Ordnung wird es gestreut, propagiert in eine neue Richtung, wird nochmal gestreut und propagiert dann aus dem Streubereich hinaus, usw. In diesem Zusammenhang wird g als *Propagator* bezeichnet. Man gelangt zur Feynman-Formulierung der relativistischen Quantenmechanik mit Propagatoren (g) und Vertex-Faktoren (V).

10.4.7 Gültigkeitsbereich der Bornschen Näherung

Die notwendige Voraussetzung für die Anwendbarkeit der ersten Bornschen Näherung ist

$$\left|\psi^{(1)}\left(\vec{r}\right)\right| \ll \left|\psi^{(0)}\left(\vec{r}\right)\right| = 1 \; .$$

Dies ist nach Gleichung (10.144) gleichbedeutend mit

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int d^3r_0 \ V\left(\vec{r_0}\right) e^{\imath k z_0} \frac{e^{\imath k |\vec{r} - \vec{r_0}|}}{|\vec{r} - \vec{r_0}|} \right| \ll 1 \; .$$

Die erste Bornsche Näherung ist insbesondere dann gut erfüllt, wenn sie bereits für r = 0 gilt, d.h.

$$\begin{split} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int d^3r_0 \, V\left(\vec{r_0}\right) e^{\imath k z_0} \frac{e^{\imath k r_0}}{r_0} \right| &\ll 1 \,, \\ \text{oder} & \frac{2\pi\hbar^2}{m} \gg \left| \int d^3r_0 \, \frac{V\left(\vec{r_0}\right)}{r_0} e^{\imath k r_0(1+\mu)} \right| \\ &= 2\pi \left| \int_0^\infty dr_0 r_0 V\left(r_0\right) \int_{-1}^1 d\mu e^{\imath k r_0(1+\mu)} \right| \\ &= \left| 2\frac{\pi}{\imath k} \int_0^\infty dr_0 V\left(r_0\right) e^{\imath k r_0} \left[e^{\imath k r_0} - e^{-\imath k r_0} \right] \right| \,. \end{split}$$

Wir erhalten als Bedingung

$$\int_{0}^{\infty} dr_0 V(r_0) \left| \left[e^{2ikr_0} - 1 \right] \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{m} .$$
 (10.158)

Bei hohen Energien $kr_0 \gg 1$ ist die Exponentialfunktion stark oszillerend und betragsmäßig klein gegen 1. Wir erhalten für vernünftige Potentiale als Gültigkeitsbedingung

$$\left| \int_0^\infty dr V(r) \right| \ll \frac{\hbar^2 k}{m} , \qquad (10.159)$$

praktisch identisch zur Bedingung (10.95). Mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ergibt sich, dass die Bornsche Näherung für hohe Teilchenenergien gut erfüllt ist.

Bei kleinen Energien $kr_0 \ll 1$ verwenden wir die Näherung

$$e^{2\imath kr_0} - 1 \simeq 1 + 2\imath kr_0 - 1 = 2\imath kr_0 ,$$

 $\left| \int_0^\infty dr r V(r) \right| \ll \frac{\hbar^2}{2m}$ (10.160)

so dass

sein muss. Für topfförmige Potentiale $V(r) \cong -V_0$ mit der Reichweite R_0 erhalten wir daraus

$$egin{array}{rcl} V_0 R_0^2 &\ll& rac{\hbar^2}{m}\,, \ V_0 &\ll& rac{\hbar^2 R_0^{-2}}{m}\simeq rac{p^2}{m}\,. \end{array}$$

oder

Die Bornsche Näherung ist nur dann bei kleinen Teilchenenergien gültig, wenn das Streupotential noch viel kleiner als die sowieso schon kleine kinetische Energie des Teilchens ist. Zusammengefasst: Die Bornsche Näherung ist für große ($kr_0 \gg 1$) Teilchenenergien sehr viel besser erfüllt als für kleine ($kr_0 \ll 1$) Teilchenenergien.

11 Formale Streutheorie

Bisher haben wir das Streuproblem ausschließlich in der anschaulichen Ortsdarstellung formuliert. Das einfallende Teilchen wurde als Wellenpaket beschrieben. Da dieses aus ebenen Wellen aufgebaut ist, konnten wir die gesamte Theorie auf die Untersuchung einer einfallenden, ebenen Welle konzentrieren. Weil diese zudem Energie-Eigenzustände des freien Hamilton-Operators sind, wurde das Streuproblem stationär. Wir wollen jetzt nach abstrakteren Darstellungen suchen, um über diese in der Wahl der zweckmäßigsten Darstellung frei zu sein.

11.1 Lippmann-Schwinger-Gleichung

324 Wir betrachten zunächst wieder die stationäre Formulierung des Streuprozesses. Wir nehmen an, dass

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$
 (11.1)

wobei

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$
 (11.2)

der freie Hamilton-Operator ist. Weit weg vom Streuzentrum, wo \hat{V} verschwindet, ist der Energie-Eigenzustand gleich dem Zustand des freien Teilchens $|\vec{p}>$.

Das Wirken von \hat{V} verursacht, dass der Energie-Eigenzustand verschieden wird vom Freie-Teilchen-Zustand $|\vec{p}\rangle$. Jedoch für einen elastischen Streuprozess, d.h. einem bei dem keine Änderung des Energiewerts auftritt, wollen wir eine Lösung der vollen Schrödinger-Gleichung mit demselben Energieeigenwert haben. Sei also $|\Phi\rangle = |\vec{p}\rangle$ der Energie-Eigenketvektor von \hat{H}_0 , d.h.

$$\ddot{H}_0|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad . \tag{11.3}$$

Wir wollen lösen

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad . \tag{11.4}$$

Bei Streuprozessen haben beide Operatoren, \hat{H}_0 und $(\hat{H}_0 + \hat{V})$ kontinuierliche Eigenwertspektren. Wir suchen deshalb nach einer Lösung der Schrödinger-Gleichung (11.4), die für $\hat{V} \rightarrow 0$ die Eigenschaft $|\psi \rangle \rightarrow |\Phi \rangle$ aufweist, wobei $|\Phi \rangle$ die Lösung der freien Schrödinger-Gleichung (11.3) mit *demselben* Energieeigenwert ist. Die gewünschte Lösung von Gleichung (11.4) ist

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi\rangle + |\Phi\rangle,$$
 (11.5)

wenn man die Komplikationen durch die Singularität des Operators $1/(E - \hat{H}_0)$ zunächst übersieht.

Beweis: Die Anwendung des Operators $E - \hat{H}_0$ auf Lösung (11.5) ergibt mit (11.3)

$$(E - \hat{H}_0) |\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle + E|\Phi\rangle - \hat{H}_0|\Phi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle,$$

$$\hat{H}_0|\psi\rangle + \hat{V}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

also

und für $\hat{V} \to 0$ geht $|\psi \rangle \to |\Phi \rangle$. Q.E.D.

Wie gehen wir mit dem singulären Operator um? Der Ausweg ist, E leicht komplex anzusetzen, d.h. $E \rightarrow E \pm i\epsilon$. Als Lösung erhalten wir dann aus Gleichung (11.5) die sog. Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\Phi\rangle + \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} |\psi^{(\pm)}\rangle,$$
 (11.6)

wobei wir im Folgenden $\lim_{\epsilon \to 0}$ oft nicht mitschreiben wollen. Die physikalische Bedeutung von \pm erhalten wir aus dem Skalarprodukt $<\vec{x}|\psi^{(\pm)}>$ bei großen Entfernungen.

Der inverse Operator $1/(E - \hat{H}_0)$ ergibt sich als Grenzfall $\epsilon \to 0$ der neuen Operatoren $(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)^{-1}$ und $(E - \hat{H}_0 - i\epsilon)^{-1}$.

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung ist eine allgemeine Ket-Gleichung. Wir projizieren auf die Ortsdarstellung durch Multiplikation mit $\langle \vec{x} |$ von links:

$$<\vec{x}|\psi^{(\pm)}> = <\vec{x}|\Phi> + <\vec{x}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm\imath\epsilon}\hat{V}|\psi^{(\pm)}>$$
.

Durch Einfügen von

$$\int d^3x' |\vec{x}'\rangle < \vec{x}'| = 1$$

erhalten wir

$$\langle \vec{x}|\psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x}|\Phi \rangle + \int d^3x' \langle \vec{x}|\frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm \imath\epsilon}|\vec{x}' \rangle \langle \vec{x}'|\hat{V}\psi^{(\pm)} \rangle$$
 (11.7)

Für die ebene Wellenlösung $|\Phi>$ gilt in der Ortsdarstellung

$$=rac{e^{ec{v}ec{v}\cdotec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}=rac{e^{ec{v}ec{k}\cdotec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,,$$

mit der Normalisierung

$$\int d^3x < \vec{p}' | \vec{x} > < \vec{x} | \vec{p} > = \delta \left(\vec{p} - \vec{p}' \right) .$$
(11.8)

Der Kern der Integralgleichung (11.7) ist

$$G_{\pm}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} < \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm \imath \epsilon} | \vec{x}' > .$$
(11.9)

Behauptung: Es ist

$$G_{\pm}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} , \qquad (11.10)$$

mit $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Beweis: Wir schieben

$$\int d^{3}p' |\vec{p}' > < \vec{p}'| = 1$$

$$\int d^{3}p'' |\vec{p}'' > < \vec{p}''| = 1$$

und

in Gleichung (11.9) ein, so dass

$$\begin{aligned} G_{\pm}\left(\vec{x},\vec{x}'\right) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' < \vec{x} |\vec{p}'| > < \vec{p}'| \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm \imath \epsilon} |\vec{p}'| > < \vec{p}'' |\vec{x}'| > \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' < \vec{x} |\vec{p}'| > < \vec{p}'| \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm \imath \epsilon} |\vec{p}''| > < \vec{p}'' |\vec{x}'| >, \end{aligned}$$

wobei \hat{H}_0 auf $< ec{p}' \mid$ gewirkt hat. Mit Gleichung (11.8) folgt

$$< \vec{p}' | \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon} | \vec{p}'' > = \frac{\delta\left(\vec{p}' - \vec{p}''\right)}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon} .$$

Unter Ausnutzung von

$$<\vec{x}|\vec{p}'>=\frac{e^{\imath\vec{p}'\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}},<\vec{p}''|\vec{x}'>=\frac{e^{-\imath\vec{p}''\cdot\vec{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

erhalten wir

$$G_{\pm}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\vec{p'} \cdot \left(\vec{x} - \vec{x}'\right)/\hbar}}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon}$$

Mit $E=\hbar^2k^2/(2m)$ und Setzen von $\vec{p}'=\hbar\vec{q}$ erhalten wir dann

$$\begin{aligned} G_{\pm}\left(\vec{x},\vec{x}'\right) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hbar^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dq \ q^2 \int_0^{2\pi} d\phi \ \int_{-1}^1 d\mu \ \frac{e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|\mu}}{\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{\hbar^2q^2}{2m} \pm i\epsilon} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \ q^2 \int_{-1}^1 d\mu \ \frac{e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|\mu}}{k^2 - q^2 \pm i\eta} \ , \end{aligned}$$

mit $\eta=2m\epsilon/\hbar^2.$ Die $\mu\text{-Integration}$ führt auf

$$\begin{aligned} G_{\pm}\left(\vec{x},\vec{x}'\right) &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \; \frac{q^2}{q^2 - k^2 \mp i\eta} \int_{-1}^1 d\mu \, e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|\mu} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \; \frac{q^2}{q^2 - k^2 \mp i\eta} \frac{1}{iq|\vec{x}-\vec{x}'|} \left[e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|} - e^{-iq|\vec{x}-\vec{x}'|} \right] \\ &= -\frac{1}{4\pi^2 i|\vec{x}-\vec{x}'|} \int_0^\infty dq \; \frac{q}{q^2 - k^2 \mp i\eta} \left[e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|} - e^{-iq|\vec{x}-\vec{x}'|} \right] \\ &= -\frac{1}{8\pi^2 i|\vec{x}-\vec{x}'|} \int_{-\infty}^\infty dq \; \frac{q}{q^2 - (k^2 \pm i\eta)} \left[e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|} - e^{-iq|\vec{x}-\vec{x}'|} \right] \end{aligned}$$

11 Formale Streutheorie

Der Integrand hat Pole in der komplexen Ebene bei

$$q_p = \pm \sqrt{k^2 \pm \imath \eta} = \pm k \sqrt{1 \pm \frac{\imath \eta}{k^2}} \simeq \pm k \pm \imath \epsilon'$$
.

Mit dem Residuen-Satz folgt

$$G_{\pm}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Q. E. D.

Unter Verwendung der bewiesenen Gleichung (11.9) erhalten wir für Gleichung (11.7)

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | \Phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{\pm ik |\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} \langle \vec{x}' | \hat{V} \psi^{(\pm)} \rangle \quad . \tag{11.11}$$

Offensichtlich ist die Ortswellenfunktion $\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ bei Anwesenheit eines Streupotentials gleich der Summe aus der einfallenden Welle plus einem Streuterm. Bei einem Potential mit endlicher Reichweite dominiert der Faktor $\exp(\pm i k r)/r$ die räumliche Variation des Streuterms bei großen Abständen (vergl. mit Kap. 10), d.h. die Lösung $|\psi^{(+)}\rangle$ entspricht der Lösung mit einfallender ebener Welle und auslaufender Kugelwelle, während die Lösung $|\psi^{(-)}\rangle$ der Lösung mit einfallender ebener Welle und einlaufender Kugelwelle entspricht. In den meisten Anwendungen sind wir an der Lösung $|\psi^{(+)}\rangle$ interessiert.

Lokale Potentiale, die nur vom Ortsoperator \vec{x} abhängen, erfüllen die Bedingung

$$\langle \vec{x}' | \hat{V} \vec{x}'' \rangle = V\left(\vec{x}'\right) \delta\left(\vec{x}' - \vec{x}''\right) . \tag{11.12}$$

Dann folgt

$$< \vec{x}' | \hat{V} \psi^{(\pm)} > = \int d^3 x'' < \vec{x}' | \hat{V} \vec{x}'' > < \vec{x}'' | \psi^{(\pm)} >$$

$$= \int d^3 x'' V \left(\vec{x}' \right) \delta \left(\vec{x}' - \vec{x}'' \right) < \vec{x}'' | \psi^{(\pm)} >$$

$$= V \left(\vec{x}' \right) < \vec{x}' | \psi^{(\pm)} >$$

und Gleichung (11.11) reduziert sich auf

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | \Phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{\pm ik |\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} V\left(\vec{x}'\right) \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \quad . \tag{11.13}$$

Der Vergleich mit Gleichung (10.140) zeigt: die integrale Schrödinger-Gleichung (10.140) ist die Ortsdarstellung der Lippmann-Schwinger-Gleichung (11.6). Wir schreiben die Lippmann-Schwinger-Gleichung (11.6) in der Form

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\Phi\rangle + G_0^{(+)}V|\psi^{(+)}\rangle,$$
 (11.14)
mit dem Greenschen Operator

$$G_0^{(+)} \equiv \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} . \tag{11.15}$$

Durch Iteration erhält man die verallgemeinerte Bornsche Reihe für den Streuzustand

$$|\psi^{(+)}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(G_0^{(+)}V\right)^n |\Phi\rangle$$
 (11.16)

Die Bornsche Reihe (10.152) ist gerade die Ortsdarstellung der abstrakten Lippmann-Schwinger-Reihe (11.16).

11.2 Alternativer Zugang zur Lippmann-Schwinger-Gleichung

Die quantentheoretische Behandlung des Streuvorgangs besteht im Schrödinger-Bild darin, die zeitliche Änderung des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ bei vorgebener Anfangsbedingung zu untersuchen. Im Fall der Streuung lautet diese Anfangsbedingung, dass $|\psi(t)\rangle$ für $t \to -\infty$ ein kräftefreier Zustand ist (Asymptotenbedingung). Es liegt das in Abb. 11.1 skizzierte Problem vor.



Abbildung 11.1: Das mathematische Streuproblem

Wie in Gleichung (11.3) gehen wir von den Eigenvektoren $|u_a^0 >$ des ungestörten Hamilton-Operators $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ aus, der kontinuierliche Eigenwerte $E_a \ge 0$ besitzt:

$$\hat{H}_0|u_a^0\rangle = E_a|u_a^0\rangle \quad . \tag{11.17}$$

Die Eigenvektoren bilden ein vollständiges Basissytem, d.h.

$$\oint |u_a^0> < u_a^0|da = 1 \; ,$$

mit der Normierung

$$< u_{a}^{0}|u_{a'}^{0}> = \delta\left(a-a'\right) \;,$$

wobei der Index a alle die Eigenvektoren kennzeichnenden Quantenzahlen repräsentiert. Ein beliebiger kräftefreier Zustand lautet in der Entwicklung nach den Vektoren $|u_a^0 >$

$$|\psi^{\text{frei}}(t)\rangle = \oint c(a)e^{-\imath \frac{E_a t}{\hbar}}|u_a^0\rangle da , \qquad (11.18)$$

wobei die Koeffizienten c(a) die spezielle Form des Wellenpakets beschreiben und gemäß $\oint |c(a)|^2 da = 1$ normiert sind.

Zwischen irgend zwei Zeiten t und t_0 besteht im Schrödinger-Bild für den Zustandsvektor $|\psi>$ nach Gleichung (6.3) der Zusammenhang

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}\frac{(t-t_0)}{\hbar}}|\psi(t_0)\rangle$$
 (11.19)

Der Streuzustand $|\psi(t)\rangle$, der sich aus dem für $t_0 \rightarrow -\infty$ vorgegebenen freien Wellenpaket (11.18) entwickelt, lautet daher

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\imath \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \lim_{t_0 \to -\infty} \oint c(a) e^{-\imath \frac{(E_a - \hat{H})t_0}{\hbar}} |u_a^0\rangle da .$$
(11.20)

Zur Behandlung des Grenzwerts in der Darstellung (11.20) benutzen wir, dass für eine Funktion $F(t_0)$, die einen Grenzwert für $t_0 \rightarrow -\infty$ besitzt, dieser geschrieben werden kann in der Form

$$\lim_{t_0 \to -\infty} F(t_0) = \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} F(t') dt' \quad (\epsilon > 0) .$$
(11.21)

Beweis: Wir betrachten das Integral

$$I = \epsilon \int_{-\infty}^{0} e^{\epsilon t'} F\left(t'\right) dt'$$

und substituieren $x = \epsilon t^{'}$, so dass

$$I = \int_{-\infty}^{0} dx \; e^{x} F\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \; .$$

Mit $\epsilon \to 0$ geht auf der rechten Seite $F(x/\epsilon) \to F(-\infty)$, so dass

$$\lim_{\epsilon \to 0} I = F(-\infty) \int_{-\infty}^{0} dx \, e^x = F(-\infty) \left[e^x \right]_{-\infty}^{0} = F(-\infty) \, .$$

Es folgt die Behauptung:

$$\lim_{t_0 \to -\infty} F(t_0) = F(-\infty) = \lim_{\epsilon \to 0} I = \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} F(t') dt'.$$

Q. E. D.

Wir wenden (11.21) auf Gleichung (11.20) an mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\imath \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \oint c(a) \lim_{\epsilon' \to +0} \epsilon' \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon' t' - \imath \left(E_{a} - \hat{H}\right) \frac{t'}{\hbar}} |u_{a}^{0}\rangle da \\ &= e^{-\imath \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \oint c(a) \lim_{\epsilon \to +0} \frac{\epsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} dt' e^{-\imath \left(E_{a} - \hat{H} + \imath \epsilon\right) \frac{t'}{\hbar}} |u_{a}^{0}\rangle da \\ &= e^{-\imath \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \oint c(a) |u_{a}^{(+)}\rangle da , \end{aligned}$$
(11.22)
$$|u_{a}^{(+)}\rangle &= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{\epsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} dt' e^{-\imath \left(E_{a} - \hat{H} + \imath \epsilon\right) \frac{t'}{\hbar}} |u_{a}^{0}\rangle , \tag{11.23}$$

mit

wobei wir $\epsilon^{'}=\epsilon/\hbar$ gesetzt haben.

Die Ausführung des Integrals in (11.23) ergibt

$$|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{\imath \epsilon}{E_a - \hat{H} + \imath \epsilon} |u_a^0\rangle \quad . \tag{11.24}$$

Es ist

$$\frac{\imath\epsilon}{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon} |u_a^0\rangle = \frac{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon + \hat{H} - E_a}{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon} |u_a^0\rangle$$
$$= \left(1 + \frac{\hat{H}_0 + \hat{V} - E_a}{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon}\right) |u_a^0\rangle$$
$$= \left(1 + \frac{\hat{V}}{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon}\right) |u_a^0\rangle$$

wegen Gleichung (11.17). Wir erhalten

$$|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \left(1 + \frac{\hat{V}}{E_a - \hat{H} + \imath \epsilon} \right) |u_a^0\rangle$$
 (11.25)

Multiplizieren wir Gleichung (11.24) mit $E_a - \hat{H} + \imath\epsilon$, so folgt

$$\lim_{\epsilon \to +0} \left(E_a - \hat{H} + \imath \epsilon \right) |u_a^{(+)} \rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \imath \epsilon |u_a^0 \rangle ,$$

oder mit $\epsilon \to +0$

$$\hat{H}|u_a^{(+)}\rangle = E_a|u_a^{(+)}\rangle, \qquad (11.26)$$

315

(11.23)

d.h. die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind Eigenvektoren des Hamilton-Operators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ zu den gleichen kontinuierlichen Eigenwerten E_a . Die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind ebenfalls normiert

$$< u_{a}^{(+)}|u_{a'}^{(+)}> = < u_{a}^{0}|u_{a'}^{0}> = \delta\left(a-a'\right)$$
.

Mit der Operatordefinition

$$G^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} \quad (\epsilon > 0)$$
(11.27)

erhält man in Erweiterung von Gleichung (11.25)

$$|u^{(\pm)}\rangle = \left(1 + G^{(\pm)}\hat{V}\right)|u^0\rangle$$
 (11.28)

Nach endlicher Zeit gilt für den Streuzustand $|\psi(t)\rangle$ dann nach Gleichungen (11.22) und (11.26)

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \oint c(a) |u_a^{(+)}\rangle da \\ &= \oint c(a) e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |u_a^{(+)}\rangle da \\ &= \oint c(a) e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}} |u_a^{(+)}\rangle da , \end{aligned}$$
(11.29)

d.h. er ist eine Linearkombination der Eigenvektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ und die Entwicklungskoeffizienten c(a) sind diejenigen des einfallenden kräftefreien Wellenpakets (11.18).

Die Gleichungen (11.24) und (11.25) gestatten es nicht, in praktischen Fällen die Eigenvektoren $|u_a^{(+)} > \text{von } \hat{H}$ zu berechnen. Um dafür eine geeignete Beziehung zu finden, addieren wir

$$\frac{E_a - H_0}{E_a - \hat{H} + \imath \epsilon} |u_a^0\rangle = 0$$

zur rechten Seite von Gleichung (11.24) mit dem Ergebnis

$$|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{i\epsilon + E_a - H_0}{E_a - \hat{H} + i\epsilon} |u_a^0\rangle$$

Auflösen nach $|u_a^0>$ ergibt

$$|u_a^0\rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + \imath\epsilon} \left(E_a - \hat{H} + \imath\epsilon\right) |u_a^{(+)}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + \imath\epsilon} \left(E_a - \hat{H}_0 - \hat{V} + \imath\epsilon\right) |u_a^{(+)}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to +0} \left(1 - \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + \imath\epsilon}\hat{V}\right) |u_a^{(+)}\rangle,$$

also gerade die Lippmann-Schwinger-Gleichung (11.6) in der Form

$$|u_a^{(+)}\rangle = |u_a^0\rangle + \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V}|u_a^{(+)}\rangle .$$
(11.30)

11.3 Die Streumatrix im zeitabhängigen Formalismus

Für die Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang eines Streuprozesses ist der Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ zu einer endlichen Zeit von geringer Bedeutung. Was wirklich interessiert, ist der Zusammenhang zwischen den kräftefreien Zuständen am Anfang $(t \rightarrow -\infty)$ und am Ende $(t \rightarrow \infty)$ der Streuwechselwirkung. Die Streumatrix S bestimmt diesen Zusammenhang:

$$\psi(\infty) \ge S |\psi(-\infty) \ge . \tag{11.31}$$

Wir wollen die S-Matrix mit den Lösungen der Lippmann-Schwinger-Gleichung bestimmen. Dazu entwickeln wir den Endzustand nach *denselben* Basisvektoren $|u_a^0 >$ (Eigenvektoren von \hat{H}_0) wie den Anfangszustand. Da wir im Schrödinger-Bild sind, gilt nach Gleichung (11.18)

$$\lim_{t \to -\infty} |\psi(t)\rangle = \oint c(a)e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}} |u_a^0\rangle da , \qquad (11.32)$$

$$\lim_{t \to +\infty} |\psi(t)\rangle = \oint \tilde{c}(a)e^{-\imath \frac{E_a t}{\hbar}} |u_a^0\rangle da .$$
(11.33)

Wir müssen nun die unbekannten Entwicklungskoeffizienten $\tilde{c}(a)$ aus der vorgegebenen Anfangsverteilung c(a) berechnen. Dies geschieht am besten im Wechselwirkungs-Bild (siehe Kap. 6.4), in dem die kräftefreien Zustände (11.32) und (11.33) wegen

$$|\psi^w(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0t}{\hbar}}|\psi^s(t)\rangle$$

zeitunabhängig werden:

$$\lim_{t \to -\infty} |\psi^w(t)\rangle = \oint c(a)|u_a^0\rangle da$$
(11.34)

und

$$\lim_{t \to +\infty} |\psi^w(t)\rangle = \oint \tilde{c}(a) |u_a^0 \rangle da .$$
(11.35)

Dabei ist der Zeitpunkt t_0^* , in dem das Schrödinger-Bild mit dem Wechselwirkungs-Bild übereinstimmen soll, willkürlich auf $t_0^* = 0$ gesetzt worden.

Im Wechselwirkungs-Bild gilt für den Zustandsvektor zu irgend zwei Zeiten t und t_0 der Zusammenhang (6.24)

$$\psi^{w}(t) > = \mathcal{E}^{w}(t, t_{0}) | \psi^{w}(t_{0}) >$$
 (11.36)

$$\mathcal{E}^{w}(t,t_{0}) = e^{i\frac{\hat{H}_{0}t}{\hbar}}e^{-i\frac{\hat{H}(t-t_{0})}{\hbar}}e^{-i\frac{\hat{H}_{0}t_{0}}{\hbar}}, \qquad (11.37)$$

wobei Operatoren ohne oberen Index als im Schrödinger-Bild gemeint sind. Mit Gleichung (11.36) erhalten wir durch Einschieben der 1

$$< u_{a}^{0} | \psi^{w}(t) > = < u_{a}^{0} | \mathcal{E}^{w}(t, t_{0}) | \psi^{w}(t_{0}) >$$

$$= \oint_{a'} da' < u_{a}^{0} | \mathcal{E}^{w}(t, t_{0}) | u_{a'}^{0} > < u_{a'}^{0} | \psi^{w}(t_{0}) > .$$
(11.38)

mit

Die Grenzwerte

$$\begin{array}{lll} c(a) & = & \lim_{t \to -\infty} < u_a^0 | \psi^w(t) > \\ \tilde{c}(a) & = & \lim_{t \to +\infty} < u_a^0 | \psi^w(t) > \end{array}$$

und

stehen daher im Zusammenhang

$$\tilde{c}(a) = \Delta \oint_{a'} da' S\left(a, a'\right) c(a') , \qquad (11.39)$$

wobei die Streumatrix oder S-Matrix $S(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}')$ gegeben ist durch

$$S(a, a') = \lim_{t \to +\infty} \lim_{t_0 \to -\infty} \langle u_a^0 | \mathcal{E}^w(t, t_0) u_{a'}^0 \rangle$$

=
$$\lim_{t \to +\infty} \lim_{t_0 \to -\infty} \langle u_a^0 | e^{i \frac{E_a t}{\hbar}} e^{-i \frac{\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}} e^{-i \frac{E_{a'} t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle$$

=
$$\lim_{t \to +\infty} \lim_{t_0 \to -\infty} \langle e^{-i \frac{(E_a - \hat{H})t}{\hbar}} u_a^0 | e^{-i \frac{(E_{a'} - \hat{H})t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle .$$
(11.40)

Die Grenzwerte berechnen wir wie in Abschnitt 11.2. Analog zu Gleichung (11.21) gilt

$$\lim_{t \to \infty} F(t) = \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \int_0^\infty e^{-\epsilon t'} F\left(t'\right) dt' \quad (\epsilon > 0) .$$
(11.41)

Damit folgt mit $\epsilon^{'}=\epsilon/\hbar$

$$\begin{split} \lim_{t \to +\infty} |e^{-\imath \frac{(E-\hat{H})t}{\hbar}} u^0 > &= \lim_{\epsilon' \to 0} |\epsilon' \int_0^\infty dt' e^{-\epsilon' t' - \imath \frac{(E-\hat{H})t'}{\hbar}} u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} |\frac{\epsilon}{\hbar} \int_0^\infty dt' e^{-\imath \frac{(E-\hat{H}-\imath\epsilon)t'}{\hbar}} u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} |\frac{\epsilon}{\hbar} \left(-\frac{\hbar}{\imath}\right) \left[\frac{e^{-\imath \frac{(E-\hat{H}-\imath\epsilon)t'}{\hbar}}}{E-\hat{H}-\imath\epsilon}\right]_0^\infty u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{-\imath\epsilon}{E-\hat{H}-\imath\epsilon} |u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\imath\epsilon}{-\left(E-\hat{H}\right)+\imath\epsilon} |u^0 > . \end{split}$$

Ebenso gilt mit Gleichung (11.21)

$$\begin{split} \lim_{t \to -\infty} |e^{-\imath \frac{(E-\hat{H})t}{\hbar}} u^0 > &= \lim_{\epsilon' \to 0} |\epsilon' \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon' t' - \imath \frac{(E-\hat{H})t'}{\hbar}} u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} |\frac{\epsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{-\imath \frac{(E-\hat{H}+\imath\epsilon)t'}{\hbar}} u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} |\frac{\epsilon}{\hbar} \left(-\frac{\hbar}{\imath}\right) \left[\frac{e^{-\imath \frac{(E-\hat{H}+\imath\epsilon)t'}{\hbar}}}{E-\hat{H}+\imath\epsilon}\right]_{-\infty}^0 u^0 > \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\imath\epsilon}{+\left(E-\hat{H}\right)+\imath\epsilon} |u^0 > . \end{split}$$

Zusammengefasst gilt also bei Verwendung von $(E - \hat{H}_0)|u^0 >= 0$:

$$\lim_{t \to \pm \infty} |e^{-i\frac{(E-\hat{H})t}{\hbar}}u^{0}\rangle = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i\epsilon}{\mp (E-\hat{H}) + i\epsilon} |u^{0}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i\epsilon \pm (E-\hat{H}) \mp (E-\hat{H})}{\mp (E-\hat{H}) + i\epsilon} |u^{0}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left(1 \pm \frac{(E-\hat{H}_{0}-\hat{V})}{\mp (E-\hat{H}) + i\epsilon}\right) |u^{0}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left(1 \mp \frac{\hat{V}}{\mp (E-\hat{H}) + i\epsilon}\right) |u^{0}\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left(1 \pm \frac{\hat{V}}{\mp (E-\hat{H}) + i\epsilon}\right) |u^{0}\rangle. \quad (11.42)$$

Mit den Operatoren $G^{(\pm)}$ nach Gleichung (11.27) erhalten wir damit unter Verwendung von Gleichung (11.28)

$$\lim_{t \to \pm \infty} |e^{-i \frac{(E-\hat{H})t}{\hbar}} u^0 \rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \left(1 + G^{(\mp)} \hat{V} \right) |u^0 \rangle = |u^{(\mp)} \rangle .$$
(11.43)

Eingesetzt in Gleichung (11.40) ergibt sich für die S-Matrix

$$S\left(a,a'\right) = < u_a^{(-)}|u_{a'}^{(+)}\rangle = < u_{a'}^{(+)}|u_a^{(-)}\rangle^* \quad . \tag{11.44}$$

Dieses Ergebnis ist wichtig, da es nicht auf die Separierbarkeit von \hat{H} in gestörten und ungestörten Anteil zurückgreift. Im Prinzip können die Zustände $|u_{a'}^{(\pm)}>$ für beliebiges \hat{H} aus der Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung abgeleitet werden.

Nach Gleichung (11.43) ist

oder

$$|u^{(+)}\rangle = |u^{0}\rangle + G^{(+)}\hat{V}|u^{0}\rangle, |u^{0}\rangle = |u^{(+)}\rangle - G^{(+)}\hat{V}|u^{0}\rangle.$$
(11.45)

Ebenso gilt

$$|u^{(-)}\rangle = |u^0\rangle + G^{(-)}\hat{V}|u^0\rangle$$
.

Setzen wir Ergebnis (11.45) ein, so erhalten wir

$$|u_a^{(-)}\rangle = |u_a^{(+)}\rangle + \left(G_a^{(-)} - G_a^{(+)}\right)\hat{V}|u_a^0\rangle \quad .$$
(11.46)

Für die Streumatrix (11.44) gilt dann nach Einsetzen von (11.46)

$$S(a, a') = \langle u_{a'}^{(+)} | u_{a}^{(-)} \rangle^{*}$$

= $\langle u_{a'}^{(+)} | u_{a}^{(+)} \rangle^{*} + \langle u_{a'}^{(+)} | (G_{a}^{(-)} - G_{a}^{(+)}) \hat{V} u_{a}^{0} \rangle^{*}$
= $\delta (a - a') + \langle u_{a}^{0} | \hat{V} (G_{a}^{(+)} - G_{a}^{(-)}) u_{a'}^{(+)} \rangle$, (11.47)

weil $(G_a^{(\pm)})^* = G_a^{(\mp)}$. Für den Vektor $(G_a^{(+)} - G_a^{(-)})|u_{a'}^{(+)} >$ erhalten wir mit Gleichung (11.27)

$$\begin{pmatrix} G_{a}^{(+)} - G_{a}^{(-)} \end{pmatrix} |u_{a'}^{(+)} \rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \left(\frac{1}{E_{a} - \hat{H} + \imath \epsilon} - \frac{1}{E_{a} - \hat{H} - \imath \epsilon} \right) |u_{a'}^{(+)} \rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{E_{a} - \hat{H} - \imath \epsilon - \left(E_{a} - \hat{H} + \imath \epsilon\right)}{\left(E_{a} - \hat{H}\right)^{2} - \imath^{2} \epsilon^{2}} |u_{a'}^{(+)} \rangle$$

$$= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{-2\imath \epsilon}{\left(E_{a} - E_{a'}\right)^{2} + \epsilon^{2}} |u_{a'}^{(+)} \rangle ,$$

weil $|u_{a^{'}}^{(+)}>$ Eigenvektor von \hat{H} zum Eigenwert $E_{a^{'}}$ ist. Es folgt

$$\left(G_{a}^{(+)} - G_{a}^{(-)} \right) |u_{a'}^{(+)} \rangle = -2i \lim_{\epsilon \to +0} \frac{\epsilon}{\left(E_{a} - E_{a'} \right)^{2} + \epsilon^{2}} |u_{a'}^{(+)} \rangle$$

$$= -2\pi i \delta \left(E_{a} - E_{a'} \right) |u_{a'}^{(+)} \rangle .$$
(11.48)

Nach Gleichung (11.47) erhalten wir für die S-Matrix somit die *Grundformel der Streutheo*rie zu

$$S(a, a') = \delta(a - a') - 2\pi i < u_a^0 | \hat{V} u_{a'}^{(+)} > \delta(E_a - E_{a'}) \quad . \tag{11.49}$$

Damit ist der Zustand nach der Streuung, (11.33) oder (11.35), völlig bestimmt. Der erste Term ergibt wieder die durchgehende Welle, der zweite beschreibt die Streuwelle.

11.4 Møllersche Operatoren

Gemäß Gleichung (11.28) erzeugen die Operatoren

$$\hat{\Omega}^{(\pm)} \equiv \left(1 + G^{(\pm)}\hat{V}\right) \tag{11.50}$$

aus dem ungestörten Zustand $|u^0>$ die Streuzustände $|u^{(\pm)}>$:

$$u^{(\pm)} >= \hat{\Omega}^{(\pm)} | u^0 > . \tag{11.51}$$

Die Operatoren $\hat{\Omega}^{(\pm)}$ heißen *Møllersche Wellenoperatoren*. Gemäß Gleichung (11.44) lässt sich die S-Matrix dann darstellen als

$$S(a, a') = \langle \hat{\Omega}^{(-)} u^0 | \hat{\Omega}^{(+)} u^0 \rangle \rangle,$$

oder kurz als

$$\hat{S} = \hat{\Omega}^{(\mp)} \hat{\Omega}^{(\pm)}$$
 (11.52)

Mit der iterativen Lösung (11.16) in der Form (11.28)

$$|u^{(\pm)}\rangle = \hat{\Omega}^{(\pm)}|u^{0}\rangle = \left(1 + G^{(\pm)}\hat{V}\right)|u^{0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(G_{0}^{(\pm)}\hat{V}\right)^{n}|u_{0}\rangle,$$

ergibt sich die Darstellung

$$\hat{\Omega}^{(\pm)} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(G_0^{(\pm)} \hat{V} \right)^n \,. \tag{11.53}$$

Man beachte den Unterschied in den Definitionen von

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon}$$
$$G^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon}$$

und

11.5 Die Transfermatrix

Es ist üblich, einen Operator \hat{T} durch die Gleichung

$$\hat{T} = \hat{V} \left(1 + G^{(+)} \hat{V} \right) = \hat{V} \hat{\Omega}^{(+)}$$
(11.54)

einzuführen. Nach Gleichung (11.43) gilt

$$|u^{(+)}\rangle = |u^{0}\rangle + G^{(+)}\hat{V}|u^{0}\rangle = \left(1 + G^{(+)}\hat{V}\right)|u^{0}\rangle,$$

$$\hat{V}|u^{(+)}\rangle = \hat{V}\left(1 + G^{(+)}\hat{V}\right)|u^{0}\rangle = \hat{T}|u^{0}\rangle.$$
(11.55)

so dass

Dann erhalten wir

$$< u_a^0 | \hat{V} u_{a'}^{(+)} > = < u_a^0 | \hat{T} | u_{a'}^0 >$$
(11.56)

als Matrix in den freien Zuständen. Für die Grundformel der Streutheorie (11.49) folgt

$$S(a, a') = \delta(a - a') - 2\pi i < u_a^0 | \hat{T} u_{a'}^0 > \delta(E_a - E_{a'})$$
(11.57)

oder

$$S_{fi} = \delta_{f,i} - 2\pi i \delta (E_f - E_i) T_{fi}.$$
 (11.58)

Wir können damit bei Verwendung des Operators \hat{T} die S-Matrix aus den ungestörten Zuständen ausrechnen. Das Ergebnis stimmt mit dem aus den wahren Streuzuständen berechneten (11.44) überein. Die Schwierigkeit liegt nun in der Bestimmung des Operators \hat{T} .

11.6 Goldene Regel, Optisches Theorem

Nach Gleichung (11.31) verbindet die S-Matrix die Wellenfunktion des Anfangszustands $\Phi_a(t \to -\infty)$ mit der des Endzustands nach der Streuung $\Psi_a(t \to \infty)$:

$$\Psi_a(\infty) = S\Phi_a(-\infty) . \tag{11.59}$$

Die Funktion $\Psi_a(\infty)$ charakterisiert alle möglichen Streuprozesse und Reaktionen, die beim Stoß vor sich gehen können. Wir bezeichnen einen der möglichen Endzustände mit ϕ_b . Jede Zerfallsmöglichkeit, die durch den Index *b* angegeben wird, heißt *Reaktionskanal*. Der Anfangszustand und der Endzustand bei elastischer Streuung gehören zum *Eingangskanal*, alle anderen Zustände zu den *Ausgangskanälen*.

Die Funktionen Φ_b , die als Spezialfall b = a auch die Funktion ϕ_a enthalten, bilden definitionsgemäß ein vollständiges, orthonormiertes Funktionensystem, daher ist

$$\Psi_a(\infty) = \sum_b \langle \Phi_b | \Psi_a \rangle \Phi_b . \qquad (11.60)$$

Das Betragsquadrat der Entwicklungskoeffizienten $| < \Phi_b | \Psi_a > |^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass das System für $t \to \infty$ im Zustand Φ_b ist. Setzen wir Gleichung (11.59) ein, folgt für diese Wahrscheinlichkeit

$$w_{ba} = |\langle \Phi_b | S \Phi_a \rangle|^2 = |S_{ba}|^2 \equiv |\langle b | S | a \rangle|^2 .$$
(11.61)

Damit die Summe aller Wahrscheinlichkeiten

$$\sum_{b} w_{ba} = 1 \tag{11.62}$$

gleich 1 ist, muss die Streumatrix S unitär sein, d.h. $S^+S = 1$ oder ausführlicher

$$\sum_{b} S_{ab}^{+} S_{ba} = \sum_{b} |S_{ba}|^{2} = 1.$$
(11.63)

Gemäß Gleichung (11.58) ist

$$S_{ba} = \delta_{b,a} - 2\pi i \delta \left(E_b - E_a \right) T_{ba} \, .$$

Durch Einsetzen in Gleichung (11.61) folgt

$$\begin{split} w_{ba} &= |S_{ba}|^2 &= \left[\delta_{b,a} - 2\pi i \delta \left(E_b - E_a \right) T_{ba} \right] \left[\delta_{b,a} + 2\pi i \delta \left(E_b - E_a \right) T_{ba}^* \right] \\ &= \delta_{b,a}^2 + \delta \left(E_b - E_a \right) \left[2\pi i T_{ba}^* \delta_{b,a} - 2\pi i T_{ba} \delta_{b,a} + 4\pi^2 T_{ba} T_{ba}^* \delta \left(E_b - E_a \right) \right] \\ &= \delta_{b,a}^2 + \delta \left(E_b - E_a \right) \left[2\pi i \left(T_{ba}^* - T_{ba} \right) \delta_{b,a} + 4\pi^2 |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a \right) \right] \,. \end{split}$$

Mit

$$\Im T_{ba} = \frac{1}{2i} \left[T_{ba} - T_{ba}^* \right] = \frac{i}{2} \left[T_{ba}^* - T_{ba} \right]$$

erhalten wir

$$w_{ba} = |S_{ba}|^2 = \delta_{b,a}^2 + \delta (E_b - E_a) \left[4\pi \delta_{b,a} \Im T_{ba} + 4\pi^2 |T_{ba}|^2 \delta (E_b - E_a) \right]$$

= $\delta_{b,a}^2 + 2\pi \hbar \delta (E_b - E_a) \left[\frac{2}{\hbar} \delta_{b,a} \Im T_{ba} + \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta (E_b - E_a) \right].$ (11.64)

In diesem Ausdruck setzen wir

$$2\pi\hbar\delta \left(E_b - E_a\right) = \lim_{t \to \infty} \int_{-t/2}^{t/2} dt' \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(E_b - E_a\right)t'\right]$$
$$= \lim_{t \to \infty} \int_{-t/2}^{t/2} dt' = \lim_{t \to \infty} t,$$

weil wegen der Faktoren $\delta_{b,a}$ und $\delta(E_b - E_a)$ in der eckigen Klammer von Gleichung (11.64) im Integral $E_a = E_b$ gesetzt werden darf. Es folgt

$$w_{ba} = \delta_{b,a}^2 + \left[\frac{2}{\hbar}\delta_{b,a}\Im T_{ba} + \frac{2\pi}{\hbar}|T_{ba}|^2\delta\left(E_b - E_a\right)\right]\lim_{t \to \infty} t .$$
(11.65)

Die mittlere Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ist demnach

$$P_{ba} = \frac{w_{ba}}{\lim_{t \to \infty} t} = \frac{2}{\hbar} \delta_{b,a} \Im T_{ba} + \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a \right) .$$
(11.66)

Für $b \neq a$ ist die Übergangsrate

$$P_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a \right) \,. \tag{11.67}$$

Der Streuwirkungsquerschnitt ergibt sich durch Division von Gleichung (11.67) durch die Stromdichte der einfallenden Teilchen $j_a = \hbar k_a/m_a = v_a$ zu

$$\frac{d\sigma_{a\to b}}{d\Omega} = \frac{P_{ba}}{j_a} = \frac{2\pi m_a}{\hbar^2 k_a} |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a\right) . \tag{11.68}$$

Wir nehmen nun an, dass die Endzustände b im Kontinuum liegen. Wir betrachten also nicht mehr den Übergang in *einen* Endzustand |b>, sondern in alle Zustände |b>, die in einem kleinen Bereich um b liegen. Wir führen daher die Zahl der Endzustände $\rho(E_b)$ im Volumen V pro Energieintervall ein. Durch Integration über die Energie der Endzustände erhalten wir für die Rate der Streuung und die Reaktionen $a \rightarrow b$

$$P_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{E_b - \frac{dE}{2}}^{E_b + \frac{dE}{2}} dE_b \,\rho(E_b) \,|T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a)$$

= $\frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_a) \,|T_{ba}|^2$
= $\frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_b) \,|T_{ba}|^2$,

weil $E_b = E_a$ ist. Es ergibt sich die Goldene Regel

$$P_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_b) |T_{ba}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_b) | < \Phi_b |T| \Phi_a > |^2.$$
(11.69)

Diese Regel hat die gleiche Form wie Fermi's Goldene Regel (8.110)

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_b) | < b|V|a > |^2$$

nur dass V_{ba} durch T_{ba} ersetzt wurde. Aber während Fermi's goldene Regel ein Ergebnis der Störungstheorie 1. Ordnung ist, ist die Regel (11.69) exakt! Die Schwierigkeit besteht allerdings darin, die Transfermatrix nach Gleichung (11.54) zu berechnen.

Anmerkung: In niedrigster Ordnung ist $\hat{T} = \hat{V}$ und die Regel (11.69) stimmt mit Fermi's Regel (8.110) überein.

Wir betrachten nochmals Gleichung (11.66). Summieren wir diesen Ausdruck über alle möglichen Zustände b (einschließlich a), so erhalten wir unter Beachtung von Gleichung (11.62), $\sum_{b} w_{ba} = 1$

$$0 = \frac{2}{\hbar} \Im T_{aa} + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{b} |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a \right) .$$
 (11.70)

Damit ergibt sich für die aufsummierte Rate (11.67)

$$P_a = \sum_b P_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b |T_{ba}|^2 \delta\left(E_b - E_a\right) = -\frac{2}{\hbar} \Im T_{aa} \ .$$

Nach Division durch die Stromdichte der einfallenden Teilchen $j_a = \hbar k_a/m_a = v_a$ folgt nach (11.68) somit für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{tot} = \sum_{b} \frac{d\sigma_{a \to b}}{d\Omega} = \sum_{b} \frac{P_{ba}}{j_a} = -\frac{2m_a}{\hbar^2 k_a} \Im T_{aa} .$$
(11.71)

Gleichung (11.71) entspricht dem optischen Theorem (10.74): der totale Wirkungsquerschnitt berechnet sich aus dem Imaginärteil von T_{aa} . Die Goldene Regel (11.69) besagt, dass die Übergangsrate

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \times \mathsf{Phasenraumfaktoren}$$

durch zwei Größen bestimmt ist:

- 1. Die Amplitude $M = \langle \Phi_b | T | \Phi_a \rangle$ des betrachteten Prozesses.
- 2. Den verfügbaren Phasenraum des Prozesses, der gleich der Dichte $\rho(E_b)$ der Endzustände ist.

11.7 Streutheorie bei Anwesenheit zweier Arten von Wechselwirkungen

Bei einigen Problemen der Streutheorie kann man das Wechselwirkungspotential in zwei Summanden zerlegen. Zum Beispiel bei der Wechselwirkung geladener Teilchen durch Kernkräfte hat man neben der eigentlichen Kernwechselwirkung \hat{V} noch die Coulomb-Wechselwirkung \hat{V}_Q zwischen den stoßenden und auseinanderfliegenden Teilchen zu beachten. In solchen Fällen schreiben wir den Hamilton-Operator in der Gestalt

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_A + \hat{V}_B . (11.72)$$

Die Rate für einen Übergang aus dem Zustand ϕ_a in den Zustand ϕ_b ist nach Gleichung (11.67)

$$P_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta \left(E_b - E_a \right) \;,$$

mit (siehe Gleichungen (11.55) und (11.57))

$$T_{ba} = \langle \Phi_b | \hat{V}_A + \hat{V}_B | \Psi_a^{(+)} \rangle . \qquad (11.73)$$

Die Wellenfunktion $\Psi_a^{(+)}$ gehört zu der einlaufenden Welle Φ_a und erfüllt die Lippmann-Schwinger-Gleichung (11.30)

$$\Psi_a^{(+)} = \Phi_a + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + i\epsilon} \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B \right) \Psi_a^{(+)} .$$
(11.74)

Wir führen nun die Wellenfunktion $\phi^{(-)}$ ein: diese soll eine einlaufende Welle bei der Streuung allein am Feld \hat{V}_B beschreiben und zum Endzustand Φ_b gehören:

$$\phi_b^{(-)} = \Phi_b + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 - i\epsilon} \hat{V}_B \phi_b^{(-)} . \qquad (11.75)$$

Aus dieser Gleichung folgt

$$\Phi_b = \phi_b^{(-)} - \frac{V_B}{E_a - \hat{H}_0 - \imath \epsilon} \phi_b^{(-)} .$$

Einsetzen in Gleichung (11.73) ergibt

$$T_{ba} = \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_A | \Psi_a^{(+)} \rangle + \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_B | \Psi_a^{(+)} \rangle - \langle \frac{\hat{V}_B}{E_a - \hat{H}_0 - \imath \epsilon} \phi_b^{(-)} | \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B \right) \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_A | \Psi_a^{(+)} \rangle + \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_B | \Psi_a^{(+)} \rangle - \langle \phi_b^{(-)} | \frac{\hat{V}_B}{E_a - \hat{H}_0 + \imath \epsilon} \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B \right) \Psi_a^{(+)} \rangle .$$

Im zweiten Term auf der rechten Seite setzen wir $\Psi_a^{(+)}$ nach Gleichung (11.74) ein und erhalten

$$T_{ba} = \langle \phi_{b}^{(-)} | \hat{V}_{A} | \Psi_{a}^{(+)} \rangle + \langle \phi_{b}^{(-)} | \hat{V}_{B} | \Phi_{a} \rangle + \langle \phi_{b}^{(-)} | \hat{V}_{B} \frac{\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B}}{E_{a} - \hat{H}_{0} + \imath \epsilon} \Psi_{a}^{(+)} \rangle - \langle \phi_{b}^{(-)} | \frac{\hat{V}_{B}}{E_{a} - \hat{H}_{0} + \imath \epsilon} \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \Psi_{a}^{(+)} \rangle = \langle \phi_{b}^{(-)} | \hat{V}_{A} | \Psi_{a}^{(+)} \rangle + \langle \phi_{b}^{(-)} | \hat{V}_{B} | \Phi_{a} \rangle = T_{ba}(A) + T_{ba}(B) .$$
(11.76)

Die Interpretation dieses Ergebnisses ist etwas länglicher.

Das Matrix-Element T_{ba} kann durch drei verschiedene Ausdrücke dargestellt werden. Neben Gleichung (11.73) gilt

$$T_{ba} = \langle \Phi_b | \hat{T} | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | \hat{V} | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | \hat{V} | \Phi_a \rangle , \qquad (11.77)$$

wobei der Operator \hat{T} der Gleichung (11.54) genügt:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E_a - \hat{H} + \imath \epsilon} \hat{V}$$
 (11.78)

Mit Gleichung (11.77) folgt für den zweiten Term von Gleichung (11.76)

$$<\phi_b^{(-)}|\hat{V}_B|\Phi_a> = <\Phi_b|\hat{V}_B|\phi_a^{(+)}> = T_{ba}(B)$$
, (11.79)

wobei $\phi_b^{(-)}$ Gleichung (11.75) erfüllt und $\phi_a^{(+)}$ genügt

$$\phi_a^{(+)} = \Phi_a + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V}_B \phi_a^{(+)} . \qquad (11.80)$$

Das Matrix-Element $T_{ba}(B)$ bestimmt nach Gleichung (11.79) den Übergang aus dem Zustand Φ_a in den Zustand Φ_b unter dem alleinigen Einfluss des Potentials \hat{V}_B .

Betrachten wir jetzt den ersten Summanden von Gleichung (11.76). Gleichung (11.78) mit $\hat{V} = \hat{V}_A + \hat{V}_B$ lautet

$$\hat{T} = \hat{V}_A + \hat{V}_B + \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B\right) \frac{1}{E_a - \hat{H} + \imath\epsilon} \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B\right) \ .$$

Unter Ausnutzung von

$$\hat{T}\Phi_a = \left(\hat{V}_A + \hat{V}_B\right)\Psi_a^{(+)}$$

nach Gleichung (11.77) oder Gleichung (11.55) folgt

$$\begin{pmatrix} \hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \end{pmatrix} \Psi_{a}^{(+)} = \hat{T} \Phi_{a} = \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \Phi_{a} + \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + i\epsilon} \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \Phi_{a} ,$$

$$\Psi_{a}^{(+)} = \Phi_{a} + \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + i\epsilon} \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \Phi_{a} .$$
(11.81)

also

Wir wenden die gleiche Prozedur auf $\phi_a^{(+)}$ von Gleichung (11.80) an: für $\hat{V} = \hat{V}_B$ lautet Gleichung (11.78)

$$\hat{T} = \hat{V}_B + \hat{V}_B \frac{1}{E_a - \hat{H} + \imath \epsilon} \hat{V}_B \,.$$

Damit ist

$$\hat{T}\Phi_{a} = \hat{V}_{B}\phi_{a}^{(+)} = \hat{V}_{B}\Phi_{a} + \hat{V}_{B}\frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon}\hat{V}_{B}\Phi_{a} ,$$

$$\phi_{a}^{(+)} = \Phi_{a} + \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon}\hat{V}_{B}\Phi_{a} .$$
(11.82)

also

Wir bilden die Differenz der Gleichungen (11.81) und (11.82) und erhalten mit der Operator-Identität

$$\hat{A}^{-1} - \hat{B}^{-1} \equiv \hat{A}^{-1} \left(\hat{B} - \hat{A} \right) \hat{B}^{-1}$$
$$= \hat{A}^{-1} \left(\hat{B} \hat{B}^{-1} \right) - \left(\hat{A}^{-1} \hat{A} \right) \hat{B}^{-1}$$
$$= \hat{A}^{-1} - \hat{B}^{-1}$$

das Ergebnis

$$\begin{split} \Psi_{a}^{(+)} - \phi_{a}^{(+)} &= \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \left(\hat{V}_{A} + \hat{V}_{B} \right) \Phi_{a} - \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{B} \Phi_{a} \\ &= \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{A} \Phi_{a} \\ &+ \left(\frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} - \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \right) \hat{V}_{B} \Phi_{a} \\ &= \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{A} \Phi_{a} + \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \\ &\times \left(E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} - \left[E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \right] \right) \\ &\times \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} + \imath\epsilon} \hat{V}_{B} \Phi_{a} \\ &= \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{A} \Phi_{a} \\ &+ \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{A} \Phi_{a} \\ &= \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{A} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{A} \left[\Phi_{a} + \frac{1}{E_{a} - \hat{H}_{0} - \hat{V}_{B} + \imath\epsilon} \hat{V}_{B} \Phi_{a} \right] . (11.83) \end{split}$$

Für die eckige Klammer in dieser Gleichung verwenden wir Gleichung (11.82), so dass

$$\Psi_a^{(+)} = \phi_a^{(+)} + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 - \hat{V}_A - \hat{V}_B + i\epsilon} \hat{V}_A \phi_a^{(+)} , \qquad (11.84)$$

oder die dazu äquivalente Beziehung (Beweis durch Umkehrung des Schritts zu Beziehung (11.82))

$$\Psi_a^{(+)} = \phi_a^{(+)} + \frac{1}{E_a - \hat{H}_0 - \hat{V}_B + i\epsilon} \hat{V}_A \Psi_a^{(+)} .$$
(11.85)

Gleichung (11.85) liefert die auslaufende Welle $\Psi_a^{(+)}$, die bei der Streuung der Welle $\phi_a^{(+)}$ am Potential \hat{V}_A entstehet; die Welle $\phi_a^{(+)}$ ist Lösung der Gleichung (11.80). Der erste Summand in Gleichung (11.76)

$$T_{ba}(A) \equiv \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_A | \Psi_a^{(+)} \rangle$$
(11.86)

gibt daher die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Streuung am Potential \hat{V}_A an von Wellen, die bereits am Potential \hat{V}_B gestreut (*verzerrt*) worden sind.

11.7.1 Verzerrte Wellen-Näherung

Die bisher abgeleiteten Beziehungen sind alle exakt und ohne vereinfachende Annahmen. In der sog. *distorted wave approximation*, also der *verzerrten Wellen-Näherung*, ersetzt man

im Matrixelement (11.86) die auslaufende Welle $\Psi_a^{(+)}$ bei der Streuung der Wellen $\phi_a^{(+)}$ am Potential \hat{V}_A durch deren nullte Näherung

$$\Psi_a^{(+)} \simeq \phi_a^{(+)} , \qquad (11.87)$$

mit dem Ergebnis

$$T_{ba}^{\rm dis}(A) = \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_A | \phi_a^{(+)} \rangle \quad . \tag{11.88}$$

In diesem Matrixelement stehen als Funktion des Anfangs- und Endzustands keine ebenen Wellen wie in der Bornschen Näherung, sondern die Lösungen der Gleichungen (11.75) und (11.80), die die "Verzerrung" der Wellenfunktionen der Anfangs- und Endzustände aufgrund der Streuung am zweiten Potential \hat{V}_B enthalten.

Es ist wesentlich, dass die Funktion $\phi_b^{(-)}$ in den Gleichungen (11.86) und (11.88), die dem Endzustand Φ_b entspricht, eine Lösung der Integralgleichung (11.75) ist. Die Funktion $\phi_b^{(-)}$ wird daher asymptotisch durch die Überlagerung der ebenen Welle des Endzustands Φ_b und einer einlaufenden Kugelwelle dargestellt, die von der Wirkung des Potentials \hat{V}_B stammt.

Gehört der Operator \hat{V}_B zur Coulomb-Wechselwirkung, dann ist die Gleichung (11.75) exakt lösbar (Übungsaufgabe). Das zweite Potential kann dann mit der Approximation (11.88) oder exakt durch Lösung der Integralgleichung (11.85) behandelt werden.

Das vollständige Matrixelement für den Übergang $a \rightarrow b$ ist nach den Beziehungen (11.76), (11.79) und (11.86)

$$T_{ba} = \langle \Phi_b | \hat{V}_B | \phi_a^{(+)} \rangle + \langle \phi_b^{(-)} | \hat{V}_A | \Psi_a^{(+)} \rangle , \qquad (11.89)$$

oder mit der verzerrten Wellen-Näherung

$$T_{ba} \simeq <\Phi_b |\hat{V}_B|\phi_a^{(+)}> + <\phi_b^{(-)}|\hat{V}_A|\phi_a^{(+)}>, \qquad (11.90)$$

wobei die Funktion $\phi_a^{(+)}$ der Integralgleichung (11.82) genügt.

12 Relativistische Quantenmechanik

Die Beschreibung von quantenmechanischen Phänomenen bei hoher Energie erfordert die Betrachtung relativistischer Wellengleichungen. Diese Gleichungen müssen kovariant sein, d.h. invariant unter Lorentz-Transformation zwischen Inertialsystemen.

Als Grundlage der speziellen Relativitätstheorie (siehe Kap. 7 Mechanik-Skript) stellte Einstein zwei Postulate auf:

- I In allen gleichförmig gegeneinander bewegten Systemen gelten die gleichen Naturgesetze.
- II Die Geschwindigkeit des Lichts hat in allen gleichförmig gegeneinander bewegten Systemen den gleichen Betrag, unabhängig von der Geschwindigkeit der Quelle relativ zum Beobachter.

Postulat I heißt, dass wir die Naturgesetze kovariant formulieren müssen.

Aus Postulat II folgt, dass der Ubergang zwischen zwei Systemen durch die Lorentztransformation beschrieben wird.

12.1 Die Lorentz-Transformation

Man denke sich zwei Bezugssysteme K und K', die sich in x-Richtung mit einer konstanten Relativgeschwindigkeit \vec{V} zueinander bewegen. Aufgrund der Isotropie des Raums ist keine Richtung besonders ausgezeichnet, so dass wir die x-Achse parallel zu $\vec{V} = \beta c$ wählen können.

Wie in der Mechanik-Vorlesung gezeigt, gilt für die Lorentz-Transformation

$$\begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} 1 & -\beta \\ -\beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix}$$
(12.1)

und

$$\begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ \beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} .$$
(12.2)

Im Grenzfall $\beta \ll 1$ folgt sofort mit $\gamma \simeq 1 + (\beta^2/2) \simeq 1$ aus Gleichung (12.1) die Galilei-Transformation $x^{'} \simeq x - Vt$ und $t^{'} \simeq t$.

Wir betrachten zunächst die Invarianz der skalaren Wellengleichung

$$\vec{\nabla}^2 \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi = 0 \tag{12.3}$$

12 Relativistische Quantenmechanik

bei Lorentz-Transformation. Es gilt für die partiellen Ableitungen

$$\begin{array}{lll} \displaystyle \frac{\partial}{\partial x} & = & \displaystyle \frac{\partial x'}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x'} + \displaystyle \frac{\partial t'}{\partial x} \frac{\partial}{\partial t'} = \gamma \frac{\partial}{\partial x'} - \displaystyle \frac{V\gamma}{c^2} \frac{\partial}{\partial t'} \ , \\ \displaystyle \frac{\partial}{\partial t} & = & \displaystyle \frac{\partial x'}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x'} + \displaystyle \frac{\partial t'}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} = -V\gamma \frac{\partial}{\partial x'} + \gamma \frac{\partial}{\partial t'} \ , \\ \displaystyle \frac{\partial}{\partial y} & = & \displaystyle \frac{\partial}{\partial y'} \ , \qquad \quad \frac{\partial}{\partial z} = \displaystyle \frac{\partial}{\partial z'} \ . \end{array}$$

Damit folgt

$$\begin{split} \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2}{\partial y'^2} , \qquad \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial z'^2} , \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \left(\gamma \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{V\gamma}{c^2} \frac{\partial}{\partial t'}\right) \left(\gamma \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{V\gamma}{c^2} \frac{\partial}{\partial t'}\right) \\ &= \gamma^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{V^2 \gamma^2}{c^4} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} - 2 \frac{V\gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x' \partial t'} \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} &= \left(\gamma \frac{\partial}{\partial t'} - V\gamma \frac{\partial}{\partial x'}\right) \left(\gamma \frac{\partial}{\partial t'} - V\gamma \frac{\partial}{\partial x'}\right) \\ &= \gamma^2 \frac{\partial^2}{\partial t'^2} + V^2 \gamma^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - 2\gamma^2 V \frac{\partial^2}{\partial x' \partial t'} . \end{split}$$

und

Mit den beiden letzten Ergebnissen folgt

$$\begin{split} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &- \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} &= \gamma^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{V^2 \gamma^2}{c^4} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} - 2 \frac{V \gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x' \partial t'} \\ &- \frac{\gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} - \frac{V^2 \gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{2\gamma^2 V}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x' \partial t'} \\ &= \gamma^2 \left(1 - \frac{V^2}{c^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \left(\frac{V^2}{c^2} - 1 \right) \frac{\gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \,. \end{split}$$

Damit ist die Forminvarianz der skalaren Wellengleichung bei Lorentz-Transformation bewiesen.

12.2 Minkowski-Raum

Die Prüfung physikalischer Gesetze auf Kovarianz, d.h. auf Forminvarianz gegenüber der Lorentz-Transformation, wird sehr erleichtert, wenn man formal eine vierte Koordinate ct einführt. Der *Minkowski-Raum* (auch als *Welt-Raum* bezeichnet) besteht dann aus den drei Dimensionen des gewöhnlichen Ortsraums und einer vierten Dimension, die proportional zur Zeit t ist.

Ein Punkt in diesem vier-dimensionalen Raum erhält dann eine Darstellung in

kontravarianten Komponenten:
$$(x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, x, y, z)$$
 (12.4)

und eine Darstellung in

kovarianten Komponenten:
$$(x_0, x_1, x_2, x_3) \equiv (ct, -x, -y, -z)$$
, (12.5)

die durch Stellung der Indizes unterschieden werden. Ein Vektor im Minkowski-Raum mit griechischen Indizes erhält die Bezeichnung

$$(x_{\mu}) \equiv (x_0, x_1, x_2, x_3)$$
, $(x^{\mu}) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3)$.

Man verwendet die Einsteinsche Summenkonvention, dass in einem Produkt über gleiche griechische Indizes automatisch über diese von 0 bis 3 summiert wird, d.h.

$$x_{\mu}x^{\mu} \equiv \sum_{\mu=0}^{3} x_{\mu}x^{\mu} \, .$$

Eine weitere Konvention ist, dass bei gleichen römischen Indizes automatisch über diese nur von 1 bis 3 summiert wird.

Zwischen den kovarianten und kontravarianten Komponenten besteht die Beziehung

$$(x^{\mu}) = \begin{pmatrix} x^{0} \\ x^{1} \\ x^{2} \\ x^{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0} \\ x_{1} \\ x_{2} \\ x_{3} \end{pmatrix} \equiv (g^{\mu\nu}x_{\nu}) .$$
(12.6)

Das Quadrat des Abstands im Minkowski-Raum wird definiert durch

$$\tau^2 \equiv \frac{1}{c^2} x_\mu x^\mu \;. \tag{12.7}$$

Gemäß Gleichung (12.6) gilt

$$\tau^2 = \frac{1}{c^2} x_\mu g^{\mu\nu} x_
u ,$$

d.h $g^{\mu\nu}$ definiert den Abstand und wird daher *metrischer Tensor* oder einfach *Metrik* genannt.

Gehen wir jetzt auf infinitesimale Abstände über, so ist das Quadrat des Abstands von zwei nahe benachbarten Ereignissen durch

$$\left(d\tau^{2}\right) = \frac{1}{c^{2}}\left(dx_{\mu}\right)\left(dx^{\mu}\right) = \frac{1}{c^{2}}\left[c^{2}(dt)^{2} - (dx)^{2} - (dy)^{2} - (dz)^{2}\right] .$$
(12.8)

Für $ds = cd\tau = 0$ ist ebenfalls auch $ds' = cd\tau' = 0$ im relativ bewegten System erfüllt. Es folgt, dass ds = ads', und weil weder das ruhende noch das bewegte System ausgezeichnet sind, auch ds' = ads. Daher muss $a^2 = 1$ oder a = 1 sein und

$$ds = cd\tau = ds' = cd\tau' \tag{12.9}$$

ist invariant unter Lorentz-Transformation.

Zur anschaulichen Bedeutung von Gleichung (12.7) bemerken wir, dass im Ursprung des Koordinatensystems

$$\tau^{2} = \frac{1}{c^{2}} x_{\mu} x^{\mu} = \frac{1}{c^{2}} \left[c^{2} t^{2} - (x=0)^{2} - (y=0)^{2} - (z=0)^{2} \right] = t^{2}$$
(12.10)

ist, d.h. τ entspricht der systemeigenen Zeit (*Eigenzeit, Weltzeit*). Mit diesen Bezeichnungen gilt

$$x_{\mu}x^{\mu} = x'_{\mu}x^{'\mu} \tag{12.11}$$

und die Lorentztransformation lautet

 Λ^{ν}_{μ}

$$x'_{\mu} = \Lambda^{\nu}_{\mu} x_{\nu} , \qquad (12.12)$$

mit

$$= \begin{pmatrix} \gamma & \beta & \gamma & 0 & 0 \\ \beta \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$
(12.13)

12.2.1 Vierer-Skalare, Vierer-Vektoren und Vierer-Tensoren

In Analogie zur Definition von Skalaren, Vektoren und Tensoren im dreidimensionalen Ortsraum definieren wir einen Vierer-Vektor (oder einen Tensor 1. Ordnung) als eine Menge von vier Komponenten, die sich gemäß Gleichung (12.12) transformieren, also das gleiche Transformationsverhalten zeigen wie der Vierer-Ortsvektor (12.4).

Ebenso ist ein Vierer-Tensor 2. Ordnung eine Größe mit 16 Komponenten, die sich gemäß

$$T'_{\mu\nu}\left(x'_{\mu}\right) = \Lambda^{\alpha}_{\mu}\Lambda^{\eta}_{\nu}T_{\alpha\eta}\left(x_{\mu}\right) \tag{12.14}$$

transformiert. Ein Vierer-Skalar ist demnach ein Vierer-Tensor 0. Ordnung und ist invariant unter Lorentz-Transformation, d.h.

$$S'\left(x'_{\mu}\right) = S\left(x_{\mu}\right) \ . \tag{12.15}$$

Das Abstandselement $(d\tau)^2$ ist ein Vierer-Skalar. Gemäß dieser Definitionen bilden

$$\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \equiv \partial^{\mu} = \left(\frac{1}{c}\partial_{t}, -\partial_{x}, -\partial_{y}, -\partial_{z}\right)$$
(12.16)

die kontravarianten Komponenten und

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \equiv \partial_{\mu} = \left(\frac{1}{c}\partial_t, \partial_x, \partial_y, \partial_z\right)$$
(12.17)

die kovarianten Komponenten eines Vierer-Vektors.

Wenn sich Vierer-Vektoren wie der Vierer-Ortsvektor transformieren, dessen Abstandselement ein Vierer-Skalar ist, dann ist auch das Skalarprodukt eines beliebigen Vierer-Vektors $Q_{\mu} = (Q_0 - Q_x, -Q_y, -Q_z)$ mit sich selbst ebenfalls invariant unter Lorentztransformation, d.h.

$$Q^{2} = Q_{\mu}Q^{\mu} = Q_{0}^{2} - Q_{1}^{2} - Q_{2}^{2} - Q_{3}^{2} = const .$$
 (12.18)

Ebenfalls folgt für zwei Vierer-Vektoren Q_{μ} und R_{μ} mit Gleichung (12.18)

$$(Q_{\mu} + R_{\mu})^2 = Q_{\mu}Q^{\mu} + 2Q_{\mu}R^{\mu} + R_{\mu}R^{\mu} = Q^2 + R^2 + 2Q_{\mu}R^{\mu} = const ,$$

dass das Skalarprodukt

$$Q_{\mu}R^{\mu} = Q'_{\mu}R'^{\mu} . \qquad (12.19)$$

invariant ist.

Gelingt es, die physikalischen Gesetze mithilfe von Vierer-Tensoren gleicher Ordnung zu formulieren, ist die Kovarianz besonders leicht zu erkennen.

12.2.2 Freies Teilchen

Es seien ein Inertialsystem K und ein bewegtes Teilchen vorgegeben, das sich mit der momentanen Geschwindigkeit \vec{v} relativ zu K bewegt. Es sei weiter K_0 das momentane Ruhesystem des Teilchens, wobei wir die Achsen des Bezugssystem K_0 parallel zu denen von K wählen. Die Verknüpfung dieser beiden Systeme ist dann durch die Lorentztransformation (12.12) zur Geschwindigkeit $\vec{V} = \vec{v}$ gegeben. Es gilt dann

$$(d\tau)^2 = \frac{1}{c^2} \left[c^2 (dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2 \right]$$

= $\frac{(dt)^2}{c^2} \left[c^2 - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 - \left(\frac{dz}{dt}\right)^2 \right]$
= $(dt)^2 \frac{c^2 - v^2}{c^2} = \frac{(dt)^2}{\gamma^2} ,$

oder für die Vierer-Invariante

$$d\tau = \frac{dt}{\gamma} , \qquad (12.20)$$

mit dem monentanen Lorentzfaktors des Teilchens

$$\gamma = \left(1 - \beta^2\right)^{-1/2} = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \,. \tag{12.21}$$

Das Äquivalenzpostulat erfordert die Gültigkeit der physikalischen Gesetze in allen Inertialsystemen, d.h. diese dürfen sich der Form nach unter einer Lorentz-Transformation nicht ändern.

Deshalb ist es erforderlich, die Teilchen-Geschwindigkeiten als Ableitung des Vierer-Ortsvektors x_{μ} nach der Eigenzeit τ darzustellen:

$$u^{\mu} = \frac{dx^{\mu}}{d\tau} = \gamma \left(c, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z} \right) = \gamma c \left(1, \beta_x, \beta_y, \beta_z \right) . \tag{12.22}$$

Da diese die Ableitung des Vierer-Ortsvektors x_{μ} nach der Invarianten τ ist, ist sie deshalb selbst wieder ein Vierer-Vektor. Es gilt

$$u_{\mu}u^{\mu} = \gamma^{2} \left[c^{2} - \left(\dot{x}^{2} + \dot{y}^{2} + \dot{z}^{2}\right)\right] = \gamma^{2} \left[c^{2} - v^{2}\right] = c^{2} .$$
 (12.23)

12 Relativistische Quantenmechanik

Wir definieren den Vierer-Impuls als

$$p^{\mu} = m u^{\mu} = \gamma m \left(c, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z} \right) . \tag{12.24}$$

Die Ortskomponenten

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \simeq m\vec{v} \left(1 + \frac{v^2}{2c^2}\right) \simeq m\vec{v}$$
(12.25)

ergeben im Grenzfall $\beta = v/c \rightarrow 0$ den bekannten Linear-Impuls $m\vec{v}$. Wir definieren die relativistische Energie des freien Teilchens als

$$E = \gamma mc^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \,. \tag{12.26}$$

Damit ist dann $\gamma mc = E/c$ und der Vierer-Impuls (12.24) ist

$$p^{\mu} = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z\right), \qquad (12.27)$$
$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) = m\gamma \vec{v}.$$

mit

Nach Gleichung (12.23) ist dann

$$p_{\mu}p^{\mu} = m^{2}u_{\mu}u^{\mu} = \frac{E^{2}}{c^{2}} - p^{2}$$

$$= \frac{m^{2}c^{4}\gamma^{2}}{c^{2}} - m^{2}\gamma^{2}v^{2}$$

$$= m^{2}\gamma^{2} (c^{2} - v^{2}) = m^{2}c^{2} = const. \qquad (12.28)$$

$$E^{2} = m^{2}c^{4} + p^{2}c^{2}. \qquad (12.29)$$

(12.29)

oder

Im Grenzfall $\beta = v/c \rightarrow 0$ geht die relativistische Teilchenenergie (12.26) gegen

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \simeq mc^2 \left(1 + \frac{\beta^2}{2} + \frac{3\beta^4}{8} + ...\right)$$

$$\simeq mc^2 + \frac{mv^2}{2} + \frac{3mv^4}{8c^2}.$$
 (12.30)

Der zweite Term entspricht der klassischen kinetischen Energie, der erste dominierende Term mc^2 ist eine Konstante. Da aber in der klassischen Mechanik nur Änderungen der Energie physikalisch signifikant sind (siehe Lagrange-Gleichung), hat der konstante Term mc^2 dort keine Auswirkungen. Übrig bleibt die kinetische Energie

$$T = (\gamma - 1) mc^2 \simeq \frac{mv^2}{2} + \frac{3mv^4}{8c^2} . \qquad (12.31)$$

12.3 Die Dirac-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung wurde aus der klassischen Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$$
 (12.32)

durch den korrespondenzmäßigen Übergang

$$E \to \imath \hbar \frac{\partial}{\partial t} , \qquad \vec{p} \to -\imath \hbar \vec{\nabla}$$
 (12.33)

abgeleitet, wobei Gleichung (12.32) als Operatorgleichung aufgefasst wurde, die auf die Wellenfunktion Ψ wirkt (siehe Kap. 2.1).

Die Klein-Gordon-Gleichung erhielten wir auf demselben Weg, wobei wir von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (12.29) ausgehen (siehe Gleichung (2.6)).

Die relativistische Energie-Impuls-Beziehung lässt sich nach Gleichung (12.28) schreiben als

$$p_{\mu}p^{\mu} - m^2 c^2 = 0. \qquad (12.34)$$

Das Korrespondenzprinzip (12.33) braucht keine relativistische Modifikation. Mit 4-Vektor-Notation ist es

$$p_{\mu} \to \imath \hbar \partial_{\mu} = \imath \hbar \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} , \qquad (12.35)$$

gleichbedeutend mit

$$\left(\frac{E}{c}, -\vec{p}\right) \to \imath\hbar \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right) \ . \tag{12.36}$$

Die Klein-Gordon-Gleichung wurde zunächst zurückgewiesen, da sie als Gleichung 2. Ordnung in der Zeit unvereinbar war mit der statistischen Interpretation. Deshalb hat Dirac versucht, eine Gleichung zu finden, die 1. Ordnung in der Zeit t ist und trotzdem konsistent mit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (12.35) ist.

1934 haben Pauli und Wreisskopf gezeigt, dass die statistische Interpretation in der relativistischen Quantenfeldtheorie nicht anwendbar ist, weil eine relativistische Theorie Paarproduktion und Paarvernichtung berücksichtigen muss, so dass die Zahl der Teilchen keine Erhaltungsgröße mehr ist. Seitdem beschreibt die Klein-Gordon-Gleichung Spin 0-Teilchen und die Dirac-Gleichung Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen.

Dirac's Ansatz war die Faktorisierung der Energie-Impuls-Beziehung (12.34) in zwei Faktoren. Dies wäre leicht, wenn wir nur p^0 hätten, wenn also $\vec{p} = 0$ wäre. Dann gilt

$$(p^{0})^{2} - m^{2}c^{2} = (p^{0} - mc)(p^{0} + mc) = 0$$

und beide Gleichungen 1. Ordnung

 $p^0 - mc = 0$, $p^0 + mc = 0$

würden garantieren, dass $p_{\mu}p^{\mu} - m^2c^2 = 0.$

Im Fall $\vec{p} \neq 0$ ist es aber schwieriger. Wir suchen nach einem Ausdruck der Form

$$0 = p^{\mu}p_{\mu} - m^2c^2 = \left(\beta^{\kappa}p_{\kappa} + mc\right)\left(\gamma^{\lambda}p_{\lambda} - mc\right) , \qquad (12.37)$$

wobei β^{κ} und γ^{λ} Koeffizienten sind, die zu bestimmen sind. Ausgeschrieben lautet der Ausdruck (12.37)

$$(p^{0})^{2} - (p^{1})^{2} - (p^{2})^{2} - (p^{3})^{2} - m^{2}c^{2}$$

$$= (\beta^{0}p^{0} - \beta^{1}p^{1} - \beta^{2}p^{2} - \beta^{3}p^{3} + mc)$$

$$\times (\gamma^{0}p^{0} - \gamma^{1}p^{1} - \gamma^{2}p^{2} - \gamma^{3}p^{3} - mc) .$$

Nach Ausmultiplizieren der rechten Seite von Gleichung (12.37) finden wir demnach

$$p^{\mu}p_{\mu} = \beta^{\kappa}\gamma^{\lambda}p_{\kappa}p_{\lambda} - mc\left(\beta^{\kappa}p_{\kappa} - \gamma^{\lambda}p_{\lambda}\right)$$
$$= \beta^{\kappa}\gamma^{\lambda}p_{\kappa}p_{\lambda} - mc\left(\beta^{\kappa} - \gamma^{\kappa}\right)p_{\kappa}, \qquad (12.38)$$

wobei wir im zweiten Term den Summationsindex λ auch in κ umbenennen. Damit der Term linear in p_{κ} auf der rechten Seite verschwindet, fordern wir für die Koeffizienten

$$\beta^{\kappa} = \gamma^{\kappa} . \tag{12.39}$$

Eingesetzt in Gleichung (12.38) erhalten wir

$$p^{\mu}p_{\mu} = \gamma^{\kappa}\gamma^{\lambda}p_{\kappa}p_{\lambda} ,$$

oder ausgeschrieben

$$(p^{0})^{2} - (p^{1})^{2} - (p^{2})^{2} - (p^{3})^{2}$$

$$= (\gamma^{0})^{2} (p^{0})^{2} + (\gamma^{1})^{2} (p^{1})^{2} + (\gamma^{2})^{2} (p^{2})^{2} + (\gamma^{3})^{2} (p^{3})^{2}$$

$$+ (\gamma^{0}\gamma^{1} + \gamma^{1}\gamma^{0}) p_{0}p_{1} + (\gamma^{0}\gamma^{2} + \gamma^{2}\gamma^{0}) p_{0}p_{2} + (\gamma^{0}\gamma^{3} + \gamma^{3}\gamma^{0}) p_{0}p_{3}$$

$$+ (\gamma^{1}\gamma^{2} + \gamma^{2}\gamma^{1}) p_{1}p_{2} + (\gamma^{1}\gamma^{3} + \gamma^{3}\gamma^{1}) p_{1}p_{3} + (\gamma^{2}\gamma^{3} + \gamma^{3}\gamma^{2}) p_{2}p_{3} .$$

Die γ^{κ} können **nicht** einfache Zahlen sein, z.B. $\gamma^0 = 1$ und $\gamma^1 = \gamma^2 = \gamma^3 = i$. Dann würden die Kreuzterme vor p_0p_1 usw. nicht wegfallen.

Dirac hatte die brilliante Idee, dass die γ^{κ} Matrizen sein könnten. Da Matrizen nicht kommutieren, können wir welche finden mit der Eigenschaft:

$$(\gamma^0)^2 = 1, \qquad (\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = -1$$
 (12.40)
 $\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 0, \qquad \text{für } \mu \neq \nu.$ (12.41)

und

Die Bedingungen (12.12) und (12.13) schreiben sich kurz mit dem Antikommutator

$$\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} \equiv [\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]_{+} = \gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu} , \qquad (12.42)$$

wobei $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$ der metrische Tensor (12.6) ist.

Man benötigt mindestens 4×4 -Matrizen. Die Standardwahl ist die *Bjorken-Drell-Konvention*

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \qquad \gamma^{i} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{i}\\ -\sigma_{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (12.43)$$

mit der 2×2 -Einheitsmatrix

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{12.44}$$

und den Pauli-Spin-Matrizen (7.144)

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
(12.45)

Rechnen wir zum Beispiel einen Teil der Bedingung (12.42) mit dieser Wahl nach, so ist

$$\begin{split} \gamma^{i}\gamma^{j} + \gamma^{i}\gamma^{j} &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{i} \\ -\sigma^{i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{j} \\ -\sigma^{j} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{j} \\ -\sigma^{j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{i} \\ -\sigma^{i} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\sigma^{i}\sigma^{j} & 0 \\ 0 & -\sigma^{i}\sigma^{j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\sigma^{j}\sigma^{i} & 0 \\ 0 & -\sigma^{j}\sigma^{i} \end{pmatrix} \\ &= -\begin{pmatrix} \sigma^{i}\sigma^{j} + \sigma^{j}\sigma^{i} & 0 \\ 0 & \sigma^{i}\sigma^{j} + \sigma^{j}\sigma^{i} \end{pmatrix} \\ &= -\begin{pmatrix} 2\delta_{i,j} & 0 \\ 0 & 2\delta_{i,j} \end{pmatrix} = -2\delta_{i,j}\hat{1} = 2g^{ij} \,. \end{split}$$

Q.E.D.

Als eine 4×4 -Matrix faktorisiert die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (12.37) zu

$$p^{\mu}p_{\mu} - m^2c^2 = \left(\gamma^k p_k + mc\right)\left(\gamma^{\lambda}p_{\lambda} - mc\right) = 0.$$
 (12.46)

Wir wählen einen der beiden Faktoren aus (es ist egal welchen, aber die Standardwahl ist der zweite Faktor):

$$\gamma^{\mu} p_{\mu} - mc = 0 , \qquad (12.47)$$

fassen diese Gleichung als Operator-Gleichung auf, wobei wir nach dem Korrespondenzprinzip (12.35) substituieren. Das Ergebnis ist die Dirac-Gleichung für ein freies Teilchen:

$$\imath \hbar \gamma^{\mu} \partial_{\mu} \Psi - mc \Psi = 0 , \qquad (12.48)$$

wobei Ψ jetzt eine vier-komponentige Spalten-Matrix ist:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} . \tag{12.49}$$

Wir nennen diese vier-komponentige Spalten-Matrix *Dirac-Spinor*. Obwohl der Dirac-Spinor eine vier-komponentige Größe ist, ist er kein Vierer-Vektor!

12.4 Lösungen der freien Dirac-Gleichung

Wir betrachten zunächst einfache Lösungen der freien Dirac-Gleichung.

12.4.1 Ortunabhängige Lösungen

Wir nehmen zunächst an, dass der Dirac-Spinor ortsunabhängig ist:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0.$$

Dies entspricht nach dem Korrespondenzprinzip (12.36) Zuständen mit verschwindendem Impuls $\vec{p} = 0$. In diesem Fall reduziert sich die Dirac-Gleichung (12.48) auf

$$i\hbar\gamma^{0}\partial_{0}\Psi - mc\Psi = \frac{i\hbar}{c}\gamma^{0}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - mc\Psi = 0, \qquad (12.50)$$

oder mit γ^0 nach Beziehung (12.43)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix} = -i \frac{mc^2}{\hbar} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix} .$$
(12.51)

Wir führen die jeweils zwei-komponentigen Spalten-Matrizen

$$\Psi_A = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \qquad \Psi_B = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$
(12.52)

ein. Damit schreibt sich Gleichung (12.51)

$$\begin{pmatrix} \hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi_A}{\partial t}\\ \frac{\partial \Psi_B}{\partial t} \end{pmatrix} = -\imath \frac{mc^2}{\hbar} \begin{pmatrix} \Psi_A\\ \Psi_B \end{pmatrix} .$$
(12.53)

Wir erhalten die beiden Gleichungen

$$\frac{\partial \Psi_A}{\partial t} = -\imath \frac{mc^2}{\hbar} \Psi_A \tag{12.54}$$

und

und

$$\frac{\partial \Psi_B}{\partial t} = i \frac{mc^2}{\hbar} \Psi_B , \qquad (12.55)$$

mit den Lösungen

$$\Psi_A(t) = \Psi_A(0)e^{-\imath mc^2 t/\hbar} \tag{12.56}$$

$$\Psi_B(t) = \Psi_B(0)e^{+imc^2t/\hbar} .$$
 (12.57)

Für ein Teilchen in Ruhe ($\vec{p} = 0$) ist $E = mc^2$. Die Lösung (12.56) weist also die bekannte charakteristische Zeitabhängigkeit

$$\Psi_A \propto e^{-\imath E t/\hbar}$$

eines Quantenzustands mit der Energie E auf.

Die zweite Lösung (12.57) allerdings repräsentiert dann einen Zustand mit negativer Energie $E = -mc^2$. Wir interpretieren diese Lösungen mit negativer Energie als Anti-Teilchen mit positiver Energie. Wenn also Ψ_A zum Beispiel Elektronen beschreibt, dann beschreibt Ψ_B Positronen. Jede Wellenfunktion ist ein 2-Komponenten-Spinor, genau richtig für ein System aus Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen.

Die Dirac-Gleichung für $\vec{p} = 0$ ergibt also vier unabhängige Lösungen, die ohne Normierungsfaktoren lauten

$$\Psi^{1} = e^{-imc^{2}t/\hbar} \begin{pmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi^{2} = e^{-imc^{2}t/\hbar} \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{pmatrix},$$
$$\Psi^{3} = e^{+imc^{2}t/\hbar} \begin{pmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi^{4} = e^{+imc^{2}t/\hbar} \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{pmatrix}.$$
(12.58)

Diese beschreiben ein Elektron mit Spin-up, ein Elektron mit Spin-down, ein Positron mit Spin-up bzw. ein Positron mit Spin-down.

12.4.2 Ebene Wellen-Lösungen

Im ortsabhängigen Fall suchen wir nach ebenen Wellen-Lösungen der Form

$$\Psi(\vec{r},t) = a e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} u(E, \vec{p}) , \qquad (12.59)$$

$$\Psi(x) = ae^{-ix^{\mu}p_{\mu}/\hbar}u(p), \qquad (12.59)$$

$$\Psi(x) = ae^{-ix^{\mu}p_{\mu}/\hbar}u(p), \qquad (12.60)$$

oder kurz

mit der Normierungskonstanten a und $p = (\frac{E}{c}, \vec{p})$. Bei diesem Ansatz tritt die Ortsabhängigkeit nur im Exponenten der Exponentialfunktion auf, so dass

$$\partial_{\mu}\Psi = -\frac{\imath}{\hbar}p_{\mu}ae^{-\imath x^{\mu}p_{\mu}/\hbar}u(p)$$

Das Einsetzen in die Dirac-Gleichung (12.48) ergibt

$$i\hbar\gamma^{\mu}\left(-\frac{i}{\hbar}p_{\mu}ae^{-ix^{\mu}p_{\mu}/\hbar}u(p)\right) - mcae^{-ix^{\mu}p_{\mu}/\hbar}u(p) = 0$$

oder die sog. Impulsraum-Dirac-Gleichung

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc) u = 0 , \qquad (12.61)$$

die eine rein algebraische Gleichung ohne Ableitungen ist. Es ist mit den Matrizen (12.43)–(12.45) und der Notation $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

$$\gamma^{\mu}p_{\mu} = \gamma^{0}p_{0} + \gamma^{i}p_{i} = \frac{E}{c} \begin{pmatrix} \hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} - \vec{p} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{c} & -\vec{p} \cdot \vec{\sigma}\\ \vec{p} \cdot \vec{\sigma} & -\frac{E}{c} \end{pmatrix} ,$$

12 Relativistische Quantenmechanik

so dass

$$S \qquad (\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc) u = \begin{pmatrix} \left(\frac{E}{c} - mc\right) & -\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{p} \cdot \vec{\sigma} & -\left(\frac{E}{c} + mc\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} \left(\frac{E}{c} - mc\right) u_A & -\vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_B \\ \vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_A & -\left(\frac{E}{c} + mc\right) u_B \end{pmatrix} = 0, \qquad (12.62)$$

wobei u_A und u_B wieder entsprechend Gleichung (12.52) definiert sind, d.h. der Index A bezieht sich auf die oberen zwei Komponenten des Dirac-Spinors und der Index B auf die unteren beiden. Wir erhalten die beiden Gleichungen

$$\left(\frac{E}{c} - mc\right)u_A = \vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_B ,$$

$$u_A = \frac{c}{E - mc^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_B$$
(12.63)

oder und

$$\left(\frac{E}{c} + mc\right)u_B = \vec{p} \cdot \vec{\sigma}u_A ,$$

$$u_B = \frac{c}{E + mc^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma}u_A . \qquad (12.64)$$

oder

Wir setzen Gleichung (12.64) in Gleichung (12.63) und finden

$$u_A = \frac{c^2}{E^2 - m^2 c^4} \left(\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \right)^2 u_A .$$
 (12.65)

Nun ist

$$\vec{p} \cdot \vec{\sigma} = p_i \sigma_i = p_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + p_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + p_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip_y \\ ip_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_z & 0 \\ 0 & -p_z \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}, \qquad (12.66)$$

so dass

$$(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_z^2 + (p_x - ip_y) (p_x + ip_y) & p_z (p_x - ip_y) - p_z (p_x - ip_y) \\ p_z (p_x + ip_y) - p_z (p_x + ip_y) & (p_x + ip_y) (p_x - ip_y) + p_z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_z^2 + p_x^2 + p_y^2 & 0 \\ 0 & p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \end{pmatrix} = \vec{p}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = p^2 \hat{1} .$$
 (12.67)

Für Gleichung (12.65) folgt

$$u_A = \frac{p^2 c^2}{E^2 - m^2 c^4} u_A \tag{12.68}$$

$$E^2 - m^2 c^4 = \vec{p}^2 c^2 , \qquad (12.69)$$

und

da die Lösung $u_A = 0$ ausgeschlossen ist.

Damit der ebene Wellen-Lösungsansatz (12.59) die Dirac-Gleichung erfüllt, müssen E und \vec{p} in diesem Ansatz die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (12.69) erfüllen. Das ist natürlich nicht überrachend, aber es ist bemerkenswert zu zeigen, wie die Dirac-Gleichung auf diese Forderung führt. Als eine Gleichung für die Energie E erlaubt Gleichung (12.69) die zwei Lösungen

$$E = E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$$

Die positive Wurzel beschreibt Teilchenzustände, die negative Wurzel Antiteilchenzustände.

Mit den Gleichungen (12.63), (12.64) und (12.66) konstruieren wir (ohne Normierungsfaktoren) vier unabhängige ebene Wellen-Lösungen der freien Dirac-Gleichung:

1. wir wählen

$$u_A = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$

und erhalten

$$u_B = \frac{c}{E + mc^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_z \\ p_x + ip_y \end{pmatrix}, \qquad (12.70)$$

2. für die Wahl

$$u_A = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$u_B = \frac{c}{E + mc^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y\\p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_x - ip_y\\-p_z \end{pmatrix}, \qquad (12.71)$$

3. wir wählen

$$u_B = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$

und erhalten

$$u_{A} = \frac{c}{E - mc^{2}} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E - mc^{2}} \begin{pmatrix} p_{z} & p_{x} - ip_{y} \\ p_{x} + ip_{y} & -p_{z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E - mc^{2}} \begin{pmatrix} p_{z} \\ p_{x} + ip_{y} \end{pmatrix}, \qquad (12.72)$$

4. für die Wahl

$$u_B = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$u_{A} = \frac{c}{E - mc^{2}} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E - mc^{2}} \begin{pmatrix} p_{z} & p_{x} - ip_{y} \\ p_{x} + ip_{y} & -p_{z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{c}{E - mc^{2}} \begin{pmatrix} p_{x} - ip_{y} \\ -p_{z} \end{pmatrix} .$$
(12.73)

In den Lösungen (12.70) und (12.71) müssen wir $E = E_+ = +\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ nehmen, da sonst die Lösungen u_B für $p \to 0$ singulär werden; offensichtlich sind dies die Teilchenlösungen. Aus dem gleichen Grund nehmen wir in den Lösungen (12.72) und (12.73) $E = E_- = -\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$. Diese Lösungen beschreiben Antiteilchenzustände.

12.4.3 Spinor-Normalisierung

Wir normieren die Spinoren (12.70)-(12.73) so, dass

$$u^+ u = \frac{2|E|}{c} , \qquad (12.74)$$

wobei u^+ den hermitesch konjugierten Spinor beschreibt, d.h. für

$$u = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \longrightarrow u^+ = \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \\ \gamma^* \\ \delta^* \end{pmatrix}$$

und es ist

$$u^{+}u = |\alpha|^{2} + |\beta|^{2} + |\gamma|^{2} + |\delta|^{2} . \qquad (12.75)$$

Die vier Lösungen (12.70)-(12.73) sind dann

$$u^{(1)} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E_+ + mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix}, \quad u^{(2)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{E_+ + mc^2} \\ \frac{c(-p_z)}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix}, \quad (12.76)$$

$$E_+ = +\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$$

mit

und

$$u^{(3)} = N \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E_- - mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E_- - mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(4)} = N \begin{pmatrix} \frac{c(p_x - ip_y)}{E_- - mc^2} \\ \frac{c(-p_z)}{E_- - mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (12.77)$$
$$E_- = -\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}.$$

mit

Als Beispiel normalisieren wir $u^{(1)}$: wir erhalten sofort

$$\begin{split} u^{(1)+} &= N^* \begin{pmatrix} 1\\ 0\\ \frac{cp_z}{E+mc^2}\\ \frac{c(p_x - ip_y)}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \\ u^{(1)}u^{(1)+} &= N^2 \left[1 + \frac{c^2 p_z^2}{(E+mc^2)^2} + \frac{c^2 \left(p_x^2 + p_y^2\right)}{(E+mc^2)^2} \right] \\ &= N^2 \left[1 + \frac{c^2 p^2}{(E+mc^2)^2} \right] \\ &= \frac{N^2}{(E+mc^2)^2} \left[E^2 + 2Emc^2 + m^2c^4 + c^2p^2 \right] \\ &= \frac{N^2}{(E+mc^2)^2} \left[2E^2 + 2Emc^2 \right] = \frac{2EN^2}{E+mc^2} \end{split}$$

so dass

Der Vergleich mit Forderung (12.74) ergibt

$$N^{2} = \frac{|E| + mc^{2}}{c}$$

$$N = \sqrt{\frac{|E| + mc^{2}}{c}}.$$
(12.79)

oder

Dieser Normierungsfaktor gilt auch für die anderen drei Spinoren (Übungsaufgabe).

12.4.4 Positron-Spinor

Im ebenen Wellen-Lösungsansatz (12.59) haben wir E und \vec{p} als mathematische Parameter aufgefasst, die physikalisch Energie und Impuls beschreiben. Dies ist auch richtig für die

(12.78)

12 Relativistische Quantenmechanik

Elektronen-Zustände $u^{(1)}$ und $u^{(2)}$. Jedoch in $u^{(3)}$ und $u^{(4)}$ kann E nicht die Positron-Energie darstellen. Alle freien Teilchen, auch Positronen, haben immer positive Energie. Wir müssen die Lösungen mit E_{-} als Anti-Teilchenzustände mit positiver Energie uminterpretieren. Um diese Lösungen ebenfalls mit der physikalischen Energie und dem physikalischen Impuls auszudrücken, ändern wir das Vorzeichen $E \rightarrow -E$ und $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ im Ansatz (12.59) für die Lösungen (3) und (4):

$$\Psi(\vec{r},t) = a e^{-\imath (Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} u(-E,-\vec{p}) .$$
(12.80)

Man schreibt v für die so resultierenden Positron-Zustände mit physikalischen Energien und Impulsen:

$$v^{(1)}(E,\vec{p}) = u^{(4)}(-E,-\vec{p}) = N \begin{pmatrix} \frac{c(p_x - ip_y)}{E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(12.81)
$$v^{(2)}(E,\vec{p}) = -u^{(3)}(-E,-\vec{p}) = -N \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E+mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} ,$$
(12.82)

und

(12.15)

jetzt natürlich mit der positiven physikalischen Energie
$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$$
.
Ab sofort werden wir Lösungen $u^{(3)}$ und $u^{(4)}$ nicht mehr erwähnen, sondern nur noch $u^{(1)}$
und $u^{(2)}$ (diese repräsentieren die zwei Spinzustände des Elektrons mit der Energie E und
dem Impuls \vec{p}) und $v^{(1)}$ und $v^{(2)}$ (diese repräsentieren die zwei Spinzustände des Positrons mit
der Energie E und dem Impuls \vec{p}). Während $u^{(1)}$ und $u^{(2)}$ der Impulsraum-Dirac-Gleichung

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc) u = 0$$

genügen, erfüllen $v^{(1)}$ und $v^{(2)}$ diese Gleichung für $(-p_{\mu})$, d.h.

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu} + mc)v = 0. \qquad (12.83)$$

(12.82)

12.5 Alternative Form der Dirac-Gleichung

Die freie Dirac-Gleichung (12.48) lautet

$$i\hbar \left(\gamma^0 \partial_0 \Psi + \gamma^1 \partial_1 \Psi + \gamma^2 \partial_2 \Psi + \gamma^3 \partial_3 \Psi\right) - mc\Psi = 0 \; .$$

Wir schreiben

$$\gamma^0 = \beta , \quad \gamma^i = \beta \alpha_i , \quad i = 1, 2, 3 ,$$
 (12.84)

mit den neuen 4×4 -Matrizen

$$\beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}.$$
(12.85)

Diese erfüllen nach Gleichung (12.42) die Relationen

$$\{\alpha_i, \alpha_k\} = \alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{i,k} ,$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 ,$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1 .$$
(12.86)

Die freie Dirac-Gleichung lautet dann

$$i\hbar\beta \frac{1}{c}\frac{\partial\Psi}{\partial t} + i\hbar\beta\alpha_i\frac{\partial\Psi}{\partial x^i} - mc\Psi = 0. \qquad (12.87)$$

Wir multiplizieren diese Gleichung mit der Matrix β und erhalten mit den Relationen (12.86)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\alpha_i\frac{\partial\Psi}{\partial x^i} + \beta mc^2\Psi \equiv \hat{H}_D\Psi , \qquad (12.88)$$

als alternative Form der freien Dirac-Gleichung mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}_D = c\alpha_i p_i + \beta mc^2 = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 = \frac{\hbar c}{\imath} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2 , \qquad (12.89)$$

nach der korrespondenzmässigen Ersetzung $\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{\imath} \vec{\nabla}$.

Ist das Teilchen mit der Ladung e einem elektromagnetischen Feld mit dem Vierer-Potential $A^{\mu} = (\Phi, \vec{A})$ ausgesetzt, wird die Kopplung durch die eichinvariante Substitution

$$p^{\mu} \to p^{\mu} - \frac{e}{c} A^{\mu} \tag{12.90}$$

beschrieben mit den Konsequenzen

$$\hat{H}_D \to \hat{H}_D - e\Phi$$
, $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$. (12.91)

Für den Hamilton-Operator (12.89) folgt dann für Teilchen im elektromagnetischen Feld

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi . \qquad (12.92)$$

12.5.1 Erhaltungsgrößen für das freie Fermiteilchen

Der Hamilton-Operator (12.89) für ein freies Teilchen vertauscht mit sich selbst und dem Impulsoperator \vec{p} . Deshalb sind Energie sowie Impulsbetrag und Impulskomponenten Erhaltungsgrößen.

Keine Erhaltungsgrößen sind jedoch sowohl Betrag als auch Komponenten des Bahndrehimpulses $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Etwa für $L_x = yp_z - zp_y$ erhalten wir nach Gleichung (6.14) im

12 Relativistische Quantenmechanik

Heisenberg-Bild

$$i\hbar \frac{dL_x}{dt} = \left[\hat{L}_x, \hat{H}_D\right] = c \left[yp_z - zp_y, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}\right]$$
$$= c \left((yp_z - zp_y) \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z\right) - \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z\right) \left(yp_z - zp_y\right)\right)$$
$$= i\hbar c \left(\alpha_x \partial_x + \alpha_y \partial_y + \alpha_z \partial_z\right) \left(yp_z - zp_y\right)$$
$$= i\hbar c \left(\alpha_y p_z - \alpha_z p_y\right), \qquad (12.93)$$

also

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = c\vec{\alpha} \times \vec{p}. \qquad (12.94)$$

Der Bahndrehimpuls ist also keine Erhaltungsgröße in der relativistischen Quantenmechanik. Weiter ist mit Gleichung (12.93)

$$\begin{bmatrix} \hat{L}_x^2, \hat{H}_D \end{bmatrix} = \hat{L}_x \begin{bmatrix} \hat{L}_x, \hat{H}_D \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{L}_x, \hat{H}_D \end{bmatrix} \hat{L}_x$$

$$= \imath \hbar c \hat{L}_x (\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) + \imath \hbar c (\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \hat{L}_x$$

$$= \imath \hbar c \alpha_y (\hat{L}_x p_z + p_z \hat{L}_x) - \imath \hbar c \alpha_z (\hat{L}_x p_y + p_y \hat{L}_x)$$

$$= \imath \hbar c \alpha_y (2 \hat{L}_x p_z - \hat{L}_x p_z + p_z \hat{L}_x)$$

$$-\imath \hbar c \alpha_z (2 \hat{L}_x p_y - \hat{L}_x p_y + p_y \hat{L}_x)$$

$$= \imath \hbar c \alpha_y (2 \hat{L}_x p_z - \imath \hbar p_y) - \imath \hbar c \alpha_z (2 \hat{L}_x p_y + \imath \hbar p_z)$$

$$= 2\imath \hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})_x \hat{L}_x + \hbar^2 c (\alpha_y p_y + \alpha_z p_z) , \qquad (12.95)$$

$$\frac{d \hat{\vec{L}}^2}{dt} = \frac{1}{\imath \hbar} [\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}_D]$$

also

$$= \frac{1}{\imath\hbar} \left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}_D \right]$$

= $2c \left(\vec{\alpha} \times \vec{p} \right) \cdot \hat{\vec{L}} - 2\imath\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}.$ (12.96)

Auch das Betragsquadrat des Bahndrehimpulses ist keine Erhaltungsgröße in der relativistischen Quantenmechanik.

Betrachten wir allerdings den Gesamtdrehimpulsoperator $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$, so ist dieser in dessen Komponenten und dessen Betragsquadrat Erhaltungsgröße in der relativistischen Quantenmechanik, wenn wir in Anlehnung an den zweikomponentigen Fall (7.144) den Spin-Operator durch

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} & 0\\ 0 & \hat{\vec{\sigma}} \end{pmatrix}$$
(12.97)

definieren. Gemäß Gleichung (12.85b) erfüllt dieser Operator (12.97) gerade die Vertauschungsbeziehung (Übungsaufgabe)

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\vec{S}} , \hat{H}_D \right] = -c\vec{\alpha} \times \vec{p} , \qquad (12.98)$$
so dass zusammen mit Gleichung (12.94)

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = 0 \tag{12.99}$$

der Gesamtdrehimpuls Erhaltungsgröße ist. Für Spin 1/2-Teilchen impliziert die Dirac-Gleichung gerade die Vertauschbarkeit des Gesamtdrehimpulses mit dem relativistischen Hamilton-Operator und damit den Gesamtdrehimpuls als Erhaltungsgröße. Innerhalb der relativistischen Quantenmechanik begründet sich das Konzept des Spins aus der Anforderung an die Vertauschbarkeit des Betrags und der Komponenten des Gesamtdrehimpulses mit dem relativistischen Hamilton-Operator, was als großer Erfolg der Dirac-Theorie gewertet werden darf.

Während $\hat{\vec{L}}^2$ keine Erhaltungsgröße darstellt, ist $\hat{\vec{S}}^2$ der vierzeiligen Einheitsmatrix proportional

$$\hat{\vec{S}}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \hat{1} & 0\\ 0 & \hat{1} \end{pmatrix} , \qquad (12.100)$$

vertauscht daher mit dem Hamilton-Operator und stellt daher eine Erhaltungsgröße dar. Eine weitere Erhaltungsgröße für das freie Teilchen ist der Helizitäts-Operator

$$\hat{S}_p = \frac{\vec{p} \cdot \hat{\vec{S}}}{p} , \qquad (12.101)$$

der als Eigenwerte die Spinprojektionen auf die Richtung des Impulses besitzt.

12.5.2 Kontinuitätsgleichung und Zitterbewegung

Wir führen neben dem Dirac-Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

den hermitesch konjugierten Spinor

$$\Psi^{+} = \begin{pmatrix} \Psi_{1}^{*} \\ \Psi_{2}^{*} \\ \Psi_{3}^{*} \\ \Psi_{4}^{*} \end{pmatrix}$$
(12.102)

ein. Wir konjugieren die Dirac-Gleichung (12.88) und erhalten mit $\alpha_i^+ = \alpha_i$ und $\beta^+ = \beta$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^{+}}{\partial t} = -\frac{\hbar c}{i}\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial\Psi^{+}}{\partial x^{k}}\alpha_{k} + mc^{2}\Psi^{+}\beta. \qquad (12.103)$$

Wir multiplizieren diese Gleichung von rechts mit Ψ :

$$-\imath\hbar\frac{\partial\Psi^{+}}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar c}{\imath}\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial\Psi^{+}}{\partial x^{k}}\alpha_{k}\Psi + mc^{2}\Psi^{+}\beta\Psi.$$
 (12.104)

Ebenso multiplizieren wir Gleichung (12.88) von links mit Ψ^+ :

$$i\hbar\Psi^{+}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\sum_{k=1}^{3}\Psi^{+}\alpha_{k}\frac{\partial\Psi}{\partial x^{k}} + mc^{2}\Psi^{+}\beta\Psi.$$
 (12.105)

Die Differenz der Gleichungen (12.105) und (12.104) lautet dann

$$i\hbar \left(\Psi^{+} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{+}}{\partial t}\Psi\right) = \frac{\hbar c}{i} \sum_{k=1}^{3} \left(\Psi^{+} \alpha_{k} \frac{\partial \Psi}{\partial x^{k}} + \frac{\partial \Psi^{+}}{\partial x^{k}} \alpha_{k}\Psi\right)$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^{+}\Psi\right) = \sum_{k=1}^{3} \frac{\hbar c}{i} \frac{\partial}{\partial x^{k}} \left(\Psi^{+} \alpha_{k}\Psi\right) . \qquad (12.106)$$

oder

Wir definieren die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho \equiv \Psi^+ \Psi = \sum_{\sigma=1}^4 \Psi_\sigma^+ \Psi_\sigma \tag{12.107}$$

und den drei-komponentigen Wahrscheinlichkeitsstrom

$$j^{k} \equiv c\Psi^{+}\alpha_{k}\Psi = c\alpha_{k}\sum_{\sigma=1}^{4}\Psi_{\sigma}^{+}\Psi_{\sigma} . \qquad (12.108)$$

Wir erhalten dann für Gleichung (12.106) die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 , \qquad (12.109)$$

die wieder statistisch gedeutet werden kann.

Gleichung (12.108) deutet an, dass der Operator $c\vec{\alpha}$ die Teilchengeschwindigkeit darstellt. Dies beweisen wir durch die Berechnung der zeitlichen Ableitung des Ortsoperators im Heisenberg-Bild

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\partial \hat{x}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{x} , \hat{H}_D \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{x} , \hat{H}_D \right] \; .$$

Mit dem Hamilton-Operator (12.89) folgt

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{1}{\imath\hbar} \left(\hat{x}\hat{H}_D - \hat{H}_D \hat{x} \right) \\ &= \frac{1}{\imath\hbar} \left(xc \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z \right) + x\beta mc^2 \right) \\ &- c \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z \right) x - \beta mc^2 x \end{aligned} \\ &= \frac{c}{\imath\hbar} \left(x \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z \right) - \left(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z \right) x \right) . \end{aligned}$$

Unter Ausnutzung von

Weil die Eigenwerte von jedem α_i gleich ± 1 , bedeutet dies, dass die Eigenwerte aller Geschwindigkeitskomponenten +c und -c sind. Wegen der Nichtvertauschbarkeit der α_i , sind die Geschwindigkeitskomponenten nicht gleichzeitig scharf meßbar und keine von ihnen ist Erhaltungsgröße. Der Impuls des freien Teilchens zeigte keine derart paradoxen Eigenschaften.

Die Erwartungswerte der Geschwindigkeit $\langle v_i \rangle$ liegen zwischen dem kleinsten und größten Eigenwert, also

$$-c \le \langle v_i \rangle \le c$$
, $i = 1, 2, 3$. (12.112)

Ist ein Teilchen in einem Eigenzustand einer Geschwindigkeitskomponente, so verschwindet der Erwartungswert der beiden anderen Geschwindigkeitskomponenten. Nehmen wir an, es liege der Eigenzustand ($\alpha_z | \Psi \rangle = +1 | \Psi \rangle$) von v_z zum Eigenwert +c vor, dann ist wegen der Vertauschungsregel (12.86a)

$$\langle v_x \rangle = c \langle \Psi | \alpha_x | \Psi \rangle$$

= $c \langle \Psi | \alpha_z \alpha_x | \Psi \rangle$
= $-c \langle \Psi | \alpha_x \alpha_z | \Psi \rangle$
= $-c \langle \Psi | \alpha_x | \Psi \rangle = 0$ (12.113)

und ebenso $\langle v_y \rangle = 0$. Das mittlere Schwankungsquadrat ist aber umso größer, je kleiner der Erwartungswert ist:

$$(\Delta v_x)^2 = \langle v_x^2 \rangle - \langle v_x \rangle^2 = c^2 - \langle v_x \rangle^2 . \qquad (12.114)$$

Es handelt sich also um eine Bewegung mit starker relativer Schwankung der Geschwindigkeitskomponenten um einen Mittelwert. Schrödinger nannte diese Bewegung *Zitterbewegung*. Bei Geschwindigkeitsmessungen stellt man nichts von ihr fest.

12.6 Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld

Der Hamilton-Operator eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld (12.92) lautet

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi . \qquad (12.115)$$

Damit ergibt sich für die Dirac-Gleichung (12.89)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi\right]\Psi.$$
 (12.116)

Wir betrachten den nichtrelativistischen Grenzfall von Gleichung (12.116). Dazu führen wir zunächst die zwei-komponentigen Spaltenmatrizen $\tilde{\phi}$ und $\tilde{\chi}$ ein durch

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \,. \tag{12.117}$$

Dann gilt mit Gleichungen (12.85)

$$\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\tilde{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\tilde{\phi} \end{pmatrix} = \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \begin{pmatrix} \tilde{\chi} \\ \tilde{\phi} \end{pmatrix}$$
(12.118)

und

 $\beta m c^2 \Psi = m c^2 \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = m c^2 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ -\tilde{\chi} \end{pmatrix} .$ (12.119)

Damit erhalten wir für die Dirac-Gleichung (12.116)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\begin{pmatrix}\tilde{\chi}\\\tilde{\phi}\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\-\tilde{\chi}\end{pmatrix}.$$
 (12.120)

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist die Ruheenergie mc^2 die größte auftretende Energie. Wir setzen daher an

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-\imath m c^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} , \qquad (12.121)$$

wobei ϕ und χ relativ langsam veränderliche Funktionen der Zeit sind. Wir erhalten mit dem Ansatz (12.121)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} = -i^{2}\hbar\frac{mc^{2}}{\hbar}e^{-imc^{2}t/\hbar}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} + i\hbar e^{-imc^{2}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix}$$
$$= e^{-imc^{2}t/\hbar}\left[mc^{2}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix}\right]$$

und damit für Gleichung (12.120)

$$mc^{2}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} + \imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\begin{pmatrix}\chi\\\phi\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} + mc^{2}\begin{pmatrix}\phi\\-\chi\end{pmatrix},$$

oder die gekoppelten Gleichungen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\begin{pmatrix}\chi\\\phi\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\phi\\\chi\end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix}0\\\chi\end{pmatrix} .$$
(12.122)

Die zweite Gleichung (12.122) ist

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = c\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\phi + e\Phi\chi - 2mc^2\chi . \qquad (12.123)$$

Die linke Seite wird durch Null approximniert, da nach Annahme die Funktion χ nur langsam zeitlich variiert. Auf der rechten Seite vernachlässigen wir $e\Phi << 2mc^2$, so dass

$$0 \simeq c\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\phi - 2mc^2\chi,$$

$$\chi \simeq \frac{\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)}{2mc}\phi.$$
 (12.124)

oder

Offensichtlich ist die Funktion

$$\chi \simeq \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)\phi$$

um den Faktor $(v/c) \ll 1$ kleiner als die Funktion ϕ . Wir setzen die Näherung (12.124) in die erste Gleichung (12.122) ein und erhalten dann die zwei-komponentige Spinor-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\chi + e\Phi\phi \simeq \left[\frac{\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)}{2m} + e\Phi\right]\phi. \quad (12.125)$$

Für die Pauli-Matrizen gilt für zwei beliebige Vektoren \vec{a} und \vec{b} die Identität

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{b} \right) = \vec{a} \cdot \vec{b} + \imath \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{a} \times \vec{b} \right) .$$
(12.126)

Beweis:

Mit

folgt

$$\sigma_{j}\sigma_{k} = \delta_{j,k} + i \sum_{l} \epsilon_{jkl}\sigma_{l}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}\right) = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sigma_{i}\sigma_{j}a_{i}b_{j}$$

$$= \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \left(\delta_{i,j} + i \sum_{l} \epsilon_{ijl}\sigma_{l}\right) a_{i}b_{j}$$

$$= \sum_{i=1}^{3} a_{i}b_{i} + i \sum_{l} \sigma_{l} \left(\sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \epsilon_{ijl}a_{i}b_{j}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{3} a_{i}b_{i} + i \sum_{l} \sigma_{l} \left(\vec{a} \times \vec{b}\right)_{l} = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{a} \times \vec{b}\right)$$

Q.E.D.

Es folgt für

$$\vec{a} = \vec{b} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$$
$$\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) = \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + i\vec{\sigma} \cdot \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]$$
$$= \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + i\vec{\sigma} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]$$
$$= \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \vec{\sigma} \cdot \frac{e\hbar}{c}\left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right)$$
$$= \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} .$$
(12.127)

Damit reduziert sich Gleichung (12.125) auf die Pauli-Gleichung

$$\imath\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \left[\frac{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\Phi\right]\phi.$$
(12.128)

Die zwei Komponenten von ϕ genügen, um die beiden Spinfreiheitsgrade eines Elektrons mit Spin1/2 zu beschreiben.

Insbesondere ergibt sich das magnetische Moment des Elektrons mit dem richtigen gyromagnetischen Verhältnis g = 2 automatisch. Wir berücksichtigen nur Terme erster Ordnung im Vektorpotential, so dass unter Coulomb-Eichung (div $\vec{A} = 0$)

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2}\phi = \left(\frac{\hbar}{\imath}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2}\phi$$

$$\simeq -\hbar^{2}\Delta\phi + \imath\hbar\frac{e}{c}\left[\vec{\nabla}\cdot\left(\vec{A}\phi\right) + \vec{A}\cdot\left(\vec{\nabla}\phi\right)\right]$$

$$= -\hbar^{2}\Delta\phi + 2\imath\hbar\frac{e}{c}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\phi$$

$$= \left(\hat{p}^{2} - 2\frac{e}{c}\vec{A}\cdot\hat{p}\right)\phi.$$

$$(12.129)$$

Für ein konstantes externes Magnetfeld $\vec{B}_{\rm ex}=\vec{B}=const.$ gilt nach Kap. 8.4 für das Vektorpotential

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} ,$$

so dass wie vorher auch

$$\vec{A}\cdot\vec{p} = \frac{1}{2}\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)\cdot\vec{p} = \frac{1}{2}\vec{B}\cdot\left(\vec{r}\times\vec{p}\right) = \frac{1}{2}\vec{B}\cdot\vec{L}\;.$$

Die Pauli-Gleichung (12.128) lautet damit

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B} - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\Phi\right]\phi$$
$$= \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\left(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}\right)\cdot\vec{B} + e\Phi\right]\phi \qquad (12.130)$$
$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \qquad (12.131)$$

mit

als Elektronenspin mit den Eigenwerten $\pm \hbar/2$ und g = 2. Dies ist ein großer Erfolg der Dirac-Theorie! Damit ist streng begründet:

- Der Spin existiert als fundamentale relativistische Eigenschaft des Elektrons und aller Fermi-Teilchen.
- 2. Mit dem Spin ist ein magnetisches Moment $\vec{\mu}_s = \mu_e \vec{S}$ verknüpft, das im Hamilton-Operator linear an das externe Magnetfeld koppelt,
- 3. Der Lande-Faktor des Elektrons $\mu_e = -g\mu_B/\hbar$ ist exakt gleich g = 2.

12.7 Feinstruktur als Konsequenz der Dirac-Gleichung

Wir gehen aus von der Dirac-Gleichung (12.116) mit $\vec{A} = 0$ und für Elektronen $V(\vec{r}) = -e\Phi$:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V\left(\vec{r}\right)\right]\Psi$$
(12.132)

und machen wieder den zwei-komponentigen Ansatz (12.117)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \,. \tag{12.133}$$

Dann gilt analog zu Gleichung (12.120)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\begin{pmatrix}\tilde{\chi}\\\tilde{\phi}\end{pmatrix} + V\left(\vec{r}\right)\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\-\tilde{\chi}\end{pmatrix}.$$
 (12.134)

Für die Zeitabhängigkeit setzen wir an

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi}\left(\vec{r},t\right) \\ \tilde{\chi}\left(\vec{r},t\right) \end{pmatrix} = e^{-\imath E_{+}t/\hbar} \begin{pmatrix} \phi\left(\vec{r}\right) \\ \chi\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix}$$
(12.135)

mit

$$E_{+} = mc^{2} + E' . (12.136)$$

Mit dem Ansatz (12.135) folgt

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\phi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} = E_+\begin{pmatrix}\phi\left(\vec{r}\right)\\\chi\left(\vec{r}\right)\end{pmatrix}e^{-iE_+t/\hbar}$$

und wir erhalten aus Gleichung (12.134)

$$\left(mc^{2} + E'\right) \begin{pmatrix} \phi\left(\vec{r}\right) \\ \chi\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \begin{pmatrix} \chi\left(\vec{r}\right) \\ \phi\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix} + V\left(\vec{r}\right) \begin{pmatrix} \phi\left(\vec{r}\right) \\ \chi\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix} + mc^{2} \begin{pmatrix} \phi\left(\vec{r}\right) \\ -\chi\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix} \right).$$
(12.137)

Wir erhalten daraus die zwei gekoppelten Gleichungen

$$\left[E' - V\left(\vec{r}\right)\right]\phi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi = 0 \qquad (12.138)$$

und

$$\left[E' + 2mc^2 - V(\vec{r})\right]\chi - c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\phi = 0.$$
(12.139)

Aus Gleichung (12.139) folgt

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2mc^2 + E' - V\left(\vec{r}\right)}\phi = \left[1 + \frac{E' - V\left(\vec{r}\right)}{2mc^2}\right]^{-1}\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2mc}\phi.$$
 (12.140)

Diese Gleichung zeigt wieder an, dass der Zweier-Spinor χ für nichtrelativistische Teilchen um den Faktor (v/c) kleiner ist als der Zweier-Spinor ϕ .

Einsetzen der Beziehung (12.140) in Gleichung (12.138) ergibt die exakte Gleichung

$$\frac{1}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left[1+\frac{E'-V\left(\vec{r}\right)}{2mc^{2}}\right]^{-1}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\phi+V\left(\vec{r}\right)\phi=E'\phi.$$
(12.141)

Wir betrachten ab jetzt ein kugelsymmetrisches Potential $V(\vec{r})=V(|\vec{r}|)=V(r)$ und führen die Bezeichnung

$$f(r) \equiv \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]^{-1}$$
(12.142)

ein. In Analogie zu Gleichung (12.126) gilt

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) f(r) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = f(r) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 + [\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, f(r)] \vec{\sigma} \cdot \vec{p} .$$
(12.143)

Mit $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=\vec{p}^2$ und dem Kommutator

$$\begin{bmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, f(r) \end{bmatrix} = -i\hbar \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{\nabla} f(r) \right) = -i\hbar \frac{df}{dr} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) f(r) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = f(r)\vec{p}^2 - i\hbar \frac{1}{r} \frac{df}{dr} (\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) .$$
(12.144)

folgt also

Wir nutzen Gleichung (12.126) zur Berechnung von

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = \vec{r} \cdot \vec{p} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{L} , \qquad (12.145)$$

mit dem Bahndrehimpulsoperator $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

Für Gleichung (12.141) erhalten wir dann

$$\frac{1}{2m} \left(f(r)\vec{p}^2 + \frac{df}{dr} \left(-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L}}{r} \right) \right) \phi + V(r)\phi$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-1} \vec{p}^2 + \frac{d}{dr} \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-1} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2\vec{S} \cdot \vec{L}}{r} \right] \right) \phi$$

$$+ V(r)\phi = E'\phi . \qquad (12.146)$$

Diese Gleichung stellt als Teil der Dirac-Gleichung die exakte relativistische Gleichung für den Zweierspinor $\phi(\vec{r})$ in einem Zentralpotential dar. Sie enthält von vornherein alle Korrekturen zur Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators ohne externes Magnetfeld. Insbesondere ergibt sich der Spin-Bahn-Kopplungsterm zu

$$\hat{H}_{S-B} = \frac{1}{mr} \frac{d}{dr} \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-1} \vec{L} \cdot \vec{S} = \Gamma(r) \vec{L} \cdot \vec{S} , \qquad (12.147)$$

mit dem Thomas-Faktor

$$\Gamma(r) = \frac{1}{mr} \frac{d}{dr} \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-1}$$

$$= \frac{1}{mr} \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-2} \frac{1}{2mc^2} \frac{dV}{dr}$$

$$= \frac{1}{2m^2c^2} \left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2} \right]^{-2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}.$$
(12.148)

In niedrigster nichtrelativistischer Näherung ergibt sich

$$\left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]^{-2} \simeq 1 - \frac{E' - V(r)}{mc^2} \simeq 1, \qquad (12.149)$$
$$\Gamma^{\rm nr}(r) \simeq \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$$

so dass

$$\hat{H}_{S-B}^{nr} \simeq \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} .$$
 (12.150)

und

Damit ist der in Gleichung (8.36) – siehe auch Kap. 7.6.4 – angegebene nichtrelativistische Spin-Bahn-Kopplungsterm exakt bewiesen.

Benutzen wir die nichtrelativistische Näherung

$$\left[1 + \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]^{-1} \simeq 1 - \frac{E' - V(r)}{2mc^2}$$
(12.151)

bis zur ersten Ordnung, so erhalten wir für Gleichung (12.146)

$$\begin{split} E'\phi &= \left(\frac{1}{2m}\left[1 - \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]\vec{p}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dr}\left[1 - \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]\frac{\partial}{\partial r} + \Gamma(r)\vec{L}\cdot\vec{S} + V(r)\right)\phi \\ &= \left(\frac{1}{2m}\left[1 - \frac{E' - V(r)}{2mc^2}\right]\vec{p}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2mc^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \Gamma(r)\vec{L}\cdot\vec{S} + V(r)\right)\phi \,. \end{split}$$

Mit

$$\begin{pmatrix} E' - V(r) \end{pmatrix} \vec{p}^2 \phi \simeq \frac{\vec{p}^2}{2m} \vec{p}^2 \phi$$
folgt
$$E' \phi = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \Gamma(r)\vec{L} \cdot \vec{S} + V(r) \right) \phi$$

$$= \left(\hat{H}_S + \hat{H}_F \right) \phi ,$$
(12.152)

mit dem bekannten nichtrelativistischen Hamilton-Operator aus der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_S = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$
(12.153)

und dem Feinstruktur-Hamilton-Operator

$$\hat{H}_F = -\frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \Gamma(r)\vec{L}\cdot\vec{S} = \hat{H}_r + \hat{H}_d + \hat{H}_{S-B} .$$
(12.154)

Drei Effekte sorgen für die Feinstruktur und alle begründen sich aus der nichtrelativistischen Approximation der Dirac-Gleichung :

1. die relativistische Korrektur mit

$$\hat{H}_r = -\frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} , \qquad (12.155)$$

2. der Kontaktterm

$$\hat{H}_d = -\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r},\qquad(12.156)$$

der keine klassische Korrespondenz hat, und

3. die Spin-Bahn-Kopplung mit dem Hamilton-Operator (12.150).

12.8 Exakte Lösung der Dirac-Gleichung für das Elektron im Coulomb-Feld

Wir untersuchen die exakte Lösung der Dirac-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Feld mit der potentiellen Energie

$$V(r) = -e\Phi = -\frac{Ze^2}{r} . (12.157)$$

Gemäß Gleichung (12.132) lautet der Hamilton-Operator dann

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(r) = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - \frac{Ze^2}{r} .$$
(12.158)

Wegen der Kugelsymmetrie des Potentials V(r) schreibt man diesen Hamilton-Operator am zweckmäßigsten in Kugelkoordinaten.

Aufgrund der Operatoridentität (12.126) gilt

$$\begin{aligned} \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}\right) \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right) &= \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}\right) \left(\vec{\sigma} \cdot \left[\vec{r} \times \vec{p}\right]\right) \\ &= \vec{r} \cdot \left[\vec{r} \times \vec{p}\right] + i\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{r} \times \left[\vec{r} \times \vec{p}\right]\right) \\ &= i\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{r} \cdot \left[\vec{r} \cdot \vec{p}\right] - \vec{p}\vec{r}^{2}\right) , \\ i\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}\right) \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right) - \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}\right) \left(\vec{r} \cdot \vec{p}\right) &= -r^{2}\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) , \end{aligned}$$

oder

so dass

 $\vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r^2} \left[(\vec{r} \cdot \vec{p}) + \imath \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) \right] . \quad (12.159)$

Gemäß Gleichung (12.85) ist

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} , \\ \vec{\alpha} \cdot \vec{p} &= \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

so dass

Wir definieren den radialen Impuls-Operator

$$p_r \equiv \frac{1}{r} \left(\vec{r} \cdot \vec{p} - \imath \hbar \right) , \qquad (12.160)$$

den radialen Geschwindigkeits-Operator

$$\alpha_r \equiv \frac{1}{r} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \tag{12.161}$$

und den Operator

$$\hat{\vec{K}} \equiv \frac{\beta}{\hbar} \left[\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \hbar \right] \,. \tag{12.162}$$

Wir berechnen damit

$$\begin{aligned} \alpha_r p_r + \frac{\imath\hbar}{r} \alpha_r \beta \hat{\vec{K}} &= \frac{1}{r^2} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \left(\vec{r} \cdot \vec{p} - \imath\hbar \right) + \frac{\imath}{r^2} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \beta^2 \left[\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \hbar \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \left(\vec{r} \cdot \vec{p} - \imath\hbar \right) + \frac{\imath}{r^2} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \left[\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \hbar \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \left[\left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \left(\vec{r} \cdot \vec{p} \right) + \imath \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right) \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) \right] \\ &= \frac{\left(\vec{\alpha} \cdot \vec{r} \right)}{r^2} \left[\left(\vec{r} \cdot \vec{p} \right) + \imath \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) \right] = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \,, \end{aligned}$$
(12.163)

wobei wir im vorletzten Schritt Gleichung (12.159) verwendet haben. Für den Hamilton-Operator (12.158) folgt dann

$$\hat{H}_D = c\alpha_r p_r + \frac{i\hbar c}{r} \alpha_r \beta \hat{\vec{K}} + mc^2 \beta + V(r) . \qquad (12.164)$$

Der Operator $\hat{\vec{K}}$ vertauscht mit den Operatoren eta, $lpha_r$, und p_r , deshalb vertauscht er mit dem ganzen Hamilton-Operator (12.164).

Als nächstes betrachten wir das Quadrat des Operators (12.162):

$$\hbar^2 \hat{\vec{K}}^2 = \left(\sigma \cdot \vec{L}\right)^2 + 2\hbar \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right) + \hbar^2 . \qquad (12.165)$$

Für den ersten Term erhalten wir, wie bei Beweis der Identität (12.126)

$$\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right)^2 = \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j L_i L_j$$

$$= \sum_i \sum_j \left(\delta_{i,j} + i \sum_l \epsilon_{ijl} \sigma_l\right) L_i L_j$$

$$= \vec{L}^2 + i \sum_l \sigma_l \sum_i \sum_j \epsilon_{ijl} L_i L_j$$

$$= \vec{L}^2 + i \left(\sigma_3 \left[L_1, L_2\right] + \sigma_2 \left[L_3, L_1\right] + \sigma_1 \left[L_2, L_3\right]\right)$$

$$= \vec{L}^2 + i \sum_l \sigma_l i \hbar L_l = \vec{L}^2 - \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L} .$$

$$(12.166)$$

Für Gleichung (12.165) erhalten wir dann

$$\hbar^2 \vec{K}^2 = \vec{L}^2 - \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L} + 2\hbar \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \hbar^2$$

$$= \vec{L}^2 + \hbar \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \hbar^2$$

$$= \vec{L}^2 + \hbar \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right) + \frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 .$$

$$(12.167)$$

Nun ist

$$\left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2 = \left(\vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\right)^2 = \vec{L}^2 + \hbar\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right) + \vec{S}^2$$

$$= \vec{L}^2 + \hbar\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right) + \frac{3}{4}\hbar^2 ,$$
so dass
$$\hbar^2 \vec{K}^2 = \left(\vec{L} + \vec{S}\right)^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 = \vec{J}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 , \qquad (12.168)$$

mit dem Gesamt-Drehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, dessen Quadrat die Eigenwerte $j(j+1)\hbar^2$ hat. Deshalb hat $\hbar^2 \vec{\vec{K}^2}$ die Eigenwerte $\hbar^2 K^2$ mit

$$K^{2} = j(j+1) + \frac{1}{4} = j^{2} + j + \frac{1}{4} = \left(j + \frac{1}{2}\right)^{2}$$

$$K = \pm \left(j + \frac{1}{2}\right) = \pm 1, \pm 2, \dots$$
(12.169)

oder

Wir interessieren uns für Zustände mit einem bestimmten Gesamtdrehimpuls des Elektrons, also einem bestimmten Wert des Eigenwerts K. Gemäß Gleichung (12.164) erhalten wir für die Energie E dieser Zustände

$$\left[c\alpha_r p_r + \frac{\imath \hbar cK}{r} \alpha_r \beta + mc^2 \beta + V(r) - E\right] \Psi = 0.$$
(12.170)

 α_r und β antikommutieren miteinander und genügen

$$\alpha_r^2 = \beta^2 = 1 , \qquad \alpha_r \beta + \beta \alpha_r = 0 . \qquad (12.171)$$

Als Matrizen, die diesen Gleichungen genügen, wählen wir nach Gleichung (12.85) für β

$$\beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(12.172)
$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
(12.173)

und

Der Operator (12.160) in Ortsdarstellung lautet

$$p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) . \tag{12.174}$$

Für den Dirac-Spinor setzen wir an

$$\Psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ F(r) \\ G(r) \\ G(r) \end{pmatrix} .$$
(12.175)

Für die einzelnen Terme der Dirac-Gleichung (12.170) erhalten wir dann

$$\begin{split} c\alpha_r p_r \Psi &= c \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-i\hbar) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ F(r) \\ G(r) \\ G(r) \\ G(r) \end{pmatrix} \\ &= -i\hbar c \begin{pmatrix} -i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{G}{r} \\ -i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{G}{r} \\ i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{F}{r} \\ i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{F}{r} \\ i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{F}{r} \end{pmatrix} , \\ mc^2 \beta \Psi &= \frac{mc^2}{r} \begin{pmatrix} F \\ F \\ -G \\ -G \end{pmatrix} , \end{split}$$

361

(12.173)

$$\begin{aligned} \frac{\imath\hbar cK}{r} \alpha_r \beta \Psi &= \frac{\imath\hbar cK}{r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\imath & 0\\ 0 & 0 & -\imath & 0 \\ 0 & \imath & 0 & 0 \\ \imath & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \imath \end{pmatrix} \Psi \\ &= \frac{\imath\hbar cK}{r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & \imath & 0 \\ \imath & 0 & 0 & 0 \\ \imath & 0 & 0 & 0 \\ \imath & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F \\ F \\ G \\ G \end{pmatrix} = -\frac{\hbar cK}{r^2} \begin{pmatrix} G \\ F \\ F \\ F \end{pmatrix} .\end{aligned}$$

Damit lautet die Dirac-Gleichung (12.170)

$$-i\hbar c \begin{pmatrix} -i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{G}{r}\\ -i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{F}{r}\\ i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{F}{r}\\ i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{F}{r} \end{pmatrix} - \frac{\hbar cK}{r^2} \begin{pmatrix} G\\G\\F\\F \end{pmatrix} + \frac{mc^2}{r} \begin{pmatrix} F\\F\\-G\\-G \end{pmatrix} + \frac{V(r) - E}{r} \begin{pmatrix} F\\G\\G \end{pmatrix} = 0.$$
(12.176)

Für die 1. und 2. Komponente der Spinor-Gleichung (12.176) finden wir

$$-\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \frac{G}{r} - \frac{\hbar c K}{r^2} G + \frac{mc^2 + V(r) - E}{r} F = 0 ,$$

oder nach Multiplikation mit $(-r/\hbar c)$

$$\frac{E - mc^2 - V(r)}{\hbar c}F + \frac{K}{r}G + r\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{G}{r} = 0.$$

Mit

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

$$r\left[-\frac{G}{r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial G}{\partial r} + \frac{G}{r^2}\right] = \frac{dG}{dr}$$

$$\frac{E - mc^2 - V(r)}{\hbar c}F + \frac{dG}{dr} + \frac{K}{r}G = 0. \qquad (12.177)$$

folgt

Ebenso finden wir für die 3. und 4. Komponente der Spinor-Gleichung (12.176)

$$\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \frac{F}{r} - \frac{\hbar c K}{r^2} F + \frac{V(r) - mc^2 - E}{r} G = 0 ,$$

und nach Multiplikation mit $(-r/\hbar c)$

$$\frac{E + mc^2 - V(r)}{\hbar c}G + \frac{K}{r}F - r\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{F}{r} = 0,$$

$$\frac{E + mc^2 - V(r)}{\hbar c}G - \frac{dF}{dr} + \frac{K}{r}F = 0.$$
 (12.178)

oder

und

und

Mit dem Potential (12.157) lauten diese Gleichungen

$$\left(\frac{Ze^2}{\hbar cr} + \frac{E - mc^2}{\hbar c} \right) F + \frac{dG}{dr} + \frac{K}{r}G = 0 \left(\frac{Ze^2}{\hbar cr} + \frac{E + mc^2}{\hbar c} \right) G - \frac{dF}{dr} + \frac{K}{r}F = 0 .$$

Nach Einführung der Feinstrukturkonstante $\alpha_f=e^2/(\hbar c)$ finden wir

$$\left(\frac{Z\alpha_f}{r} + \frac{E - mc^2}{\hbar c}\right)F + \frac{dG}{dr} + \frac{K}{r}G = 0$$
(12.179)

$$\left(\frac{Z\alpha_f}{r} + \frac{E + mc^2}{\hbar c}\right)G - \frac{dF}{dr} + \frac{K}{r}F = 0.$$
(12.180)

Wir führen die Abkürzungen

$$A = \frac{E + mc^2}{\hbar c}$$
, $B = \frac{mc^2 - E}{\hbar c}$ (12.181)

ein. Die Gleichungen lauten dann

$$\left(\frac{Z\alpha_f}{r} - B\right)F + \frac{dG}{dr} + \frac{K}{r}G = 0$$

$$\left(\frac{Z\alpha_f}{r} + A\right)G - \frac{dF}{dr} + \frac{K}{r}F = 0.$$

und

Wir substitutieren

$$r = \frac{\rho}{D} , \qquad (12.182)$$

mit der noch zu wählenden Konstanten D, so dass

$$\frac{d}{dr} = D\frac{d}{d\rho} \; .$$

Die Gleichungen reduzieren sich damit auf

$$\left(\frac{B}{D} - \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)F - \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{K}{\rho}\right]G = 0$$
(12.183)

$$\left(\frac{A}{D} + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)G - \left[\frac{d}{d\rho} - \frac{K}{\rho}\right]F = 0.$$
(12.184)

und

Für den Fall $E \leq mc^2$ wählen wir die Konstante D zu

$$D = \sqrt{AB} = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}, \qquad (12.185)$$

so dass

$$\frac{B}{D} = \sqrt{\frac{B^2}{AB}} = \sqrt{\frac{B}{A}} = \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}},$$

$$\frac{A}{D} = \sqrt{\frac{A}{B}} = \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}}.$$
(12.186)

Zur Lösung der Differentialgleichungen (12.183) und (12.184) machen wir die Ansätze:

$$F(\rho) = f(\rho)e^{-\rho}, \qquad G(\rho) = g(\rho)e^{-\rho}, \qquad (12.187)$$
$$\frac{dF}{d\rho} = \left(\frac{df}{d\rho} - f\right)e^{-\rho}, \qquad \frac{dG}{d\rho} = \left(\frac{dg}{d\rho} - g\right)e^{-\rho}.$$

so dass

Aus Gleichung (12.183) folgt

$$\left(\frac{B}{D} - \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)f - \left(\frac{dg}{d\rho} - g + \frac{Kg}{\rho}\right) = 0$$

$$\frac{dg}{d\rho} - g + \frac{Kg}{\rho} - \left(\frac{B}{D} - \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)f = 0,$$
(12.188)

oder

während wir aus Gleichung (12.184) finden

$$\left(\frac{A}{D} + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)g - \left(\frac{df}{d\rho} - f - \frac{Kf}{\rho}\right) = 0$$
$$\frac{df}{d\rho} - f - \frac{Kf}{\rho} - \left(\frac{A}{D} + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\right)g = 0.$$
(12.189)

oder

Wir betrachten die Potenzreihenansätzen

$$f(\rho) = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu} , \qquad a_0 \neq 0$$
 (12.190)

und

$$g(\rho) = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \rho^{\nu} , \qquad b_0 \neq 0 .$$
 (12.191)

Damit

$$\frac{1}{r}F(r) \propto \frac{1}{\rho}e^{-\rho}f(\rho)$$

endlich ist für $r \rightarrow 0$, erwarten wir Werte $s \ge 1$ in den Entwicklungen (12.190) und (12.191). Für die jeweiligen Ableitungen folgt

$$\frac{df}{d\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \left(\nu + s\right) \rho^{s+\nu-1} , \qquad \frac{dg}{d\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \left(\nu + s\right) \rho^{s+\nu-1} .$$

Einsetzen in Gleichung (12.188) ergibt

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu}(\nu+s+K)\rho^{s+\nu-1} - \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu}\rho^{s+\nu} - \frac{B}{D}\sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}\rho^{s+\nu} + Z\alpha_f \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}\rho^{s+\nu-1} = 0.$$

Im zweiten und dritten Term setzen wir $\nu = \eta - 1$, so dass

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu}(\nu+s+K)\rho^{s+\nu-1} - \sum_{\eta=1}^{\infty} b_{\eta-1}\rho^{s+\eta-1} - \frac{B}{D}\sum_{\eta=1}^{\infty} a_{\eta-1}\rho^{s+\eta-1} + Z\alpha_f \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}\rho^{s+\nu-1} = 0.$$

Setzen wir wieder $\eta = \nu$, so finden wir

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu}(\nu+s+K)\rho^{s+\nu-1} - \sum_{\nu=1}^{\infty} b_{\nu-1}\rho^{s+\nu-1} - \frac{B}{D}\sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu-1}\rho^{s+\nu-1} + Z\alpha_f \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}\rho^{s+\nu-1} = 0.$$

Der Koeffizientenvergleich zum Term $\rho^{s+\nu-1}$ ergibt

$$(\nu + s + K)b_{\nu} - b_{\nu-1} - \frac{B}{D}a_{\nu-1} + Z\alpha_f a_{\nu} = 0 \qquad \text{für} \quad \nu > 0.$$
 (12.192)

In analoger Weise finden wir nach dem Einsetzen der Potenzreihenentwicklungen in die Gleichung (12.189) für $\nu > 0$

$$(\nu + s - K)a_{\nu} - a_{\nu-1} - \frac{A}{D}b_{\nu-1} - Z\alpha_f b_{\nu} = 0.$$
(12.193)

Speziell für $\nu = 0$ muss

$$(s+K)b_0 + Z\alpha_f a_0 = 0$$

und
$$-Z\alpha_f b_0 + (s-K)a_0 = 0.$$

Damit $a_0 \neq 0$ und $b_0 \neq 0$ muss die Koeffizienten-Determinante aus den beiden letzten Gleichungen verschwinden:

$$\begin{vmatrix} s+K & Z\alpha_f \\ -Z\alpha_f & s-K \end{vmatrix} = (s+K)(s-K) + (Z\alpha_f)^2 = s^2 - K^2 + (Z\alpha_f)^2 ,$$

mit den Lösungen

$$s_{1,2} = \pm \sqrt{K^2 - Z^2 \alpha_f^2}$$
.

Wegen der Randbedingung ($s \ge 1$) bei r = 0 kommt nur die positive Lösung in Frage, so dass

$$s = \sqrt{K^2 - Z^2 \alpha_f^2} . (12.194)$$

Wir multiplizieren Gleichung (12.192) mit D mit dem Ergebnis

$$(\nu + s + K)b_{\nu}D - b_{\nu-1}D - Ba_{\nu-1} + Z\alpha_f a_{\nu}D = 0$$

und Gleichung (12.193) mit B mit dem Ergebnis

$$(\nu + s - K)a_{\nu}B - a_{\nu-1}B - \frac{A}{D}b_{\nu-1}B - Z\alpha_f b_{\nu}B = 0.$$

Die Differenz der so erhaltenen Gleichungen lautet

$$(\nu + s + K)b_{\nu}D + Z\alpha_{f}a_{\nu}D - (\nu + s - K)a_{\nu}B + Z\alpha_{f}b_{\nu}B + \left(-D + \frac{AB}{D}\right)b_{\nu-1} = 0$$

Die letzte Term verschwindet, weil $D = \sqrt{AB}$ so dass

$$\frac{AB}{D} - D = 0 \; ,$$

und wir erhalten als Zusammenhang zwischen den Koeffizienten a_{ν} und b_{ν}

$$b_{\nu} \left[Z \alpha_f B + D(\nu + s + K) \right] = a_{\nu} \left[B(\nu + s - k) - Z \alpha_f D \right] . \tag{12.195}$$

12.8.1 Energiequantelung

Wir betrachten das Verhalten der Potenzreihen (12.190) und (12.191) für große Werte von r. Wenn die Reihen nicht abbrechen, bestimmen große Werte von ν das Verhalten. Im Fall $\nu \gg 1$ reduziert sich die Koeffizientengleichung (12.195) auf

$$b_{\nu}D\nu \simeq a_{\nu}B\nu ,$$

$$a_{\nu} = \frac{D}{B}b_{\nu} .$$
(12.196)

Daraus folgt

so dass

$$a_{\nu-1} = \frac{D}{B}b_{\nu-1} \; .$$

Die beiden letzten Beziehung setzen wir in Gleichung (12.192) ein und erhalten für $\nu \gg 1$

$$(\nu + s + K)b_{\nu} - b_{\nu-1} - \frac{B}{D}a_{\nu-1} + Z\alpha_f a_{\nu} \simeq \nu b_{\nu} - b_{\nu-1} - b_{\nu-1} + Z\alpha_f \frac{D}{B}b_{\nu} \\ \simeq \nu b_{\nu} - 2b_{\nu-1} = 0 ,$$

weil $\nu \gg Z \alpha_f \frac{D}{B}$. Es folgt

$$b_{\nu} \simeq \frac{2}{\nu} b_{\nu-1}$$
 (12.197)

$$a_{\nu} \simeq \frac{2}{\nu} a_{\nu-1} .$$
 (12.198)

und

Damit finden wir, dass beide Potenzreihen (12.190) und (12.191) das asymptotische Verhalten

$$f(\rho \gg 1) = g(\rho \gg 1) = e^{2\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^{\nu}}{\nu!}$$

aufweisen, denn gemäß der Reihe (12.8.1) ist

$$a_{\nu} = \frac{2^{\nu}}{\nu!}, \qquad a_{\nu-1} = \frac{2^{\nu-1}}{(\nu-1)!},$$
$$\frac{a_{\nu}}{a_{\nu-1}} = \frac{2^{\nu}}{2^{\nu-1}} \frac{(\nu-1)!}{\nu!} = \frac{2}{\nu}.$$

so dass

wie in (12.198) gefordert.

Mit diesem asymptotischen Verhalten wären nach dem Ansatz (12.187) die Funktionen F(r) und G(r) für große r nicht endlich, d.h. beide Reihen (12.190) und (12.191) **müssen** abbrechen!

Wir nehmen an, der Abbruch passiert für $\nu = N$, so dass

$$a_{N+1} = b_{N+1} = 0 \; .$$

Aus Gleichung (12.192) folgt dann für $\nu = N + 1$

$$b_N = -\frac{B}{D}a_N , \qquad (12.199)$$

so dass mit der Wahl (12.185)

$$\sqrt{B}a_N = -\sqrt{A}b_N$$
, $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ (12.200)

Aus Gleichung (12.193) folgt für $\nu = N + 1$

$$-a_N - \frac{A}{D}b_N = 0 ,$$

mit der Wahl (12.185) ebenso sofort Beziehung (12.200). Wir erhalten die möglichen Energieeigenwerte, indem wir in der Koeffizientengleichung (12.195) $\nu = N$ setzen:

$$b_N \left[Z\alpha_f B + D(N+s+K) \right] = a_N \left[B(N+s-k) - Z\alpha_f D \right] .$$

Mit Gleichung (12.199) folgt

$$-a_N \left[Z\alpha_f \frac{B^2}{D} + B(N+s+K) \right] = a_N \left[B(N+s-k) - Z\alpha_f D \right] ,$$
$$a_N \left[B(N+s-k+N+s+k) - Z\alpha_f D + Z\alpha_f \frac{B^2}{D} \right] = a_N \left[2B(N+s) - \frac{Z\alpha_f}{D} \left(D^2 - B^2 \right) \right] = 0$$

oder

Für $a_N \neq 0$ muss gelten

$$N + s = \frac{Z\alpha_f}{2BD} (D^2 - B^2)$$

$$= \frac{Z\alpha_f}{2BD} (AB - B^2)$$

$$= \frac{Z\alpha_f}{2D} (A - B) ,$$

$$\frac{A - B}{D} Z\alpha_f = 2(s + N) . \qquad (12.201)$$

oder

Aus den Abkürzungen (12.181) und (12.185) folgt

$$\frac{A-B}{D} = \frac{2E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}$$

und wir finden für Gleichung (12.201)

$$\frac{s+N}{Z\alpha_f} = \frac{E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} ,$$
$$\frac{m^2c^4}{E^2} = 1 + \left(\frac{Z\alpha_f}{s+N}\right)^2 ,$$

oder also

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha_f}{N+s}\right)^2}} ,$$

Nach dem Einsetzen von Beziehung (12.194) ergibt sich für die Energieeigenwerte

$$E_N = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha_f Z}{N + \sqrt{K^2 - Z^2 \alpha_f^2}}\right)^2}},$$

$$N = 0, 1, 2, \dots, K = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots.$$
(12.202)

Wir entwickeln diesen Ausdruck für kleine Werte von

$$\epsilon = Z^2 \alpha_f^2 \ll 1 . \tag{12.203}$$

Gleichung (12.202) schreiben wir als

$$\frac{E_N}{mc^2} \equiv F(\epsilon) = \left[1 + \frac{\epsilon}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2}\right]^{-1/2} .$$
(12.204)

Wir nutzen die Taylor-Entwicklung

$$F(\epsilon) \simeq F(0) + \epsilon \frac{dF(\epsilon)}{d\epsilon} \bigg|_{\epsilon=0} \epsilon + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{d^2 F(\epsilon)}{d\epsilon^2} \bigg|_{\epsilon=0} .$$
(12.205)

Es gilt

$$\begin{split} \frac{dF(\epsilon)}{d\epsilon} &= -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2} \right]^{-3/2} \\ &\times \left(\frac{1}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2} - \frac{2\epsilon}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^3} \frac{-1}{2\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2} \right]^{-3/2} \frac{1}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^3} \\ &\times \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon} + \frac{\epsilon}{\sqrt{K^2 - \epsilon}}\right) \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{K^2 - \epsilon}} \frac{1}{\left[1 + \frac{\epsilon}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2}\right]^{3/2}} \frac{1}{\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^{2 - \frac{3}{2}}} \\ &\times \left(\epsilon + N\sqrt{K^2 - \epsilon} + K^2 - \epsilon\right) \\ &= -\frac{1}{2} \left[N + \frac{K^2}{\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right] \frac{1}{\left[\epsilon + \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2\right]^{3/2}} \\ \frac{dF^2(\epsilon)}{d\epsilon^2} &= -\frac{1}{2} \left[\left(-\frac{1}{2}\right) K^2 \left(K^2 - \epsilon\right)^{-3/2} \left(-1\right) \right] \left[\epsilon + \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2 \right]^{-3/2} \\ &- \frac{1}{2} \left[N + \frac{K^2}{\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right] \left(-\frac{3}{2}\right) \left[\epsilon + \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2 \right]^{-5/2} \\ &\times \left[1 + 2 \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right) \frac{-1}{2\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right] \\ &= \frac{3}{4} \frac{1}{\left[\left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2 + \epsilon \right]^{5/2}} \left[1 - \frac{N + \sqrt{K^2 - \epsilon}}{\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right] \left[N + \frac{K^2}{\sqrt{K^2 - \epsilon}} \right] \\ &- \frac{1}{4} \frac{K^2}{\left(K^2 - \epsilon\right)^{3/2}} \frac{1}{\left[\epsilon + \left(N + \sqrt{K^2 - \epsilon}\right)^2 \right]^{3/2}} . \end{split}$$

Wir erhalten

und

$$\frac{dF}{d\epsilon}|_{\epsilon=0} = -\frac{1}{2} \left[N + \frac{|K|^2}{|K|} \right] \frac{1}{(N+|K|)^3} = -\frac{1}{2} \frac{1}{[N+|K|]^2}$$

$$\begin{aligned} \text{und} \qquad & \frac{dF^2}{d\epsilon^2}|_{\epsilon=0} \ = \ -\frac{1}{4} \frac{|K|^2}{|K|^3} \frac{1}{(N+|K|)^3} + \frac{3}{4} \frac{N+|K|}{|N+|K||^5} \left(1 - \frac{N+|K|}{|K|}\right) \\ & = \ -\frac{1}{4|K|} \frac{1}{(N+|K|)^3} - \frac{3}{4} \frac{N}{|K|} \frac{N}{|K|} + \frac{1}{|K|} \frac{N}{|K|} \right) \\ & = \ -\frac{1}{(N+|K|)^4} \left[\frac{3}{4} \frac{N}{|K|} + \frac{1}{4} \frac{N+|K|}{|K|}\right] \\ & = \ -\frac{1}{(N+|K|)^4} \left[\frac{3}{4} \frac{N+|K|-|K|}{|K|} + \frac{1}{4} \frac{N+|K|}{|K|}\right] \\ & = \ -\frac{1}{(N+|K|)^4} \left[\frac{N+|K|}{|K|} - \frac{3}{4}\right]. \end{aligned}$$

Für die Entwicklung (12.205) folgt

$$F(\epsilon) \simeq 1 - \frac{\epsilon}{2[N+|K|]^2} - \frac{\epsilon^2}{2[N+|K|]^4} \left[\frac{N+|K|}{|K|} - \frac{3}{4}\right] .$$
(12.206)

Mit

$$n \equiv N + |K| \tag{12.207}$$

folgt für die Energieeigenwerte (12.204)

$$E_n = mc^2 F(\epsilon) \simeq mc^2 \left[1 - \frac{(Z\alpha_f)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha_f)^4}{2n^4} \left[\frac{n}{|K|} - \frac{3}{4} \right] \right] .$$
(12.208)

Mit $E_n' = E_n - mc^2$ erhalten wir die Sommerfeldsche Feinstrukturformel

$$E'_{n} \simeq -mc^{2} \left[\frac{(Z\alpha_{f})^{2}}{2n^{2}} + \frac{(Z\alpha_{f})^{4}}{2n^{3}} \left[\frac{1}{|K|} - \frac{3}{4n} \right] \right]$$
$$= -\frac{mc^{2}Z^{2}\alpha_{f}^{2}}{2n^{2}} \left[1 + \frac{Z^{2}\alpha_{f}^{2}}{n} \left(\frac{1}{|K|} - \frac{3}{4n} \right) \right].$$
(12.209)

Der erste Term dieser Gleichung ist identisch mit dem Energieeigenwert (7.108), den die Lösung der nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung ergibt. Der zweite Term enthält die relativistischen Korrekturen für ein Teilchen mit Spin 1/2. Wenn wir |K| = j + 1/2 benutzen, erhalten wir exakt das störungstheoretische Ergebnis (8.40) zur Feinstruktur.

Zur Klassifizierung der Energieniveaus (12.208) wird die nichtrelativistische Bezeichnungsweise verwandt, d.h. l ist die Bahndrehimpulsquantenzahl und j = l + s = l + (1/2) die

Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses. Nach Gleichung (12.202) gilt mit

$$N = n - |K| = n - \left(j + \frac{1}{2}\right)$$

und

$$K = \pm \left(j + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_{nj} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha_f Z}{N + \sqrt{K^2 - Z^2 \alpha_f^2}}\right)^2}}$$

$$= mc^2 \left[1 + \left(\frac{\alpha_f Z}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2 \alpha_f^2}}\right)^2\right]^{-1/2}. \quad (12.210)$$

Tabelle 12.1 zeigt das Ergebnis der vier niedrigsten Niveaus. Die $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}\mbox{-}{\rm Zust}$ ände sind entartet.

Niveau	n	1	j	$ \mathbf{k} $	$\mathbf{E_{nj}}$
$1 \ S_{\frac{1}{2}}$	1	0	$\frac{1}{2}$	1	$mc^2\sqrt{1-Z^2\alpha^2}$
$2 S_{\frac{1}{2}}$	2	0	$\frac{1}{2}$	1	$mc^2 \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-Z^2\alpha^2}}{2}}$
$2 P_{\frac{1}{2}}$	2	1	$\frac{1}{2}$	+ 1	$mc^2 \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-Z^2\alpha^2}}{2}}$
$2 P_{\frac{3}{2}}$	2	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{mc^2}{2}\sqrt{4-Z^2\alpha^2}$

Tabelle 12.1: Energieniveaus

12.8.2 Eigenfunktionen

Wir untersuchen jetzt die Lösungen der Gleichungen (12.188) und (12.189):

$$\frac{dg}{d\rho} + \frac{Kg}{\rho} + \frac{Z\alpha_f}{\rho}f = g + \frac{B}{D}f,$$
(12.211)
$$\frac{df}{d\rho} - \frac{Kf}{\rho} - \frac{Z\alpha_f}{\rho}g = f + \frac{A}{D}g = f + \sqrt{\frac{A^2}{AB}g}.$$

Dazu multiplizieren wir die letzte Gleichung mit $\sqrt{B/A}$,

$$\sqrt{\frac{B}{A}} \left[\frac{df}{d\rho} - \frac{Kf}{\rho} - \frac{Z\alpha_f}{\rho} g \right] = \sqrt{\frac{B}{A}} f + \sqrt{\frac{B}{A}} \sqrt{\frac{A^2}{AB}} g = g + \sqrt{\frac{BB}{AB}} f = g + \frac{B}{D} f \quad (12.212)$$

und ziehen das Ergebnis von der ersten Gleichung (12.211) ab:

$$\frac{dg}{d\rho} - \sqrt{\frac{B}{A}}\frac{df}{d\rho} + \frac{K}{\rho}\left(g + \sqrt{\frac{B}{A}}f\right) + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\left(f + \sqrt{\frac{B}{A}}g\right) = 0.$$
(12.213)

Die Summe der Gleichungen (12.211) und (12.212) ergibt

$$\frac{dg}{d\rho} + \sqrt{\frac{B}{A}}\frac{df}{d\rho} + \frac{K}{\rho}\left(g - \sqrt{\frac{B}{A}}f\right) + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\left(f - \sqrt{\frac{B}{A}}g\right) = 2\left(g + \frac{B}{D}f\right) .$$
(12.214)

Wir führen ein:

$$w(\rho) \equiv g - \sqrt{\frac{B}{A}}f$$
, $v(\rho) \equiv g + \sqrt{\frac{B}{A}}f$, (12.215)

so dass

$$= \frac{w+v}{2}, \qquad f = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{A}{B}}(v-w). \qquad (12.216)$$

Wir erhalten damit für Gleichung (12.213)

g

$$\frac{dw}{d\rho} + \frac{K}{\rho}v + \frac{Z\alpha_f}{\rho}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{A}{B}}(v-w) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{B}{A}}(w+v)\right] = 0 \; .$$

Mit den Abkürzungen

$$\mu \equiv \sqrt{\frac{B}{A}} , \qquad \beta = Z\alpha_f \qquad (12.217)$$

schreibt sich diese Gleichung als

$$\frac{dw}{d\rho} + \frac{K}{\rho}v + \frac{\beta}{2\rho}\left[\left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)v - \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)w\right] = 0.$$
 (12.218)

Ebenso erhalten wir für Gleichung (12.214)

$$\frac{dv}{d\rho} + \frac{K}{\rho}w + \frac{\beta}{2\rho}\left[\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)v - \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)w\right] = w + v + \sqrt{\frac{B^2}{AB}}\sqrt{\frac{A}{B}}(v - w) = 2v,$$

$$\frac{dv}{d\rho} + \frac{w}{\rho}\left[K - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)\right] + v\left[\frac{\beta}{2\rho}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) - 2\right] = 0. \quad (12.219)$$

also

Wir lösen Gleichung (12.218) nach v auf:

$$\frac{v}{\rho} \left[K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right) \right] = -\frac{dw}{d\rho} + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) \frac{w}{\rho} ,$$

d. h.
$$v = -\frac{\rho \frac{dw}{d\rho} - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) w}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)} .$$
(12.220)

Wir berechnen damit

$$\frac{dv}{d\rho} = -\frac{1}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left[\frac{dw}{d\rho} + \rho \frac{d^2w}{d\rho^2} - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) \frac{dw}{d\rho}\right]$$

und setzen das Ergebnis und Gleichung (12.220) in Gleichung (12.219) ein:

$$-\frac{1}{K+\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)}\rho\frac{d^{2}w}{d\rho^{2}}+\frac{1}{K+\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)}\frac{dw}{d\rho}\left[\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right)-1\right]$$
$$+\frac{w}{\rho}\left[K-\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)\right]+\left[\frac{\beta}{2\rho}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right)-2\right]\frac{\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right)}{K+\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)}w$$
$$-\left[\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right)-2\rho\right]\frac{1}{K+\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)}\frac{dw}{d\rho}=0.$$

Wir ordnen:

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + \frac{dw}{d\rho} \left[-\frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) + 1 + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) - 2\rho \right]$$
$$+ w \left[-\frac{\beta^2}{4\rho} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right)^2 + \beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) - \frac{1}{\rho} \left(K^2 - \frac{\beta^2}{4} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)^2 \right) \right] = 0,$$

oder

$$\rho \frac{d\rho^{2}}{d\rho^{2}} + (1 - 2\rho) \frac{d\rho}{d\rho} + w \left[\beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) - \frac{K^{2}}{\rho} + \frac{\beta^{2}}{4\rho} \left[\left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)^{2} - \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right)^{2} \right] \right] = 0,$$

$$\rho \frac{d^{2}w}{d\rho^{2}} + (1 - 2\rho) \frac{dw}{d\rho} + w \left[\frac{\beta^{2} - K^{2}}{\rho} + \beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) \right] = 0. \quad (12.221)$$

also

Nach Multiplikation mit ρ lautet diese Gleichung

$$\rho^2 \frac{d^2 w}{d\rho^2} + (1-2\rho)\rho \frac{dw}{d\rho} + w \left[\beta^2 - K^2 + \beta\rho \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)\right] = 0$$

Für kleine $\rho \ll 1$ wird aus dieser Gleichung

$$\rho^2 \frac{d^2 w}{d\rho^2} + \rho \frac{d w}{d\rho} + (\beta^2 - K^2) w = 0 ,$$

die durch $w(\rho)\propto\rho^{\Gamma}$ gelöst wird, wobei

$$\Gamma(\Gamma - 1) + \Gamma + (\beta^2 - K^2) = \Gamma^2 + \beta^2 - K^2 = 0.$$

Zur allgemeinen Lösung von Gleichung (12.221) setzen wir daher an

$$w(\rho) = \rho^s \phi(\rho) , \qquad s = \sqrt{K^2 - \beta^2} .$$
 (12.222)

Dann ist

$$\frac{dw}{d\rho} = \rho^s \left[\frac{d\phi}{d\rho} + \frac{s}{\rho} \phi \right]$$

$$\frac{d^2w}{d\rho^2} = \rho^s \left[\frac{d^2\phi}{d\rho^2} + \frac{2s}{\rho} \frac{d\phi}{d\rho} + \frac{s(s-1)}{\rho^2} \phi \right] .$$

und

Einsetzen ergibt für Gleichung (12.221)

$$\rho \frac{d^2 \phi}{d\rho^2} + 2s \frac{d\phi}{d\rho} + \frac{s(s-1)}{\rho} \phi + (1-2\rho) \left(\frac{d\phi}{d\rho} + \frac{s}{\rho}\phi\right) + \phi \left[\beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) - \frac{s^2}{\rho}\right] = 0$$

und nach Ordnen

$$\rho \frac{d^{2} \phi}{d\rho^{2}} + [2s + 1 - 2\rho] \frac{d\phi}{d\rho}
+ \phi \left[\frac{s(s-1)}{\rho} + (1 - 2\rho) \frac{s}{\rho} + \beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) - \frac{s^{2}}{\rho} \right] =
\rho \frac{d^{2} \phi}{d\rho^{2}} + [2s + 1 - 2\rho] \frac{d\phi}{d\rho}
+ \phi \left[\frac{s(s-1) - s^{2} + s}{\rho} - 2s + \beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) \right] = 0,
\rho \frac{d^{2} \phi}{d\rho^{2}} + [2s + 1 - 2\rho] \frac{d\phi}{d\rho} - \left[2s - \beta \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) \right] \phi = 0.$$
(12.223)

also

Mit der neuen Variablen

$$z = 2\rho , \qquad \frac{d}{d\rho} = 2\frac{d}{dz} \qquad (12.224)$$

erhalten wir für Gleichung (12.223)

$$\frac{z}{2}4\frac{d^2\phi}{dz^2} + (2s+1-z)2\frac{d\phi}{dz} - \left[2s - \beta\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)\right]\phi = 0,$$

oder nach Division durch $2 \$

$$z\frac{d^{2}\phi}{dz^{2}} + (2s+1-z)\frac{d\phi}{dz} - \left[s - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)\right]\phi = 0, \qquad (12.225)$$

die wir als Differentialgleichung der konfluenten hypergeometrischen Funktion (siehe Gleichung (3.122)) identifizieren. Deren bei z = 0 reguläre, nicht-verschwindende Lösung ist mit dem Normierungsfaktor C

$$\phi(\rho) = CM\left(s - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right), 1 + 2s, 2\rho\right), \qquad (12.226)$$

da die andere linear unabhängige Lösung für $\rho \rightarrow 0$

$$U\left(s - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right), 1 + 2s, 2\rho\right) \propto (2\rho)^{-2s}$$

am Ursprung divergiert und damit nicht normierbar ist. Nach dem Ansatz (12.222) erhalten wir damit

$$w(\rho) = C\rho^s M\left(s - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right), 1 + 2s, 2\rho\right) . \qquad (12.227)$$

Zur Berechnung der Lösung $v(\rho)$ schreiben wir Gleichung (12.220) um zu

$$v = -\frac{1}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left[\rho \frac{dw}{d\rho} - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) w \right]$$

$$= -\frac{1}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho^{s}\phi\right) - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) \rho^{s}\phi \right]$$

$$= -\frac{1}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left[s\rho^{s}\phi + \rho^{s+1}\frac{d\phi}{d\rho} - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) \rho^{s}\phi \right]$$

$$= -\frac{\rho^{s}}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left[\rho \frac{d\phi}{d\rho} + \left[s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right) \right] \phi \right].$$
(12.228)

In der Klammer wenden wir die Identität

$$\left(z\frac{d}{dz}+a\right)M\left(a,b,z\right) = aM\left(a+1,b,z\right)$$
(12.229)

an und erhalten

$$v = -\frac{\rho^{s}C}{K + \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} \left(s - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)\right) M\left(s + 1 - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \mu\right), 1 + 2s, 2\rho\right) ,$$

so dass

$$v(\rho) = -\frac{s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right)}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu\right)} C \rho^s M \left(1 + s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu\right), 1 + 2s, 2\rho\right) .$$
(12.230)

Nach Gleichungen (12.216) erhalten wir

$$g = \frac{w+v}{2} = \frac{C}{2}\rho^{s} \left[M \left(s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) , 1 + 2s , 2\rho \right) \right. \\ \left. - \frac{s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right)}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)} M \left(1 + s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) , 1 + 2s , 2\rho \right) \right] \\ f = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{A}{B}}(v - w) = -\frac{C}{2}\sqrt{\frac{A}{B}}\rho^{s} \left[M \left(s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) , 1 + 2s , 2\rho \right) \right. \\ \left. + \frac{s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right)}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)} M \left(1 + s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) , 1 + 2s , 2\rho \right) \right] .$$

und

Gemäß Gleichungen (12.187) folgt dann

$$\begin{array}{rcl} F(\rho) &=& f(\rho) e^{-\rho} \\ G(\rho) &=& g(\rho) e^{-\rho} \ , \end{array}$$
 so mit
$$\rho &=& Dr \ , \qquad D = \sqrt{AB} \ , \qquad \mu = \sqrt{\frac{B}{A}}$$

 $\beta = Z\alpha_f$

so dass

und

und

der Dirac-Spinor (12.175) lautet

$$\Psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) \\ F(r) \\ G(r) \\ G(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1(r) \\ \Psi_1(r) \\ \Psi_2(r) \\ \Psi_2(r) \end{pmatrix} , \qquad (12.231)$$

$$\begin{array}{lll} \text{mit} \quad \Psi_{1}(r) &=& -C_{1}r^{s-1}e^{-Dr}\left[M\left(s-\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right),1+2s,2Dr\right)\right. \\ && \left.+\frac{s-\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right)}{K+\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}+\mu\right)}M\left(1+s-\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{\mu}-\mu\right),1+2s,2Dr\right)\right] \quad (12.232) \\ \text{und} \quad \Psi_{2}(r) &=& \frac{C_{2}}{2}r^{s-1}e^{-Dr}\left[M\left(s-\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{-}-\mu\right),1+2s,2Dr\right)\right] \end{array}$$

$$\Psi_{2}(r) = \frac{-r}{\mu} r^{s-1} e^{-Dr} \left[M \left(s - \frac{r}{2} \left(\frac{-\mu}{\mu} - \mu \right), 1 + 2s, 2Dr \right) - \frac{s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right)}{K + \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} + \mu \right)} M \left(1 + s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right), 1 + 2s, 2Dr \right) \right] . \quad (12.233)$$

Für $2Dr \gg 1$ verhalten sich die M-Funktionen gemäß Gleichung (3.138) proportional zu

$$M(a,c,z\gg 1)\simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}x^{a-c}e^{2Dr},$$

so dass Ψ_1 und Ψ_2 über alle Grenzen wachsen, es sei denn, dass $\Gamma(a) = 0$ (siehe auch unsere Diskussion in Kap. 7.5.1). $\Gamma(a) = 0$ ist äquivalent zu $a = -n_r$, $n_r = 0, 1, 2, ...$ Wir erhalten die beiden Bedingungen

und

$$s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) = -n_r$$

$$1 + s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) = -n_r ,$$

$$s - \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\mu} - \mu \right) = -n_r , \qquad n_r = 0, 1, 2, \dots . \qquad (12.234)$$

so dass

Diese Bedingung führt wieder auf die Energiequantelung, denn mit

$$\mu = \sqrt{\frac{B}{A}} = \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}$$

 $\beta (1)$

folgt aus Bedingung (12.234)

oder

$$s + n_r = \frac{1}{2} \left(\frac{-}{\mu} - \mu\right) ,$$

$$\frac{2}{\beta} (s + n_r) = \frac{1}{\mu} - \mu = \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} - \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}$$

$$= \frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} - \frac{mc^2 - E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} = \frac{2E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}$$

Mit

 $\begin{array}{lll} \nu & = & n_r + s = n_r + \sqrt{K^2 - \beta^2} \\ \frac{2E}{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}} & = & \frac{2\nu}{\beta} \ , \end{array}$

finden wir

oder

also

$$\frac{\beta^{2}}{\nu^{2}} = \frac{m^{2}c^{4} - E^{2}}{E^{2}} = \frac{m^{2}c^{4}}{E^{2}} - 1,$$

$$E = \frac{mc^{2}}{\sqrt{1 + \frac{\beta^{2}}{\nu^{2}}}} = \frac{mc^{2}}{\sqrt{1 + \frac{Z^{2}\alpha_{f}^{2}}{(n_{r} + \sqrt{K^{2} - \beta^{2}})^{2}}}},$$

$$n_{r} = 0, 1, 2, \dots .$$
(12.235)

Gleichung (12.235) ist identisch mit Gleichung (12.202).

12.9 Die Foldy-Wouthuysen-Transformation für stationäre Zustände

12.9.1 Problemstellung

In der Diracschen Theorie tritt eine vierkomponentige Wellenfunktion auf, weil wir zu jedem Impuls zwei Spinrichtungen und zwei Energievorzeichen vorgeben können. Dabei sind

aber keineswegs diese vier Kombinationen derart auf die vier Komponenten verteilt, dass jede davon gerade einer Komponente zugeordnet werden kann. Nur im nichtrelativistischen Grenzfall (siehe Gleichungen (12.124) und (12.140)) haben wir gesehen, dass für positive Energien die dritte und vierte Spinor-Komponente gegen Null geht und nur die erste und zweite Spinor-Komponente übrig bleiben.

Es erleichtert das Verständnis der Diracschen Theorie als auch die Durchführung des Grenzübergangs zum nichtrelativistischen Fall, wenn wir zu einer Darstellung übergehen, die in voller Allgemeinheit diese Aufspaltung hinsichtlich der beiden Energievorzeichen herstellt. Um diese Darstellung zu finden, überlegen wir zuerst, auf welche Weise die Entmischung der Komponenten im nichtrelativistischen Fall zustande kommt, und wodurch diese sonst verhindert wird.

Für stationäre Zustände lautet die Dirac-Gleichung für ein Teilchen der Ladung e

$$\hat{H}_D \Psi = E \Psi , \qquad (12.236)$$

mit
$$\hat{H}_D = mc^2\beta + c\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{P}\right) + e\Phi$$
, $\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$. (12.237)

In der Standarddarstellung ist

. .

$$\Psi = \begin{pmatrix} u \\ u \\ v \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \qquad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$
(12.238)

Gleichung (12.236) lautet dann in den Zweier-Spinoren:

$$(mc^2 + e\Phi) u + c \left(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) v = Eu \qquad (12.239)$$

und

$$+ \left(mc^2 - e\Phi\right)\underline{v} + c\left(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right)\underline{u} = E\underline{v}. \qquad (12.240)$$

Die Kopplung der Funktionenpaare \underline{u} und \underline{v} kommt dadurch zustande, dass die Operatoren $\vec{\alpha}$ die Eigenschaft haben, diese miteinander zu vertauschen.

Man kann eine der Dirac-Algebra angehörende Größe Γ immer in zwei Summanden zerlegen, deren einer (*ungerader Anteil*) diese Vertauschungseigenschaft besitzt und deren anderer (*gerader Anteil*) sie nicht besitzt. Es besteht die Identität

$$\Gamma = \frac{1}{2} \left[\Gamma + \beta \Gamma \beta \right] + \frac{1}{2} \left[\Gamma - \beta \Gamma \beta \right] .$$
 (12.241)

Der erste Term ist gerade, d.h. er vertauscht \underline{u} und \underline{v} nicht; der zweite Term ist ungerade, d.h. er vertauscht \underline{u} und \underline{v} miteinander.

Beweis:

Wir schreiben

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \underline{a} & \underline{b} \\ \underline{c} & \underline{d} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma \beta = \begin{pmatrix} \underline{a} & \underline{b} \\ \underline{c} & \underline{d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{a} & -\underline{b} \\ \underline{c} & -\underline{d} \end{pmatrix}$$

$$\beta(\Gamma\beta) = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{a} & -\underline{b} \\ \underline{c} & -\underline{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{a} & -\underline{b} \\ -\underline{c} & +\underline{d} \end{pmatrix}$$

und berechner

378

und

Damit ist

$$\begin{split} \Gamma + \beta \Gamma \beta &= \begin{pmatrix} \underline{a} & \underline{b} \\ \underline{c} & \underline{d} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \underline{a} & -\underline{b} \\ -\underline{c} & +\underline{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\underline{a} & \underline{0} \\ \underline{0} & 2\underline{d} \end{pmatrix} \\ \frac{1}{2} \left[\Gamma + \beta \Gamma \beta \right] &= \begin{pmatrix} \underline{a} & \underline{0} \\ \underline{0} & \underline{d} \end{pmatrix} \end{split}$$

so dass

die gerade Eigenschaft hat, d.h. er vertauscht bei Anwendung auf den Dirac-Spinor ψ die Komponenten \underline{u} und \underline{v} nicht.

Ebenso berechnen wir

$$\Gamma - \beta \Gamma \beta = \begin{pmatrix} \underline{a} & \underline{b} \\ \underline{c} & \underline{d} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \underline{a} & -\underline{b} \\ -\underline{c} & +\underline{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{0} & 2\underline{b} \\ 2\underline{c} & \underline{0} \end{pmatrix} ,$$
$$\frac{1}{2} \left[\Gamma - \beta \Gamma \beta \right] = \begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{b} \\ \underline{c} & \underline{0} \end{pmatrix}$$

so dass

ungerade Eigenschaft hat, d.h. er vertauscht bei Anwendung auf den Dirac-Spinor ψ die Komponenten <u>u</u> und <u>v</u> miteinander. Q.E.D.

Nach diesem Prinzip können wir auch den Hamilton-Operator (12.237) in einen geraden und einen ungeraden Bestandteil zerlegen, wobei der letztere der Term $c(\vec{\alpha} \cdot \vec{P})$ ist. Die gewünschte Entkopplung der Gleichungen (12.135) und (12.136) wird erreicht, wenn es möglich ist, eine kanonische Transformation derart auszuführen, dass der Hamilton-Operator in dem neuen Hilbertschen Koordinatensystem keine ungeraden Bestandteile mehr besitzt. Eine Transformation, durch welche dies erreicht wird, heißt Foldy-Wouthuysen-Transformation.

12.9.2 Die Foldy-Wouthuysen-Transformation im kräftefreien Fall

Für $\vec{A} = \Phi = 0$ kann die Transformation streng angegeben werden. Wir führen statt \hat{H}_D und Ψ die transformierten Größen

$$\hat{H}' = e^{iS} \hat{H}_D e^{-iS} , \qquad \Psi' = e^{iS} \Psi$$
 (12.242)

ein, wobei S hermitesch sein $(S^+ = S)$ soll. Dann ist e^{iS} unitär. (12.242) ist dann eine hermitesche Transformation und Gleichung (12.236) geht über in

$$\hat{H}'\Psi' = E\Psi'$$
 (12.243)

Im kräftefreien Fall ist

$$\hat{H}_D = mc^2\beta + c\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) \tag{12.244}$$

und wir setzen an

$$S = -i\beta \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\right) F(p) , \qquad (12.245)$$

wobei F(p) eine Funktion von $p = |\vec{p}|$ ist. Wir schreiben den Hamilton-Operator (12.244) als ($\beta^2 = 1$)

$$\hat{H}_D = mc^2 \left(\beta + \Omega\right) = mc^2 \beta \left(1 + \beta \Omega\right) , \qquad (12.246)$$

mit dem ungeraden Operator

$$\Omega = \frac{1}{mc} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \,, \tag{12.247}$$

der aus der Gleichung

$$mc^2\beta^2\Omega = c\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right)$$

folgt.

Für Gleichung (12.245) erhalten wir damit

$$S = -i\beta \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) F(p) = -i\beta \Omega m c F(p) = -i\beta \Omega f(p) ,$$

mit f(p) = mcF(p). Da S proportional zu $\beta\Omega$ ist, kommutiert S mit $\beta\Omega$:

$$[S,\beta\Omega]=0.$$

Es folgt für den transformierten Hamilton-Operator (12.242a) mit Gleichung (12.246)

$$\hat{H}' = e^{iS} \hat{H}_D e^{-iS} = mc^2 e^{iS} \beta \left(1 + \beta \Omega\right) e^{-iS} = mc^2 e^{iS} \beta e^{-iS} \left(1 + \beta \Omega\right) .$$
(12.248)

Wir zeigen zunächst, dass $\beta\Omega = -\Omega\beta$ antikommutiert. Sei etwa

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \underline{b} \\ \underline{c} & 0 \end{pmatrix},$$

dann ist
$$\beta \Omega = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \underline{b} \\ \underline{c} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{b} \\ -\underline{c} & 0 \end{pmatrix}$$

und
$$\Omega \beta = \begin{pmatrix} 0 & \underline{b} \\ \underline{c} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\underline{b} \\ \underline{c} & 0 \end{pmatrix} = -\beta \Omega$$

und

Q.E.D. Damit finden wir

$$\beta \left(\beta \Omega\right)^n = (-1)^n \left(\beta \Omega\right)^n \beta . \tag{12.249}$$

Beweis durch vollständige Induktion: für n = 1 ist (12.249) erfüllt, denn

$$\beta(\beta\Omega) = \beta(-\Omega\beta) = -(\beta\Omega)\beta.$$

Zweitens: es gelte für n = k

$$\beta \left(\beta \Omega\right)^k = (-1)^k \left(\beta \Omega\right)^k \beta .$$

Für n = k + 1 ist dann

$$\beta (\beta \Omega)^{k+1} = \beta (\beta \Omega)^k (\beta \Omega)$$

= $(-1)^k (\beta \Omega)^k \beta (\beta \Omega)^k$
= $(-1)^{k+1} (\beta \Omega)^{k+1} \beta$

Q.E.D.

Nun entwickeln wir e^{-iS} in eine Potenzreihe und nutzen $-iS = -\beta\Omega f$, so dass mit (12.249)

$$\beta e^{-iS} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-f)^n \beta \left(\beta \Omega\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (f)^n \left(\beta \Omega\right)^n \beta = e^{iS} \beta .$$

Für den Hamilton-Operator (12.248) erhalten wir dann mit $\beta^2 = 1$

$$\hat{H}' = mc^2 e^{2iS} \beta \left(1 + \beta \Omega\right) = mc^2 e^{2iS} \left(\beta + \Omega\right) .$$
(12.250)

Wir beachten, dass nach Gleichung (12.247)

$$\Omega^2 = \left(\frac{p}{mc}\right)^2 = q^2$$

eine gewöhnliche Zahl ist.

Entwickeln wir $e^{2\imath S}(\beta+\Omega)$ in Gleichung (12.250) in eine Potenzreihe, dann treten Terme auf mit

$$\beta\Omega \left(\beta + \Omega\right) = \beta\Omega\beta + \beta\Omega^{2}$$

$$= -\beta^{2}\Omega + \beta q^{2} = q^{2}\beta - \Omega ,$$

$$(\beta\Omega)^{2} \left(\beta + \Omega\right) = (\beta\Omega) \left(-\Omega\beta\right) \left(\beta + \Omega\right)$$

$$= -q^{2}\beta^{2} \left(\beta + \Omega\right) = -q^{2} \left(\beta + \Omega\right) ,$$

$$(\beta\Omega)^{3} \left(\beta + \Omega\right) = -(\beta\Omega) \left(\Omega\beta\right) \left(\beta\Omega\right) \left(\beta + \Omega\right)$$

$$= -q^{2}\beta\Omega \left(\beta + \Omega\right) = -q^{2} \left(q^{2}\beta - \Omega\right) ,$$

usw., d.h. allgemein

$$(\beta\Omega)^{2n+1} (\beta + \Omega) = (-1)^n q^{2n} (q^2 \beta - \Omega)$$
(12.251)

$$(\beta \Omega)^{2n} (\beta + \Omega) = (-1)^n q^{2n} (\beta + \Omega) . \qquad (12.252)$$

und

Damit erhalten wir bei der Reihenentwicklung nach Trennung für gerade und ungerade Potenzen mit $2iS = 2f\beta\Omega$ für Gleichung (12.250)

$$\begin{split} \hat{H}' &= mc^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{(2n+1)!} (2f)^{2n+1} \left(\beta\Omega\right)^{2n+1} \left(\beta+\Omega\right) + \frac{1}{(2n)!} (2f)^{2n} \left(\beta\Omega\right)^{2n} \left(\beta+\Omega\right) \right] \\ &= mc^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{(2n+1)!} (2f)^{2n+1} (-1)^n q^{2n} \left(q^2\beta-\Omega\right) + \frac{1}{(2n)!} (2f)^{2n} (-1)^n q^{2n} \left(\beta+\Omega\right) \right] \\ &= mc^2 \left[\frac{\sin(2qf)}{q} \left(q^2\beta-\Omega\right) + \cos(2qf) \left(\beta+\Omega\right) \right] \,, \end{split}$$

oder getrennt nach geraden und ungeraden Operatoren

$$\hat{H}' = mc^2 \left[\left(\cos(2qf) - \frac{\sin(2qf)}{q} \right) \Omega + \left(\cos(2qf) + q\sin(2qf) \right) \beta \right] .$$
(12.253)

In diesem Operator können wir den ungeraden Anteil zum Verschwinden bringen durch die Wahl der Funktion f(p) = mcF(p) durch

$$\begin{aligned} \cos(2qf) &= \frac{\sin(2qf)}{q} ,\\ \text{oder} & \tan(2qf) &= q ,\\ \text{also} & f(p) = mcF(p) &= \frac{1}{2q}\arctan(q) \end{aligned} \tag{12.254}$$

ode

Damit erhalten wir für die Transformation (12.245)

$$S = -i\beta \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\right) F(p)$$

= $-i\beta \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\right) \frac{1}{2qmc} \arctan(q)$
= $-\frac{i}{2}\beta \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\right) \frac{1}{p} \arctan\left(\frac{p}{mc}\right)$. (12.255)

Für den transformierten Hamilton-Operator (12.253) folgt

$$\hat{H}' = mc^2 \left[\cos \left(\arctan q \right) + q \sin \left(\arctan q \right) \right] \beta$$
.

Mit

$$\cos x = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 x}}, \quad \sin x = \frac{\tan x}{\sqrt{1 + \tan^2 x}}$$
$$\sin x = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 x}}, \quad \sin (\arctan q) = \frac{q}{\sqrt{1 + \tan^2 x}}$$

gilt $\cos(\arctan q) =$

$$\hat{H}' = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1+q^2}}, -\frac{q^2}{\sqrt{1+q^2}} \right) \beta = mc^2 \sqrt{1+q^2} \beta, \quad (12.256)$$

so dass

$$H = mc^{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1+q^{2}}} + \frac{1}{\sqrt{1+q^{2}}} \right) \beta = mc^{2} \sqrt{1+q^{2}} \beta, \quad (12.256)$$
$$\hat{H}' = mc^{2} \sqrt{1+\left(\frac{p}{mc}\right)^{2}} \beta = c \sqrt{p^{2}+(mc)^{2}} \beta. \quad (12.257)$$

oder

Bis auf den Faktor
$$\beta$$
 ist der transformierte Hamilton-Operator gleich der relativistischen Energie-Impuls-Relation. Mit

 $\Psi^{'} = \begin{pmatrix}\underline{u}^{'} \\ \underline{v}^{'} \end{pmatrix}$

erhalten wir für die transformierte Dirac-Gleichung (12.243)

$$E\left(\frac{\underline{u}'}{\underline{v}'}\right) = \hat{H}'\left(\frac{\underline{u}'}{\underline{v}'}\right) = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}\beta\left(\frac{\underline{u}'}{\underline{v}'}\right) = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}\begin{pmatrix}\hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\underline{u}'\\\underline{v}'\end{pmatrix}$$

Diese entkoppelt zu

$$c\sqrt{p^2 + (mc)^2}\underline{u}' = E\underline{u}' \tag{12.258}$$

$$-c\sqrt{p^2 + (mc)^2}\underline{v}' = E\underline{v}'.$$
(12.259)

und

Setzen wir $\underline{v}' = 0$, so beschreibt $\begin{pmatrix} \underline{u}' \\ 0 \end{pmatrix}$ einen Zustand positiver Energie. Setzen wir $\underline{u}' = 0$, so beschreibt $\begin{pmatrix} 0 \\ \underline{v}' \end{pmatrix}$ einen Zustand negativer Energie, d. h. einen Antiteilchenzustand. Mit den Abkürzungen

$$\omega = \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{p}, \quad z = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{p}{mc}\right)$$

$$\omega^2 = 1, \quad \beta\omega = -\omega\beta$$
(12.260)

gilt

und die Transformation (12.255) lautet

$$S = -i\beta\omega z \; .$$

Es folgt

$$e^{iS} = e^{\beta\omega z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (\beta\omega)^n$$

= $1 + \frac{z}{1!} (\beta\omega) + \frac{z^2}{2!} (\beta\omega)^2 + \frac{z^3}{3!} (\beta\omega)^3 + \dots$
= $1 + \frac{z}{1!} (\beta\omega) - \frac{z^2}{2!} - \frac{z^3}{3!} (\beta\omega) + \frac{z^4}{4!} + \dots = \cos z + \beta\omega \sin z$.

Der Operator $\beta \omega$ verhält sich offensichtlich wie die imaginäre Einheit *i*:

$$(\beta\omega)^2 = -1$$
, $(\beta\omega)^3 = -\beta\omega$, $(\beta\omega)^4 = 1$ usw.

Nach Gleichung (12.242) finden wir dann für die transformierte Wellenfunktion

$$\Psi' = e^{iS}\Psi = \left[\cos z + (\sin z)\,\beta\omega\right]\Psi\,,\tag{12.261}$$

während der Hamilton-Operator (12.244) in dieser Notation gegeben ist durch

$$\hat{H}_D = mc^2\beta + c\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) = mc^2\beta + cp\omega \;.$$

Die nichttransformierte Dirac-Gleichung (12.236) ergibt dann für Ψ die Gleichung

$$(mc^2\beta + cp\omega)\Psi = cp\left[\omega + \frac{mc}{p}\beta\right]\Psi = E\Psi.$$

Wir multiplizieren von links mit β , so dass

$$cp\left[\beta\omega + \frac{mc}{p}\beta^2\right]\Psi = cp\left[\beta\omega + \frac{mc}{p}\right]\Psi = E\beta\Psi.$$

Wir erhalten

$$\beta \omega \Psi = \left[\frac{E}{cp} \beta - \frac{mc}{p} \right] \Psi$$

Einsetzen in Gleichung (12.261) ergibt

$$\Psi' = e^{iS}\Psi = \cos z\Psi + \sin z \left[\frac{E}{cp}\beta - \frac{mc}{p}\right]\Psi$$
$$= \left[\left(\cos z - \frac{mc}{p}\sin z\right) + \frac{E}{cp}(\sin z)\beta\right]\Psi. \quad (12.262)$$

Es gilt

$$\frac{E}{pc} = \pm \frac{\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}}{pc}$$
$$= \pm \frac{mc^2}{pc} \sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} = \pm \frac{mc}{p} \epsilon . \qquad (12.263)$$

mit

$$\epsilon = \sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} > 1 \tag{12.264}$$

$$\frac{p}{mc} = \sqrt{\epsilon^2 - 1} . \tag{12.265}$$

Gleichung (12.263) ergibt dann

$$\frac{E}{pc} = \pm \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} . \tag{12.266}$$

Ebenso finden wir für

$$z = \frac{1}{2} \arctan\left(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\right)$$

und
$$\sqrt{\epsilon^2 - 1} = \tan 2z = \frac{2 \tan z}{1 - \tan^2 z} .$$

Dies ergibt die quadratische Gleichung

$$1 - \tan^2 z = \frac{2}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} \tan z ,$$
$$\tan^2 z + \frac{2}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} \tan z = 1 ,$$

oder

$$\tan z = \frac{\epsilon - 1}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} = \sqrt{\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1}} . \tag{12.267}$$

Es folgt daraus

$$1 + \tan^2 z = 1 + \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} = \frac{2\epsilon}{\epsilon + 1},$$

$$\cos z = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 z}} = \sqrt{\frac{\epsilon + 1}{2\epsilon}},$$

$$\sin z = \tan z \cos z = \sqrt{\frac{\epsilon - 1}{2\epsilon}}.$$
(12.268)

384

so dass
Einsetzen der Gleichungen (12.265), (12.266) und (12.268) ergibt für den transformierte Dirac-Spinor (12.262)

$$\Psi' = \left[\left(\sqrt{\frac{\epsilon+1}{2\epsilon}} - \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} \sqrt{\frac{\epsilon - 1}{2\epsilon}} \right) \pm \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - 1}} \sqrt{\frac{\epsilon - 1}{2\epsilon}} \beta \right] \Psi$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}} \left[\sqrt{\epsilon + 1} - \frac{1}{\sqrt{\epsilon + 1}} \pm \frac{\epsilon\beta}{\sqrt{\epsilon + 1}} \right] \Psi$$
$$= \sqrt{\frac{2\epsilon}{\epsilon + 1}} \frac{1}{2} (1 \pm \beta) \Psi , \qquad (12.269)$$

wobei das Pluszeichen für Teilchenzustände (E > 0) und das Minuszeichen für Antiteilchenzustände (E < 0) gilt.

Angewandt auf

$$\Psi = \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix}$$

sorgen die Projektionsoperatoren in Gleichung (12.269)

$$\frac{1}{2}(1+\beta)\begin{pmatrix}\underline{u}\\\underline{v}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}\hat{1}&0\\0&\hat{1}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\hat{1}&0\\0&-\hat{1}\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\underline{u}\\\underline{v}\end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix}\hat{1}&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\underline{u}\\\underline{v}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\underline{u}\\0\end{pmatrix} \qquad (12.270)$$
$$\frac{1}{2}(1-\beta)\begin{pmatrix}\underline{u}\\\underline{v}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}\hat{1}&0\\0&\hat{1}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\hat{1}&0\\0&-\hat{1}\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\underline{u}\\\underline{v}\end{pmatrix}$$

und

für die gewünschte Entkopplung. Die vierkomponentige Dirac-Gleichung spaltet somit in zwei zweikomponentige Gleichungen auf, die man getrennt behandeln kann.

 $= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{v} \end{pmatrix} ,$

Abschließend bemerken wir, dass beim Vorliegen von Kräften, etwa $\vec{A} \neq 0$, die Foldy-Wouthuysen-Transformation nicht mehr explizit angeben kann. In diesem Fall kann man nur schrittweise die ungeraden Anteile des Hamilton-Operator abbauen. Dieses iterative Verfahren funktioniert gut für nichtrelativistische Teilchen $E - mc^2 \ll mc^2$.

(12.271)

$12\ {\rm Relativistische}\ Quantenmechanik$

A Anhang

A.1 Empfohlene Literatur

A.1.1 Bücher zur Quantenmechanik:

Merzbacher, E. (1998): Quantum Mechanics, 3rd Ed., John Wiley, New York

Griffith, D. J. (1995): Introduction to Quantum Mechanics, Prentice-Hall, Upple Saddle River

Fließbach, T. (1996): Quantenmechanik, Spektrum Lehrbuch

Schwabl, F. (1998): Quantenmechanik I, Springer, Berlin

Glöckle, W.: Quantenmechanik I, Skript, Ruhr-Universität Bochum

A.1.2 Bücher für mathematische Formeln ("Grundausstattung"):

K. Rottmann, Mathematische Formelsammlung

I. N. Bronstein, K. A. Semedjajew, G. Musiol, H. Mühlig: Taschenbuch der Mathematik, Harri Deutsch Verlag

M. Abramowitz, I. A. Stegun: Handbook of Mathematical Functions, National Bureau of Standards (oder Dover Publ.)

I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik: Tables of Integrals, Series and Products (deutsche Übersetzung: Harri Deutsch Verlag)

A.1.3 Bücher für mathematische Physik ("Grundausstattung"):

G. Arfken: Mathematical Methods for Physicists, Academic Press

C. R. Wylie: Advanced Engineering Mathematics, McGraw-Hill

P. M. Morse, H. Feshbach: Methods of Theoretical Physics, Vol. I and II, McGraw-Hill