

Quanten Mechanik I

Woche 1

Kap. 1 Warum ist QM nötig ? → Experimenten

Kap. 2 Schrödinger'sche QM. → Wellenfunktion, Schrödinger Gleichung.

Kap. 3 Allgemeine Formulierung der QM. → „Mathe“

Woche 2

Kap. 4 QM in einer räumlichen Dimension → „Harmonische Oszillator, Tunnel Effekt, Band Struktur.

Kap. 5 Zentral potential und Drehimpuls. → Wasserstoff Atom.

Kap. 6 Symmetrien und Erhaltungssätze.

Woche 3

Kap. 7 Der Spin. → Spin-Bahn Kopplung, Dynamik von Spin Systeme (NMR).

Kap. 8 Addition von Drehimpuls. → Feinstruktur Aufspaltung.

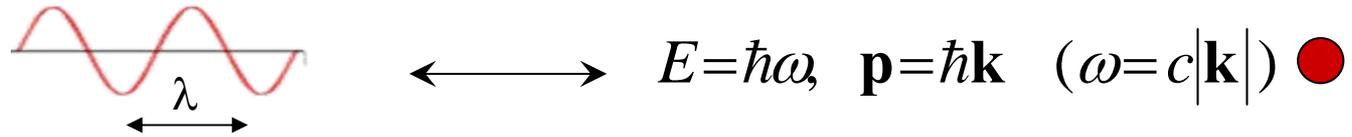
Kap. 9 Störungstheorie. → Zeitunabhängige Störungstheorie und Fermi Goldene Regel.

Teilchen-Welle Dualität

Photoelektrische Effekt, Compton Streuung.

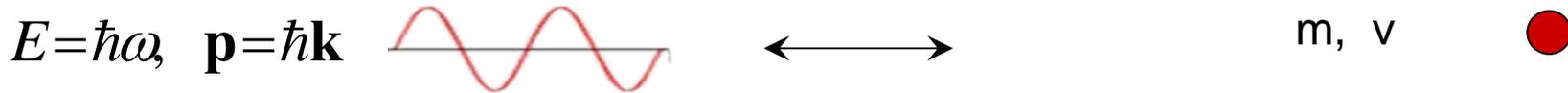
Einstein 1905

Licht hat Teilchen Charakter.



De Broglie 1923

Teilchen haben Wellen Charakter.

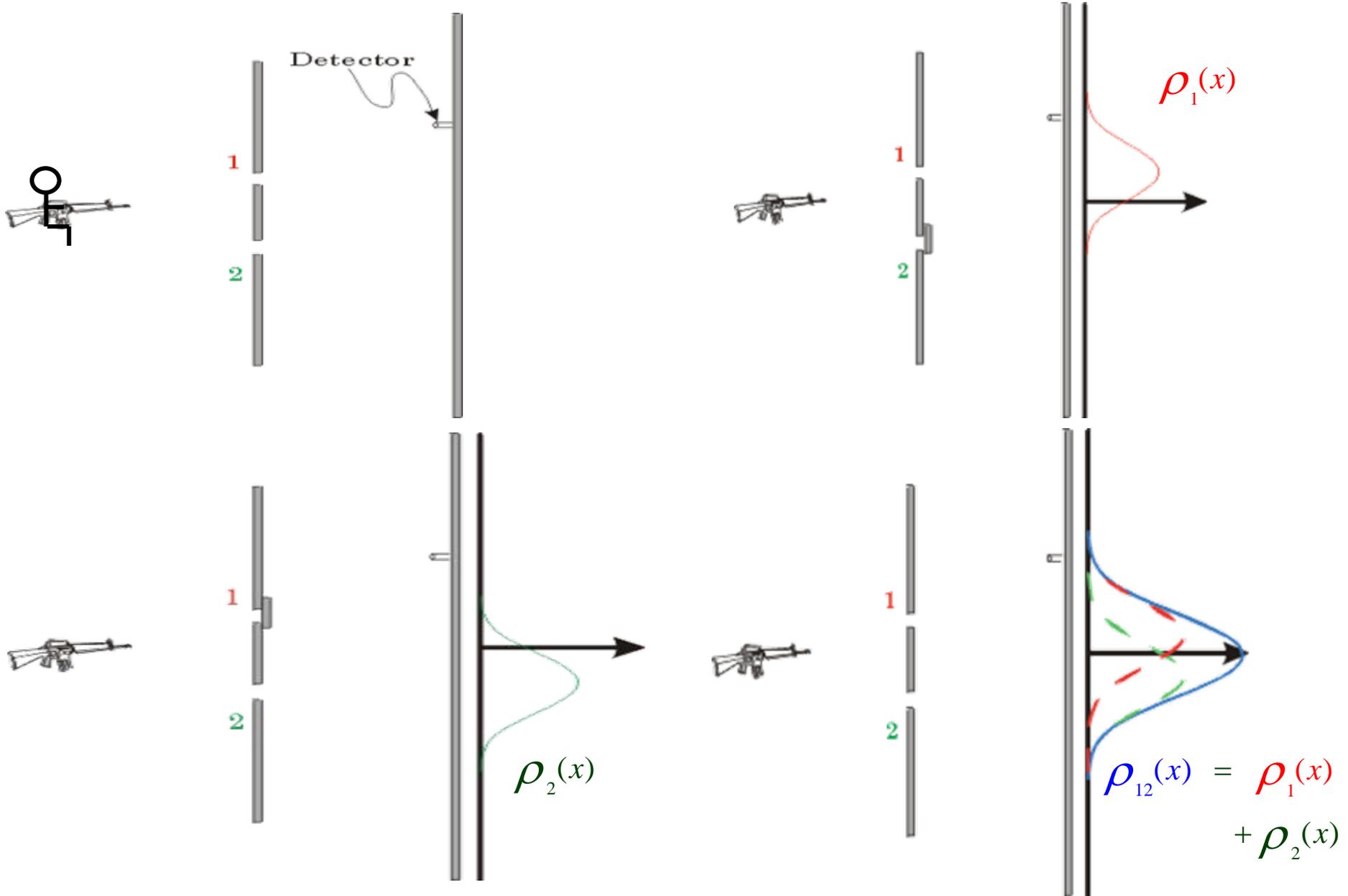


Davisson-Germer experiment (1927)

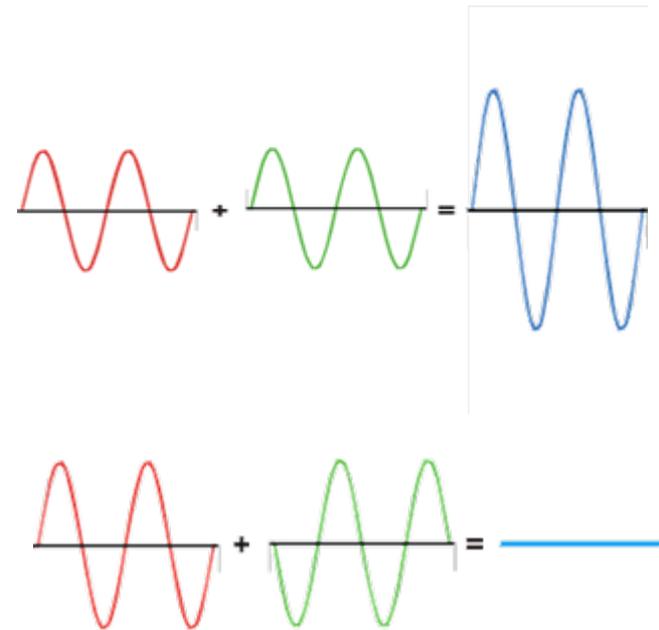
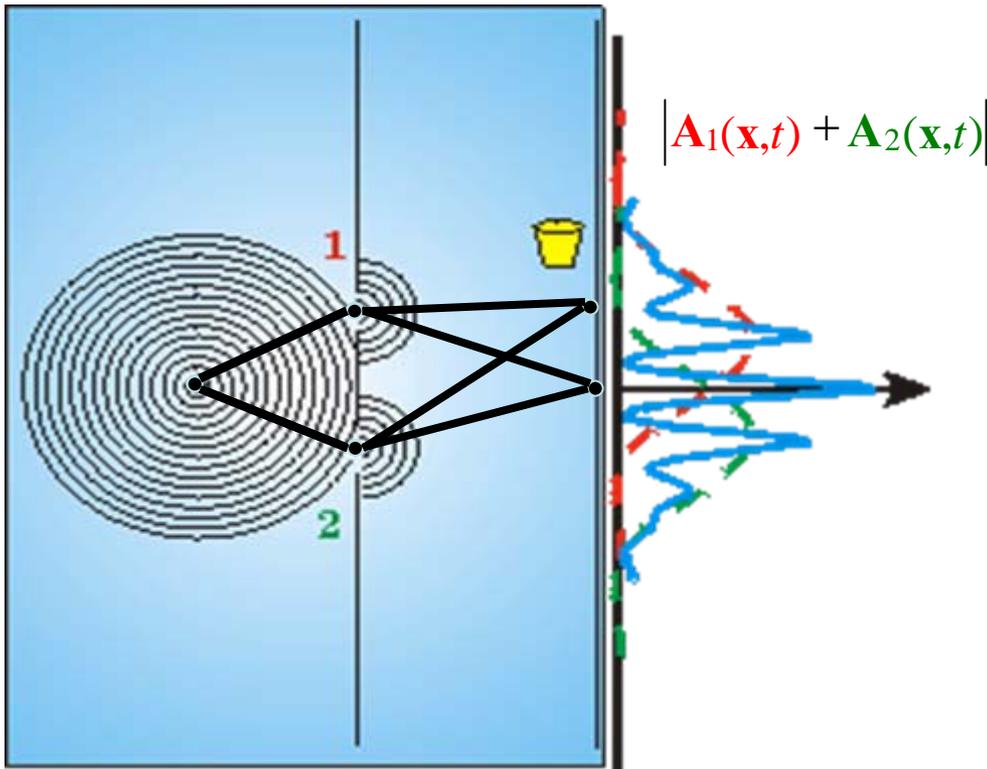
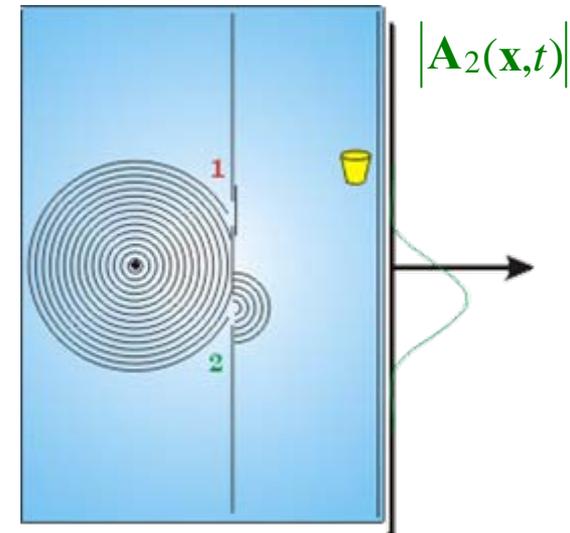
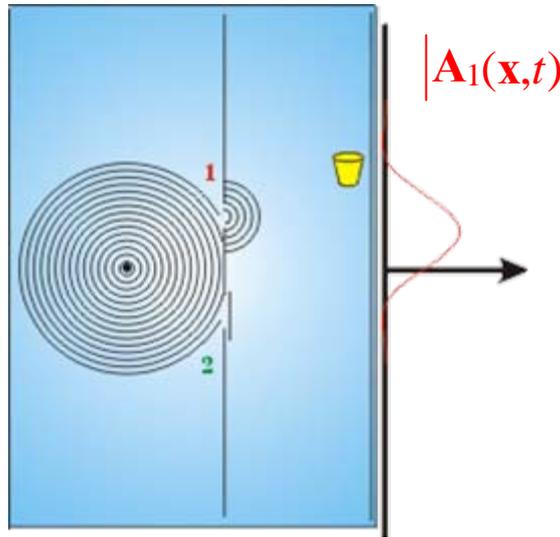
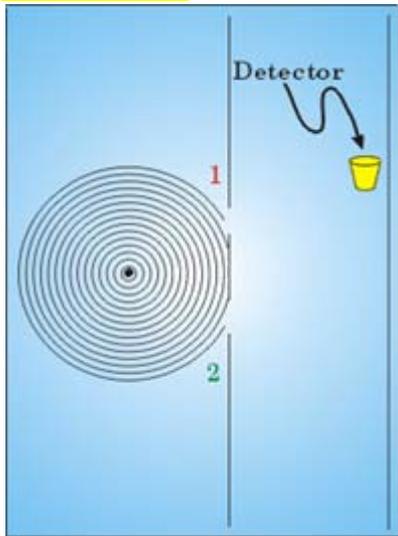
Atomspektren. Bohrs Quantenhypothese (1913) $L = n\hbar$

QM: 1923-1927: Dynamik von einem Teilchen ist durch eine **Welle** beschrieben.
Bei einer Messung beobachtet man ein **Teilchen**.

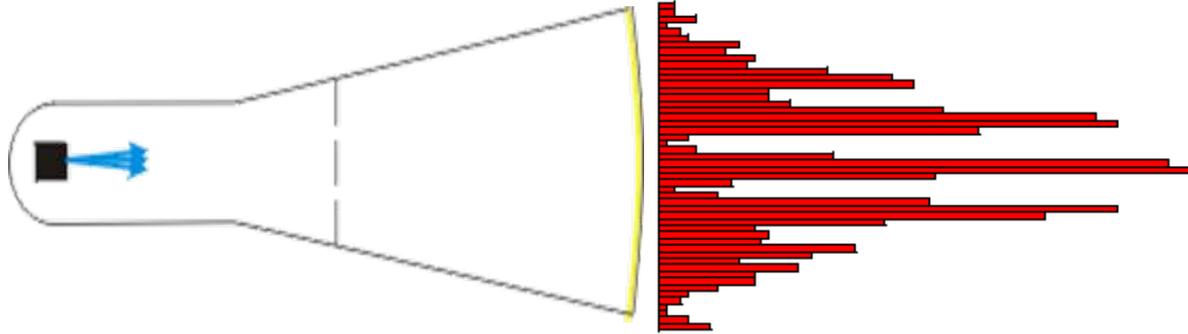
Feynman Doppel-Spalt-Experiment. Teilchen, Wellen und Materie-Wellen.



Wellen



Was passiert bei Elektronen?



Elektron treffen den Bildschirm wie Teilchen.

Verteilung zeigt Interferenz-Muster wie bei Wellen.

Planck 1923.

Elektron ist durch eine Welle beschrieben. Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t)$

Bei eine Messung beobachtet man eine Teilchen. $|\Psi(x,t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron am Ort x zu finden.

Die Aussagen des QM sind von statistischer Natur.



EINSTEIN

QUANTUM
THEORY IS
NON-INTUITIVE
AND DEFIES
COMMON
SENSE.



PLANCK

QUANTUM
THEORY IS ESSENTIALLY
MATHEMATICAL...



SCHRÖDINGER

QUANTUM
THEORY HAS
NEVER FAILED.

“There was a time when the newspapers said that only twelve men understood the theory of relativity. I do not believe that there ever was such a time. . . . On the other hand, I think it is safe to say that no one understands quantum mechanics. . . . Do not keep saying to yourself, if you can possibly avoid it, ‘But how can it be like that?’ because you will get ‘down the drain’ into a blind alley from which nobody has yet escaped. Nobody knows how it can be like that.”

R. P. Feynman

The Character of Physical Law
(1967a, p. 129)

Kap.1 Zusammenfassung.

Teilchen ist durch eine Welle beschrieben. Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x}, t)$

Bei eine Messung beobachtet man eine Teilchen. $|\Psi(x,t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron am Ort x zu finden.

Die Aussagen des QM sind von statistischer Natur !

De Boglie: Wellenfunktion für freies Teilchen mit Impuls \mathbf{p} und Energie $E = \mathbf{p}^2/2m$

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p} \mathbf{x} - E t]\right) \quad \text{da} \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad \text{und} \quad E = \hbar \omega$$

Schrödingergleichung. Dynamik von Wellenfunktion.

Forderungen:

- 1) Dgl 1. Ordnung in Zeit. => $\Psi(\mathbf{x}, t)$ ist eindeutig bestimmt durch $\Psi(\mathbf{x}, t = 0)$
- 2) Linear. => Interferenz Effekten wie im Elektrodynamik.
- 3) Erhaltung von Wahrscheinlichkeitsdichte. (Homogen).
- 4) $\Psi(\mathbf{x}, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p} \mathbf{x} - E t]\right)$ ist Lösung für Teilchen mit Energie E und Impuls \mathbf{p}

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

Allgemeine Lösung für Freies Teilchen.

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{x}, t) &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t=0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} [\mathbf{p} \mathbf{x} - E_{\mathbf{p}} t]\right) = \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{x}\right)\end{aligned}$$

$$\frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left| \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \right|^2$$

Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt t innerhalb des Impulsraum Volumenelement $d^3 \mathbf{p}$ um den Impuls \mathbf{p} zu finden.

Observablen / Korrespondenzprinzip in Ortsraum.

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int d^3 \mathbf{x} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathbf{x} = \int d^3 \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t)^* \hat{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad \hat{\mathbf{X}} = \mathbf{x}$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\Psi(\mathbf{p}, t)|^2 \mathbf{p} = \int d^3 \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t)^* \hat{\mathbf{P}} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad \hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}}$$

$$\langle E \rangle = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\Psi(\mathbf{p}, t)|^2 \mathbf{p}^2 / 2m = \int d^3 \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t)^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t)$$

Allgemeine Form der Schrödinger Gleichung.

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

wo $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ die Klassische Hamiltonsche Funktion entspricht.

Gauss Wellenpaket.

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} e^{-x^2/4D}$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} \left(\frac{D}{D(t)} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} (p_0 x - E(p_0) t)} e^{-(x - v_0 t)^2 / 4D(t)}$$

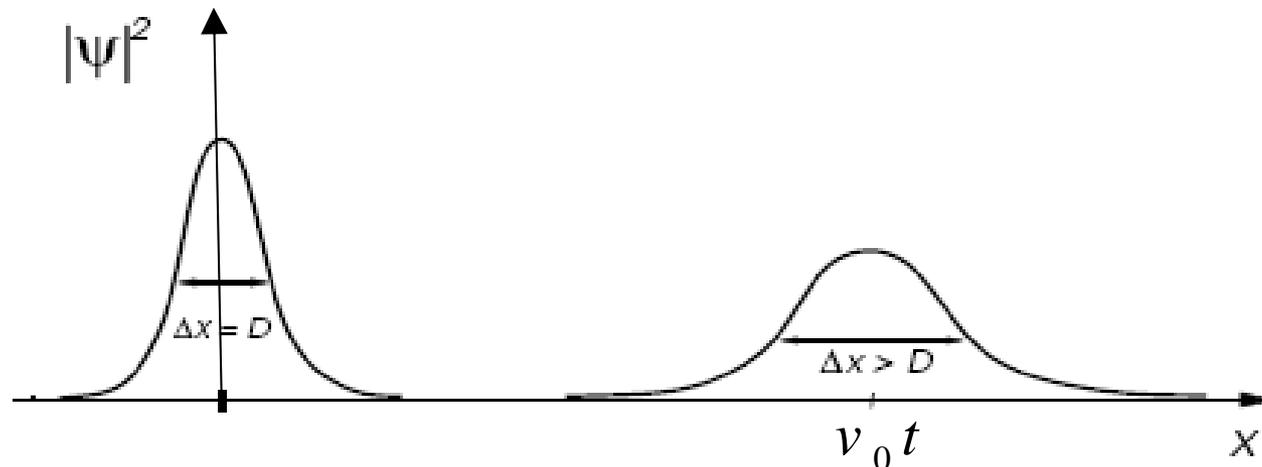
$$v_0 = p_0/m$$

$$D(t) = D + i\hbar/2m$$

$$\langle p \rangle = p_0, \quad \langle x \rangle = v_0 t$$

Wie beim klassischen Teilchen. Beispiel von Ehrenfest Theorem (siehe Kap. III.)

$$(\Delta p)^2 \equiv \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4D}, \quad (\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = D \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 D^2} \right)$$



Aus Rechnung:
$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + (\hbar t / 2 m D)^2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Beispiel von Heisenberg Unschärfe-Relation. Allgemein gilt:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$
 (siehe Kap. 3) Unmöglich p und x Gleichzeitig exakt zu bestimmen!

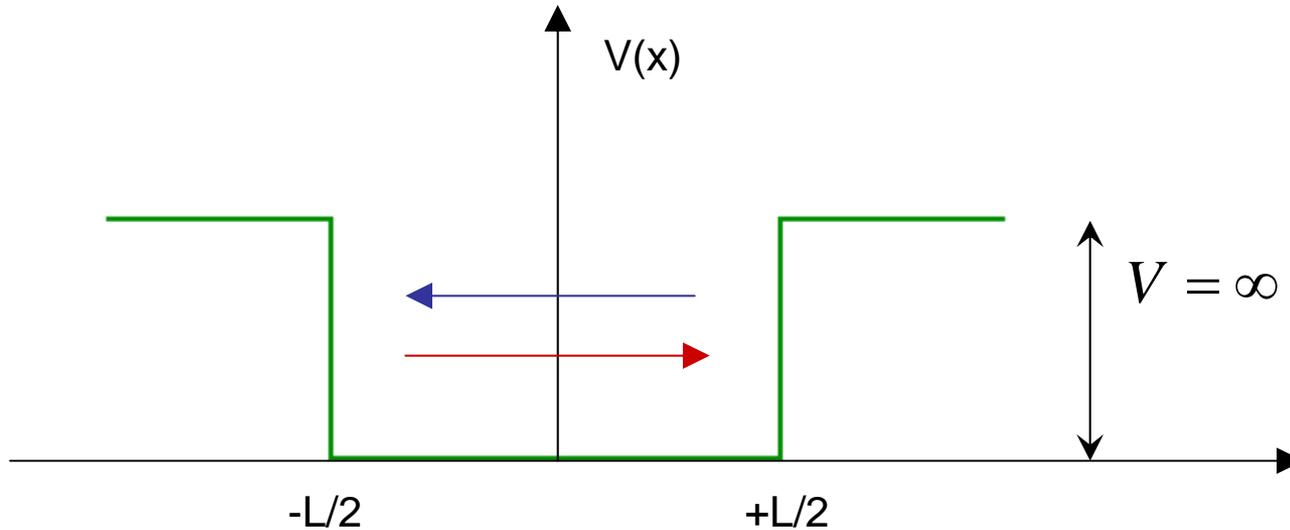
Konsequenz. Nullpunkt Bewegung, Nullpunktenergie.

Beispiel: Harmonische Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m \omega^2}{2} \hat{X}^2$$

Sogar wenn $\langle p \rangle = \langle x \rangle = 0$ gilt $\langle E \rangle \geq \frac{\hbar \omega}{2}$

Teilchen im unendlich Potentialtopf.



Stationäre Schrödinger Gl.

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{X}) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

Randbedingung:

$$\psi(x) = 0 \text{ für } |x| > L/2$$

$$\psi(x) \text{ stetig} \rightarrow \text{für } \psi(x = \pm L/2) = 0$$

Lösungs-Ansatz ($|x| < L/2$)

$$\psi(x) = a e^{ipx/\hbar} + b e^{-ipx/\hbar}$$

Stationäre Schr. Gl. \rightarrow

$$E = p^2 / 2m$$

Rand Bedingung \rightarrow

$$k = p / \hbar = 2n \pi / L, \quad k = p / \hbar = (2n + 1) \pi / L$$

Ungerade Pariät.

$$k_n^{(u)} = 2n \pi / L, \quad n = 1, 2, 3..$$

$$\psi_n^{(u)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x)$$

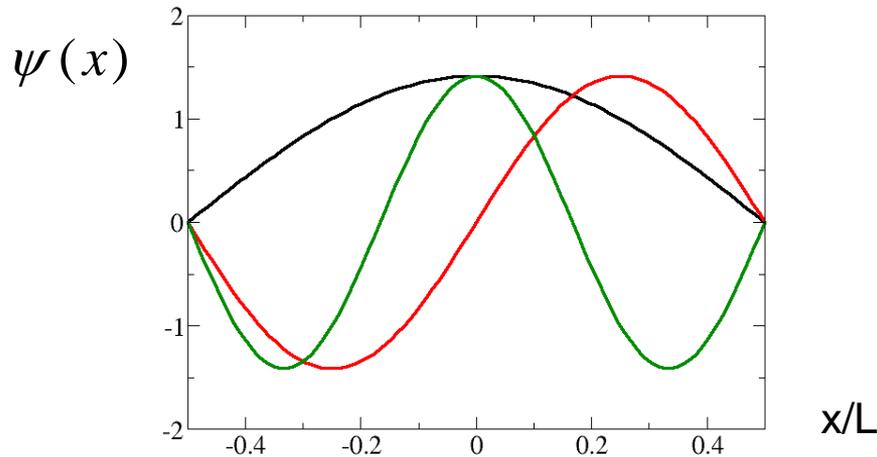
$$E_n^{(u)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(u)2}}{2m}$$

Gerade Pariät.

$$k_n^{(g)} = (2n+1) \pi / L, \quad n = 0, 1, 2, 3..$$

$$\psi_n^{(g)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n x)$$

$$E_n^{(g)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(g)2}}{2m}$$



$$\psi_0^{(g)}(x)$$

$$\psi_1^{(u)}(x)$$

$$\psi_1^{(g)}(x)$$

x/L

Comments.

- 1) Quantization of energy stems from boundary condition!
- 2) Ground state does not have vanishing energy. (Zero point motion! Uncertainty principle.)
- 3) The energy Eigenstates build a complete basis (VONS) of $L^2([-L/2, L/2])$

$$\forall \psi(x, t=0), \quad \psi(x, t=0) = a_0^{(g)} \psi_0^{(g)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(g)} \psi_n^{(g)}(x) + a_n^{(u)} \psi_n^{(u)}(x)$$

and

$$\psi(x, t) = a_0^{(g)} e^{-itE_0^{(g)}/\hbar} \psi_0^{(g)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(g)} e^{-itE_n^{(g)}/\hbar} \psi_n^{(g)}(x) + a_n^{(u)} e^{-itE_n^{(u)}/\hbar} \psi_n^{(u)}(x)$$

is a solution of the time dependent Schrödinger equation with appropriate initial conditions!

Kap. III Allgemeine Formulierung der QM.

- 1) Der Hilbertraum, Dirac Notation.
- 2) Lineare Operatoren.
- 3) Postulate der QM.
- 4) Unschärferelation, Zeitevolution, Bewegungsgleichungen für Operatoren.
- 5) Dichtematrix Formulierung.
- 6) Pfadintegral Formulierung.

a) Hilbertraum, Dirac-Notation.

QM System \longrightarrow Menge von Zustände (z.b. Zustände Teilchen in unendliche Potentialtopf. $\psi_n(x)$)

Zustände identifizieren wir zu Vektoren $|\alpha\rangle$ in abstrakte **Hilbertraum** \mathcal{H}

$$\text{Ket. } |\alpha\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_\infty \end{pmatrix} \quad a_i \in \mathbb{C} \quad \text{z.b. } |n\rangle \rightarrow \psi_n(x)$$

Duale Zustand Vektor zu $|\alpha\rangle$

$$\text{Bra. } \langle\alpha| \rightarrow (a_1^*, \dots, a_\infty^*)$$

$$\text{Skalarprodukt. } |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + \dots + a_\infty^* b_\infty$$

$$\text{Orthogonalität. } \langle\alpha|\beta\rangle = 0 \Rightarrow |\alpha\rangle, |\beta\rangle \quad \text{Orthogonal zueinander.}$$

Norm (durch Skalarprodukt induziert)

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} \quad \text{Es gilt } \|\alpha + \beta\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$$
$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \|\alpha\|^2 \|\beta\|^2$$

Basis Vollständig Orthonormalsystem (**VONS**)

$\exists |\phi_n\rangle, n=1 \dots \infty, \in \mathcal{H}$ so dass:

1) $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad |\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \alpha \rangle$ Vollständigkeit.

2) $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$ Orthonormal.

3) $\sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle = 0 \Rightarrow a_i = 0 (i:1 \dots \infty)$ Linear unabhängig

Darstellung des Eins.

Aus Vollständigkeit folgt:

$$\mathbf{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n |$$

Beispiel.

a)

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Geeignet für zwei-niveau System.

Darstellung der Eins.

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}$$

b) **Impuls und Ort Basen**, Teilchen in \mathbb{R}^3

$|\mathbf{p}\rangle \rightarrow$ Teilchen mit Impuls \mathbf{p}

$|\mathbf{x}\rangle \rightarrow$ Teilchen am Ort \mathbf{x}

Orthogonal $\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$,

$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$,

Vollständigkeit. $\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}\rangle\langle \mathbf{p}| = \mathbf{1}$

$\int d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}| = \mathbf{1}$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle = \tilde{\Psi}(\mathbf{p})$

$\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{x})$

Basis Transformationen.

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{1} | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle}_{= e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p})\end{aligned}$$


Vergleich Kap. II.
(De Broglie)

Norm

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) \tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \int d^3 \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = \int d^3 \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2$$

2) Linear Operatoren $\hat{\mathbf{A}}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\hat{\mathbf{A}}|\alpha\rangle + b\hat{\mathbf{A}}|\beta\rangle$ mit $\hat{\mathbf{A}}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

Adjungiert Operator. $\hat{\mathbf{A}}^+ : \langle\beta|\hat{\mathbf{A}}|\alpha\rangle = (\langle\alpha|\hat{\mathbf{A}}^+|\beta\rangle)^*$

Kommutator: $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$

Funktion eines Operators ist durch Taylor Entwicklung definiert: $\exp(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{\mathbf{A}}^n}{n!}$

Operatoren lassen sich als **Matrizen Darstellen:**

$$\text{Sei } \{|n\rangle\} \text{ VONS } \Rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \sum_{n,m} \underbrace{\langle n|\hat{\mathbf{A}}|m\rangle}_{=A_{n,m}} |n\rangle\langle m|$$

$\hat{\mathbf{A}}$ Hermitesch: $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^+$

$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^+ \Rightarrow \exists \{|\alpha_n\rangle\} \mid \{|\alpha_n\rangle\} \text{ VONS und } \hat{\mathbf{A}}|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle \text{ mit } a_n \in \mathbb{R}$

$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^+ \Rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \sum_n a_n |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|$ **Spektral Darstellung eines hermitesch Operator.**

Erwartungswert eines Operator für den Zustand $|\psi\rangle$: $\langle \hat{\mathbf{A}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{A}} | \psi \rangle$

Messgrößen entsprechen hermitesch Operatoren. $\hat{\mathbf{A}}^+ = \hat{\mathbf{A}} \Rightarrow \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle = \sum_n a_n |\langle \alpha_n | \psi \rangle|^2$

Beisp. Hamilton Operator Diskrete spektrum.

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}^+, \quad \hat{\mathbf{H}} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad \hat{\mathbf{H}} = \sum_n E_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

Impuls Operator Kontinuierliche Spektrum.

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}}^+, \quad \hat{\mathbf{P}} |\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle, \quad \hat{\mathbf{P}} = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$$

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{P}} | \mathbf{x}' \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Ort Operator Kontinuierliche Spektrum.

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{X}}^+, \quad \hat{\mathbf{X}} |\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle, \quad \hat{\mathbf{X}} = \int d^3 \mathbf{x} \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$$

3) Postulate der QM.

P1. Jedes Zustand eines QM System wird durch ein Element $|\psi\rangle$ des Hilbertraumes \mathcal{H} beschrieben.

P2. Messbaren Größen (Observablen) entsprechen hermitesche Operatoren.

P3. Erwartungswert einer Observablen $\hat{\mathbf{A}}$ in einem gegebenen Zustand $|\psi\rangle$ wird durch $\langle \hat{\mathbf{A}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{A}} | \psi \rangle$ gegeben.

P4. Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch den Hamilton Operator bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

P5. Es können für einen Observablen $\hat{\mathbf{A}}$ nur die Eigenwerte als Messergebnis auftreten.

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^\dagger \Rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \sum_n a_n |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n| \quad \text{und} \quad \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle = \sum a_n |\langle \alpha_n | \psi \rangle|^2$$

$|\langle \alpha_n | \psi \rangle|^2$: Wahrscheinlichkeit Messergebnis a_n zu erhalten.

Falls a_n gemessen wird dann geht der Zustand des Systems in den entsprechenden

Eigenzustand $|\alpha_n\rangle$ (collapse of the wave function)

(Zur Messungen: J. von Neumann, Mathematical foundations of QM, D. Bohm: Quantum theory, Messiah, Quantum mechanics)

4) Unschärferelation:

$$\hat{\mathbf{A}}^\dagger = \hat{\mathbf{A}}, \quad \hat{\mathbf{B}}^\dagger = \hat{\mathbf{B}}, \quad \Delta\mathbf{A}^2 = \left\langle \left(\hat{\mathbf{A}} - \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle \right)^2 \right\rangle$$

Standardabweichung vom Mittelwert.

$$\Delta\mathbf{A} \Delta\mathbf{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] | \psi \rangle \right| \quad \text{Beisp: } [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] = \frac{\hbar}{i} \quad \text{so dass } \Delta\mathbf{P} \Delta\mathbf{X} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Zeitevolution für Zeit unabhängige Hamilton Operator.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{Def: } |\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$

Aus Schr. Gl.: $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$

Damit ist:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$$

$$\hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \mathbf{1}$$

(da $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$)

Zeitevolution Operator für Zeitabhängige Hamilton Operatoren $\hat{H}(t)$

Def: $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$

Aus Schr. Gl. : $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$

➤ $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad t > t_1 > t_0$

➤ U ist Unitär. $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}$

➤ Dyson Reihe.

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n)$$

Bem: Falls $\hat{H}(t) = \hat{H}$ liefert die Dyson Reihe: $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}$

Bewegungsgleichungen des Operatoren:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle \quad \Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar} |\psi(t=0)\rangle$$

$$\langle \psi(t) | \hat{\mathbf{A}} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t=0) | \underbrace{e^{i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar} \hat{\mathbf{A}} e^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar}}_{=\hat{\mathbf{A}}(t)} | \psi(t=0) \rangle$$

$\hat{\mathbf{A}}(t)$: Heisenberg-Darstellung.

Bewegungsgleichung:

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

Ehrenfest Theorem

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

Im Ortsdarstellung gilt: $m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{\mathbf{X}}(t) \rangle = -\langle \nabla_x V[\hat{\mathbf{X}}(t)] \rangle = \langle F[\hat{\mathbf{X}}(t)] \rangle$ Ähnlich zu Newton.

Äquivalenz ist nicht streng da im allgemein: $\langle F[\hat{\mathbf{X}}(t)] \rangle \neq F(\langle \hat{\mathbf{X}}(t) \rangle)$

5) Dichtematrix Formulierung.

Reine Zustand. $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ Dann gilt $\langle\hat{\mathbf{A}}\rangle = \langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathbf{A}}]$

Gemischte Zustand.

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad \text{Dann gilt} \quad \langle\hat{\mathbf{A}}\rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathbf{A}}] = \sum_n p_n \langle\psi_n|\hat{\mathbf{A}}|\psi_n\rangle$$

p_n : Wahrscheinlichkeit dass reine Zustand $|\psi_n\rangle$ vorkommt.

Beispiel (Rein)

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad \text{mit} \quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + e^{i\varphi} |\psi_2\rangle), \quad \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{i,j}$$

$$\text{Tr}[\hat{\mathbf{A}}\hat{\rho}] = \frac{1}{2} \left(\langle\psi_1|\hat{\mathbf{A}}|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\hat{\mathbf{A}}|\psi_2\rangle + 2\text{Re}[\langle\psi_1|\hat{\mathbf{A}}|\psi_2\rangle e^{i\varphi}] \right)$$

Beispiel (Gemischte)

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|)$$

$$\text{Tr}[\hat{\mathbf{A}}\hat{\rho}] = \frac{1}{2} \left(\langle\psi_1|\hat{\mathbf{A}}|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\hat{\mathbf{A}}|\psi_2\rangle \right)$$

Beispiel: QM System bei endliche Temperatur, T.

$$\hat{\mathbf{H}}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho} = \sum_n p_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \quad \text{mit} \quad p_n = e^{-E_n/k_B T} / \sum_n e^{-E_n/k_B T}, \quad k_B : \text{ Boltzmann Konst.}$$

Einen gemischten Zustand können wir nicht als Vektor im Hilbertraum Darstellen, da er nicht einen Linearkombination (kohärent Überlagerung) von mehreren Zuständen entspricht !

Zeitevolution der Dichtematrix.

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\rho}(t)]$$

Bewegungsgleichung für Operatoren in Heisenberg Darstellung.:

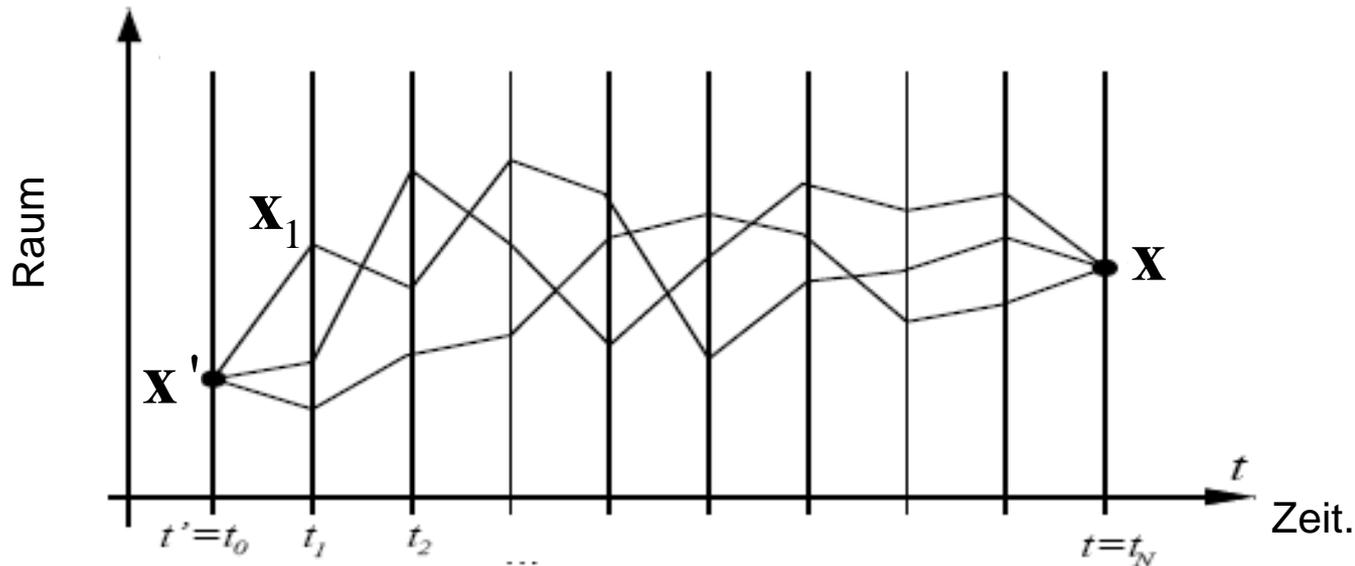
$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{A}}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{A}}(t)]$$

6). Pfad Integral Formulierung.

Propagator:

$$t_j = t' + j \frac{t-t'}{N} \quad j=0,1,\dots,N \quad t' < t$$

$$\begin{aligned}
 K(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t-t') &= \langle \mathbf{x} | e^{-it\hat{H}(t-t')/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle = \\
 &= \int d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \cdots d^3 \mathbf{x}_{N-1} \langle \mathbf{x} | e^{-it\hat{H}(t-t_{N-1})/\hbar} | \mathbf{x}_{N-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{N-1} | e^{-it\hat{H}(t_{N-1}-t_{N-2})/\hbar} | \mathbf{x}_{N-2} \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-it\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle \\
 &= \int d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \cdots d^3 \mathbf{x}_{N-1} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{N-1}, t_N - t_{N-1}) K(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{x}_{N-2}, t_{N-1} - t_{N-2}) \cdots K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}', t_1 - t_0)
 \end{aligned}$$



Für: $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}})$ gilt

$$K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_{j-1}, t_j - t_{j-1} = \varepsilon) \underset{\substack{\uparrow \\ \varepsilon \ll 1}}{\cong} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}}{\varepsilon} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{j-1}) \right) \right)$$

so dass:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t - t') =$$

$$\int d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \cdots d^3 \mathbf{x}_{N-1} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{N-1}, t_N - t_{N-1}) K(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{x}_{N-2}, t_{N-1} - t_{N-2}) \cdots K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}', t_1 - t_0) \cong$$

$$\int \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3(N-1)/2} d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \cdots d^3 \mathbf{x}_{N-1} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \varepsilon \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}}{\varepsilon} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{j-1}) \right) \right)$$

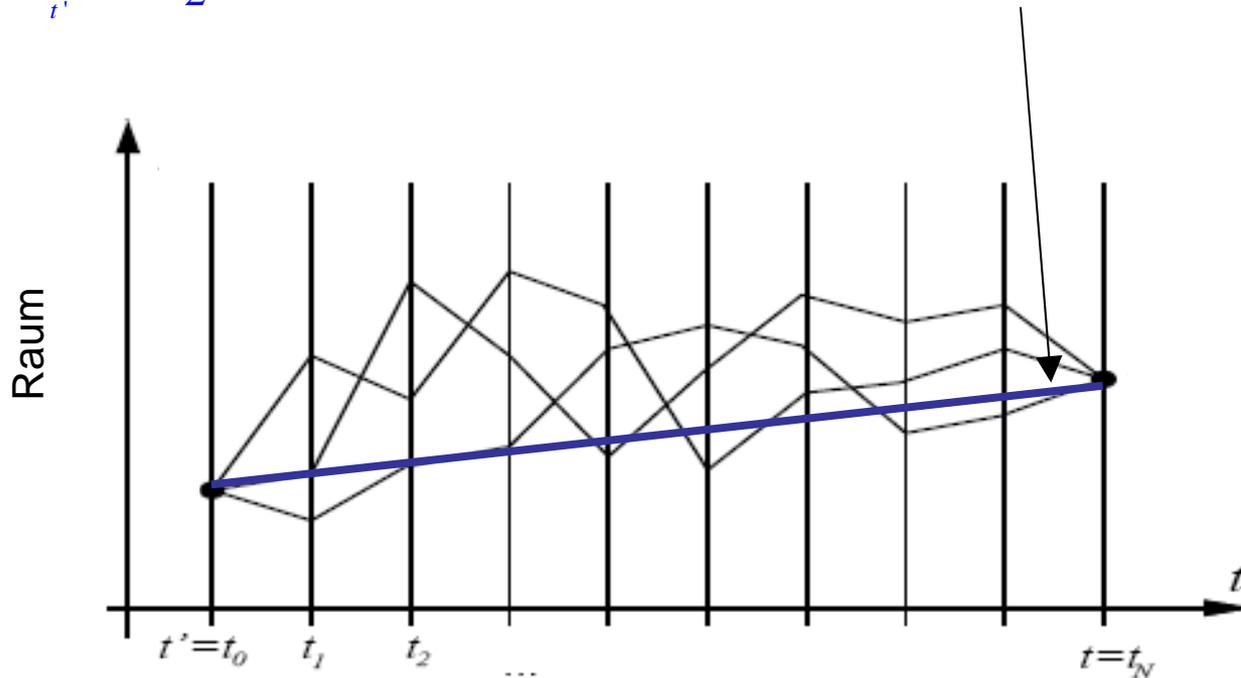
$$\frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}}{\varepsilon} \cong \dot{\mathbf{x}}(t_j) \quad , \quad \sum_{j=1}^N \varepsilon \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}}{\varepsilon} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{j-1}) \right) \approx \int_{t'}^t ds \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(s) - V(\mathbf{x}(s))$$

$$\int \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3N/2} d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \cdots d^3 \mathbf{x}_{N-1} = \int \{ D\mathbf{x}(s) \} \quad \text{Integral über alle Pfade}$$

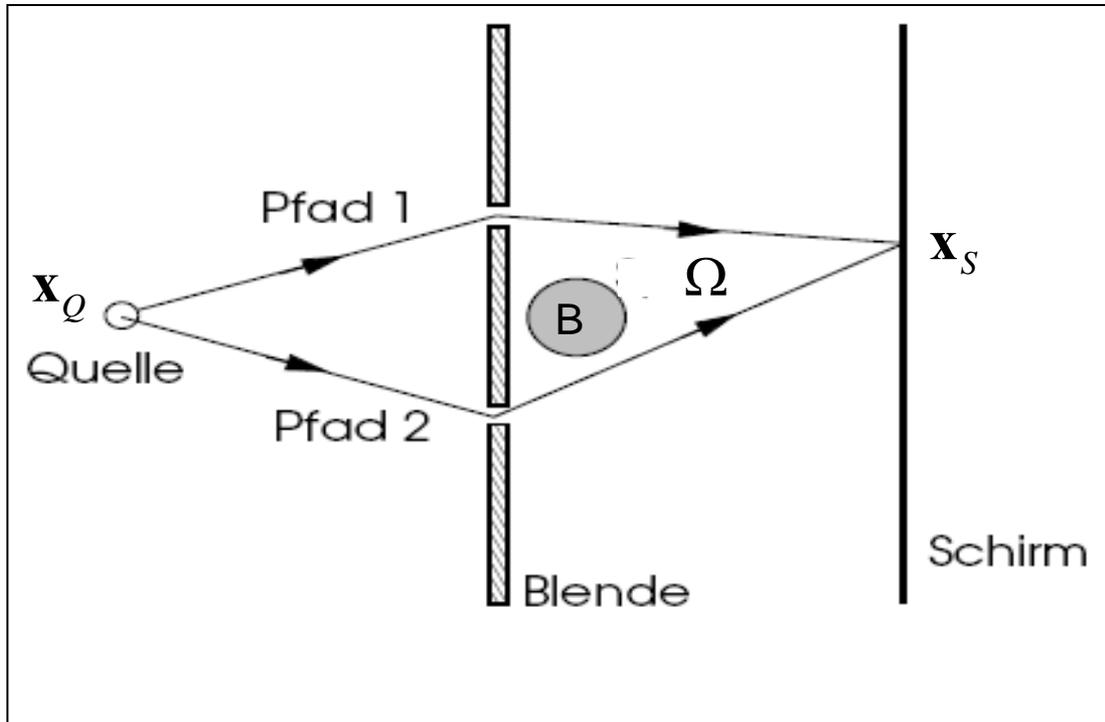
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t - t') \cong \int \{D\mathbf{x}(s)\} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t ds \underbrace{\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(s) - V(\mathbf{x}(s))}_{=L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})} \right)$$

$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$: Klassische Lagrange Funktion.

$$\delta \int_{t'}^t ds \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(s) - V(\mathbf{x}(s)) = 0 \quad \text{Klassische Pfad.}$$



Beisp: Aharonov-Bohm Effekt (1959).



$$K(\mathbf{x}_S, \mathbf{x}_Q, t) \approx$$

$$\sum_{\text{Pfad}, j=1,2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds L(\mathbf{x}_j(s), \dot{\mathbf{x}}_j(s))\right)$$

Mit

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = m \dot{\mathbf{x}}^2 / 2 + \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}}$$

(cgs Einheiten) und

$$\psi(\mathbf{x}, t=0) \approx \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_Q)$$

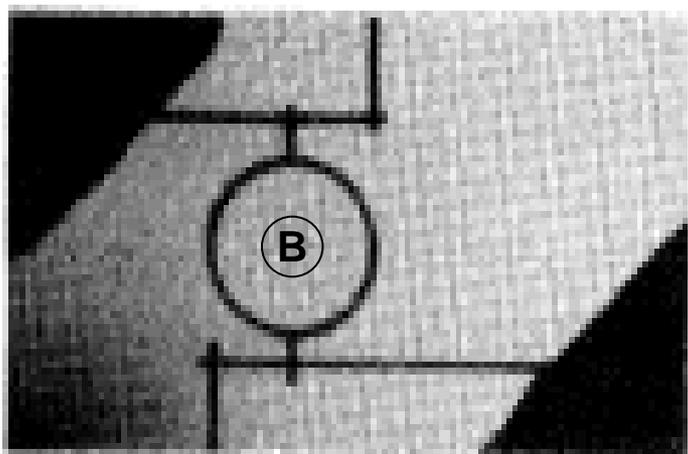
$$|\psi(\mathbf{x}_S, t)|^2 \approx |K(\mathbf{x}_S, \mathbf{x}_Q, t)|^2 \approx |K_1^0|^2 + |K_2^0|^2 + 2 \operatorname{Re}(K_1^{0*} K_2^0 e^{2\pi i \Phi / \Phi_0})$$

$$K_j^0 = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\text{Pfad } j} ds m \dot{\mathbf{x}}_j^2(s)/2}, \quad \Phi = \int_{\Omega} d\Omega \cdot \mathbf{B}, \quad \Phi_0 = 2\pi \hbar c / e \quad \text{Magnetische Fluss Quanta}$$

Interferenz Muster ändert sich periodisch mit Periode Φ / Φ_0 . Effekt hängt nur von Mag. Fluss durch Ω

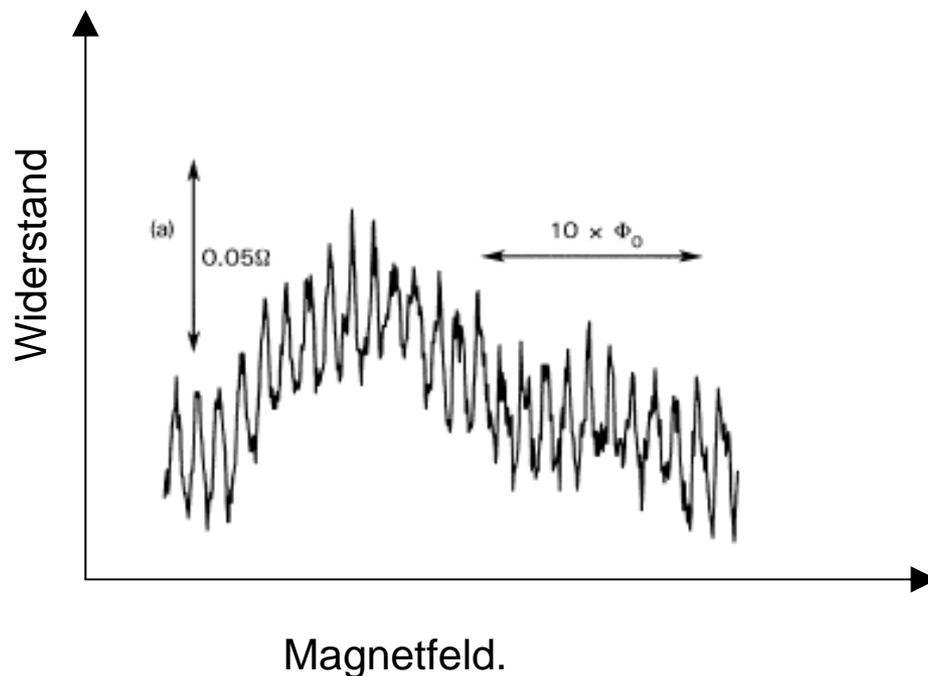
Observation of h/e Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings

R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz
IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598
(Received 27 March 1985)



7

Mesokopischer Metallischer Ring.



The inset is a photograph of the larger ring. The inside diameter of the loop is 784 nm, and the width of the wires is 41 nm.

Kap. IV QM in einer Räumliche Dimension (1D).

- 1) Der Harmonische Oszillator → Kohärente Zustände (Übungen)
- 2) Potentialstufe (1D Streuung).
- 3) Potentialbarriere (Tunnel Effekt).
- 4) Potentialtopf (Gebundene Zustände)
- 5) Periodische Potentiale (Bloch Theorem und Krönig-Penny Modell).

1) Der Harmonischer Oszillator (1d)

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2$$

Zu lösen: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit $\langle\psi|\psi\rangle=1$

Abstieg, aufstieg Operatoren:

$$\hat{a} = \frac{\omega m \hat{X} + i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \quad \hat{a}^+ = \frac{\omega m \hat{X} - i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \quad \text{da } [\hat{P}, \hat{X}] = \frac{\hbar}{i} \text{ gilt } [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

Invertierung,

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad \hat{P} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\omega m \hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+)$$

so dass:

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

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

Ist Hermitesch und heißt Besetzungszahloperator

Eigenvektoren von \hat{n} bilden VONS. $\hat{n} |\psi_\nu\rangle = \nu |\psi_\nu\rangle \quad \nu \geq 0$

Grundzustand:

$$\hat{n} |\psi_0\rangle = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} e^{-x^2/2x_0^2} \quad x_0 = \sqrt{\hbar/2m}$$

Angeregte Zustände.

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |\psi_0\rangle, \quad \hat{n} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle \Rightarrow \hat{H} |\psi_n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2) |\psi_n\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Bem: 1) $\langle x | \psi_n \rangle = \psi_n(x)$ bildet VONS von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

2) Ortsraumdarstellung von $\psi_n(x)$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0)$$

$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_2(x) = 4x^2 - 2, \dots$ Hermite Polynome

$$3) |\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ |\psi_{n-1}\rangle, \quad |\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |\psi_n\rangle, \quad \hat{a} |\psi_0\rangle = 0$$

4) Ehrenfest Theorem.

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle(t) = -m\omega^2 \langle \hat{X} \rangle(t) \Rightarrow \langle \hat{X} \rangle(t) = A \cos(\omega t + \delta)$$

Wie beim klassischen Fall.

$$5) \langle \psi_n | \hat{X} | \psi_n \rangle = 0$$

Frage : Für welche Zustände gilt $\langle \hat{X} \rangle(t) = A \cos(\omega t + \delta)$?

Antwort: Kohärente Zustände:

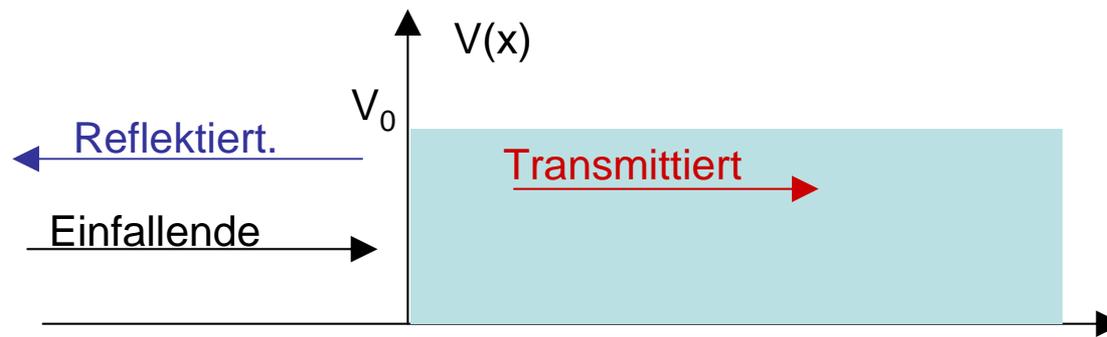
$$|\psi_\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle, \quad \langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = 1, \quad \hat{a} |\psi_\alpha\rangle = \alpha |\psi_\alpha\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\psi_{\alpha(t)}\rangle, \quad \alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$$

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \langle \psi_\alpha(t) | \hat{X} | \psi_\alpha(t) \rangle = \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t + \delta),$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}, \quad \alpha = |\alpha| e^{i\delta}$$

2) Potential-Stufe.



Zu lösen:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{Stationäre Schrödinger Gleichung.}$$

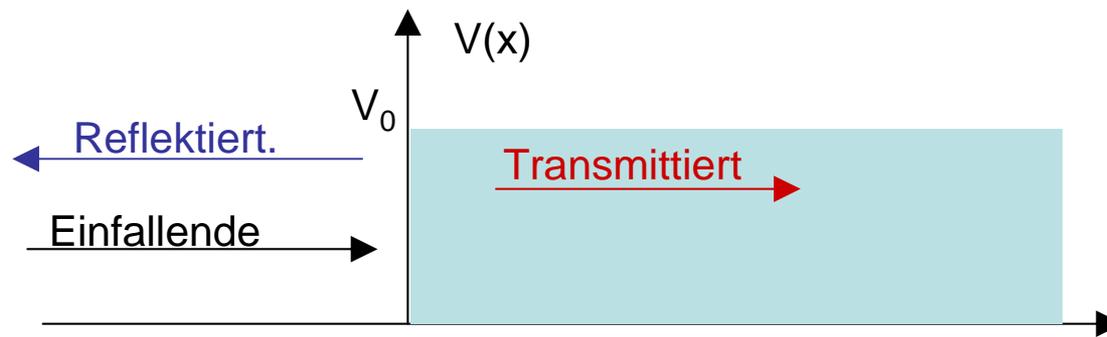
Bedingungen $|V(x)|, |\psi(x)|, |E| < \infty \Rightarrow \psi(x), \frac{d}{dx} \psi(x)$ sind stetig

Ansatz.
$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0, & k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ T e^{iqx}, & x > 0, & q = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \end{cases}$$

Lösung.
$$R = \frac{k - q}{k + q} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}, \quad T = \frac{2k}{k + q} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}$$

Bemerkung.
$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{|\psi(x,t)|^2}_{=\rho(x,t)} + \nabla \left[\underbrace{\frac{i\hbar}{2m} \left\{ (\nabla \psi(x,t))^* \psi(x,t) - \psi(x,t)^* \nabla \psi(x,t) \right\}}_{=j(x,t)} \right] = 0$$

Stationäre Zustand, ein Dimension $\Rightarrow j(x,t) = \text{Wahrscheinlichkeitsstrom} = \text{Konstant !}$



$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0, \\ T e^{iqx}, & x > 0, \end{cases} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ q &= \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \end{aligned} \quad R = \frac{k - q}{k + q}, \quad T = \frac{2k}{k + q}$$

$$E > V_0$$

$$q \in \mathbb{R}$$

$$j_t / j_0 = \frac{q}{k} |T|^2$$

$$j_r / j_0 = |R|^2$$

$R \in \mathbb{R}$ Keine Phase Verschiebung zwischen einfallende und reflektiert Welle.

QM Teilchen kann reflektiert werden sogar wenn $E > V_0$

$$E < V_0$$

$q = i\kappa, \quad \kappa \in \mathbb{R}$ Wellenfunktion $x > 0$ ist exponentiell unterdrückt.

$$j_t = 0$$

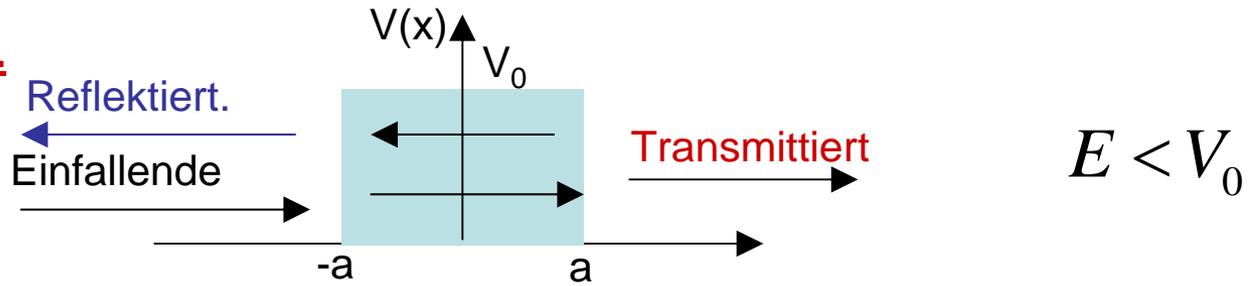
$$j_r / j_0 = |R|^2 = 1 \quad \text{Total-Reflektion.}$$

$$R \in \mathbb{C}$$

$$R = e^{-2i\delta} \quad \delta = \arctan \left(\sqrt{\frac{|E - V_0|}{E}} \right)$$

Phaseverschiebung.

3) Tunnel Effekt.



$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} & x < -a & k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a & q = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar = i\kappa \\ T e^{-ik(x-a)} & x > a \end{cases}$$

Stetigkeit von $\psi(x)$, $\psi'(x)$

Transmissionswahrscheinlichkeitsamplitude.

$$T(E)/A(E) = S(E) = \frac{2ik\kappa}{2ik\kappa \cosh(2\kappa a) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(2\kappa a)} \neq 0$$

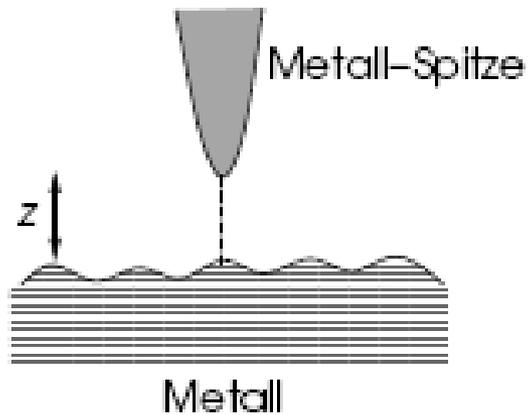
Scanning tunneling Microscope. STM.

Tunnel Barriere groß: =>

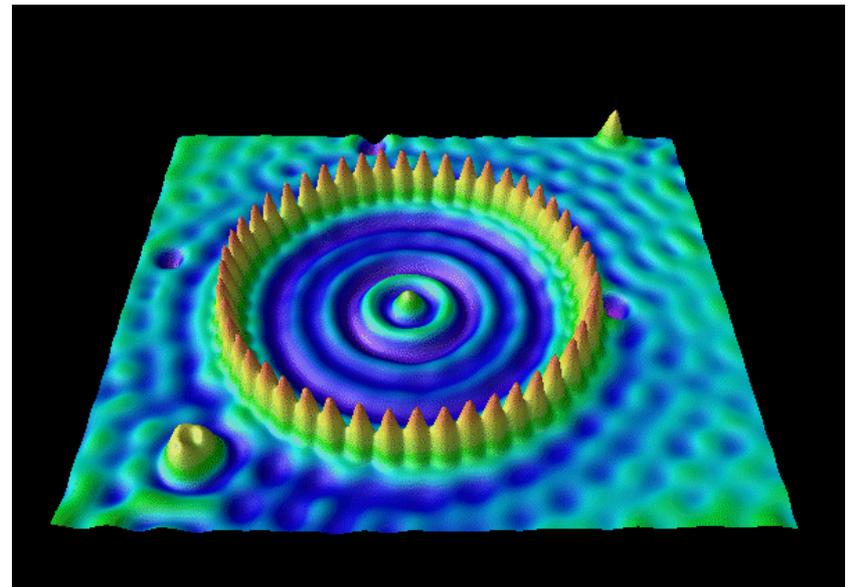
$$|S(E)|^2 \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-4\kappa a}$$

Starke Abhängigkeit von a .

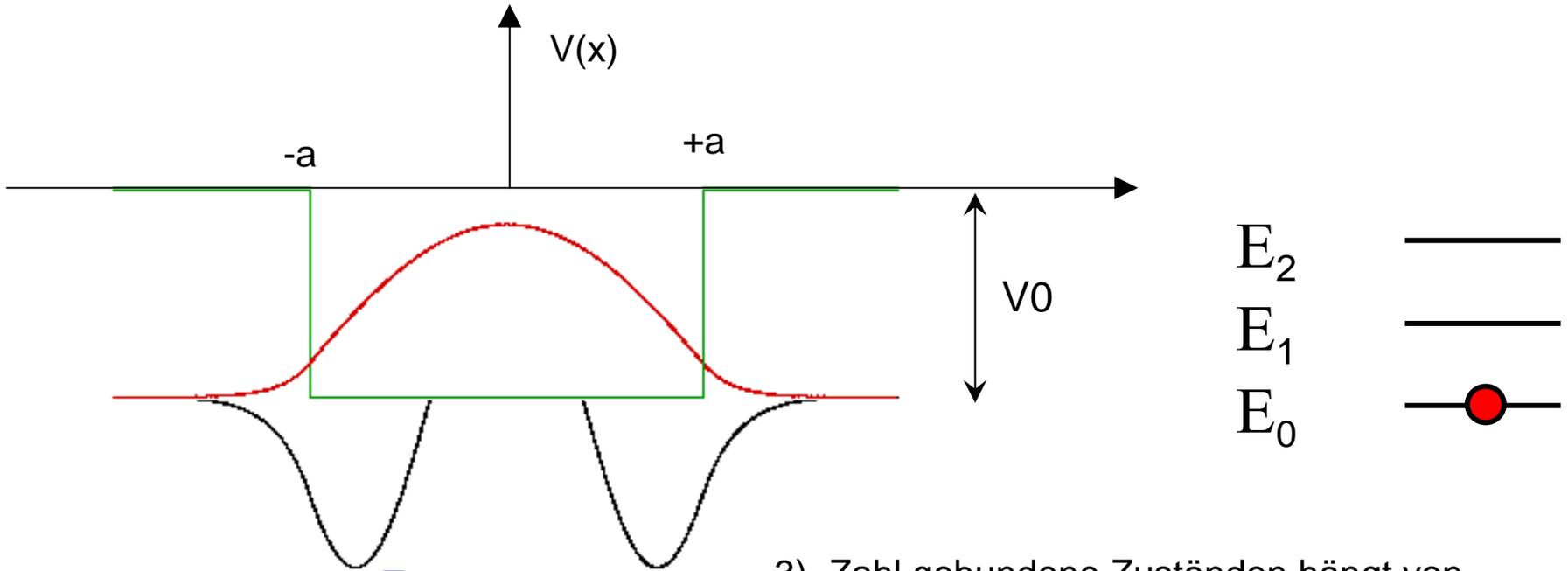
Tunnelraster-Mikroskop



Eisen auf Kupfer Oberfläche.



4) Teilchen im Potentialtopf, Gebundene Zustände $E < 0$.



- 1) Grundzustand hat keine Knotenpunkt.
- 2) Mit aufsteigender Energie nimmt Anzahl von Knotenpunkten zu.

- 3) Zahl gebundene Zuständen hängt von breite und tiefe des Potentialstopf.
- 4) Es gibt immer einen gebundene Zustand.

Lösung Vereinfacht durch Symmetrie Betrachtungen. Parität.

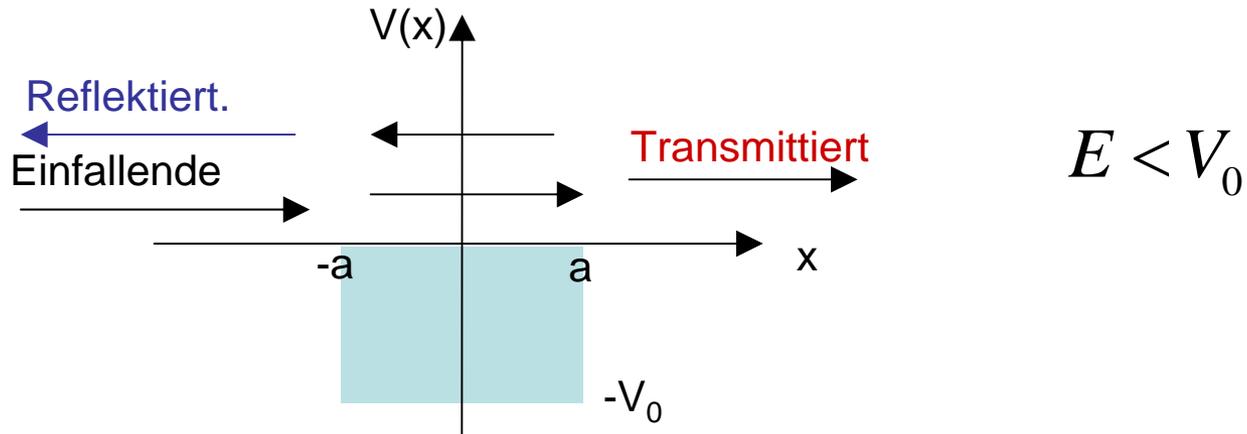
$$\hat{P}|x\rangle = |-x\rangle, \quad \hat{P}|p\rangle = |-p\rangle$$

$$\hat{P}^+ = \hat{P}, \quad \hat{P}^2 = 1, \quad \hat{P}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle \Rightarrow \xi = \pm 1, \quad \hat{P}\hat{X}\hat{P} = -\hat{X}, \quad \hat{P}\hat{P}\hat{P} = -\hat{P}$$

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Parität sein.

Teilchen im Potentialtopf, Streu Zustände $E > 0$.



Ansatz.

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} & x < -a & k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a & q = \sqrt{2m(E + V_0)} / \hbar \\ T e^{-ik(x+a)} & x > a \end{cases}$$

Stetigkeit von $\psi(x)$, $\psi'(x)$ \Rightarrow Transmissionswahrscheinlichkeit.

$$|S(E)|^2 = \left| \frac{T(E)}{A(E)} \right|^2 = \left\{ 1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2qa)}{4E(V_0 + E)} \right\}^{-1}$$

1) Perfekte Transmission bei:

$$2qa = n\pi, \quad n \lambda_q / 2 = 2a$$

$$(\lambda_q = 2\pi / q), \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 - V_0$$

Resonanzen.

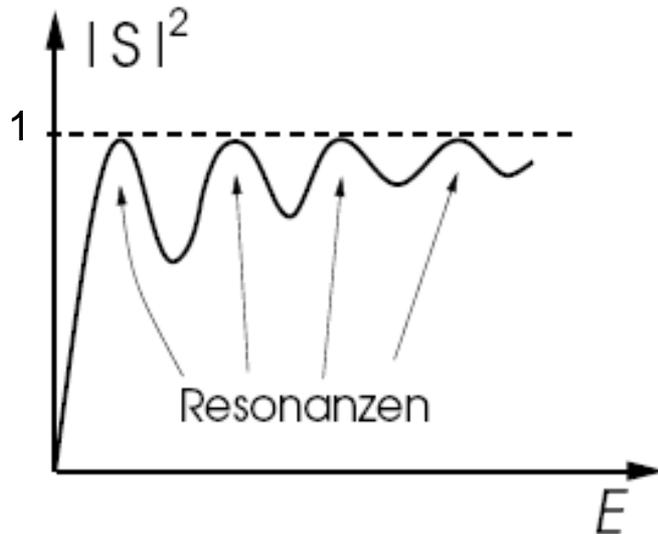
2) Beim Resonanz Energie E_n

$$\text{gilt } B(E_n) = 0$$

In der Nähe des Resonanz gilt:

$$S(E) = \frac{2kq}{2kq \cos(2qa) + i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \cong \frac{1}{\cos(n\pi)} \frac{i\Gamma_n / 2}{E - E_n + i\Gamma_n / 2}$$

$$\text{mit } \frac{1}{\Gamma_n} = \frac{\chi}{4} \frac{1 + 2E_n / V_0}{\sqrt{E_n / V_0} (1 + E_n / V_0)}, \quad \chi = a\sqrt{2mV_0} / \hbar$$



$$|S(E)|^2 \cong \frac{(\Gamma_n / 2)^2}{(E - E_n)^2 + (\Gamma_n / 2)^2}$$

Lorentz Funktion Breite Γ_n

Breite wächst mit zunehmender Energie.

Bedeutung von Breite des Resonanz.

$$\text{Sei } \psi_E(x) = \begin{cases} \tilde{A} e^{ikx} + \tilde{B} e^{-ikx} & x < -a \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a \\ \tilde{T} e^{-ikx} & x > a \end{cases} \quad \text{Lösung des Stationär Schr. Gl.}$$

$$\text{Dann ist: } \psi(x, t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E) \psi_E(x) \quad \text{Lösung des Zeitabhängig Schr. Gl.}$$

Es gilt:

$$\psi_{Trans}(x, t) = \int dt' \tilde{S}(t - t') \psi_{Ein}(x, t')$$

mit:

$$\psi_{Ein}(x, t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E) \tilde{A}(E) e^{ik(E)x}$$

$$\psi_{Trans}(x, t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} f(E) \tilde{T}(E) e^{ik(E)x}$$

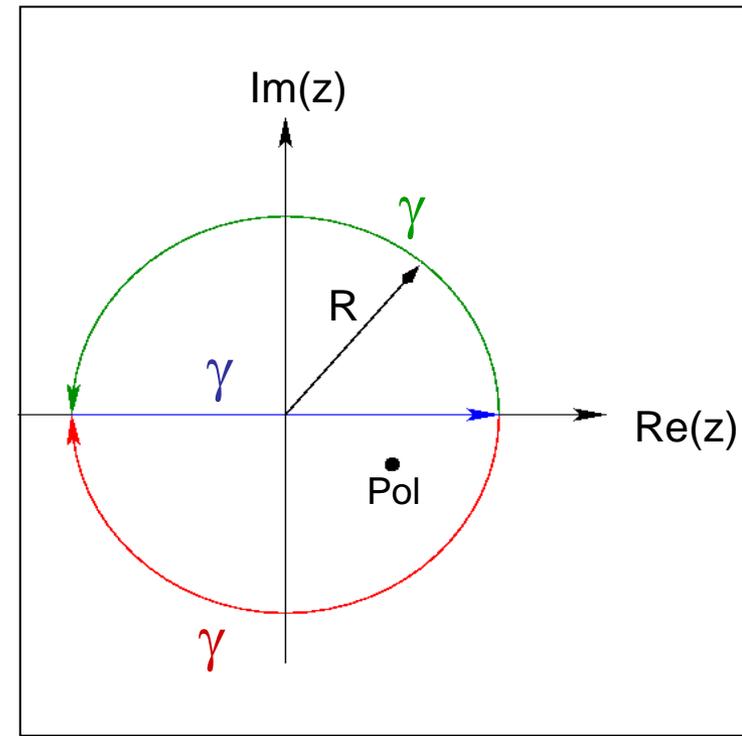
$$\tilde{S}(t - t') = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iE(t-t')/\hbar} \tilde{S}(E)$$

Für $\tilde{S}(E) \cong \frac{i\Gamma_n/2}{E - (E_n - i\Gamma_n/2)}$ ist $\tilde{S}(t-t') = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iE(t-t')/\hbar} \tilde{S}(E) =$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{i\Gamma_n}{4\pi\hbar} \left\{ \begin{array}{l} \oint_{\gamma+\gamma'} dz \frac{e^{-iz(t-t')/\hbar}}{z - (E_n - i\Gamma_n/2)} = 0 \quad t - t' < 0 \\ \oint_{\gamma+\gamma} dz \frac{e^{-iz(t-t')/\hbar}}{z - (E_n - i\Gamma_n/2)} = 2\pi e^{-iE_n t/\hbar} e^{-\Gamma_n(t-t')/2\hbar} \quad t - t' > 0 \end{array} \right.$$

$$= \Theta(t-t') \frac{1}{\tau_n} e^{-iE_n t/\hbar} e^{-(t-t')/\tau_n}, \quad \tau_n = 2\hbar/\Gamma_n$$

- 1) Kausalität
- 2) Transmissionssignal überlebt auf Zeitskala τ_n



5) Periodische Potentiale.

$$\hat{H} = \hat{P}^2 / 2m + V(\hat{X})$$

$$V(x + na) = V(x) \quad n \in \mathbb{N}$$

Translations Operator.

$$\hat{T}_a = e^{-i\hat{P}a/\hbar} \quad \hat{P} : \text{Impuls Operator.}$$

$$\hat{T}_a |x\rangle = |x + a\rangle, \quad [\hat{T}_a, \hat{H}] = 0 \quad \underline{\text{Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Translationsoperator sein.}}$$

$$\hat{T}_a : \text{Ist unitär.} \Rightarrow \hat{T}_a |\psi_k\rangle = \lambda_k |\psi_k\rangle, \quad |\lambda_k|^2 = 1 \Rightarrow \lambda_k = e^{-ika}$$

Im Ortsraum gilt:

$$\langle x | \psi_k \rangle = \psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x + na) = u_k(x)$$

(Bloch Theorem).

Krönig-Penny Modell.

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

Bem: Anschlussbedingungen für $V(x) = V_0 \delta(x - x_0)$:

$$\psi(x) \text{ stetig.} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) = 2mV_0\psi(x_0) / \hbar^2$$

Ansatz zur Lösung stationäre Schr. Gleichung zur Energie E und Translationsoperator
Eigenwert $\exp(-ika)$:

$$\psi(x) = A_n e^{iqx} + B_n e^{-iqx} \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2mE} / \hbar, \quad na \leq x < (n+1)a$$

$$\Rightarrow u(x) = e^{-ikx} \psi(x)$$

Forderungen:

$$1) \quad u(x+a) = u(x) \quad \Rightarrow$$

$$A_n = A_0 e^{-i(q-k)na}, \quad B_n = B_0 e^{i(q+k)na}$$

$$2) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(na + \varepsilon) - \psi(na - \varepsilon) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(1 - e^{i(q-k)a}\right) A_0 + \left(1 - e^{-i(q+k)a}\right) B_0 = 0$$

$$3) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'(na + \varepsilon) - \psi'(na - \varepsilon) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(na) \quad \Rightarrow$$

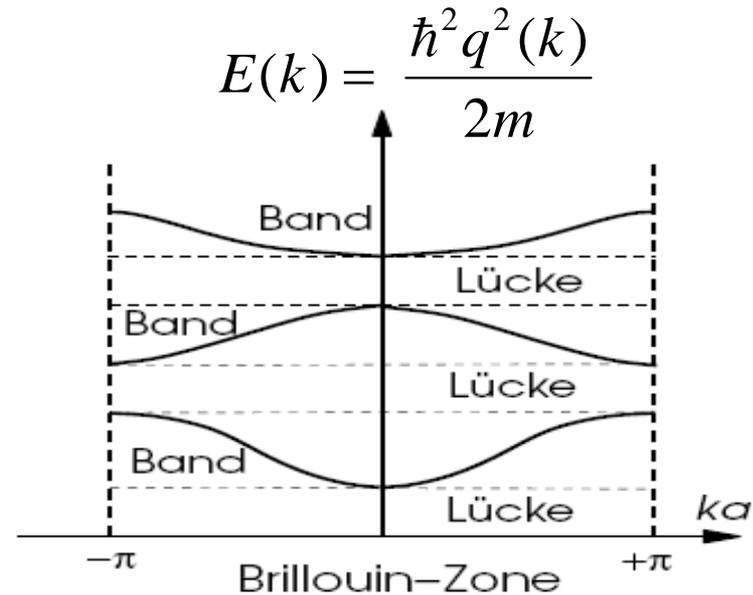
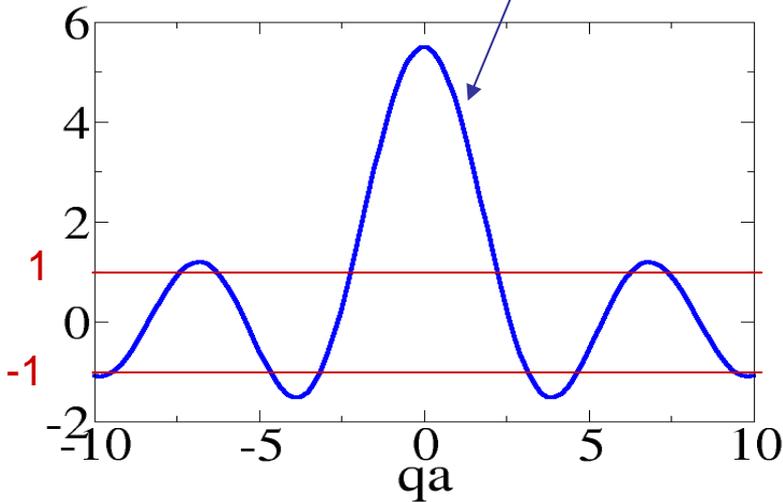
$$\left(iq - iqe^{i(q-k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) A_0 + \left(-iq + iqe^{-i(q+k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) B_0 = 0$$

Nicht Triviale Lösung falls:

$$\det \begin{pmatrix} (1 - e^{i(q-k)a}) & (1 - e^{-i(q+k)a}) \\ \left(iq - iqe^{i(q-k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) & \left(-iq + iqe^{-i(q+k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) \end{pmatrix} = 0$$

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{2maV_0}{\hbar^2} \frac{\sin(qa)}{qa}$$

Für Gegebenes k gibt es nur Diskrete Werte von q



Grundlage für Elektronenbandtheorie von Festkörpern.

Kap. V Zentral potential und Drehimpuls.

- 1) Drehimpuls, Eigenwertproblem.
- 2) Ortsraumdarstellung der Drehimpuls & Egenfunktionen
- 3) Zentralpotential, gebundene Zustände.
- 4) Wasserstoff Atom.
- 5) Magnetisches Moment.

Kapitel V

Drehimpuls

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad , \quad [\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{i,j} \quad , \quad \hat{\mathbf{L}}^+ = \hat{\mathbf{L}}$$

Kommutationsregeln

$$(1) \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{i,j,k} \hat{L}_k$$

$$(2) \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_j] = 0$$

Def:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

Eigenwertproblem. Sei: $|\psi\rangle$ mit $\hat{L}_z|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, $\hat{\mathbf{L}}^2|\psi\rangle = \beta|\psi\rangle$, und $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Möglich wegen (2) und es gilt: $\lambda \in \mathbb{R}$, $\beta \geq 0$

Aus Kommutationregeln folgt:

$$(3) \quad \hat{L}_z \hat{L}_\pm |\psi\rangle = (\lambda \pm \hbar) \hat{L}_\pm |\psi\rangle$$

$$(4) \quad \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{L}_\pm |\psi\rangle = \beta \hat{L}_\pm |\psi\rangle$$

$$(5) \quad \text{Aus } \|\hat{L}_\pm |\psi\rangle\|^2 = \beta - \lambda^2 \mp \lambda > 0$$

folgt: $\beta \geq \lambda(\lambda \pm \hbar)$

Ansatz: $\beta = \hbar^2 l(l+1)$ mit $l \geq 0$

und $\lambda = \hbar m$

folgt aus (5) $|m| \leq l$

Note: we are free to choose $l \geq 0$ for the parametrization of β !

Notation:

Eigenzustände von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z werden wir durch $|l, m\rangle$ bezeichnen.

$$|\psi\rangle \rightarrow |l, m\rangle$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{l, l'} \delta_{m, m'}, \quad |m| \leq l$$

$$\hat{L}_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle$$

$$\hat{L}_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle$$

Normierungsfaktor folgt aus:

$$\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \gamma |l, m \pm 1\rangle$$

$$\|\hat{L}_\pm |l, m\rangle\|^2 = \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)] = \gamma^2$$

Konsequenzen.

$$\hat{L}_+ |l, m = l\rangle = 0, \quad \hat{L}_- |l, m = -l\rangle = 0$$

$$\hat{L}_- |l, m = l\rangle \sim |l, m = l - 1\rangle$$

$$(\hat{L}_-)^n |l, m = l\rangle \sim |l, m = l - n\rangle$$

Sei $-l + 1 > l - n > -l \Rightarrow \hat{L}_- |l, m = l - n\rangle = 0$ da sonst wäre $|m| = |l - n - 1| > l$

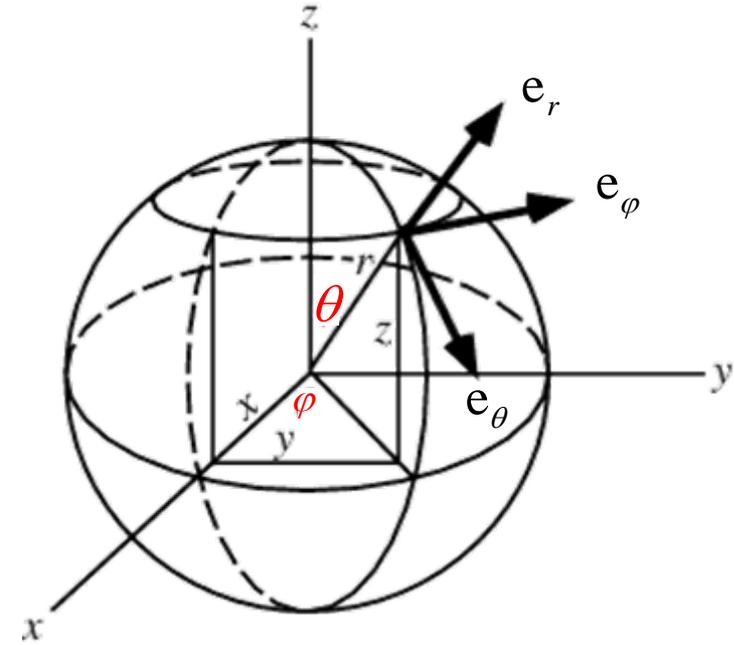
$$|l, m = l - n\rangle \propto |l, m = -l\rangle$$

$$\Rightarrow l - n = -l \Rightarrow 2l = n, \quad n \in \mathbb{N}$$

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$ Ganzzahlig Orbital Drehimpuls

$l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \dots$ Halbzahlig. Spin

Ortsraum Darstellung von $|l,m\rangle$ und $\hat{\mathbf{L}}$



$$\mathbf{x} = r(\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta))$$

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\Theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\mathbf{e}_r = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \Big/ \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \right|, \quad \mathbf{e}_\Theta = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta} \Big/ \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta} \right|, \quad \mathbf{e}_\varphi = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi} \Big/ \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi} \right|$$

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla = \frac{\hbar}{i} \left[\mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{\sin(\Theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

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

Gesucht:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \quad \text{mit:}$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} (-1)^{(m+|m|)/2} e^{im\varphi} P_{l,|m|}(\cos(\theta))$$

Kugelflächenfunktionen

$$P_{l,|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{l,0}(x) \quad \text{Assoziiertem Legendre Polynome}$$

$$P_{l,0}(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l \quad \text{Legendre Polynome}$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad m = -l, -l+1, \dots, l$$

Eigenschaften:

1) **Orthonormal**

$$\overbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\Theta \sin(\Theta)} = \int_S d\Omega \quad Y_{lm}^*(\Theta, \varphi) Y_{l'm'}(\Theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

2) **Vollständig**

$$\forall f : S \rightarrow \mathbb{C} \quad f(\Theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{l,m} Y_{l,m}(\Theta, \varphi) \quad \text{mit } a_{l,m} = \int_S d\Omega Y_{lm}^*(\Theta, \varphi) f(\Theta, \varphi)$$

3) $Y_{l,-m}(\Theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\Theta, \varphi)$

4) **Eigenfunktion der Parität Operator**

$$\overset{\text{Parität}}{\hat{P}} Y_{l,m}(\Theta, \varphi) = Y_{l,m}(\pi - \Theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{l,m}(\Theta, \varphi)$$

Beispiele

$$|Y_0^0(\theta, \phi)|^2$$



$l=0$: s-orbital (sharp)

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}} \cos(\theta), \quad Y_{1,1} = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}} \sin(\theta) e^{i\phi}$$

$$Y_{2,0} = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{16\pi}} (3 \cos^2(\theta) - 1), \quad Y_{2,1} = -\frac{\sqrt{15}}{\sqrt{16\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{i\phi},$$

$$Y_{2,2} = \frac{\sqrt{15}}{\sqrt{32\pi}} \sin^2(\theta) e^{i2\phi}$$

$$|Y_1^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_1^1(\theta, \phi)|^2$$



$l=1$: p-orbital (principle)

$$|Y_2^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^1(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^2(\theta, \phi)|^2$$



$l=2$: d-orbital (difuse)

$$|Y_3^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^1(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^2(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^3(\theta, \phi)|^2$$



$l=3$: f-orbital (fundamental)

Zentral Potential, Gebundene Zustände.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + V(\hat{\mathbf{X}}) \quad , \quad \text{mit} \quad V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$$

Symmetrien: $\hat{H}(R\hat{\mathbf{P}}, R\hat{\mathbf{X}}) = \hat{H}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}})$ mit $R \in SO(3)$

Konsequenz: $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0$ (Siehe Später.) $\Rightarrow \hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ kommutieren miteinander. Stationäre Zustände können gleichzeitig Eigenzuständen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z sein.

Im Kugelkoordinaten ist:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2Mr^2} + V(r) \quad , \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{P}}$$

Ansatz:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

so dass:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) u(r) = E u(r)$$

Radiale Schr. Gl.

Gebundene Zustände.

Wellenfunktion ist Normierbar: 1) $|u(r)| < C/\sqrt{r}$ $r \rightarrow \infty$ 2) $|\psi(\mathbf{x}=0)| < \infty \Rightarrow u(0) = 0$

Für, $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$ und $\lim_{r \rightarrow 0} \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}$ ist

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \propto \lim_{r \rightarrow 0} r^{l+1} \quad \text{und} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} u(r) \propto \lim_{r \rightarrow \infty} e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{2M|E|} / \hbar$$

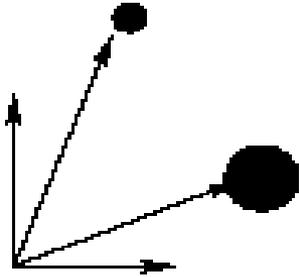
$E < 0$

κ : Inverse Länge Skala: $\rho = \kappa r$ ist dimensions- los und radiale Wellenfunktion lautet:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{V(\rho/\kappa)}{|E|} - 1 \right) u(\rho/\kappa) = 0$$

Wasserstoff Atom

\mathbf{x}_e , Ladung $-|e|$, Masse m_e



\mathbf{x}_K , Ladung $Z|e|$, Masse M_K

Im CM System ist

Relativer Impuls

Relativer Ort

Reduziert Masse.

$$H_{CM} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|}, \quad \mathbf{P} = \frac{M_K \mathbf{P}_e - m_e \mathbf{P}_K}{M_K + m_e}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_K, \quad M = \frac{M_K m_e}{M_K + m_e}$$

QM (Korrespondenzprinzip) :

$$\hat{H}_{CM} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|}$$

Ansatz: $\psi(\mathbf{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

Radiale Schrödinger Gleichung:

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

Ansatz: $\tilde{u}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho)$

$$\kappa = \sqrt{2M|E|} / \hbar, \quad \rho_0 = \frac{\kappa Ze^2}{|E|}, \quad \rho = \kappa r, \quad \tilde{u}(\rho) = u(\rho / \kappa)$$

Einsetzen ergibt:

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

Taylor: $\omega(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad \Rightarrow \quad a_{k+1} = a_k \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)}$

=> Für $k \rightarrow \infty$ ist $a_{k+1}/a_k \cong 2/k$ so dass $a_k \cong 2^{k-1}/(k-1)!$ und $\omega(\rho) \cong e^{2\rho}, \rho \rightarrow \infty$

Damit ist $\tilde{u}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho) \cong e^{\rho}, \rho \rightarrow \infty$ und die Wellenfunktion ist

nicht Normierbar!

Lösung: $\exists N = k, N \in \mathbb{N}$, so dass $2(N+l+1) - \rho_0 = 0$ Damit ist die reihe abgebrochen Und die Normierbarkeit vorhanden.

$$\Rightarrow E_n = - \frac{M Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2}, \quad n = N + l + 1$$

n: Hauptquantenzahl.

Bem.

1) Quantisierung der Energie kommt durch Normierungsbedingung der Wellenfunktion.

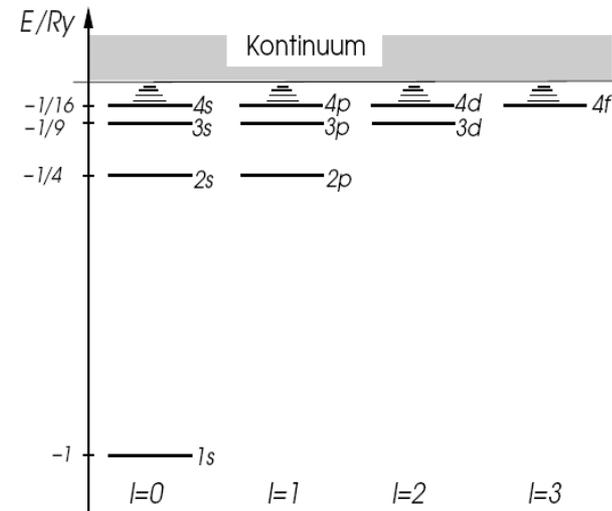
2) $N = n - l - 1 \geq 0$ Für gegebenes n ist $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

3) Entartung der Energieniveau. $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$

4) Länge Skala: $\kappa_n^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2M|E_n|}} = \frac{na}{Z}$, $a = \frac{\hbar^2}{Me^2} \cong 0.5 \text{ Angstrom}$ ($M \cong m_e$)

a: Bohrsche Radius.

5) $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{Me^4}{2\hbar^2}$, $\frac{Me^4}{2\hbar^2} \approx Ry = 13.6eV$
($M \cong m_e$)

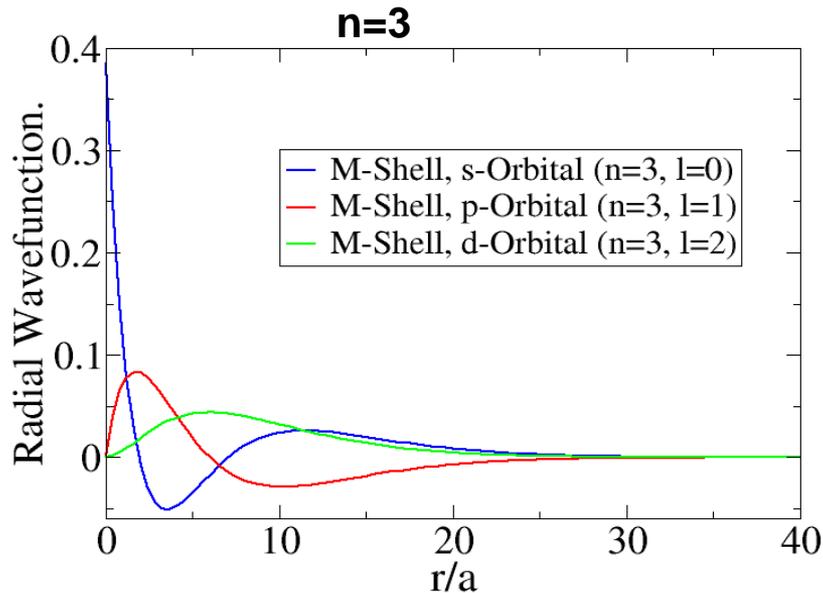
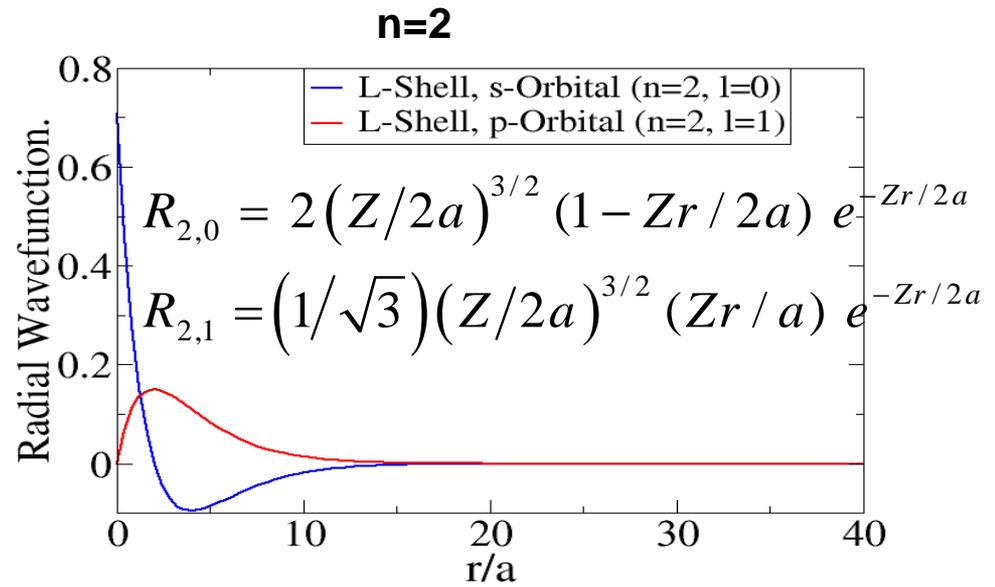
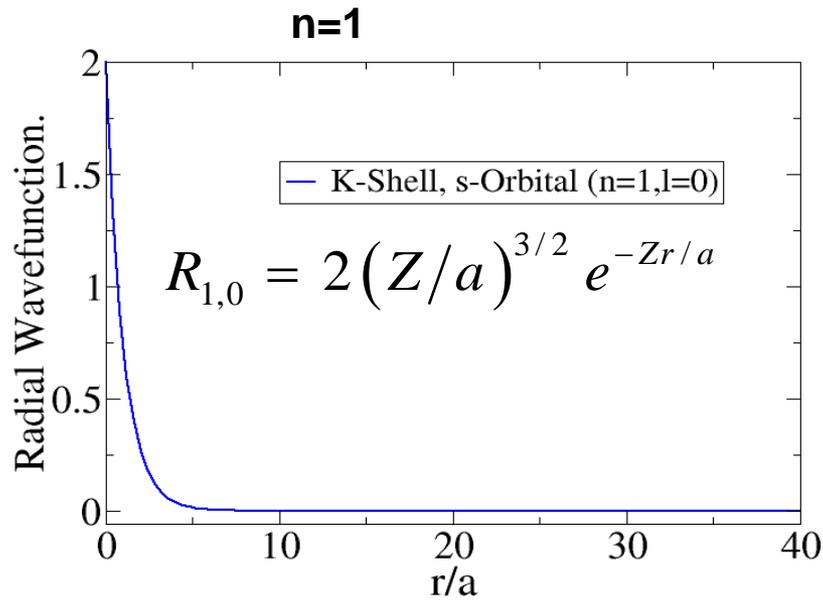


Optische Übergänge $\Delta l = \pm 1$

$\Delta m = 0, \pm 1$

6) Gesamte Wellenfunktion ist: $\psi_{n,l,m}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

Radiale Wellenfunktionen. $R_{n,l}(r)$

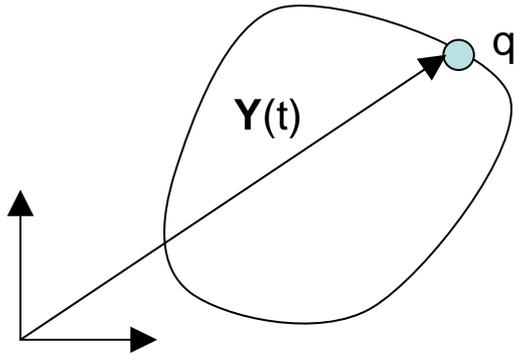


$$R_{3,0} = 2 \left(\frac{Z}{3a} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a} + \frac{2Z^2 r^2}{27a^2} \right) e^{-Zr/3a}$$

$$R_{3,1} = \frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{Z}{3a} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a} \left(1 - \frac{Zr}{6a} \right) e^{-Zr/3a}$$

$$R_{3,2} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a} \right)^2 e^{-Zr/3a}$$

Magnetisches Moment (Klassisch).



$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = q \dot{\mathbf{Y}}(t) \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{Y}(t)), \quad \mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int d^3\mathbf{x} \mathbf{x} \times \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{q}{2mc} \mathbf{L}$$

\mathbf{m} : magnetisches Moment

Im Magnetfeld, \mathbf{B} $\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) = -\nabla U, \quad U = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$

QM: Teilchen im EM Feld.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{X}}) \right)^2 + q \phi(\hat{\mathbf{X}}), \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, 0, B) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \mathbf{x} \times \mathbf{B} \quad (\text{Coulomb Eichung})$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + q \phi(\mathbf{x}) - \frac{q}{2mc} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{8mc^2} B^2 (x^2 + y^2)$$

Für Wasserstoff Atom ist: $\langle \hat{L}_z \rangle \approx \hbar, \quad \langle x^2 + y^2 \rangle \approx a^2, \quad q = -e, \quad e > 0$

$$\frac{\text{Diamagnetisch}}{\text{Paramagnetisch}} \approx \frac{eB a^2}{4c \hbar} \approx 10^{-10} B \quad (\text{in Gauss})$$

Diamagnetisches Term
Ist vernachlässigbar.

Zeeman Effekt. (Atom im Magnetfeld)

Unter Vernachlässigung des diamagnetischen Term können wir der Hamilton Operator des Wasserstoffs Atom schreiben als:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2Mc} B \hat{L}_z$$

Eigenzustände:

$$\psi_{n,l,m}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

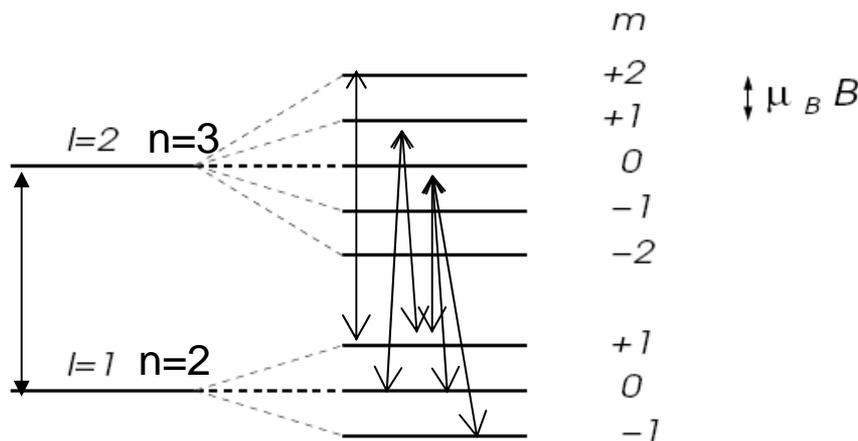
Energie:
$$E_{n,m} = -Ry \frac{Z}{n^2} + \frac{eB}{2Mc} \hbar m = -Ry \frac{Z}{n^2} + \mu_B \frac{m_e}{M} B m, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

μ_B : **Bohrsche Magneton.**

$$\mu_B = 9.274\,009\,49(80) \times 10^{-24} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1} \quad (\text{SI})$$

$$\mu_B = 9.274\,009\,49(80) \times 10^{-21} \text{ erg}\cdot\text{G}^{-1} \quad (\text{cgs})$$

=> Im Magnetfeld ist die Entartung teilweise aufgehoben.



Aufspaltung der Energieniveaus ist klein im Vergleich zur Ursprüngliche Abstand.

$$\mu_B B \approx 4 Ry \times 10^{-10} B \quad (\text{In Gauss})$$

Optische Übergänge $\Delta l = \pm 1$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

Die Änderung der Energie der Atomniveaus im Magnetfeld bedeutet dass, die Zustände ein magnetisches Moment besitzen.

$$\hat{\mathbf{M}} = - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{B}} = - \frac{e}{2 M c} \hat{\mathbf{L}} = - \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{m_e}{M} \hat{\mathbf{L}}$$

Bem.

1) Quantisierung der Energie kommt durch Normierungsbedingung der Wellenfunktion.

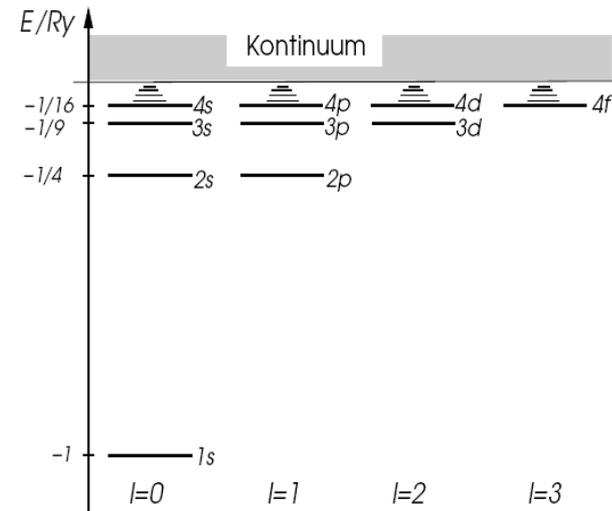
2) $N = n - l - 1 \geq 0$ Für gegebenes n ist $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

3) Entartung der Energieniveau. $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$

4) Länge Skala: $\kappa_n^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2M|E_n|}} = \frac{na}{Z}$, $a = \frac{\hbar^2}{Me^2} \cong 0.5 \text{ Angstrom}$ ($M \cong m_e$)

a: Bohrsche Radius.

5) $E_n = -\frac{Z^2 Me^4}{n^2 2\hbar^2}$, $\frac{Me^4}{2\hbar^2} \approx Ry = 13.6eV$
($M \cong m_e$)



Optische Übergänge $\Delta l = \pm 1$

$\Delta m = 0, \pm 1$

6) Anzahl Knoten in Radiale Wellenfunktion. $N=n-l-1$

7) Gesamte Wellenfunktion ist: $\psi_{n,l,m}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

Note. Getting more realistic....

Silver

[Key to notation](#)
[ASCII text](#)

47 Ag [Kr] 4d¹⁰ 5s¹

Energy	LDA	LSD	RLDA	ScRLDA
Etot =	-5195.031215	-5195.037351	-5305.487822	-5304.298884
Ekin =	5191.818600	5191.826711	5537.467641	5495.980760
Ecout =	2131.618463	2131.701991	2160.192112	2157.628228
Eenuc =	-12377.294484	-12377.383542	-12865.696462	-12820.702324
Exc =	-141.173794	-141.182511	-137.451114	-137.205548
1s	-900.324578	-900.323018 -900.322342	-925.100814	-925.674173
2s	-129.859807	-129.857873 -129.857927	-136.360076	-136.476376
2p	-120.913351	-120.911471 -120.911414	-126.908805 -120.522583	-122.628414
3s	-23.678437	-23.676747 -23.676394	-24.991112	-25.010846
3p	-20.067630	-20.065928 -20.065596	-21.201871 -20.073878	-20.441965
3d	-13.367803	-13.366019 -13.365839	-13.309422 -13.081156	-13.184815
4s	-3.223090	-3.221445 -3.221253	-3.480046	-3.482162
4p	-2.086602	-2.085232 -2.084523	-2.280871 -2.092419	-2.152005
4d	-0.298706	-0.299962 -0.294005	-0.294880 -0.274268	-0.282334
5s	-0.157407	-0.167365 -0.142816	-0.172527	-0.172492

Einheiten 1Hartree = 2 Ry.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \frac{\hat{\mathbf{P}}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}_i - \hat{\mathbf{X}}_K|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^Z \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{X}}_i - \hat{\mathbf{X}}_j|} + \dots$$

Energien Wasserstoff Atom

-Hartree $Z^2 / 2n^2$

1s -1104.5
2s -276.125
2p -276.125
3s -122.72
3p -122.72
3d -122.72
4s -69
4p -69
4d -69
5s -44

NIST
National Institute of
Standards and Technology
Physics Laboratory

<http://physics.nist.gov/PhysRefData/DFTdata/contents.html>

Achtung LDA ist nicht Exact.

Hydrogen

[Key to notation](#)
[ASCII text](#)

1 H 1s

Energy	LDA	LSD	RLDA	ScRLDA
Etot =	-0.445671	-0.478671	-0.445668	-0.445668
Ekin =	0.425027	0.466643	0.425020	0.425020
Ecoul =	0.282827	0.298377	0.282824	0.282824
Eenuc =	-0.920999	-0.965619	-0.920997	-0.920996
Exc =	-0.232525	-0.278072	-0.232516	-0.232515
1s	-0.233471	-0.268975 -0.100175	-0.233463	-0.233463

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z-1} \frac{\hat{\mathbf{P}}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^{Z-1} \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}_i - \hat{\mathbf{X}}_K|} + \dots$$

Exakt: -Hartree $Z^2 / 2n^2$

1s -0.5

Radial-Impuls.

Kugel-Koordinaten $\mathbf{x} = r(\sin(\theta)\cos(\varphi), \sin(\theta)\sin(\varphi), \cos(\theta))$

$$\hat{P}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

Radial-Impuls da es Kanonische Kommutations $[\hat{P}_r, r] = \frac{\hbar}{i}$

erfühlt. $\hat{P}_r \frac{1}{r} e^{ipr/\hbar} = p \frac{1}{r} e^{ipr/\hbar}$

Symmetrie und Erhaltungssätze

- 1) Kontinuierliche Symmetrien (Drehungen, Translationen)
 - 2) Diskrete Symmetrien (Parität, Zeitumkehr)
 - 3) Eichtransformationen.
- } Siehe Sakurai. (Modern Quantum Mechanics
Kap. IV.)

1) Kontinuierliche Symmetrien.

Sei $\hat{\mathbf{K}} = (\hat{K}_1, \hat{K}_2, \dots, \hat{K}_n), \quad \hat{K}_i^\dagger = \hat{K}_i$

$\hat{\mathbf{K}}$ erzeugt Unitäre Transformation:

$$\hat{U}(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-i\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{K}} \Theta / \hbar} \quad \text{mit} \quad \mathbf{e} \in \mathbb{R}^n, \quad |\mathbf{e}| = 1, \quad \Theta \in \mathbb{R}$$

Sei \hat{H} Hamilton Operator mit

$$\hat{U}^\dagger(\mathbf{e}, \Theta) \hat{H} \hat{U}(\mathbf{e}, \Theta) = \hat{H} \quad \forall \mathbf{e}, \Theta \quad \text{dh. } \hat{H} \text{ Invariant unter } \hat{U}(\mathbf{e}, \Theta)$$

Konsequenzen:

$$1) \quad \left[\hat{H}, \hat{U}(\mathbf{e}, \Theta) \right] = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{K}_i \right] = 0 \quad \forall i$$

2) $\hat{\mathbf{K}}$ ist eine Erhaltungsgröße. Mit $\hat{\mathbf{K}}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{\mathbf{K}} e^{-it\hat{H}/\hbar}$ ist

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{K}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{K}}(t)] = 0 \quad \text{so dass} \quad \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{\mathbf{K}}(t) | \psi \rangle = 0$$

3) $[\hat{H}, \hat{K}_1] = 0 \Rightarrow \exists \text{ VONS, } |n, m\rangle, \quad |$
 $\hat{K}_1 |n, m\rangle = k_m |n, m\rangle \text{ und } \hat{H} |n, m\rangle = E_{n,m} |n, m\rangle$

k_m ist eine gute Quantenzahl. d.h. Sei:

$$\hat{K}_1 |\phi_m\rangle = k_m |\phi_m\rangle \quad \text{dann gilt} \quad \hat{K}_1 |\phi_m(t)\rangle = k_m |\phi_m(t)\rangle$$

4) Sei $\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ dann ist $\hat{H} \hat{U}(\mathbf{e}, \Theta) |\Psi\rangle = E \hat{U}(\mathbf{e}, \Theta) |\Psi\rangle$

Translationen

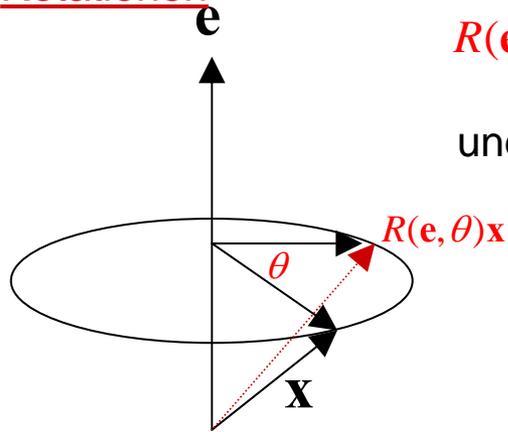
$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}} / \hbar}$$

$\hat{\mathbf{P}}$ Impuls

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle, \quad \hat{T}_{\mathbf{a}} |\mathbf{p}\rangle = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p} / \hbar} |\mathbf{p}\rangle$$

Falls \hat{H} invariant unter Translationen ist, dann ist Impuls erhalten.

Rotationen



$$R(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x} = \mathbf{e} \cdot (\mathbf{e} \times \mathbf{x}) - \cos(\theta) \mathbf{e} \times (\mathbf{e} \times \mathbf{x}) + \sin(\theta) \mathbf{e} \times \mathbf{x}$$

und es gilt: $\frac{d}{d\theta} R(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x} = \mathbf{e} \times R(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x}$

Damit ist:

$R(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x}$ ist Lösung der Dgl.

$$\frac{d}{d\theta} \mathbf{x}(\theta) = \mathbf{e} \times \mathbf{x}(\theta) \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}(\theta=0) = \mathbf{x}$$

Drehimpuls, $\hat{\mathbf{L}}$, ist Erzeuger von Rotationen.

Sei $\hat{T}(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-i\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{L}}\Theta / \hbar}$

Transformation der Operatoren

$$\hat{T}^\dagger(\mathbf{e}, \Theta) \begin{Bmatrix} \hat{\mathbf{X}} \\ \hat{\mathbf{P}} \\ \hat{\mathbf{L}} \end{Bmatrix} \hat{T}(\mathbf{e}, \Theta) = R(\mathbf{e}, \Theta) \begin{Bmatrix} \hat{\mathbf{X}} \\ \hat{\mathbf{P}} \\ \hat{\mathbf{L}} \end{Bmatrix}$$

Transformation der Kets.

$$\hat{T}(\mathbf{e}, \Theta)|\mathbf{x}\rangle = |R(\mathbf{e}, \Theta)\mathbf{x}\rangle$$

$$\hat{T}(\mathbf{e}, \Theta)|\mathbf{p}\rangle = |R(\mathbf{e}, \Theta)\mathbf{p}\rangle$$

Beisp:

$$\text{Für } \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} \text{ ist: } \hat{T}^\dagger(\mathbf{e}, \Theta) \hat{H} \hat{T}(\mathbf{e}, \Theta) = \hat{H} \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0$$

Die Operatoren $\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ kommutieren alle miteinander. \Rightarrow Stationäre Zustände: $|n, l, m\rangle$,

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |n, l, m\rangle = \hbar m |n, l, m\rangle, \quad \hat{H} |n, l, m\rangle = E_{n,l} |n, l, m\rangle$$

Da $[\hat{H}, \hat{L}_\pm] = 0$ ist die Energie unabhängig von m und ist deshalb mindestens $2l+1$ mal entartet.

Kap. 7 Der Spin.

Der Spin ist ein interner Freiheitsgrad eines Teilchen und hängt weder von den räumlichen Koordinaten noch von Impuls ab.

Der Spin legt die Statistik (Fermion oder Boson) fest. (QMII).

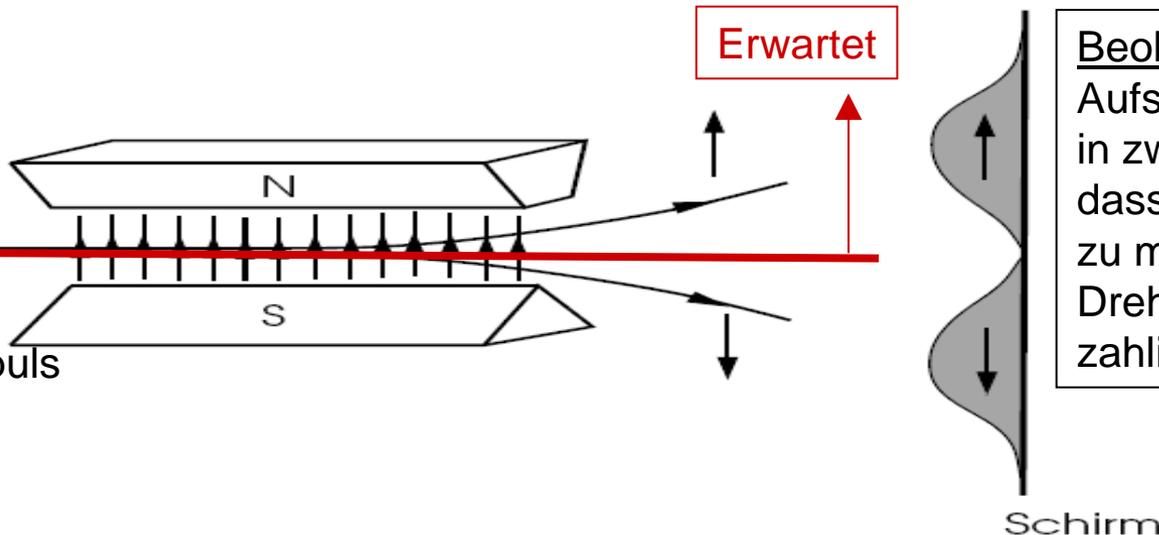
Stern Gerlach Experiment (1922).

$$\hat{\mathbf{M}} = - \frac{e}{2 m c} \hat{\mathbf{L}} \quad \text{Magnetisches Moment des Wasserstoff Atoms.}$$

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) \approx M_z \frac{\partial}{\partial z} B_z \mathbf{e}_z$$

Kraft auf Magnetisches Moment. => Zuständen mit verschiedenen \hat{L}_z Quantenzahlen erfahren verschieden Starke Kräfte.

Quelle:
Wasserstoff
1s Zustand
oder
Ag : 5s =>
Gesamt Drehimpuls
 $l=0$



Beobachtet:
Aufspaltung des Strahls
in zwei Komponenten so
dass, $l=1/2$. Passt nicht
zu möglichen Orbital
Drehimpulse die Ganz-
zahlig sind!

Interpretation:Elektron besitzt eine interne Drehimpuls „Spin“ von $l = 1 / 2$ Bem: Spin der Elektron folgt aus relativistische Formulierung der QM. Dirac Gleichung (QMII)**Der Spin 1/2 Operator.**

➤ Analog zu Drehimpuls: $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z), \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon^{i,j,k} \hat{S}_k$

➤ Spin ist unabhängig von Orbital Freiheitsgraden. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{orbital} \otimes \mathcal{H}_{spin}$

$$[1 \otimes \hat{S}_i, \hat{X}_j \otimes 1] = [1 \otimes \hat{S}_i, \hat{P}_j \otimes 1] = [1 \otimes \hat{S}_i, \hat{L}_j \otimes 1] = 0$$

➤ Es gibt Zwei Spin zuständen $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ mit $\hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$

$$\left[\text{Dreimpuls Notation: } |\uparrow\rangle = \left| l = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \right\rangle, |\downarrow\rangle = \left| l = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

➤ $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ Ist Basis von Spin 1/2 Hilbertraum \mathcal{H}_s

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1, \quad \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0, \quad \sum_{s=\uparrow, \downarrow} |s\rangle \langle s| = 1_s$$

$$\begin{aligned}
\hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y, & \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y \\
\hat{S}_+ |\uparrow\rangle &= 0, & \hat{S}_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle \\
\hat{S}_- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle, & \hat{S}_- |\downarrow\rangle &= 0
\end{aligned}$$

➤ Der Spin Operator kann man durch die 2X2 **Pauli Spin Matrizen** Darstellen.

$$\hat{S} = \sum_{s,s'=\uparrow,\downarrow} |s'\rangle \langle s| \langle s'|\hat{S}|s\rangle, \quad \langle s'|\hat{S}|s\rangle = \frac{\hbar}{2} \left([\sigma_x]_{s',s}, [\sigma_y]_{s',s}, [\sigma_z]_{s',s} \right)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Magnetisches Moment der Elektron:

$$\hat{\mathbf{M}}_s = -g \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{S}} = -g \mu_B \hat{\mathbf{S}} / \hbar \quad g: \text{ Landé oder Giromagnetische Faktor.}$$

$g = 2$ Kann man aus der Dirac Gleichung herleiten.

Dynamik von Spin Systeme

Spin Präzession.

$$\hat{H} = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} / \hbar$$

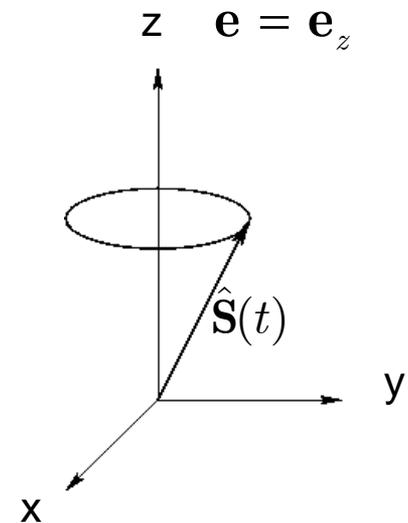
Heisenberg bild:

$$\hat{\mathbf{S}}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{\mathbf{S}} e^{-it\hat{H}/\hbar} = R(\mathbf{e}, \omega_0 t) \hat{\mathbf{S}}(t=0),$$

$$\mathbf{e} = \mathbf{B} / |\mathbf{B}|, \quad \omega_0 = \frac{ge|\mathbf{B}|}{2mc} \quad \text{Larmor Frequenz}$$

$R(\mathbf{e}, \omega_0 t)$ Drehung um Achse \mathbf{e} Winkel $\omega_0 t$

In Zeit $T=2\pi/\omega_0$ hat $\hat{\mathbf{S}}(t)$ eine volle Umdrehung durchgeführt.



Schrödinger bild:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}/\hbar} |\psi\rangle = e^{-i\omega_0 t \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{S}} / \hbar} |\psi\rangle = \sum_{\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow} |\sigma\rangle \langle \sigma | e^{-i\omega_0 t \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{S}} / \hbar} | \sigma' \rangle \langle \sigma' | \psi \rangle$$

$$\langle \sigma | e^{-i\omega_0 t \hat{S}_z / \hbar} | \sigma' \rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t / 2) - i \sin(\omega_0 t / 2) \mathbf{e}_z & -i \sin(\omega_0 t / 2) [\mathbf{e}_x - i \mathbf{e}_y] \\ -i \sin(\omega_0 t / 2) [\mathbf{e}_x + i \mathbf{e}_y] & \cos(\omega_0 t / 2) + i \sin(\omega_0 t / 2) \mathbf{e}_z \end{pmatrix}$$

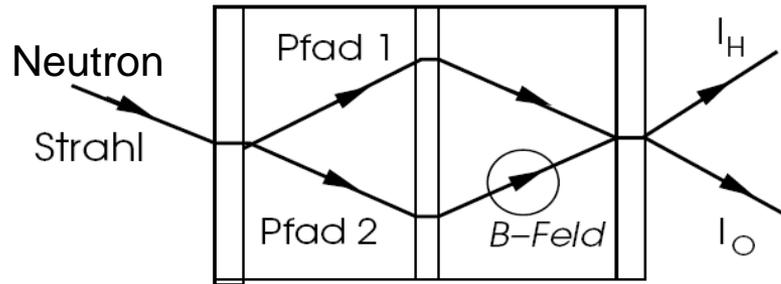
$$\Rightarrow |\Psi(t + 2\pi / \omega_0)\rangle = -|\Psi(t)\rangle \quad \text{obwohl} \quad \hat{\mathbf{S}}(t + 2\pi / \omega_0) = \hat{\mathbf{S}}(t)$$

Man erwartet Interferenz Phänomene mit Periode $T=4\pi/\omega_0$!

VERIFICATION OF COHERENT SPINOR ROTATION OF FERMIONS [☆]

H. RAUCH, A. ZEILINGER, G. BADUREK, A. WILFING

Atominstytut der Oesterreichischen Hochschulen, A-1020 Wien, Austria



Weg im Uniform Magnetfeld B_z hat Länge l
Geschwindigkeit der Neutrons: v

$$|\psi\rangle_{final} = |\psi\rangle_{Pfad\ 1} + |\psi\rangle_{Pfad\ 2} =$$

$$|\psi\rangle_{initial} + e^{-i\hat{S}_z \omega_0 l / v\hbar} |\psi\rangle_{initial}$$

Volle Spin rotation für: $\omega_0 l / v = 2\pi$

Periode der Interferenz Muster: $\omega_0 l / v = 4\pi$

VERIFICATION OF COHERENT SPINOR ROTATION OF FERMIONS \star

H. RAUCH, A. ZEILINGER, G. BADUREK, A. WILFING

Atominstytut der Oesterreichischen Hochschulen, A-1020 Wien, Austria

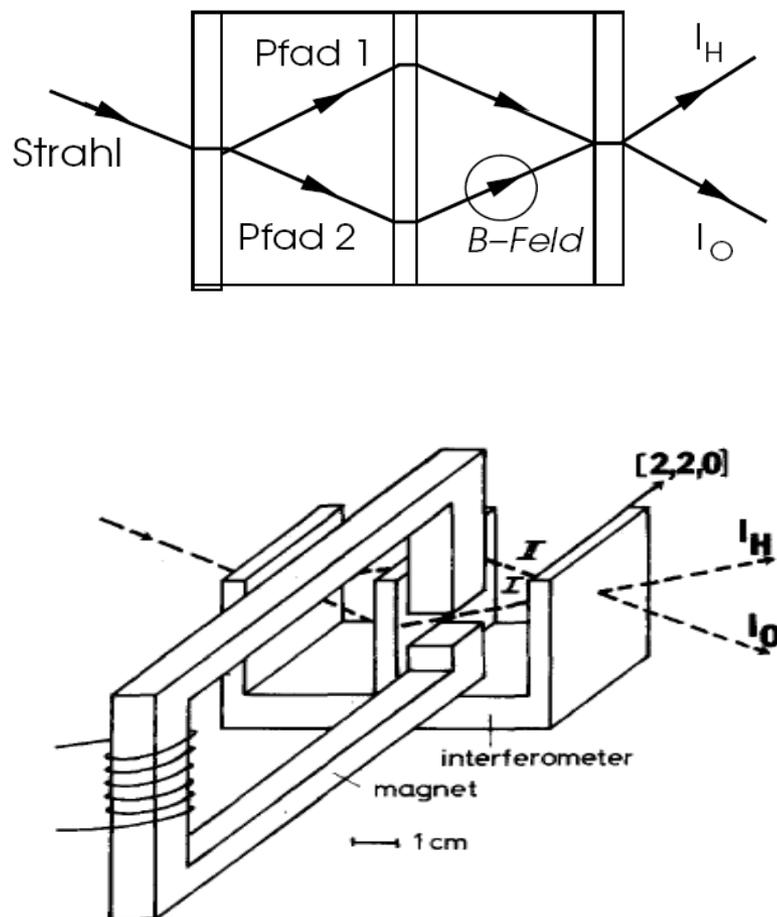


Fig. 1. Sketch of the experimental setup.

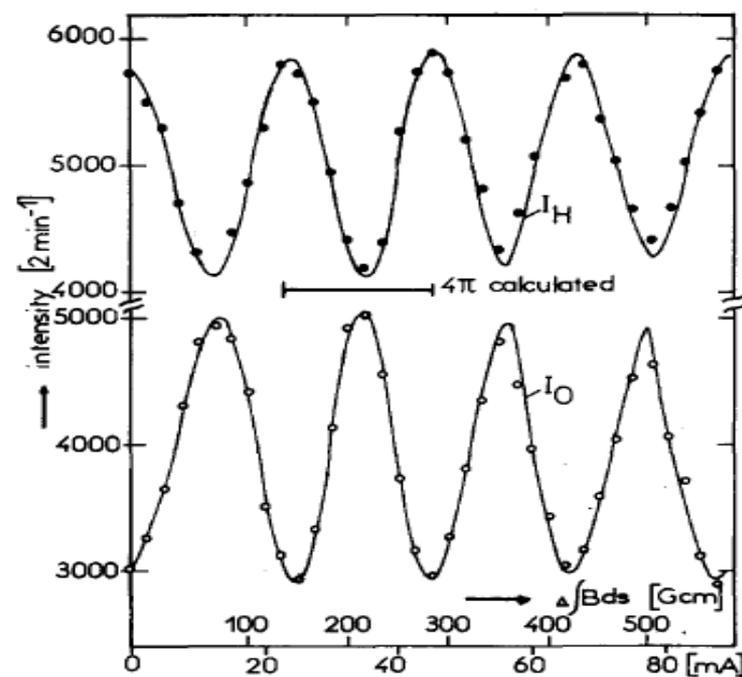
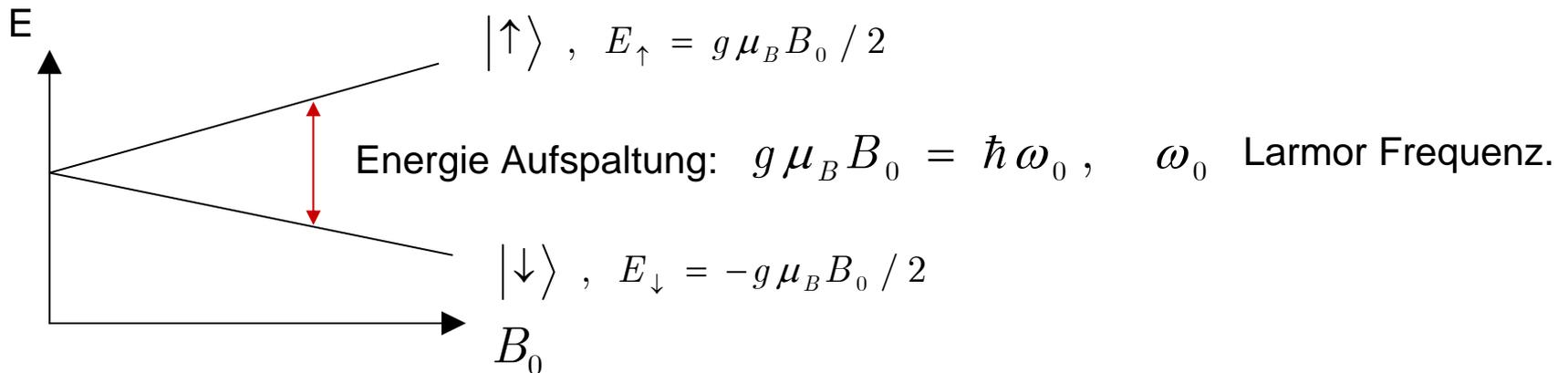


Fig. 2. Observed intensity oscillations of the 0- and H-beam as a function of the difference of the magnetic field action on beam I and II ($\Delta \int B_z ds = \int B_z ds$ (path I) - $\int B_z ds$ (path II)).

NMR. Nukleare Magnetische Resonanz

$$\hat{H}_0 = g\mu_B \mathbf{B}_0 \cdot \hat{\mathbf{S}} / \hbar, \quad \mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$$

Stationäre Zustände:



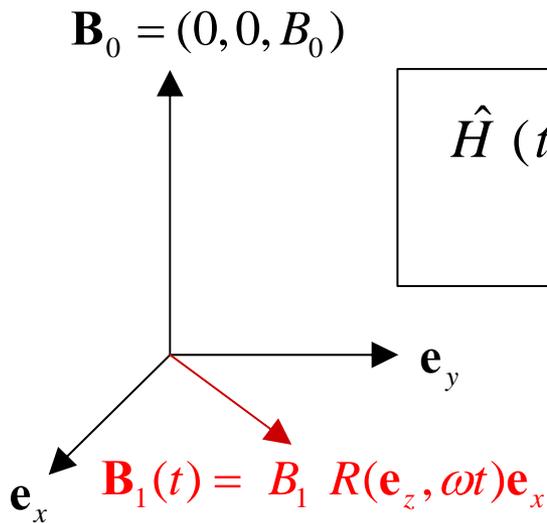
In Magnetfeld der Frequenz $\omega = \omega_0$ erwartet man ein Resonanzverhalten des

Spinflips Übergangs $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$

Modell:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\mu_B \mathbf{B}_1(t) \cdot \hat{\mathbf{S}} / \hbar, \quad \mathbf{B}_1(t) = B_1(\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0)$$

Gesucht. $|\langle \downarrow | \hat{U}(t, 0) | \uparrow \rangle|^2$



$$\hat{H}(t) = \underbrace{\frac{g \mu_B B_0}{\hbar}}_{=\omega_0} \hat{S}_z + \underbrace{\frac{g \mu_B B_1}{\hbar}}_{=\omega_1} \underbrace{R(\mathbf{e}_z, \omega t) \mathbf{e}_x}_{\mathbf{e}_1(t)} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

Sei: $\hat{U}_0(t) = e^{-it\omega\hat{S}_z/\hbar}$ so dass, $\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{U}_0(t) = \tilde{H} = \omega_0\hat{S}_z + \omega_1\hat{S}_x$

und $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0) = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H} - \omega\hat{S}_z] \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0)$

Mit $[\tilde{H} - \omega\hat{S}_z] = \Omega \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad \boldsymbol{\alpha} = (\omega_1, 0, \omega_0 - \omega) / \Omega, \quad \Omega = \sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2}$

$\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}(t,0) = e^{-it\Omega \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}/\hbar}$ oder $\hat{U}(t,0) = e^{-it\omega\hat{S}_z/\hbar} e^{-it\Omega \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}/\hbar}$

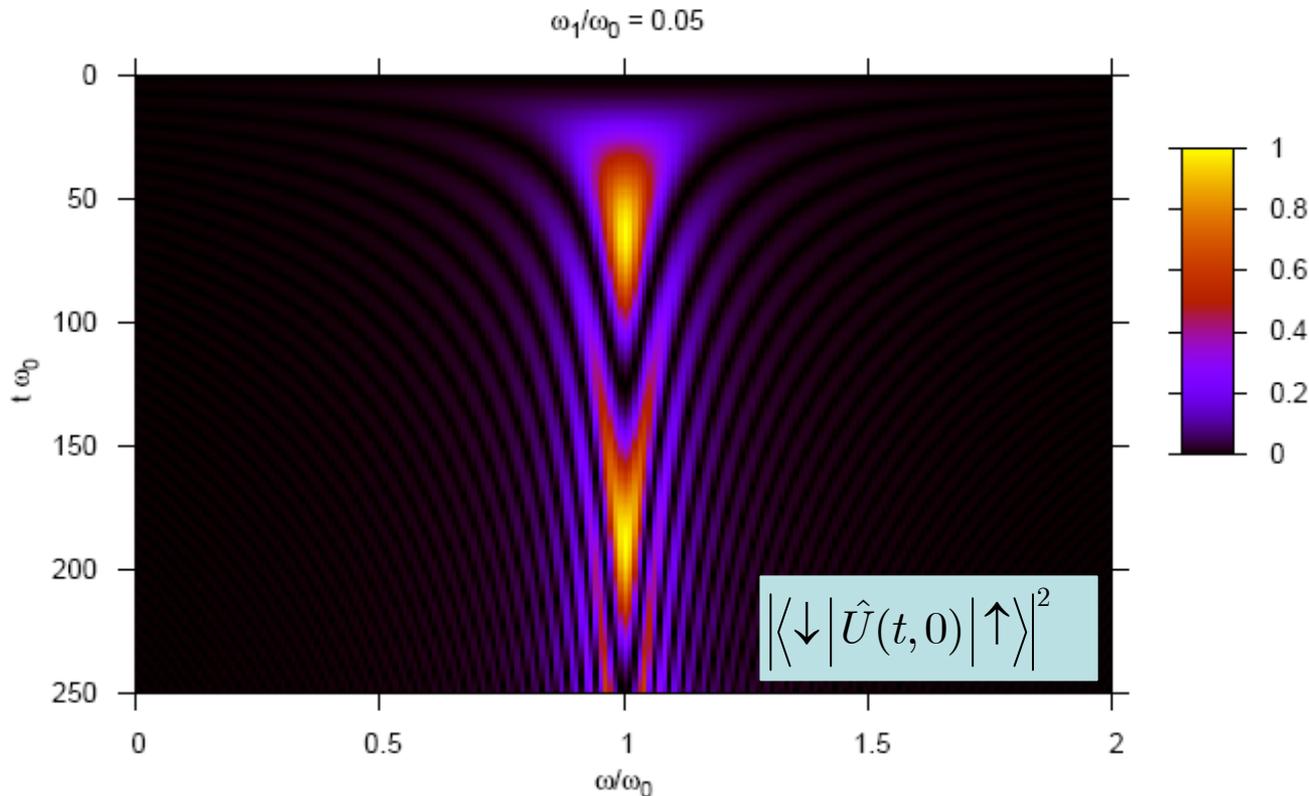
Rechnung ergibt:

$$\left| \langle \downarrow | \hat{U}(t, 0) | \uparrow \rangle \right|^2 = \sin^2 \left(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} t / 2 \right) \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \quad \omega_1 = g \mu_B B_1 / \hbar$$

➤ Resonanz in Amplitude bei $\omega = \omega_0 = g \mu_B B_0 / \hbar$. Hängt von Magnetisches Moment des Kerns und Lokal Magnetfeld ab. Breite der Resonanz. ω_1

➤ Beim Resonanz ist $\left| \langle \downarrow | \hat{U}(t, 0) | \uparrow \rangle \right|^2 = \sin^2(\omega_1 t / 2)$

=> Bei $t = \frac{\pi}{\omega_1}$ 100% Wahrscheinlichkeit Kernspin umzudrehen.



Der Spinor Zustand.

➤ Gesamt Hilbertraum des Elektrons.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{orbital} \otimes \mathcal{H}_{spin} \quad \text{mit z.B. } \mathcal{H}_{orbital} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad \text{und } \mathcal{H}_{spin} = \mathbb{C}^2$$

➤ Basis von \mathcal{H}

Sei $|\mathbf{x}\rangle$ basis von $\mathcal{H}_{orbital}$ d.h. $\int d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = 1_{orbital}$

Sei $|s\rangle$ basis von \mathcal{H}_{spin} d.h. $\sum_{s=\uparrow,\downarrow} |s\rangle\langle s| = 1_{spin}$

Dann ist:

$$|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle \text{ basis von } \mathcal{H} \quad \text{d.h.} \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad |\psi\rangle = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \int d^3\mathbf{x} \psi_s(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle$$

➤ Skalarprodukt:

$$(\langle\mathbf{y}| \otimes \langle s'|) (|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle) = \langle\mathbf{y}|\mathbf{x}\rangle \langle s'|s\rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta_{s,s'}$$

Damit ist:

$$\psi_s(\mathbf{x}) = (\langle\mathbf{x}| \otimes \langle s|) |\psi\rangle$$

➤ Operatoren in \mathcal{H} $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

$$\hat{A} = \hat{A}_{orbital} \otimes \hat{A}_{spin} \quad \text{und} \quad \hat{A}_{orbital} \otimes \hat{A}_{spin} (|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle) = \left(\hat{A}_{orbital} |\mathbf{x}\rangle \right) \otimes \left(\hat{A}_{spin} |s\rangle \right)$$

$$\hat{A}_{orbital} : \mathcal{H}_{orbital} \rightarrow \mathcal{H}_{orbital} \quad \hat{A}_{spin} : \mathcal{H}_{spin} \rightarrow \mathcal{H}_{spin}$$

Beisp: $\hat{1} = \hat{1}_{orbital} \otimes \hat{1}_{spin} = \sum_{s=\uparrow, \downarrow} \int d^3\mathbf{x} (|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle) (\langle \mathbf{x}| \otimes \langle s|)$

Hamilton Operator des Elektrons im äußere EM Feld.

$$\hat{H} = \underbrace{\left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{X}}) \right)^2 - e\phi(\hat{\mathbf{X}}) \right]}_{=\hat{H}_{Orbital}} \otimes \hat{1}_s + \underbrace{\frac{ge}{2mc} \mathbf{B}(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{\mathbf{S}}}_{=\sum_{i=1}^3 B_i(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{S}_i} = -\mathbf{B}(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{\mathbf{M}}_s$$

Ortsraum Darstellung der Stationäre Schrödinger Gleichung.

$$(\langle \mathbf{x}| \otimes \langle s|) \hat{H} |\psi\rangle = E \underbrace{(\langle \mathbf{x}| \otimes \langle s|) |\psi\rangle}_{=\psi_s(\mathbf{x})}$$

$$\sum_{s'=\uparrow,\downarrow} \int d^3\mathbf{y} (\langle \mathbf{x} | \otimes \langle s |) \hat{H} (| \mathbf{y} \rangle \otimes | s' \rangle) (\langle \mathbf{y} | \otimes \langle s' |) | \psi \rangle = E \psi_s(\mathbf{x})$$

$$\sum_{s'=\uparrow,\downarrow} \left[\hat{H}_{Orbital} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{x} \right) \delta_{s,s'} + \frac{ge}{2mc} \sum_{i=1}^3 B_i(\mathbf{x}) [S_i]_{s,s'} \right] \psi_{s'}(\mathbf{x}) = E \psi_s(\mathbf{x})$$

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad \sigma_i \text{ Pauli Spin Matrix}$$

Mit Spinor Wellenfunktion

$$\vec{\psi}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

hat man dann:

$$\left[\hat{H}_{Orbital} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{x} \right) \mathbf{1}_s + \frac{ge}{2mc} \sum_{i=1}^3 B_i(\mathbf{x}) S_i \right] \vec{\psi}(\mathbf{x}) = E \vec{\psi}(\mathbf{x})$$

Pauli Theorie des Elektrons.

(Coulomb Eichung)

Beisp: Wasserstoff Atom mit $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, 0, B) \Rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \mathbf{x} \times \mathbf{B}$

$$\hat{H}_{\text{Orbital}} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2mc} B \hat{L}_z \quad (\text{Vernachlässigung der diamagnetischen Term})$$

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} \right) \mathbf{1}_s + \frac{e}{2mc} B \left(\hat{L}_z \mathbf{1}_s + g \mathbf{S}_z \right)$$

Stationäre Zustände:

$$\vec{\psi}_{n,l,m,\uparrow}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_{n,m,\uparrow} = -Ry \frac{Z}{n^2} + \frac{eB}{2mc} \hbar (m + g/2)$$

$$\vec{\psi}_{n,l,m,\downarrow}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E_{n,m,\downarrow} = -Ry \frac{Z}{n^2} + \mu_B B (m - g/2)$$

Gesamt Magnetisches Moment:

$$\hat{\mathbf{M}}_{\text{tot}} = - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{B}} = - \frac{e}{2mc} \left(\hat{\mathbf{L}} \mathbf{1}_s + g \mathbf{S} \right)$$

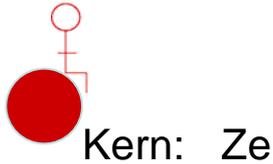
Spin-Bahn Kopplung.



In CM Inertialsystem



Elektron bewegt sich mit Geschwindigkeit \mathbf{v} .



In \mathcal{O}' Elektron Ruht.

$$\mathbf{B}' = \mathbf{B} - \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \approx 1 \quad (\text{Siehe ED})$$

$$\text{In } \hat{H} = \underbrace{\left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{X}}) \right)^2 - e\phi(\hat{\mathbf{X}}) \right]}_{=\hat{H}_{\text{Orbital}}} \otimes \hat{\mathbf{1}}_s + g\mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{\mathbf{S}} / \hbar \quad \text{sollte man}$$

B durch \mathbf{B}' ersetzen. Mit $\phi(\mathbf{x}) = \phi(r)$, $\mathbf{E} = -\nabla \phi(\mathbf{x})$, $\mathbf{v} = \mathbf{p} / m$ ist

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{Orbital}} \otimes \hat{\mathbf{1}}_s + g\mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{X}}) \otimes \hat{\mathbf{S}} / \hbar - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{g\mu_B}{cm} \frac{1}{|\hat{\mathbf{X}}|} \frac{\partial \phi}{\partial r} \Big|_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{X}}}}_{\text{Spin-Bahn Kopplung.}} \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{S}} / \hbar$$

Spin-Bahn Kopplung.

\mathcal{O}' ist keine Inertialsystem! Korrektur: Klassisch Thomas precession (Siehe Jackson, Classical ED.), QM Dirac Gleichung (Siehe QM II) -> Faktor $\frac{1}{2}$.

Spin-Bahn Kopplung, Symmetrie Eigenschaften.

Hilbert Raum: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Orbital}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$

Hamilton Operator:

$$\hat{H} = \overbrace{\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}|} \right]}^{\hat{H}_{\text{Orb}}} \otimes \hat{1}_{\text{spin}} + \alpha \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{S}} = \hat{H}_{\text{Orb}} \otimes \hat{1} + \alpha (\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1}) \cdot (\hat{1} \otimes \hat{\mathbf{S}})$$
$$= \hat{H}_{\text{Orb}} \otimes \hat{1} + \alpha \sum_{i=1}^3 (\hat{L}_i \otimes \hat{1}) \cdot (\hat{1} \otimes \hat{S}_i)$$

\hat{H} ist **nicht** invariant unter $\hat{T}_L(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-ie \cdot (\hat{\mathbf{L}} \otimes 1) \Theta / \hbar}$

\hat{H} ist invariant unter $\hat{T}(\mathbf{e}, \Theta) = e^{-ie \cdot [\hat{\mathbf{L}} \otimes 1 + 1 \otimes \hat{\mathbf{S}}] \Theta / \hbar}$,

Def : $\hat{\mathbf{J}} \equiv \hat{\mathbf{L}} \otimes 1 + 1 \otimes \hat{\mathbf{S}}$

Gesamt Drehimpuls.

Kap 8. Addition von Drehimpulsen

Allgemeine Fragestellung:

Sei $|l_1, m_1\rangle$, $m_1 = -l_1, \dots, l_1$ $\hat{\mathbf{L}}^2 |l_1, m_1\rangle = \hbar^2 l_1(l_1 + 1) |l_1, m_1\rangle$, $\hat{L}_z |l_1, m_1\rangle = \hbar m_1 |l_1, m_1\rangle$

Basis von \mathcal{H}_{l_1} . Es gilt: $\dim(\mathcal{H}_{l_1}) = 2l_1 + 1$, $l_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$, $\hat{\mathbf{L}} : \mathcal{H}_{l_1} \rightarrow \mathcal{H}_{l_1}$

Sei: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{l_1} \otimes \mathcal{H}_{l_2}$, $\dim(\mathcal{H}) = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$

Basis von \mathcal{H} : $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$ so dass, $\sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle) (\langle l_1, m_1| \otimes \langle l_2, m_2|) = \hat{1}$

Gesamt Drehimpuls: $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}^{(1)} + \hat{\mathbf{L}}^{(2)}$, mit $\hat{\mathbf{L}}^{(1)} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{1}$ und $\hat{\mathbf{L}}^{(2)} = \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{L}}$

$$\hat{\mathbf{J}}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

Da: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{i,j,k} \hat{L}_k$ gilt: $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{i,j,k} \hat{J}_k$

$$\exists |j, m\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_{l_1} \otimes \mathcal{H}_{l_2} \mid \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

d.h. wir wollen eine Basis von \mathcal{H} finden so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_z diagonal sind!

Clebsch-Gordan Koeffizienten

$$|j, m\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow |j, m\rangle = \underbrace{\sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \left(|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \right)}_{=1} \left(\langle l_1, m_1 | \otimes \langle l_2, m_2 | \right) |j, m\rangle$$

Es gilt: $\left(\langle l_1, m_1 | \otimes \langle l_2, m_2 | \right) |j, m\rangle \neq 0$ nur falls: $m = m_1 + m_2$

da: $\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$ und $\hat{J}_z |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$

Fragen: Clebsch-Gordan Koeffizienten?

Welche werte von j sind überhaupt erlaubt ?

Beispiel. Addition von zwei Spin $\frac{1}{2}$ Freiheitsgraden:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\frac{1}{2}} \otimes \mathcal{H}_{\frac{1}{2}}, \quad \dim(\mathcal{H}) = 4,$$

$$\text{Basis: } |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\mathbf{J} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}, \quad \text{mit } \hat{\mathbf{S}}^{(1)} = \hat{\mathbf{S}} \otimes \hat{\mathbf{1}} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{S}}^{(2)} = \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{S}},$$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{i,j,k} \hat{J}_k$$

$$\text{Gesucht: } |j, m\rangle \in \mathcal{H} \quad \text{mit} \quad \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$$\text{Es gilt: } \hat{\mathbf{J}}^2 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad \hat{J}_z |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\Rightarrow |1, 1\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \quad \text{da:} \quad \hat{J}_- |1, 1\rangle = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y) |1, 1\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, 0\rangle \quad \text{ist:}$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \quad \hat{J}_- |1, 0\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, -1\rangle \quad \Rightarrow$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad \hat{S}_-^{tot} |1, -1\rangle = 0$$

$\dim(\mathcal{H}) = 4$. d.h. Es fehlt eine Zustand!

Im ursprüngliche Basis:

$$\left. \begin{aligned} \hat{J}_z |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ \hat{J}_z |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &= 0 \\ \hat{J}_z |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &= 0 \\ \hat{J}_z |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &= -\hbar |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{Zwei Zustände mit } m = 0$$

Im $|j,m\rangle$ basis:

$$\hat{J}_z |1, m\rangle = \hbar m |1, m\rangle, \quad m = -1, 0, 1 \quad \text{Ein Zustand mit } m = 0$$

\Rightarrow Es fehlt eine Zustand mit $m = 0$ und die Orthogonal zu $|1,0\rangle$ sein muss.

Einziges Möglichkeit (bis auf eine Phase) :

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |0,0\rangle = 0, \quad \hat{J}_z |0,0\rangle = 0$$

Basis von \mathcal{H} so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_z diagonal sind:

$$\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \left\{ \underbrace{|0,0\rangle}_{\mathcal{H}_0}, \underbrace{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle}_{\mathcal{H}_1} \right\} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$$

d.h. Kombination von zwei Spin $\frac{1}{2}$ ergibt eine Drehimpuls 0 (Singulett) und drei Drehimpuls 1 (Triplet) Zustände.

Clebsch-Gordan Koeffizienten.

Bem:

$$\begin{pmatrix} |0,0\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,1\rangle \\ |1,-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

Orthogonale Matrix. => Alles was wir gemacht haben ist eine Basis Transformation !

Allgemein gilt:

$$\mathcal{H}_{l_1} \otimes \mathcal{H}_{l_2} = \mathcal{H}_{l_1+l_2} \oplus \mathcal{H}_{l_1+l_2-1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{|l_1-l_2|}$$

Dimensionen stimmen da:

$$\dim(\mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_{l_1}) = (2l + 1)(2l_1 + 1)$$

$$\dim(\mathcal{H}_{l_1+l_2} \oplus \mathcal{H}_{l_1+l_2-1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{|l_1-l_2|}) = \sum_{n=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2n + 1) = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$$

Clebsch-Gordan Koeffizienten bilden $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \times (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ Unitär

$$\text{Matrix. } \left(\langle l_1, m_1 | \otimes \langle l_2, m_2 | \right) | j, m \rangle = U_{(m, m_1), (j, m)}^{(l_1, l_2)}$$

$$m_1 : -l_1 \dots l_1, \quad m_2 = -l_2 \dots l_2 \quad \Rightarrow \quad (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \quad \text{Mögliche Werte.}$$

$$j : |l_1 - l_2| \dots l_2 + l_1, \quad m = -j \dots j \quad \Rightarrow \quad (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \quad \text{Mögliche Werte.}$$

Besip. Feinstruktur Aufspaltung.

a) Addition von Drehimpuls:

$$\mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{l+1/2} \oplus \mathcal{H}_{l-1/2} \quad (l \text{ ganzzahlig})$$

Gesucht: Basis so dass, $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_z diagonal sind. $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{S}}$
gesamt Drehimpuls

$\mathcal{H}_{l+1/2}$ Hilbertraum:

Es gilt:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar^2 j(j+1) |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\hat{J}_z |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar j |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \quad j = l + 1/2$$

$$\Rightarrow \left| j = l + 1/2, m = l + 1/2 \right\rangle = |l, l\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\text{Mit: } \hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$$

erzeugt man rekursiv die Zustände: $\left| j = l + 1/2, m \right\rangle$

$$\left| j = l + 1/2, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} |l, m-1/2\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} |l, m+1/2\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

Analog : $\mathcal{H}_{l-1/2}$ Hilbertraum:

$$|j = l - 1/2, m\rangle = -\sqrt{\frac{l - m + 1/2}{2l + 1}} |l, m - 1/2\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{l + m + 1/2}{2l + 1}} |l, m + 1/2\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

Wasserstoff Atom mit Spin-Bahn Kopplung.

$$\hat{H} = \overbrace{\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{X}}|} \right]}^{H_0} \otimes \hat{\mathbf{1}}_{spin} + \alpha \left(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{1}}_{spin} \right) \cdot \left(\hat{\mathbf{1}}_{orb} \otimes \hat{\mathbf{S}} \right)$$

Eigenzustände bei $\alpha = 0$: $|n, l, m\rangle \otimes |s\rangle$ Energie: $E_n = -\frac{Z^2 Ry}{n^2}$, $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6eV$

Bem: Ohne Spin-Bahn Kopplung ist l eine gute Quanten Zahl.

Eigenzustände bei $\alpha \neq 0$

Bem: Mit Spin-Bahn Kopplung ist j (gesamt Drehimpuls) eine gute Quanten Zahl.

Da: $(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{1}}) \cdot (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{J}}^2 - (\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{1}})^2 - (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{S}})^2 \right)$ ist:

$$(\hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{1}}) \cdot (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathbf{S}}) |j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) |j, m\rangle$$

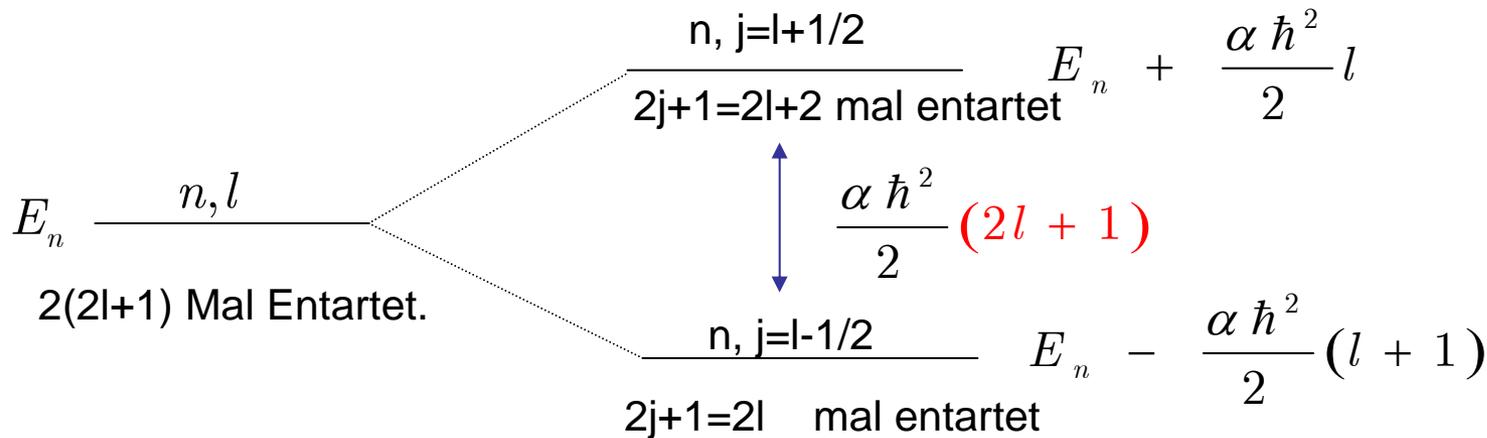
Eigenzustände mit Spin-Bahn Kopplung:

$$\rightarrow \left| n, j = l + 1/2, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m + 1/2}{2l + 1}} \left| n, l, m - 1/2 \right\rangle \otimes \left| \uparrow \right\rangle + \sqrt{\frac{l - m + 1/2}{2l + 1}} \left| n, l, m + 1/2 \right\rangle \otimes \left| \downarrow \right\rangle$$

Mit Energie $E_n + \frac{\alpha \hbar^2}{2} l$

$$\rightarrow \left| n, j = l - 1/2, m \right\rangle = -\sqrt{\frac{l - m + 1/2}{2l + 1}} \left| n, l, m - 1/2 \right\rangle \otimes \left| \uparrow \right\rangle + \sqrt{\frac{l + m + 1/2}{2l + 1}} \left| n, l, m + 1/2 \right\rangle \otimes \left| \downarrow \right\rangle$$

Mit Energie $E_n - \frac{\alpha \hbar^2}{2} (l + 1)$



Größenordnung von α

Nur Dimensionen Berücksichtigen.

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \text{Bohrsche Radius.}$$

$$\frac{1}{2} \frac{g\mu_B}{cm} \left\langle \frac{1}{|\hat{\mathbf{X}}|} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right\rangle_{n,l} / \hbar, \quad \phi = Ze/r$$

Ze/a^3

So dass,

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{e^2 Z}{m^2 c^2 a^3}$$

$$\Rightarrow \frac{\alpha \hbar^2 (2l + 1) / 2}{Ry} = \frac{Z}{2} (2l + 1) \left(\frac{e^2}{c\hbar} \right)^2, \quad \left(\frac{e^2}{c\hbar} \right) \approx \left(\frac{1}{137} \right)$$

Feinstrukturkonstante.

Feinstruktur Aufspaltung ist *klein* gegenüber Balmer Aufspaltung (Ry).

Ce: 4f $n=4, l=3, Z=58$ Feinstruktur Aufspaltung ~ 0.5 eV

Kap 9. Störungs-Theorie.

- 1) Zeit Unabhängig (Nicht entartete Fall).
- 2) Zeit Abhängig: Fermi Goldene Regel.

1) $\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ Wir kennen stationäre Zustände von \hat{H}_0

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = \varepsilon_n |\phi_n\rangle$$

Gesucht: Stationäre Zustände von $\hat{H}(\lambda)$ unter der Annahme dass, $\lambda \ll 1$.

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle \quad (1)$$

Ansatz:

$$E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots$$
$$|\Psi_n(\lambda)\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\Psi_1\rangle + \lambda^2 |\Psi_2\rangle + \dots$$

Mit Bedingung: $\langle \phi_n | \Psi_1 \rangle = \langle \phi_n | \Psi_2 \rangle = \dots = \langle \phi_n | \Psi_n \rangle = 0$

In 1) Einsetzen und Koeffizienten vergleich:

$$(a) \quad (\hat{H}_0 - \varepsilon_n) |\Psi_1\rangle + (\hat{H}_1 - E_1) |\phi_n\rangle = 0$$

$$(b) \quad (\hat{H}_0 - \varepsilon_n) |\Psi_2\rangle + (\hat{H}_1 - E_1) |\Psi_1\rangle - E_2 |\phi_n\rangle = 0$$

Mit $\hat{P}_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ und $\hat{Q}_n = 1 - \hat{P}_n \equiv \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle\langle\phi_m|$ hat man:

$$E_1 = \langle\phi_n | \hat{H}_1 | \phi_n\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = -\hat{Q}_n (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)^{-1} \hat{Q}_n \hat{H}_1 |\phi_n\rangle$$

$$E_2 = -\langle\phi_n | \hat{H}_1 \hat{Q}_n (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)^{-1} \hat{Q}_n \hat{H}_1 | \phi_n\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = -\hat{Q}_n (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)^{-1} \hat{Q}_n (\hat{H}_1 - E_1) |\psi_1\rangle$$

Insgesamt für Energie:

$$E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda \langle\phi_n | \hat{H}_1 | \phi_n\rangle - \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle\phi_n | \hat{H}_1 | \phi_m\rangle|^2}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} + O(\lambda^3)$$

Bem: Für n=0 ist zweite Ordnung immer < 0 !

Normierung der Wellenfunktion.

$$\text{Sei } |\Psi_n(\lambda)\rangle_N = Z_n^{\frac{1}{2}} |\Psi_n(\lambda)\rangle \text{ so dass, } \|\Psi_n(\lambda)\rangle_N\| = 1$$

$$\langle \phi_n | \Psi_n(\lambda) \rangle_N = Z_n^{1/2} \underbrace{\langle \phi_n | \Psi_n(\lambda) \rangle}_{=1} \rightarrow \left| \langle \phi_n | \Psi_n(\lambda) \rangle_N \right|^2 = Z_n$$

Z_n : Wahrscheinlichkeit der Original Zustand $|\phi_n\rangle$ im Korrigierten Zustand $|\psi_n(\lambda)\rangle_N$ zu finden

$$Z_n(\lambda) = \frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \varepsilon_n}$$

Beispiel: Zwei Niveau System.

$$\hat{H} = \underbrace{\varepsilon_0 |\phi_0\rangle\langle\phi_0| + \varepsilon_1 |\phi_1\rangle\langle\phi_1|}_{\hat{H}_0} + \lambda \underbrace{J \left[|\phi_0\rangle\langle\phi_1| + |\phi_1\rangle\langle\phi_0| \right]}_{\hat{H}_1}$$

Exakt:

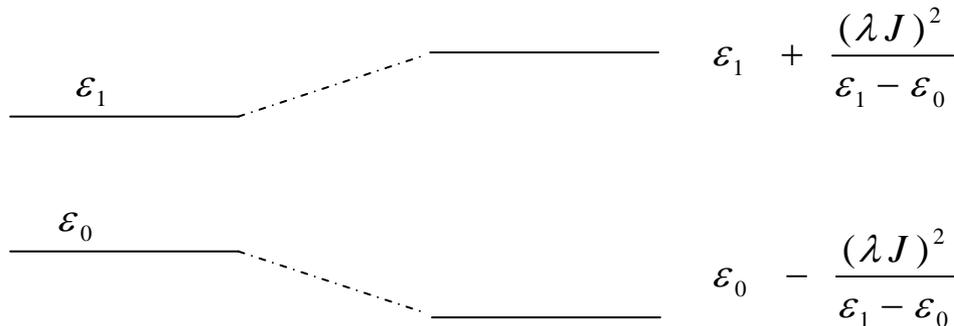
$$E_{\pm} = \varepsilon_{\pm} \pm \sqrt{\varepsilon_{-}^2 + (\lambda J)^2}, \quad \text{mit} \quad \varepsilon_{+} = \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2}, \quad \varepsilon_{-} = \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_1}{2}$$

Für: $(\lambda J)/|\varepsilon_{-}| \ll 1$ (Konvergenz Radius: $(\lambda J)/|\varepsilon_{-}| < 1$)

$$E_{\pm} = \varepsilon_{\pm} \pm |\varepsilon_{-}| \left(1 + \frac{1}{2} (\lambda J)^2 / |\varepsilon_{-}|^2 \right) \quad \text{Für} \quad \varepsilon_1 > \varepsilon_0$$

$$E_{+} = \varepsilon_1 + \frac{(\lambda J)^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} = \varepsilon_1 + \lambda \langle \phi_1 | \hat{H}_1 | \phi_1 \rangle - \lambda^2 \frac{|\langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_1 \rangle|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_1}$$

$$E_{-} = \varepsilon_0 - \frac{(\lambda J)^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} = \varepsilon_0 + \lambda \langle \phi_0 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle - \lambda^2 \frac{|\langle \phi_1 | \hat{H}_1 | \phi_0 \rangle|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}$$



Zeitabhängige Störungstheorie.

a) Wechselwirkungsbild.

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t), \quad \hat{H}_0 |\phi_n\rangle = \varepsilon_n |\phi_n\rangle$$

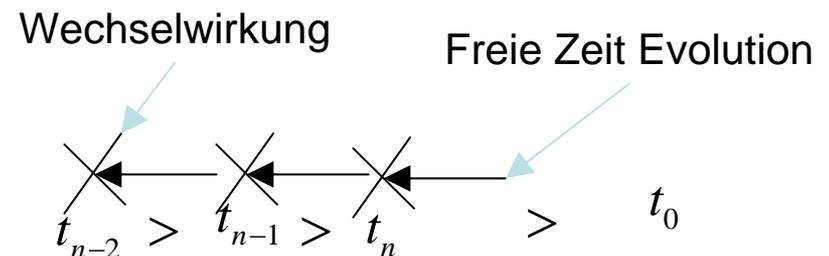
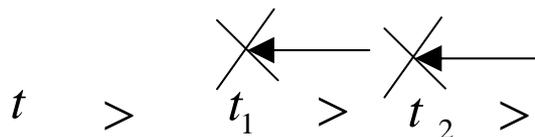
Gesucht: $\hat{U}(t, t_0): \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$

Def: $\hat{U}_W(t, t_0) = e^{itH_0/\hbar} \hat{U}(t, t_0) e^{-it_0H_0/\hbar}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_W(t, t_0) = \underbrace{e^{itH_0/\hbar} \hat{H}_1(t) e^{-itH_0/\hbar}}_{= \hat{H}_{1,W}(t)} \hat{U}_W(t, t_0)$$

→ Dyson Reihe (Siehe Kap. III)

$$\hat{U}_W(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_{1,W}(t_1) \hat{H}_{1,W}(t_2) \cdots \hat{H}_{1,W}(t_n)$$



Fermi Goldene Regel. (1. Ordnung Störungs-Theorie)

Zur Zeit $t=0$ wird die Störung eingeschaltet und der QM System befindet sich im Zustand $|\phi_i\rangle$

$$\text{Frage: } P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \langle \phi_f | \hat{U}(t,0) | \phi_i \rangle \right|^2 \approx \left| \langle \phi_f | \phi_i \rangle \right|^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt_1 \langle \phi_f | \hat{H}_{1,W}(t_1) | \phi_i \rangle \right|^2 =$$
$$\left| \langle \phi_f | \phi_i \rangle \right|^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt_1 e^{it_1(E_f - E_i)/\hbar} \langle \phi_f | \hat{H}_1(t_1) | \phi_i \rangle \right|^2$$

$$\hat{H}_0 |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle, \quad \hat{H}_0 |\phi_f\rangle = E_f |\phi_f\rangle$$

Zeitunabhängige Störung.

$$\hat{H}_1(t) = \begin{cases} \hat{V} & \text{für } t \geq 0 \\ 0 & \text{für } t < 0 \end{cases}$$

Klassisch. Energie für $t > 0$ ist erhalten.

QM.

$$P_{i \rightarrow f}(t) \approx \left| \langle \phi_f | \phi_i \rangle \right|^2 + \frac{4|V_{f,i}|^2}{|E_f - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{E_f - E_i}{2} \frac{t}{\hbar} \right)$$

$$V_{f,i} = \langle \phi_f | \hat{V} | \phi_i \rangle$$

$$\frac{4|V_{f,i}|^2}{|E_f - E_i|^2} \sin^2\left(\frac{E_f - E_i}{2} \frac{t}{\hbar}\right)$$

ΔE : Energie bereich wo P(i->f) groß ist:

$$\Delta t = t - t_0 = t$$

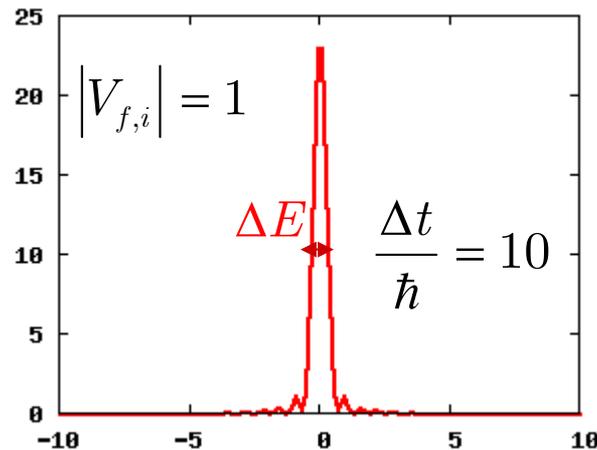
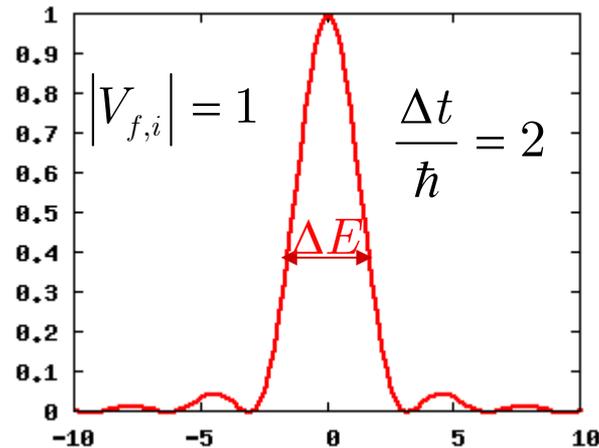
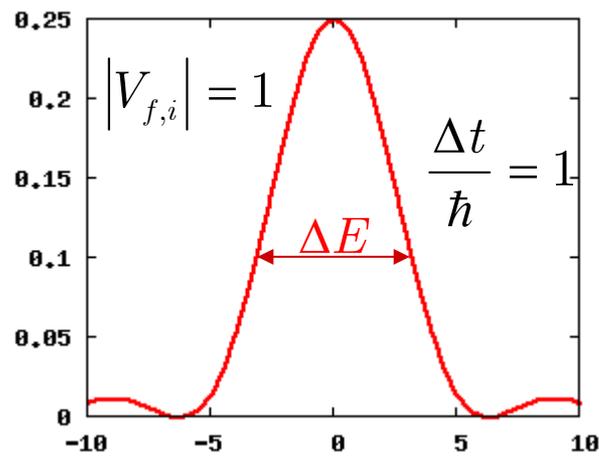
$$\Delta E \Delta t \sim \hbar$$

„Unschärferrelation“ zwischen Energie und Zeit ist fundamental verschieden als der zwischen Orts und Impuls. Ort und Impuls sind Observabeln (d.h. Operatoren). Zeit ist ein Parameter!

Bem. Aus $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ folgt

$$\Delta E = 1eV \Rightarrow \Delta t \sim 10^{-16} s$$

$$10^{-15} s = \text{femto seconds}$$



Es gilt:
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(nx)}{nx^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} n g_1(nx) = \delta(x)$$

weil
$$g_1(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(x)}{x^2}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx g_1(x) = 1$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{i \rightarrow f}(t) \simeq \left| \langle \phi_f | \phi_i \rangle \right|^2 + \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{4 |V_{f,i}|^2}{|E_f - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{E_f - E_i}{2} \frac{t}{\hbar} \right)$$

$$\simeq \left| \langle \phi_f | \phi_i \rangle \right|^2 + \frac{2\pi}{\hbar} t \left| \langle \phi_f | \hat{V} | \phi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i)$$

Übergangs Rate:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{i \rightarrow f}(t) \simeq \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \phi_f | \hat{V} | \phi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i)$$

Fermi Goldene Regel.

Bem. Länge Zeiten. (in femto-seconds)
Schwache Störungen.

Time is not an operator, it's a parameter which describes the evolution of a state in the Hilbert space.

Hence, the energy-time uncertainty relation does not follow from:

Unschärferelation: $\hat{\mathbf{A}}^+ = \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}^+ = \hat{\mathbf{B}}, \Delta \mathbf{A}^2 = \left\langle \left(\hat{\mathbf{A}} - \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle \right)^2 \right\rangle$ Standardabweichung vom Mittelwert.

$$\Delta \mathbf{A} \Delta \mathbf{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] | \psi \rangle \right| \quad \text{Beisp: } [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] = \frac{\hbar}{i} \quad \text{so dass } \Delta \mathbf{P} \Delta \mathbf{X} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Meaning of $\Delta E \Delta t \approx \hbar$?

$$\text{Let } \hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \text{and} \quad |\alpha(t)\rangle = \sum_n e^{-itE_n/\hbar} |n\rangle \langle n | \alpha \rangle$$

At time t we carry out a measurement characterized by the observable $\hat{A} = |\alpha\rangle \langle \alpha|$

with expectation value: $\langle \hat{A} \rangle(t) = |\langle \alpha | \alpha(t) \rangle|^2 =$ probability that at time t the state

$|\alpha(t)\rangle$ is similar to the initial state $|\alpha\rangle$. $\langle \hat{A} \rangle(t)$ varies on a time scale Δt

For example: $\langle \hat{A} \rangle(t) \approx e^{-t/\Delta t}$, Δt : lifetime of state α

But:

$$\langle \alpha | \alpha(t) \rangle = \sum_n e^{-iE_n t / \hbar} \underbrace{|\langle n | \alpha \rangle|^2}_{g(E_n)} = \int dE \rho(E) g(E) e^{-iEt / \hbar} \quad \text{with } \rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

density of states.

Assume that $\rho(E) g(E)$ is a smooth function of width ΔE For Example: $\text{Im} \frac{1}{E - (E_0 - i \Delta E)}$

$$\Delta t \approx \hbar / \Delta E \quad \Rightarrow \quad \hbar \approx \Delta t \Delta E \quad \text{Lifetime is inversely proportional to the width } \Delta E$$

More Formally. (Messiah).

$$\Delta A \Delta H \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle \right| = \frac{1}{2} \left| i \hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle \right|$$

$$\left[\frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle \right|} \right] \Delta H \geq \frac{\hbar}{2}$$