

# Theoretische Quantenmechanik

Vorlesung im Wintersemester 1999/00\*

Prof. JULIUS WESS

*Sektion Physik der Ludwig-Maximilians-Universität  
Theresienstr. 37, D-80333 München*

---

\*Betreuung des Skriptums: Monika Kürzinger und Fabian Bachmaier

## Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Phänomenologische Erfahrungen, die zur Formulierung der Quantenmechanik führen</b>	<b>2</b>
1	Plancksche Beziehung, De Brogliesche Beziehung und Heisenbergsche Unschärferelation	2
2	Beugung am Doppelspalt	6
3	Versuch, die bisherigen Erfahrungen mit einer Wellenfunktion und einer Wellengleichung zu beschreiben	11
4	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	14
5	Erwartungswerte	16
6	Adjungierte und hermitische Operatoren	19
7	Zeitliche Änderung von Erwartungswerten	22
8	Schwankungsquadrate und die Heisenbergsche Unschärferelation	25
9	Das Minimale Wellenpaket	30
10	Impuls und Ortseigenfunktionen	33
11	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	39
<b>II</b>	<b>Eindimensionale Systeme</b>	<b>42</b>
12	Kräftefreies Teilchen	43
13	Die Potentialstufe	47
14	Die Potentialschwelle	52
15	Gebundene Zustände im Potentialtopf	57

<b>16 Der harmonische Oszillator</b>	<b>61</b>
<b>17 Hermite Polynome</b>	<b>65</b>
<b>18 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren</b>	<b>70</b>
<b>19 Kohärente Zustände</b>	<b>75</b>
<b>20 Drehimpuls</b>	<b>78</b>
<b>21 Drehimpulseigenfunktionen</b>	<b>82</b>
<b>22 Algebraische Behandlung des Drehimpulses</b>	<b>84</b>
<b>23 Bahndrehimpuls und Spin</b>	<b>89</b>
<b>24 Addition des Drehimpulses</b>	<b>92</b>
<b>25 Störungsrechnung</b>	<b>96</b>
25.1 Nichtentartete Störungsrechnung . . . . .	97
25.2 Entartete Störungsrechnung . . . . .	99
<b>26 Wechselwirkung des Schrödingerfeldes mit dem elektromagnetischen Feld - Eichfeldtheorie</b>	<b>102</b>

## Teil I

# Phänomenologische Erfahrungen, die zur Formulierung der Quantenmechanik führen

## 1 Plancksche Beziehung, De Brogliesche Beziehung und Heisenbergsche Unschärferelation

Max Planck (Max Planck, Deutschland 1858-1948) war in der Lage, das Spektrum der Hohlraumstrahlung unter der Annahme richtig zu beschreiben, daß zwischen Energie und Frequenz der Strahlung die Relation:

$$E = h\nu \quad (1.1)$$

besteht. Die Konstante  $h$  hat die Dimension einer Wirkung - Energie mal Zeit, sie heißt Plancksche Wirkungskonstante. Ihr numerischer Wert ergibt sich experimentell zu:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-27} \text{ erg sec} \quad (1.2)$$

Wir haben den Wert für  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  angegeben, da die Relation (1.1) meist mit der Kreisfrequenz  $\omega = 2\pi\nu$  geschrieben wird:

$$E = \hbar\omega. \quad (1.3)$$

Im Bereich der klassischen Physik gibt es für eine Relation wie (1.1) keine Begründung, sie drückt eine vollkommen neue Erfahrung aus. Da die Einheiten *erg* und *sec* unserer täglichen Erfahrungswelt gut angepaßt sind, zeigt der numerische Wert von  $\hbar$  auch, warum eine Relation wie (1.1) unserer täglichen Erfahrung so fremd ist.

De Broglie (Louis-Victor de Broglie, Frankreich 1892-1987) hat, wohl ausgehend von den Beziehungen zwischen Energie und Impuls einerseits sowie Frequenz und Wellenlänge andererseits, die folgende Relation postuliert:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad , \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.4)$$

Die Wellenzahl  $k$  kann auch vektoriell verstanden werden:

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.5)$$

$\mathbf{k}$  ist nun der Wellenzahlvektor.

Die Relationen (1.1) und (1.5) werden nun so gedeutet, daß es sich bei  $E$  und  $\mathbf{p}$  um die Energie und den Impuls einzelner Materieteilchen (Elektron, Proton etc.) handelt, denen so ein Wellencharakter zugeordnet wird. Es ist erstaunlich, daß der so postulierte Wellencharakter eines Teilchens experimentell bestens bestätigt werden konnte, wobei die Konstanten in den Relationen (1.1) und (1.5) denselben numerischen Wert haben.

Dies ist ein physikalischer Sachverhalt, der unserer täglichen Erfahrung nicht nur fremd, sondern zunächst sogar widersprüchlich erscheint. Klassisch sind die Begriffe Teilchen, Bahnkurve, Energie und Impuls von den Begriffen Welle, Wellenausbreitung, Frequenz und Wellenlänge sauber getrennt. Daß es sich bei einer Verknüpfung dieser Begriffe nicht um eine Verschmutzung unseres physikalischen Weltbildes, sondern um eine von der Natur erzwungene Erweiterung dieses Weltbildes handelt, wird im Rahmen der Quantenmechanik verstanden. Die Quantenmechanik löst diesen scheinbaren Widerspruch vom gleichzeitigen Teilchen- und Wellenverhalten der Materie auf, dabei verlangt sie von uns jedoch einen weiteren Abstraktionsschritt in der Formulierung und Interpretation physikalischer Gesetze. Ziel dieser Vorlesung ist es, diesen Abstraktionsschritt zu vermitteln und die unglaublichen Erfolge der Quantenmechanik durch die Diskussion einfachster quantenmechanischer Systeme zu demonstrieren.

Die Relationen (1.1) und (1.5) fassen wir zunächst als Konzentrat zahlreicher experimenteller Ergebnisse auf und ergänzen dies noch mit einer weiteren Relation, der Heisenbergschen Unschärferelation (Werner Heisenberg, Deutschland 1901-1976):

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.6)$$

Sie besagt, daß bei einer Messung das Produkt der Unschärfe der Impulsmessung mit der Unschärfe der Koordinatenmessung nicht beliebig klein werden kann, vielmehr immer größer als  $\frac{\hbar}{2}$  sein muß. In unseren klassischen Vorstellungen findet sich kein Anhaltspunkt für eine solche Relation.

Um zu zeigen, was für physikalische Folgerungen man aus dieser Relation ziehen kann, versuchen wir mit Hilfe der Unschärferelation den Aufbau der Atome zu verstehen. Wir gehen von der experimentellen Tatsache aus, daß das Atom aus einem positiv geladenen Kern und negativ geladenen Elektronen besteht; das hat das Rutherford'sche Streuexperiment gezeigt (Ernest Rutherford, England 1871-1937).<sup>1</sup> Wir haben also theoretisch das Keplerproblem (Johannes Kepler, Deutschland 1571-1630) (mit dem Coulombpotential (Charles Augustin de Coulomb, Frankreich 1736-1806)) zu lösen, um die Bahnkurve des Elektrons zu bestimmen. Auf dieser Bahnkurve müßte das Elektron allerdings elektromagnetische Wellen und damit Energie abstrahlen, das Elektron müßte

---

<sup>1</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.11,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

schließlich in den Atomkern fallen - es gäbe keine stabilen Atome. Soweit die klassische Physik. Gilt jedoch eine Relation wie (1.6), dann können Ort und Impuls nicht genauer bestimmt werden als durch die Unschärfe festgelegt. Nähert sich das Elektron dem Kern, so wird der Radius der Bahnkurve klein, damit die Impulsunschärfe und somit auch der mittlere Impuls groß - die kinetische Energie wird also groß. Damit die kinetische Energie klein wird, muß der Impuls und damit  $\Delta p$  klein werden, damit wird  $\Delta x$  und  $x$  groß, die potentielle Energie nimmt dem Betrag nach zu. Dazwischen muß irgendwo ein Minimum der Energie liegen - dies wird die Grundzustandsenergie des Atoms sein. Diese Grundzustandsenergie wollen wir nun abschätzen.

Klassisch ist der Ausdruck der Energie eines nicht relativistischen Teilchens in einem Coulombpotential gegeben durch:

$$E = \frac{p^2}{2m} - Z \frac{e_0^2}{r} \quad (1.7)$$

$e_0^2$  ist das Quadrat der Einheitsladung,  $Z$  die Kernladungszahl. Aus (1.7) ist ersichtlich, daß  $e_0^2$  die Dimension Energie mal Länge bzw. Wirkung mal Geschwindigkeit haben muß. Es liegt nahe,  $e_0^2$  durch die Wirkungskonstante und die Lichtgeschwindigkeit, beides universelle Naturkonstanten, auszudrücken:

$$e_0^2 = \alpha \hbar c \quad (1.8)$$

$\alpha$  heißt Feinstrukturkonstante und hat den numerischen Wert

$$\alpha = \frac{1}{137} = 0.0072992701 \quad (1.9)$$

Dieser Wert ist unabhängig von den Einheiten, die man wählt - diese bestimmen den numerischen Wert von  $\hbar$  und  $c$ .

Das Minimum der Energie (1.7) wollen wir nun unter der Bedingung  $r \cdot p = \hbar$  berechnen. Wir nehmen also an, daß Ort und Impuls im Grundzustand in der Größenordnung der erlaubten Unschärfe sei und daß das Produkt der Unschärfen den jeweils kleinsten Wert annimmt. Wir haben also das Minimum von  $E$  in Abhängigkeit von  $p$  zu finden:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{Z\alpha\hbar c}{rp} p = \frac{p^2}{2m} - Z\alpha c p \quad (1.10)$$

Die Nebenbedingung  $rp = \hbar$  wurde verwendet.

Die Ableitung von  $E$  nach  $p$  verschwindet bei

$$p_0 = Z\alpha mc \quad (1.11)$$

Setzen wir dies in (1.10) ein, so erhalten wir die Grundzustandsenergie:

$$E_0 = -\frac{1}{2} Z^2 \alpha^2 mc^2 \quad (1.12)$$

Diese Energie stimmt für  $Z = 1$  numerisch ziemlich genau mit der Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms überein.

Den Radius des Atoms im Grundzustand bestimmen wir aus  $r_0 p_0 = \hbar$

$$\begin{aligned} r_0 &= \frac{1}{Z} \frac{\hbar}{m\alpha c} = \frac{1}{Z} r_{Bohr} \\ r_{Bohr} &= \frac{\hbar}{m\alpha c} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ cm} \end{aligned} \quad (1.13)$$

Die Abschätzung der Grundzustandsenergie und des Atomdurchmessers im Grundzustand mit Hilfe der Unschärferelation liefert demnach sehr überzeugende Werte. Wir sehen auch, daß der Bohrsche Radius (Niels Bohr, Dänemark 1885-1962) verkehrt proportional zur Masse  $m$  ist.

Die Geschwindigkeit des Elektrons bestimmen wir wie folgt:

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = \alpha c Z \quad (1.14)$$

Für  $Z < \frac{1}{\alpha}$  ist auch  $v_0 < c$ , in diesem Bereich und vor allem für  $Z = 1$  ist der nichtrelativistische Ansatz (1.7) durchaus gerechtfertigt.

Wird ein Elektron, das zunächst praktisch ruht, von einem positiv geladenen Kern eingefangen, dann wird die abgestrahlte Energie den negativen Wert der Grundzustandsenergie besitzen. Nach Planck entspricht dies einer Frequenz von

$$\nu = -\frac{1}{h} E_0 = \frac{1}{2} Z^2 \alpha^2 m_e c^2 \frac{2\pi}{h} \quad (1.15)$$

Hier haben wir die Masse des Elektrons explizit mit  $m_e$  bezeichnet, um sie nicht mit der Zahl  $m$  in der Balmerreihe zu verwechseln (Johann Jakob Balmer, Schweiz 1825-1898). Vergleicht man dies nun mit der Balmerreihe für die Frequenzen des von Atomen ausgestrahlten Lichtes

$$\begin{aligned} \Delta\nu &= Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \\ R &= 1.09737 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1} \quad , \text{ Rydbergkonstante} \end{aligned} \quad (1.16)$$

so wird  $\nu$  aus (1.15) dem Fall  $n = 1$ ,  $m = \infty$  entsprechen. Vergleichen wir (1.16) mit (1.15), so erhalten wir

$$Z^2 R = \frac{\pi Z^2 \alpha^2}{h} m_e c^2 \quad (1.17)$$

Daraus ergibt sich ein Wert für die Rydbergkonstante

$$R = \frac{1}{h} \pi \alpha^2 Z^2 c^2 m_e \quad (1.18)$$

Dies ist ein Wert, der mit dem experimentellen Wert der Rydbergkonstante gut übereinstimmt (Johannes Robert Rydberg, Schweden 1854-1919).

## 2 Beugung am Doppelspalt

Wir folgen Richard Feynman (Richard Feynman, USA 1918-1988) und betrachten ein fiktives Experiment, das unsere Erfahrung mit Streuexperimenten an quantenmechanischen Systemen zusammenfaßt.

Ein Teilchenstrahl oder eine Welle mit möglichst genau definiertem Impuls bzw. möglichst genau definierter Wellenlänge trifft auf einen Doppelspalt, wird gebeugt und danach in einer Entfernung  $l$  vom Doppelspalt, die im Vergleich zum Spaltenabstand  $a$  sehr groß sein soll ( $l \gg a$ ), registriert. Diese Anordnung wird in Abb.1 verdeutlicht.

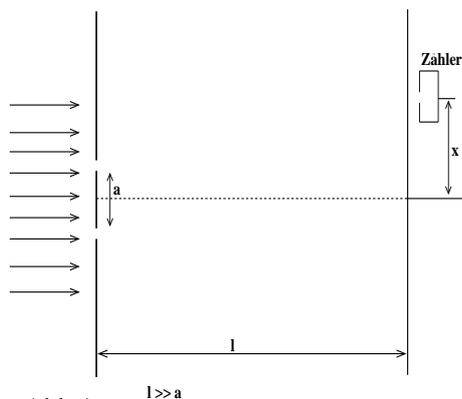


Abb.1

Zunächst betrachten wir ein klassisches System, etwa realisiert durch einen Sandstrahl. Die auf die Zählerwand auftreffenden Teilchen werden gezählt und als Funktion von  $x$  aufgetragen. Sind beide Spalte geöffnet, nennen wir die beobachtete Verteilung der Sandkörner  $P_{1+2}^K[x]$ , ist nur der Spalt 1 bzw. nur der Spalt 2 geöffnet, so nennen wir die Verteilungen  $P_1^K[x]$  bzw.  $P_2^K[x]$ .

Abb.2 zeigt das erwartete Ergebnis:

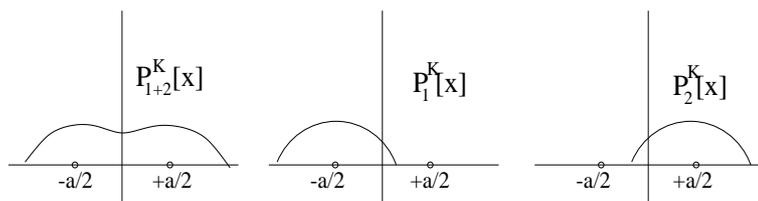


Abb2.

Wir sind nicht überrascht, daß

$$P_{1+2}^K[x] = P_1^K[x] + P_2^K[x] \quad (2.1)$$

gilt.

Machen wir den Strahl dünner und dünner, sodaß schließlich immer nur ein Sandkorn unterwegs ist, so wird sich an den Verteilungen nichts ändern. Wir können auch den Weg jedes Sandkorns auf seiner Bahnkurve verfolgen und werden feststellen, daß ein Sandkorn entweder durch den ersten oder den zweiten Spalt hindurchfliegt. Stellen wir mehrere Zähler auf, so werden wir ein bestimmtes Sandkorn immer nur in einem bestimmten Zähler finden. Dies alles entspricht ganz unserer alltäglichen Erfahrung mit der Bewegung von Teilchen.

Als nächstes machen wir das gleiche Experiment mit einer elektromagnetischen oder mit einer Wasserwelle.

Sind beide Spalte geöffnet, werden wir ein typisches Interferenzmuster beobachten, dargestellt in Abb.3.

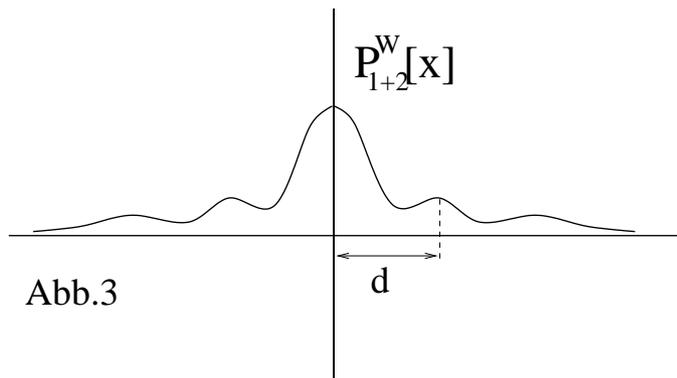


Abb.3

Mit  $d$  bezeichnen wir den Abstand der ersten beiden Maxima. Schließen wir den einen oder anderen Spalt, so verschwindet das Interferenzmuster und wir beobachten:

$$\begin{aligned} P_1^W[x] &= P_1^K[x], \quad P_2^W[x] = P_2^K[x] \\ P_{1+2}^W[x] &\neq P_1^W[x] + P_2^W[x] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Sind beide Spalte geöffnet, so können wir feststellen, daß die Welle den Weg durch beide Spalte findet, und daß es die von Spalt 1 und 2 ausgehenden Wellen sind, die zu der Interferenzerscheinung führen (Gustav Robert Kirchhoff, Deutschland 1824-1887). Mehrere Zähler werden beim Auftreten der Welle gleichzeitig ansprechen, die Wellen werden nicht lokalisiert sein. Dies alles entspricht ganz unserer tagtäglichen Erfahrung mit der Ausbreitung von Wellen.

Nun wollen wir das Experiment mit einem quantenmechanischen Teilchen, sagen wir einem Elektron, durchführen. Auch hier werden wir, wenn beide Spalte geöffnet sind, ein Interferenzbild beobachten, welches verschwindet, wenn nur einer der beiden Spalte geöffnet bleibt:

$$\begin{aligned}
 P_{1+2}^Q[x] &= P_{1+2}^W[x] \\
 P_1^Q[x] &= P_1^K[x], \quad P_2^Q[x] = P_2^K[x] \\
 P_{1+2}^Q[x] &\neq P_1^Q[x] + P_2^Q[x]
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

Dabei werden wir jedoch feststellen, daß ein Elektron immer nur in einem Zähler registriert wird. Ist der Strahl so dünn, daß immer nur ein Elektron unterwegs ist, so wird immer nur ein Zähler ansprechen. Wir wissen nicht, welcher es sein wird. Nach vielen Elektronen wird jedoch im zeitlichen Mittel die angegebene Verteilung auftreten. Diese Verteilung können wir auch als Wahrscheinlichkeit interpretieren, daß ein Elektron im Zähler an der Stelle  $x$  registriert wird. Das Elektron und seine elektrische Ladung bleibt bei einer Messung streng lokalisiert.

Wie kommt es dabei zu einer Interferenzerscheinung? Wir fragen uns zunächst, ob das Elektron auch wirklich nur durch einen Spalt fliegt, auch wenn beide geöffnet sind, wie dies die Lokalisierung des Elektrons bei einer Messung verlangt, oder ob es doch eine Bahn durch beide Spalte findet. Um dies experimentell festzustellen, streuen wir eine elektromagnetische Welle an dem Elektron gleich hinter der Wand mit den beiden Spalten, um so den Ort des Elektrons zu bestimmen. Ist die elektromagnetische Welle intensiv und kurzweilig genug, so daß uns dies auch gelingt, so werden wir feststellen, daß das Elektron tatsächlich entweder durch den Spalt eins oder den Spalt zwei geflogen ist. Tragen wir die Verteilung der Teilchen auf, die durch den Spalt eins kamen, obwohl auch Spalt zwei geöffnet war, so finden wir die Verteilung  $P_1^Q[x]$ , desgleichen bei Spalt zwei. Tragen wir die jeweiligen Verteilungen gleichzeitig auf, jedoch wissend, daß das Elektron entweder durch den ersten oder zweiten Spalt kam, so finden wir die Verteilung  $P_1^Q[x] + P_2^Q[x]$ . Die Interferenzfähigkeit des Elektrons wurde zerstört.

Wir können nun versuchen, den Einfluß der Messung geringer zu machen, indem wir zunächst die Wellenlänge der elektromagnetischen Welle vergrößern. Wird diese größer als der Spaltenabstand  $a$ , so können wir den Ort, wo das Elektron durch den Spalt kam, nicht mehr auflösen, die Interferenz stellt sich wieder ein, und wir finden  $P_{1+2}^Q[x]$ . Im Übergangsbereich werden wir bei einigen Elektronen den Ort messen können, bei anderen nicht, dementsprechend finden wir bei den georteten Elektronen die Verteilung  $P_1^Q[x] + P_2^Q[x]$ , bei den nichtgeorteten die Verteilung  $P_{1+2}^Q[x]$ .

Wir können den Einfluß der elektromagnetischen Welle auch verringern, indem wir die Intensität des Strahles verkleinern. Bei zu kleiner Intensität werden wir jedoch nicht mehr jedes Elektron sehen. Die gesehenen und georteten Elektronen werden die  $P_1^Q[x] + P_2^Q[x]$  Verteilung ergeben, die nicht gesehenen oder nicht georteten die Verteilung  $P_{1+2}^Q[x]$

Dies ist nun ein Phänomen, das mit unserer alltäglichen Erfahrung überhaupt nicht mehr übereinstimmt.

Nun versuchen wir noch, den Ort des Elektrons, wo es den Spalt passiert hat, durch eine Impulsmessung im Zähler festzustellen. Wir messen dabei die  $x$ -Komponente des Impulses im Verhältnis zum Betrag des Impulses, um so den Winkel zu messen, unter dem das Elektron in den Zähler geflogen ist. Dies wird durch Abb.4 deutlich:

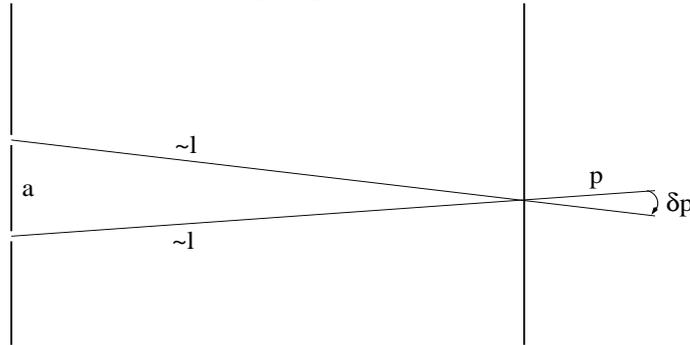


Abb.4

Um feststellen zu können, durch welchen Spalt das Elektron geflogen ist, muß  $\delta p/p < a/l$  sein. Die Unschärfe der Impulsmessung muß demnach kleiner sein als  $pa/l$ :

$$\Delta p < p \frac{a}{l} \quad (2.4)$$

Nun verwenden wir die Unschärferelation (1.1), um  $\Delta x$  abzuschätzen. Wir wollen  $\Delta x$  möglichst klein haben, um die Maxima des Interferenzbildes auflösen zu können. Dazu muß naturgemäß  $\Delta x < d$  sein, wobei  $d$  der Abstand der beiden Maxima in Abb.3 ist.

Der Abstand  $d$  der beiden Maxima berechnet sich für eine Welle zu

$$d \sim \frac{\lambda}{a}. \quad (2.5)$$

Der Gangunterschied der Welle, die durch den Spalt eins kommt zur Welle, die durch den Spalt zwei kommt, muß gerade  $\lambda$  sein, um ein Intensitätsmaximum zu ergeben (siehe Abb.5).

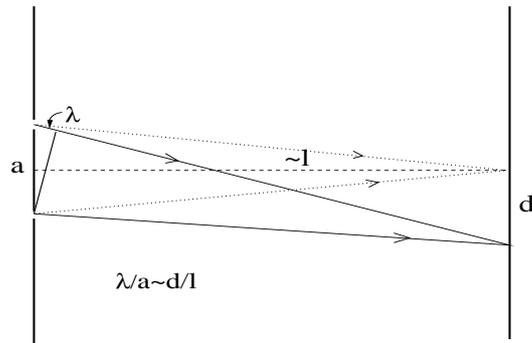


Abb.5

Aus der Unschärferelation folgt unter Berücksichtigung von (2.4) und (2.5)

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} > \frac{\hbar l}{2pa} = \frac{\hbar d}{2p\lambda} \quad (2.6)$$

Verwenden wir jetzt noch die de Brogliesche Beziehung (1.4), so finden wir

$$\Delta x > d \quad (2.7)$$

Das heißt, messen wir die  $x$ -Komponente des Impulses so genau, daß wir Spalt eins und Spalt zwei in der Flugrichtung unterscheiden können, dann wird infolge der Unschärfere-lation  $\Delta x$  so groß, daß wir keine Interferenz mehr sehen können. Messen wir  $x$  so genau, daß wir die Interferenz sehen können, so wird die Impulsunschärfe so groß, daß es nicht mehr möglich ist zu bestimmen, aus welchem Spalt das Elektron kam.

Die Unschärferelation zeigt uns also, daß eine genaue Ortung des Elektrons das Interferenzbild zerstören muß.

### 3 Versuch, die bisherigen Erfahrungen mit einer Wellenfunktion und einer Wellengleichung zu beschreiben

Es soll nun als gesichert gelten, daß ein Teilchen auch wellenartige Phänomene zeigt. Dementsprechend versuchen wir dem Teilchen eine Wellenfunktion zuzuordnen, und soweit als möglich unsere Erfahrung mit der klassischen Wellenausbreitung zu nutzen. Die Wellenfunktion soll demnach eine komplexwertige Funktion von Raum und Zeit sein. Um Interferenzerscheinungen zu beschreiben, soll für diese Wellenfunktion das Superpositionsprinzip gelten. Im Falle der Beugung am Doppelspalt sollte es also eine Wellenfunktion geben, für die gilt:

$$\Psi_{1+2}(\mathbf{x}, t) = \Psi_1(\mathbf{x}, t) + \Psi_2(\mathbf{x}, t) \quad (3.1)$$

wobei  $\Psi_1$  die Wellenfunktion bei geschlossenem Spalt 2 und entsprechend  $\Psi_2$  die Wellenfunktion bei geschlossenem Spalt 1 sein soll. Allgemein sollte mit  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  auch  $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , ( $c_1, c_2$  komplexe Zahlen) eine Wellenfunktion für das zu beschreibende System darstellen. Dies entspricht ganz unserer klassischen Erfahrung mit Wellenphänomenen. Nur sollte jetzt die Wellenfunktion keiner direkten Beobachtung mehr zugänglich sein. Obwohl also  $\Psi_{1+2}$  sowohl hinter dem ersten wie dem zweiten Spalt von Null verschieden sein kann, bedeutet dies nicht, daß wir das Teilchen gleichzeitig sowohl hinter dem ersten als auch hinter dem zweiten Spalt messen können, wir können es vielmehr nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit hinter dem ersten oder hinter dem zweiten Spalt messen.

Die Wahrscheinlichkeit muß eine positive Zahl sein. Der Absolutbetrag einer komplexen Zahl ist immer positiv. Wir postulieren daher als Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  zu messen für eine beliebige Wellenfunktion  $\Psi$ :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t) = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (3.2)$$

Für diese Wahrscheinlichkeit gilt sicher nicht das Superpositionsprinzip, dies ist im Einklang mit (2.3).

Nun haben wir also einen Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei einer Messung hinter dem ersten oder hinter dem zweiten Spalt zu sehen:

$$\begin{aligned} \rho(x_1, t) &= \Psi_{1+2}^*(x_1, t)\Psi_{1+2}(x_1, t) \\ \rho(x_2, t) &= \Psi_{1+2}^*(x_2, t)\Psi_{1+2}(x_2, t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei  $x_1$  bzw.  $x_2$  der Ort des ersten bzw. des zweiten Spalts ist. Da aber die Messung des Ortes die Interferenzfähigkeit des Teilchens zufolge der Unschärferelation zerstören muß wird nach der Messung des Teilchens die Wellenfunktion nicht mehr  $\Psi_{1+2}$  sein können. Messen wir das Teilchen am Ort  $x_1$ , so soll infolge der Messung die Wellenfunktion auf

$c\Psi_1$  reduziert werden, wobei  $c$  ein Normierungsfaktor ist, der so gewählt werden muß, daß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden, eins bleibt. Somit folgt, daß beim Auftreffen auf die Zählerwand die Verteilung  $P_1^Q$  sein wird; entsprechendes gilt bei der Messung des Teilchens am Ort  $x_2$ . Haben wir keine Messung durchgeführt, so bleibt die Wellenfunktion  $\Psi_{1+2}$ , sie wird an der Zählerwand die Verteilung  $P_{1+2}^Q \neq P_1^Q + P_1^Q$  ergeben.

Nun zur Wellengleichung. Um die zeitliche Änderung der Wellenfunktion zu beschreiben, brauchen wir eine Wellengleichung. Wegen des Superpositionsprinzips für die Wellenfunktion nehmen wir an, daß diese Gleichung linear in der Wellenfunktion sein soll. Dann wird mit  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  auch  $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  eine Lösung der Wellengleichung sein.

Um eine spezielle Form dieser Wellengleichung zu finden, greifen wir auf die Plancksche und die De Brogliesche Beziehungen (1.1) und (1.4) zurück und versuchen daraus etwas für ein freies Teilchen zu lernen.

Klassisch ist die Bahnkurve eines freien Teilchens eine Gerade, entsprechend soll die Wellenfunktion eine ebene Welle sein, wobei die Wellenfront senkrecht auf die Bewegungsrichtung, also dem Impuls, steht.

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{p},E} &= C \exp^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)} \\ \hbar\mathbf{k} &= \mathbf{p}, \quad \hbar\omega = E\end{aligned}\tag{3.4}$$

Die Amplitude  $C$  ist willkürlich. Betrachten wir die Wahrscheinlichkeit (3.2), das Teilchen zu einer bestimmten Zeit am Ort  $\mathbf{x}$  zu finden, folgt aus (3.2)

$$\rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = C^* C,\tag{3.5}$$

sie ist also von Ort und Zeit unabhängig. Dies ist nicht überraschend, da es genau das sagt, was wir infolge der Unschärferelation erwartet haben. Da für die Wellenfunktion (3.4) der Impuls genau bekannt ist,  $\Delta p$  daher Null ist, muß  $\Delta x$  unendlich sein. Die Gleichung (3.5) sagt uns dementsprechend, daß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an irgendeinem Ort zu finden, überall gleich ist.

Akzeptieren wir (3.4) als die Wellenfunktion eines freien Teilchens, so folgt unmittelbar:

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p},E} &= \hbar\omega\Psi_{\mathbf{p},E} = E\Psi_{\mathbf{p},E} \\ -i\hbar\nabla\Psi_{\mathbf{p},E} &= \hbar\mathbf{k}\Psi_{\mathbf{p},E} = \mathbf{p}\Psi_{\mathbf{p},E}\end{aligned}\tag{3.6}$$

In der Wirkung auf eine Wellenfunktion können wir also folgende Ersetzung durchführen:

$$\begin{aligned}E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbf{p} &\rightarrow -i\hbar\nabla\end{aligned}\tag{3.7}$$

Diese Ersetzung bezeichnen wir als Quantisierungsvorschrift. Wir können mit dieser Vorschrift jeder klassischen Funktion von  $E$  und  $\mathbf{p}$  einen Differentialoperator zuordnen.

Aus der Beziehung

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.8)$$

wird nun

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \nabla \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (3.9)$$

Dies ist eine Bewegungsgleichung für ein freies Teilchen. Ist die Wellenfunktion zu einer bestimmten Zeit bekannt, so wird sie durch die Gleichung (3.10) für alle anderen Zeiten festgelegt. Der entsprechende Zusammenhang zwischen Frequenz und Wellenzahl

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (3.10)$$

wird als nichtrelativistische Dispersionsbeziehung bezeichnet und entspricht genau den von de Broglie erfolgreich postulierten Welleneigenschaften eines freien Teilchens.

Ergänzen wir die Quantisierungsvorschrift (3.4) noch mit der Regel

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \quad , \quad t \rightarrow t \quad (3.11)$$

wie sie aus  $\mathbf{x}\Psi = \mathbf{x}\Psi$  und  $t\Psi = t\Psi$  folgt, so können wir jeder klassischen Funktion von  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{p}$ ,  $t$  und  $E$  einen Differentialoperator zuordnen. Aus der Beziehung

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}, t) \quad (3.12)$$

wird aufgrund unserer Quantisierungsvorschriften (3.7) und (3.11)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \Psi \quad (3.13)$$

Dies ist die Schrödingergleichung (Erwin Schrödinger, Österreich, Irland 1887-1961), die die Physik unseres Jahrhunderts revolutioniert und tiefgreifend verändert hat.

## 4 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Als Wahrscheinlichkeitsdichte haben wir in (3.2) die Größe

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

postuliert. Nun wollen wir ihre zeitliche Änderung, die aus der Schrödingergleichung folgt, untersuchen und zeigen, daß sie für reelles Potential einer Kontinuitätsgleichung genügt. Dazu werden wir auch die komplex konjugierte Schrödingergleichung benötigen:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V^* \right) \Psi^* \quad (4.2)$$

Berechnen wir nun

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) &= \left( \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \right) \Psi(\mathbf{x}, t) + \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left( \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= +\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - (\Delta \Psi^*) \Psi) + \frac{i}{\hbar} (V^* - V) \Psi^* \Psi \end{aligned} \quad (4.3)$$

und fordern:

$$V^* = V \quad (4.4)$$

also reelles  $V$ , so folgt aus (4.3):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi) \quad (4.5)$$

Wir haben die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j$  hergeleitet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{j} &= 0 \\ \vec{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Diese Stromdichte hat physikalisch eine sehr anschauliche Bedeutung. Erinnern wir uns an die Quantisierungsregel (3.7) für den Impuls, so enthält  $\vec{j}$  im wesentlichen  $\vec{v} = \frac{1}{m} \vec{p}$ , also den Geschwindigkeitsoperator.

Die Kontinuitätsgleichung ist Ausdruck für den Erhaltungssatz der Wahrscheinlichkeit. Integrieren wir die Wahrscheinlichkeitsdichte über ein endliches Volumen  $V$  und verwenden den Gaußschen Satz (Karl Friedrich Gauß, Deutschland 1777-1855), so folgt aus (4.6)

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \vec{j} = \int_F d\vec{F} \cdot \vec{j} \quad (4.7)$$

wobei  $F$  die das Volumen begrenzende Fläche ist. Die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Volumen  $V$  ist durch den durch die Oberfläche des Volumens erfolgten Fluß des Wahrscheinlichkeitsstromes gegeben.

Ist das Teilchen geladen, so identifizieren wir  $e\rho$  mit der Ladungsdichte und  $e\vec{j}$  mit der elektrischen Stromdichte - jeweils in der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsinterpretation -  $e$  ist die Ladung des Teilchens.

Die Wahrscheinlichkeit, die elektrische Ladung in einem Volumen  $V$  zu finden, ist dann durch  $\int_V d^3x \rho(\mathbf{x}, t)$  gegeben. Messen wir die Ladung im Volumen, so werden wir, wenn es sich um ein Teilchen handelt, entweder die gesamte Ladung im Volumen  $V$  oder keine Ladung in diesem Volumen finden.

Die Größe  $\int_V d^3x \rho(\mathbf{x}, t)$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, die Ladung im Volumen zu finden. Da die Ladung für ein Teilchen, das nicht irgendwie ins Unendliche verschwinden soll, irgendwo sein muß, müssen wir die Normierungsbedingung

$$\int d^3x \rho(\mathbf{x}, t) = 1 \quad (4.8)$$

fordern. Das heißt, die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  soll quadratintegrierbar sein,  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  gehört also zu  $L^2$ , dem Raum der quadratintegrierbaren Funktionen.<sup>2</sup>:

$$\int d^3x \Psi^* \Psi = 1 \quad (4.9)$$

Bei Integralen ohne Angabe des Volumens ist über den gesamten Raum zu integrieren.

Man wird natürlich fragen, aus welcher Symmetrie der Erhaltungssatz (4.6) folgt. Später werden wir sehen, daß er aus der Invarianz der Schrödingergleichung unter einer Phasentransformation

$$\Psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i\alpha} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.10)$$

hergeleitet werden kann,  $\alpha$  ist hier eine beliebige reelle Konstante, so daß auch die Normierungsbedingung (4.9) invariant bleibt.

---

<sup>2</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.17,23,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

## 5 Erwartungswerte

Die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\mathbf{x}$  zu finden, ist

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.1)$$

Daraus ergibt sich ein Mittelwert für die Messung der Ortskoordinate:

$$\langle \mathbf{x}(t) \rangle_\Psi = \int d^3x \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, t) = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.2)$$

Diesen Mittelwert bezeichnen wir auch als Erwartungswert. Es ist dies der im Mittel bei einer Ortsmessung zu erwartende Wert.

Für eine physikalische Interpretation unseres quantenmechanischen Formalismus<sup>3</sup> werden wir nach einem Erwartungswert für alle zu beobachtenden dynamischen Größen, die wir Observable nennen werden, fragen.

Wir stellen diese Frage zunächst für den Impuls und gehen von der Überlegung aus, daß nach de Broglie eine ebene Welle den Zustand eines Teilchens mit festem Impuls repräsentiert. In diesem Zustand sollte demnach die Wahrscheinlichkeit, den entsprechenden Impuls zu messen, gleich eins sein.

Im allgemeinen werden wir es mit Überlagerungen von ebenen Wellen zu tun haben.

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (5.3)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Impulses wird sicher von den Koeffizienten  $C(\mathbf{k})$  abhängen.

Wir erinnern uns nun daran, daß (5.2) genau eine Fouriertransformation<sup>3</sup> darstellt, für die auch gilt

$$C(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x \Psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (5.4)$$

falls  $\Psi$  quadratintegrierbar ist.

Gleichzeitig gilt:

$$\int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) = \int d^3k C^*(\mathbf{k}) C(\mathbf{k}) \quad (5.5)$$

Es ist nun mehr als naheliegend,  $C^*(\mathbf{k})C(\mathbf{k})$  als Wahrscheinlichkeitsdichte für den Impuls  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  zu definieren. Daraus ergibt sich

$$\langle \mathbf{p} \rangle_C = \int d^3x C^*(\mathbf{k}) \hbar\mathbf{k} C(\mathbf{k}) \quad (5.6)$$

---

<sup>3</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.17,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

Setzen wir  $C(\mathbf{k})$  aus (5.4) ein, dann finden wir den Erwartungswert des Impulses für eine bestimmte Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{x})$ :

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\Psi} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k d^3x d^3y e^{i\mathbf{k}\mathbf{y}} \Psi^*(\mathbf{y}) \hbar \mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.7)$$

Wir können nun im Integral  $\hbar \mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}$  ersetzen durch:

$$\hbar \mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} = i\hbar \nabla e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (5.8)$$

Die Ableitung der Exponentialfunktion können wir durch partielle Integration zu einer Ableitung von  $\psi$  umformen. Der Beitrag vom Rand fällt dabei weg, da  $\Psi(\mathbf{x})$  im Unendlichen verschwindet. Wir finden:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\Psi} = \int \frac{1}{(2\pi)^3} d^3k e^{i\mathbf{k}(\mathbf{y}-\mathbf{x})} d^3x d^3y \Psi^*(\mathbf{y}) (-i\hbar \nabla \Psi(\mathbf{x})) \quad (5.9)$$

Die  $\mathbf{k}$  Integration ergibt eine  $\delta$ -Funktion, die wiederum die Integration über  $\mathbf{y}$  erlaubt:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\Psi} = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.10)$$

oder, für zeitabhängige Wellenfunktionen:

$$\langle \mathbf{p}(t) \rangle_{\Psi} = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.11)$$

Um den Erwartungswert des Impulses zu bilden, müssen wir den durch die Quantisierungsvorschriften (3.7) bestimmten Differentialoperator zwischen den Wellenfunktionen einsetzen.

Vergleichen wir dies mit (4.6), so sehen wir, daß die Wahrscheinlichkeitsstromdichte auch als Erwartungswert der Geschwindigkeit  $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \mathbf{p}$  interpretiert werden kann.

Wir sind nun in der Lage, den Erwartungswert einer beliebigen Funktion von Koordinaten und Impulsen zu bilden.

$$\langle F \rangle_{\Psi} = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) F(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.12)$$

Zu beachten ist, daß unterschiedliche Anordnungen der Reihenfolge  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{p}$  zu unterschiedlichen Differentialoperatoren führen. Als einfachstes Beispiel betrachten wir das Produkt  $x \cdot p_x$ . Nach unserer Quantisierungsvorschrift erhalten wir

$$xp_x = x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (5.13)$$

während wir für  $p_x \cdot x$  nach der Leibnizregel (Gottfried Wilhelm Leibniz, Deutschland 1646-1716)

$$p_x x = \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x = -i\hbar + x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (5.14)$$

erhalten. Impuls und Koordinaten vertauschen nicht! Die Formeln (5.13) und (5.14) können auch in der Relation

$$xp_x - p_x x = i\hbar \quad (5.15)$$

zusammengefaßt werden.

Für den Ausdruck der Energie (3.12) ergibt sich dabei kein Problem, wir finden

$$\langle E \rangle_\Psi = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x}, t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) \right\} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.16)$$

## 6 Adjungierte und hermitische Operatoren

Allgemein werden wir erwarten, daß messbare Größen reelle Erwartungswerte besitzen. Aus (5.13) folgt daraus:

$$\langle F \rangle_{\Psi} = \int d^3x \Psi^* (F\Psi) = \langle F \rangle_{\Psi}^* = \int d^3x (F\Psi)^* \Psi \quad (6.1)$$

Es sollte also für Wellenfunktionen, für die wir den Erwartungswert von  $F$  bilden können,

$$\int d^3x \Psi^* (F\Psi) = \int d^3x (F\Psi)^* \Psi \quad (6.2)$$

gelten. Nun bilden wir Superpositionen von zwei solchen Wellenfunktionen:

$$\Psi_I = \Psi_1 + \Psi_2 \quad \Psi_{II} = \Psi_1 + i\Psi_2 \quad (6.3)$$

Aus (6.2) folgt für  $\Psi_I$ :

$$\int d^3x \Psi_1^* F\Psi_2 + \int d^3x \Psi_2^* F\Psi_1 = \int d^3x (F\Psi_1)^* \Psi_2 + \int d^3x (F\Psi_2)^* \Psi_1 \quad (6.4)$$

und für  $\Psi_{II}$ :

$$\int d^3x \Psi_1^* F\Psi_2 - \int d^3x \Psi_2^* F\Psi_1 = \int d^3x (F\Psi_1)^* \Psi_2 - \int d^3x (F\Psi_2)^* \Psi_1 \quad (6.5)$$

Dies ergibt:

$$\int d^3x \Psi_1^* F\Psi_2 = \int d^3x (F\Psi_1)^* \Psi_2 \quad (6.6)$$

für beliebige Wellenfunktionen  $\Psi_1, \Psi_2$ , für die das Integral (6.6) existiert.

Dies ist eine Bedingung an den Differentialoperator  $F$ . Operatoren, die dieser Bedingung genügen, nennt man hermitisch.

Observable, also Differentialoperatoren, die wir mit einer Messung in Verbindung bringen können, müssen demnach hermitisch sein. Dann sind ihre Erwartungswerte auch reell, sofern die Integrale (6.1) existieren.

Den Operator  $H$ , der sich nach den Quantisierungsvorschriften aus der Hamiltonfunktion ergibt, nennen wir Hamiltonoperator:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \quad (6.7)$$

Für reelles  $V$  ist  $H$  hermitisch. Um dies zu zeigen, müssen wir nur noch wissen, daß der Laplaceoperator (Pierre Simon Laplace, Frankreich 1749-1827) ein hermitischer Operator ist. Nun gilt aber:

$$\Psi_1^* (\Delta \Psi_2) - (\Delta \Psi_1^*) \Psi_2 = \nabla \cdot (\Psi_1^* (\nabla \Psi_2)) - (\nabla \Psi_1^*) \Psi_2 \quad (6.8)$$

Integrieren wir (6.8) und nehmen an, daß die Wellenfunktionen  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  im Unendlichen schnell genug verschwinden, dann folgt:

$$\int d^3x \Psi_1^* \Delta \Psi_2 = \int d^3x (\Delta \Psi_1^*) \Psi_2 = \int d^3x (\Delta \Psi_1)^* \Psi_2 \quad (6.9)$$

Ebenso ist der Ortsoperator  $\mathbf{x}$  und der Impulsoperator  $-i\hbar\nabla$  hermitisch:

$$\begin{aligned} \int d^3x \Psi^* \mathbf{x} \Psi &= \int d^3x (\mathbf{x} \Psi)^* \Psi \\ \int d^3x \Psi^* (-i\hbar\nabla) \Psi &= \int d^3x (-i\hbar\nabla \Psi)^* \Psi \end{aligned} \quad (6.10)$$

Der Vorzeichenwechsel bei der partiellen Integration wird durch den Vorzeichenwechsel beim komplex Konjugieren kompensiert. Der Operator  $\nabla$  wäre nicht hermitisch.

Wirkt ein Differentialoperator  $F$  auf eine Wellenfunktion  $\Psi_2$ , so kann man im Integral

$$\int d^3x \Psi_1^* F \Psi_2 \quad (6.11)$$

durch partielle Integration  $F$  auch zu einem Operator, der auf  $\Psi_1$  wirkt, umformen:

$$\int d^3x \Psi_1^* F \Psi_2 = \int d^3x (F^\dagger \Psi_1)^* \Psi_2 \quad (6.12)$$

Der so entstandene Operator  $F^\dagger$  heißt der zu  $F$  adjungierte Operator. Es ist leicht zu sehen, daß

$$\int d^3x \Psi_1^* F^\dagger \Psi_2 = \int d^3x (F \Psi_1)^* \Psi_2 \quad (6.13)$$

gilt, sowie:

$$\int d^3x \Psi_1^* F G \Psi_2 = \int d^3x (G^\dagger F^\dagger \Psi_1)^* \Psi_2 \quad (6.14)$$

Alle diese Beispiele sind natürlich nur sinnvoll, wenn die entsprechenden Integrale auch existieren. Dies wird nicht immer der Fall sein, obwohl  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  quadratintegrierbar sind. Man denke etwa an einen Operator  $x^n$ , der das Konvergenzverhalten der Integrale stark verändert.

Der Definitionsbereich des Operators  $F$  muß demnach so eingeschränkt werden, daß  $F\Psi$  quadratintegrierbar ist. Der Definitionsbereich des Operators  $F^\dagger$  wird sich im allgemeinen vom Definitionsbereich des Operators  $F$  unterscheiden, er wird größer als der Definitionsbereich des Operators  $F$  sein.

Ist ein Operator hermitisch, dann ist unter dem Integral  $F^\dagger$  gleich  $F$ . Als Operatoren wollen wir sie aber nur dann als gleich bezeichnen, wenn auch ihr Definitionsbereich übereinstimmt. Gilt in diesem Sinne

$$F^\dagger = F \quad (6.15)$$

und ist der Definitionsbereich dicht in  $L^2$ , dann nennen wir den Operator selbstadjungiert. Gilt nur

$$(F^\dagger)^\dagger = F^\dagger \tag{6.16}$$

mit dichtem Definitionsbereich, dann nennen wir den Operator wesentlich selbstadjungiert.

## 7 Zeitliche Änderung von Erwartungswerten

Die Schrödingergleichung erlaubt es, die zeitliche Änderung der Wellenfunktion und damit auch der Erwartungswerte zu berechnen. Wir wollen nun zeigen, daß die zeitlichen Änderungen der Erwartungswerte eine Form annehmen, die an die klassischen Bewegungsgleichungen erinnert.

Wir beginnen mit der zeitlichen Änderung des Erwartungswertes des Ortes:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{x} \rangle_\Psi = \int d^3x \left\{ \dot{\Psi}^* \mathbf{x} \Psi + \Psi^* \mathbf{x} \dot{\Psi} \right\} \quad (7.1)$$

Die Zeitableitung der Wellenfunktion haben wir mit  $\dot{\Psi}$  bezeichnet. Aus der Schrödingergleichung folgt nun

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{x} \rangle_\Psi = \frac{i}{\hbar} \int d^3x \left\{ (H\Psi^*) \mathbf{x} \Psi - \Psi^* \mathbf{x} H\Psi \right\} \quad (7.2)$$

Nun verwenden wir, daß  $H\Psi^* = (H\Psi)^*$  und  $H$  ein hermitischer Differentialoperator ist. Dann folgt aus (7.2)

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{x} \rangle_\Psi = \frac{i}{\hbar} \int d^3x \Psi^* (H\mathbf{x} - \mathbf{x}H) \Psi \quad (7.3)$$

Zur Berechnung der zeitlichen Änderung des Erwartungswertes des Ortes müssen wir demnach den Ausdruck

$$H\mathbf{x} - \mathbf{x}H \quad (7.4)$$

auswerten. Wir setzen für  $H$  (3.12) ein und erhalten:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \mathbf{x} - \mathbf{x} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \mathbf{x} - \mathbf{x} \Delta) \quad (7.5)$$

was wiederum leicht auszurechnen ist:

$$\Delta x^l = \partial^k \partial_k x^l = \partial^k \left\{ \delta_k^l + x^l \partial_k \right\} = 2\partial^l + x^l \Delta \quad (7.6)$$

Wir erhalten also, wenn wir dies in (7.3) einsetzen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \mathbf{x} \rangle_\Psi &= -\frac{i\hbar}{m} \int d^3x \Psi^* \nabla \Psi \\ &= \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle_\Psi \end{aligned} \quad (7.7)$$

Dies erinnert an die klassische Gleichung  $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \mathbf{p}$ .

Nun berechnen wir die zeitliche Änderung des Erwartungswertes des Impulses:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathbf{p}\rangle_{\Psi} &= \int d^3x \left\{ \dot{\Psi}^*(-i\hbar\nabla\Psi) + \Psi^*(-i\hbar\nabla\dot{\Psi}) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \left\{ H\Psi^*(-i\hbar\nabla\Psi) - \Psi^*(-i\hbar\nabla H\Psi) \right\}\end{aligned}\quad (7.8)$$

Nach einer analogen Umformung, die von (7.2) zu (7.3) geführt hat, sehen wir, daß wir den Ausdruck

$$H\nabla - \nabla H \quad (7.9)$$

auszuwerten haben. Dies ergibt durch Einsetzen von (3.12):

$$H\nabla - \nabla H = -\nabla V \quad (7.10)$$

Aus (7.8) folgt

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{p}\rangle_{\Psi} = \langle-\nabla V\rangle_{\Psi} \quad (7.11)$$

Diese Gleichung erinnert an die Newtonsche Bewegungsgleichung.

Die Gleichungen (7.7) und (7.11) werden als Ehrenfest'sches Theorem bezeichnet (Paul Ehrenfest, Österreich 1880-1933). Dieses besagt, daß die klassischen Gleichungen für die Mittelwerte gelten:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathbf{x}\rangle_{\Psi} &= \left\langle\frac{1}{m}\mathbf{p}\right\rangle_{\Psi} \\ \frac{d}{dt}\langle\mathbf{p}\rangle_{\Psi} &= \langle-\nabla V\rangle_{\Psi}\end{aligned}\quad (7.12)$$

Nun wollen wir noch die zeitliche Änderung des Erwartungswertes einer beliebigen Observablen berechnen.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle F\rangle_{\Psi} &= \int d^3x \left\{ \dot{\Psi}^*F\Psi + \Psi^*F\dot{\Psi} \right\} + \left\langle\frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle_{\Psi} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \left\{ H\Psi^*F\Psi - \Psi^*FH\Psi \right\} + \left\langle\frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle_{\Psi} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \Psi^* \left\{ HF - FH \right\} \Psi + \left\langle\frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle_{\Psi} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle HF - FH\rangle_{\Psi} + \left\langle\frac{\partial F}{\partial t}\right\rangle_{\Psi}\end{aligned}\quad (7.13)$$

Die Rechenschritte folgen genau dem Weg, dem wir für die Orts- und Impulsobservable vorgezeichnet haben, sie können leicht nachvollzogen werden.

Der Ausdruck (7.13) kann nun mit der Poissonschen Formulierung der Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik verglichen werden <sup>4</sup>.

$$\dot{F} = \{f, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (7.14)$$

Es liegt nahe, auch für Differentialoperatoren eine Klammer zu definieren:

$$[F, H] = FH - HF \quad (7.15)$$

Wir bezeichnen diese Klammer als Kommutator der Differentialoperatoren  $F$  und  $H$ .

Der Kommutator genügt denselben abstrakten Rechenregeln wie die Poissonklammer (Theor. Mechanik, 33.10):

$$\begin{aligned} [F, G] &= -[G, F] \\ [c_1 F_1 + c_2 F_2, G] &= c_1 [F_1, G] + c_2 [F_2, G] \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C} \\ [FG, H] &= F[G, H] + [FH, G] \end{aligned} \quad (7.16)$$

sowie der Jacobiidentität (Theor. Mechanik, 33.11) (Carl Gustav Jacobi, Deutschland 1804-1851).

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (7.17)$$

Dies ist durch explizites Rechnen leicht nachweisbar. Wir überprüfen die letzte Identität in (7.16):

$$\begin{aligned} [FG, H] &= FGH - HFG \\ &= F(GH - HG) + FHG - HFG \\ &= F[G, H] + [F, H]G \end{aligned} \quad (7.18)$$

In der Gleichung (5.15) haben wir den Kommutator der Orts- und Impulsvariablen berechnet.

$$[x^l, p^k] = i\hbar\delta_k^l \quad (7.19)$$

Dies sind die berühmten Heisenbergschen kanonischen Vertauschungsrelationen, sie erinnern an die Poissonklammern der kanonischen Variablen.

---

<sup>4</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.33,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

## 8 Schwankungsquadrate und die Heisenbergsche Unschärferelation

Wir wissen nun, wie wir Erwartungswerte dynamischer Variablen berechnen können. Ein Maß für die mittlere Abweichung einer Messung vom Mittelwert ist nach Gauß durch das Schwankungsquadrat definiert.

Für die Koordinaten:

$$(\Delta x)_{\Psi}^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle_{\Psi} = \langle x^2 \rangle_{\Psi} - \langle x \rangle_{\Psi}^2 \quad (8.1)$$

und ebenso für den Impuls:

$$(\Delta p)_{\Psi}^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle_{\Psi} = \langle p^2 \rangle_{\Psi} - \langle p \rangle_{\Psi}^2 \quad (8.2)$$

Die Mittelwerte werden hier gemäß unserer Definition (5.12) gebildet.

Bevor wir uns der Heisenbergschen Unschärferelation (1.6) zuwenden, wollen wir die mathematische Struktur unserer bisher entwickelten quantenmechanischen Formalismen etwas näher ansehen.

Das Superpositionsprinzip (3.1) entspricht der Definition eines linearen Raumes. Die Wellenfunktionen sind Elemente dieses Raumes, und mit  $\Psi_1, \Psi_2$  ist auch  $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  ( $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ ) ein Element dieses Raumes. Die üblichen Rechenregeln eines linearen Raumes sind unmittelbar einsichtig. Dementsprechend werden wir die Wellenfunktion in Zukunft auch Zustandsfunktion oder Zustandsvektor nennen. Zustandsfunktion deshalb, weil sie den Zustand eines physikalischen Systems beschreibt und sich aus ihr die Erwartungswerte physikalischer Observablen berechnen lassen. Zustandsvektor weist darauf hin, daß sie Vektoren in einem linearen Raum sind.

Auf diesem linearen Raum ist in natürlicher Weise ein Skalarprodukt definiert. Für dieses Skalarprodukt werden wir die Bezeichnung  $\langle \Psi, \Phi \rangle$ :

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \int d^3x \Psi^* \Phi \quad (8.3)$$

eingeführen. Dieses Skalarprodukt ist linear in  $\Phi$  und antilinear in  $\Psi$ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi, c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 \rangle &= c_1\langle \Psi, \Phi_1 \rangle + c_2\langle \Psi, \Phi_2 \rangle \\ \langle c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2, \Phi \rangle &= c_1^*\langle \Psi_1, \Phi \rangle + c_2^*\langle \Psi_2, \Phi \rangle \end{aligned} \quad (8.4)$$

Die üblichen Eigenschaften eines Skalarproduktes und der daraus gebildeten Norm sind unmittelbar einsichtig.

Norm:

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle \geq 0 \quad (8.5)$$

Die Norm einer Wellenfunktion ist genau dann Null, wenn die Wellenfunktion Null ist.

Trotz der abstrakten Schreibweise für das Skalarprodukt und die Norm denken wir dabei immer an die Definition durch das Integral (8.3). Diese Definition des Skalarproduktes erfüllt alle Bedingungen, die es uns erlauben, von einem Hilbertraum zu sprechen. Es ist dies der Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen  $L^2$ , den wir schon mehrmals erwähnt haben. (David Hilbert, Deutschland 1862-1943). In diesem Abschnitt wollen wir diese Fragestellung nicht vertiefen.

Wir wollen jedoch eine wichtige Ungleichung für das Skalarprodukt, die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung, beweisen, die uns direkt zur Heisenbergschen Unschärferelation führen wird (Louis Augustin Cauchy, Frankreich 1789-1857), (Hermann Amandus Schwarz, Deutschland 1843-1921). Diese Ungleichung lautet:

$$|\langle \Psi, \Phi \rangle|^2 \leq \|\Phi\|^2 \|\Psi\|^2 \quad (8.6)$$

Wir nehmen nun an, daß  $\Phi \neq 0$  sei, da (8.6) sonst trivial wäre, und beweisen (8.6). Dazu betrachten wir die Wellenfunktion

$$\chi = \Psi - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi \quad (8.7)$$

Sie steht senkrecht auf  $\Phi$ :

$$\langle \Phi, \chi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \langle \Phi, \Phi \rangle = 0 \quad (8.8)$$

Wie für alle Zustandsvektoren gilt auch für  $\chi$ :

$$\langle \chi, \chi \rangle \geq 0 \quad (8.9)$$

Wir setzen (8.7) in (8.9) ein und berücksichtigen (8.8):

$$\left\langle \Psi - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi, \Psi - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi \right\rangle = \left\langle \Psi, \Psi - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi \right\rangle \geq 0 \quad (8.10)$$

Dies ergibt unmittelbar (8.6), wenn wir mit  $\langle \Phi, \Phi \rangle$  multiplizieren:

$$\langle \Psi, \Psi \rangle \langle \Phi, \Phi \rangle - \langle \Phi, \Psi \rangle \langle \Psi, \Phi \rangle \geq 0 \quad (8.11)$$

Dies ist identisch mit (8.6), da für alle Wellenfunktionen

$$\langle \Phi, \Psi \rangle = \langle \Psi, \Phi \rangle^* \quad (8.12)$$

gilt. Dies folgt unmittelbar aus der Definition (8.3).

Die Eigenschaft (6.6) eines Differentialoperators, sagen wir  $\hat{A}$ , hermitisch zu sein, hat in unserer neuen Schreibweise eine einfache Form:

$$\int d^3x \Psi^* \hat{A} \Phi = \int d^3x (\hat{A} \Psi)^* \Phi$$

$$\langle \Psi, \hat{A} \Phi \rangle = \langle \hat{A} \Psi, \Phi \rangle \quad (8.13)$$

Dies verwenden wir, um das Schwankungsquadrat eines hermitischen Operators  $\hat{A}$  als Norm eines Vektors zu schreiben. Dazu berücksichtigen wir, daß mit  $\hat{A}$  auch  $\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$  ein hermitischer Operator ist.

$$(\Delta \hat{A})_{\Psi}^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle_{\Psi} = \langle \Psi, (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \Psi \rangle$$

$$= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi, (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi \rangle \quad (8.14)$$

Nun zur Unschärferelation. Um die Rechnung übersichtlich zu machen, führen wir zunächst die Bezeichnung

$$x - \langle x \rangle_{\Psi} = A \quad , \quad p - \langle p \rangle_{\Psi} = B \quad (8.15)$$

ein. Wir werden von nun an nur noch davon Gebrauch machen, daß  $A$  und  $B$  hermitische Operatoren sind.

Das Produkt der Schwankungsquadrate  $(\Delta x)_{\Psi}^2 (\Delta p)_{\Psi}^2$  formen wir gemäß (8.14) um und erhalten:

$$(\Delta x)_{\Psi}^2 (\Delta p)_{\Psi}^2 = \langle A \Psi, A \Psi \rangle \langle B \Psi, B \Psi \rangle \quad (8.16)$$

In dieser Form bietet sich die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung für die folgende Abschätzung an:

$$\langle A \Psi, A \Psi \rangle \langle B \Psi, B \Psi \rangle \geq |\langle A \Psi, B \Psi \rangle|^2 \quad (8.17)$$

Nun bedarf es noch einiger Umformungen an  $|\langle A \Psi, B \Psi \rangle|^2$ . Wir beginnen mit

$$\langle A \Psi, B \Psi \rangle = \langle \Psi, AB \Psi \rangle = \left\langle \Psi, \left( \frac{1}{2}(AB - BA) + \frac{1}{2}(AB + BA) \right) \Psi \right\rangle \quad (8.18)$$

Den Kommutator der Operatoren  $A, B$  haben wir bereits in (7.15) mit einer Klammer bezeichnet:

$$[A, B] = AB - BA \quad (8.19)$$

Dasselbe tun wir noch mit dem Antikommutator. Wiederum vereinfacht sich die Schreibweise von (8.18), ohne daß wir wirklich etwas berechnet hätten:

$$\langle A \Psi, B \Psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi, ([A, B] + \{A, B\}) \Psi \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \left( \langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle + \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle \right) \quad (8.20)$$

Desgleichen finden wir:

$$\begin{aligned}
\langle B\Psi, A\Psi \rangle &= \frac{1}{2} \langle \Psi, ([B, A] + \{B, A\}) \Psi \rangle \\
&= \frac{1}{2} \langle \Psi, (-[A, B] + \{A, B\}) \Psi \rangle \\
&= \frac{1}{2} \left( -\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle + \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle \right)
\end{aligned} \tag{8.21}$$

Dies deshalb, weil der Kommutator antisymmetrisch und der Antikommutator symmetrisch ist.

Nun zurück zu (8.17).

$$|\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2 = \langle A\Psi, B\Psi \rangle \langle A\Psi, B\Psi \rangle^* = \langle A\Psi, B\Psi \rangle \langle B\Psi, A\Psi \rangle \tag{8.22}$$

Dies wegen (8.12). Nun verwenden wir (8.20) und (8.21):

$$\begin{aligned}
|\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2 &= \frac{1}{4} \left( \langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle + \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle \right) \left( \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle - \langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle \right) \\
&= \frac{1}{4} \left( \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle^2 - \langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle^2 \right)
\end{aligned} \tag{8.23}$$

Nun zeigen wir noch, daß  $\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle^2$  positiv und  $\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle^2$  negativ ist. Dazu verwenden wir die Eigenschaft (8.13) hermitescher Operatoren.

$$\langle \Psi, AB\Psi \rangle = \langle A\Psi, B\Psi \rangle = \langle BA\Psi, \Psi \rangle \tag{8.24}$$

Die Reihenfolge der Operatoren  $AB$  hat sich umgedreht. Deshalb gilt für den Antikommutator:

$$\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle = \langle \{A, B\} \Psi, \Psi \rangle \tag{8.25}$$

und für den Kommutator:

$$\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle = -\langle [A, B] \Psi, \Psi \rangle \tag{8.26}$$

Es ist also

$$\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle^2 = \langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle \langle \{A, B\} \Psi, \Psi \rangle = |\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle|^2 \tag{8.27}$$

und desgleichen

$$\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle^2 = -|\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle|^2 \tag{8.28}$$

Setzen wir dies in (8.23) ein, so erhalten wir:

$$|\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} \left( |\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle|^2 + |\langle \Psi, [A, B] \Psi \rangle|^2 \right) \tag{8.29}$$

und damit gilt sicher

$$|\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \Psi, [A, B]\Psi \rangle|^2 \quad (8.30)$$

da wir ja nur einen positiven Term weggelassen haben.

Kombinieren wir dies mit (8.17), so erhalten wir:

$$\langle A\Psi, A\Psi \rangle \langle B\Psi, B\Psi \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle \Psi, [A, B]\Psi \rangle|^2 \quad (8.31)$$

Hätten wir mit beliebigen Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$  begonnen und wie folgt definiert:

$$A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi, \quad B = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi \quad (8.32)$$

so hätten wir die allgemeine Unschärferelation

$$\langle \Delta \hat{A} \rangle_\Psi^2 \langle \Delta \hat{B} \rangle_\Psi^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \Psi, [\hat{A}, \hat{B}]\Psi \rangle|^2 \quad (8.33)$$

erhalten. Auf der rechten Seite konnten wir den Kommutator von  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  schreiben, da

$$[A, B] = [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\Psi, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\Psi] = [\hat{A}, \hat{B}] \quad (8.34)$$

gilt.  $\langle \hat{A} \rangle_\Psi$  und  $\langle \hat{B} \rangle_\Psi$  sind ja Zahlen, die mit allen Operatoren vertauschen.

Um zur Heisenbergschen Unschärferelation zu gelangen, setzen wir in (8.34) für die Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$  die Operatoren  $x$  und  $p$  ein. Deren Kommutator haben wir schon in (7.19) berechnet:

$$[x, p] = i\hbar \quad (8.35)$$

Aus (8.34) folgt nun für normierte Wellenfunktionen  $\Psi$ :

$$(\Delta x)_\Psi^2 (\Delta y)_\Psi^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2 \quad (8.36)$$

Die rechte Seite ist in diesem besonderen Fall unabhängig von der Wellenfunktion  $\Psi$ , somit haben wir die Unschärferelation (1.6) in unserem Formalismus wiedergefunden:

$$(\Delta x)_\Psi (\Delta y)_\Psi \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (8.37)$$

Wir haben also gezeigt, daß die Beschreibungsweise quantenmechanischer Systeme, wie wir sie in Kapitel 3 und 4 formuliert haben, die Heisenbergsche Unschärferelation bedingt. Desgleichen wissen wir, daß die Plancksche Beziehung und die de Brogliesche Beziehung in dieser Beschreibungsweise erfüllt sind. Wir haben also eine Beschreibungsweise formuliert, die der quantenmechanischen Erfahrung, wie wir sie in den ersten beiden Kapiteln in abstrahierter Form präsentiert haben, entspricht.

Im folgenden müssen wir uns um detailliertere Konsequenzen dieser quantenmechanischen Beschreibung bemühen und zeigen, daß sie mit den experimentellen Erfahrungen dann auch im Detail übereinstimmt.

## 9 Das Minimale Wellenpaket

Die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (9.1)$$

gilt unabhängig von der jeweiligen Wellenfunktion. Wir haben sie aufgrund von Abschätzungen hergeleitet. Hier stellen wir die Frage, ob es Wellenfunktionen  $\Psi$  gibt, für die in (9.1) das Gleichheitszeichen gilt. Wir werden sehen, daß es sie gibt, es sind die Gaußschen Glockenfunktionen. Damit ist dann auch gezeigt, daß die Abschätzung (9.1) nicht verbessert werden kann.

Bei der Abschätzung im vorhergehenden Kapitel haben wir zunächst nach solchen Funktionen zu fragen, für die in der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung (8.6) das Gleichheitszeichen gilt. Dies wird genau dann der Fall sein, wenn die Funktion

$$\chi = \Psi - \frac{\langle \Phi, \Psi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi \quad (9.2)$$

verschwindet, genau dann ist  $\langle \chi, \chi \rangle = 0$ . Es ist klar, daß  $\chi = 0$  lineare Abhängigkeit der Funktionen  $\Psi$  und  $\Phi$  bedingt. Wir zeigen, daß dies auch ausreicht. Es gelte

$$\Psi = \lambda \Phi \quad (9.3)$$

dann folgt

$$\chi = \lambda \Phi - \lambda \frac{\langle \Phi, \Phi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \Phi = 0 \quad (9.4)$$

In der Notation von (8.9) bedeutet dies:

$$B\Psi = \lambda A\Psi \quad (9.5)$$

oder

$$\left( -i\hbar \frac{d}{dx} - \langle p \rangle \right) \Psi = \lambda (x - \langle x \rangle) \Psi \quad (9.6)$$

Diese Differentialgleichung ist leicht zu lösen:

$$\Psi \sim e^{\frac{i\lambda}{\hbar} \left( \frac{1}{2} x^2 - \langle x \rangle x \right) + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x} \quad (9.7)$$

Wir ergänzen im Exponenten das Quadrat und lassen den Beitrag weg, der nur die Normierung ändert.

$$\Psi \sim e^{\frac{i\lambda}{\hbar^2} (x - \langle x \rangle)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x} \quad (9.8)$$

Bei der Abschätzung im vorhergehenden Kapitel haben wir außerdem auch noch den Ausdruck

$$\langle \Psi, \{A, B\} \Psi \rangle = \langle \Psi, (AB + BA) \Psi \rangle = 0 \quad (9.9)$$

vernachlässigt. Damit in der Relation (8.37) das Gleichheitszeichen gilt, muß

$$\langle \Psi, (AB + BA) \Psi \rangle = 0 \quad (9.10)$$

sein. Da  $A$  und  $B$  hermitische Operatoren sind, können wir diese Bedingung wie folgt umformen:

$$\langle \Psi, AB \Psi \rangle = -\langle B \Psi, A \Psi \rangle \quad (9.11)$$

Wir kombinieren dies mit (9.5) und erhalten:

$$-\lambda \langle \Psi, A^2 \Psi \rangle = \langle \lambda A \Psi, A \Psi \rangle = \lambda^* \langle \Psi, A^2 \Psi \rangle \quad (9.12)$$

wir finden die Bedingung

$$\lambda^* = -\lambda \quad (9.13)$$

$\lambda$  muß demnach rein imaginär sein. Um normierbare Wellenfunktionen zu erhalten, muß der Imaginärteil von  $\lambda$  positiv sein.

Wir erhalten aus (9.8):

$$\Psi = \left( \frac{|\lambda|}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{|\lambda|}{2} (x - \langle x \rangle)^2 + \frac{i}{\hbar} (p) x} \quad (9.14)$$

Den Normierungsfaktor haben wir so gewählt, daß

$$\int d^3x \Psi^* \Psi = 1 \quad (9.15)$$

gilt. Dabei haben wir das Gaußsche Integral:<sup>5</sup>

$$\int d^3x e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (9.16)$$

verwendet. Differenzieren wir die rechte und die linke Seite nach  $a$ , so erhalten wir

$$\int d^3x x^2 e^{-ax^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (9.17)$$

Dies macht es uns leicht, das Schwankungsquadrat von  $x$  für die Wellenfunktion (9.14) zu berechnen:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{|\lambda|} \quad (9.18)$$

---

<sup>5</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.17,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

wir können also  $|\lambda|$  in (9.14) durch  $(\Delta x)^2$  ersetzen und finden das Ergebnis:

$$\Psi = (2\pi(\Delta x)^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{4(\Delta x)^2}(x-\langle x \rangle)^2 + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar}x} \quad (9.19)$$

Dies ist eine Gaußsche Glockenfunktion. Genau für diese Funktion gilt das Gleichheitszeichen in der Heisenbergschen Unschärferelation. Die Funktion (??) werden wir als Gaußsches Wellenpaket bezeichnen.

## 10 Impuls und Ortseigenfunktionen

Wie für endlichdimensionale Matrizen formulieren wir auch für lineare Differentialoperatoren ein Eigenwertproblem.  $A$  sei ein linearer Operator, dann ist

$$A\Psi_a = a\Psi_a \quad (10.1)$$

eine Eigenwertgleichung. Die eventuell komplexe Zahl  $a$  heißt Eigenwert des Operators  $a$ , und  $\Psi_a$  ist die dazugehörige Eigenfunktion. Das mathematische Problem besteht nun darin herauszufinden, für welche Differentialoperatoren und für welche  $a$  einigermaßen vernünftige Eigenfunktionen existieren.

Existiert eine normierbare Eigenfunktion zu einem bestimmten Eigenwert  $a$ , dann ist  $a$  auch der Erwartungswert des Operators  $A$  für diese Eigenfunktion.

$$\int d^3x \Psi_a^* A\Psi_a = a \quad (10.2)$$

Für Differentialoperatoren, die eine Observable representieren, sollte  $a$  reell sein, wie es für hermitesche Operatoren auch der Fall ist:

$$a^* = \int d^3x (A\Psi)^* \Psi = \int d^3x \Psi^* A\Psi = a \quad (10.3)$$

Das Schwankungsquadrat verschwindet für Eigenfunktionen:

$$\langle A \rangle_{\Psi_a} = \int d^3x \Psi_a^* (A - \langle a \rangle)^2 \Psi_a = 0 \quad (10.4)$$

Dies folgt aus (10.1).

Es ist auch leicht zu zeigen, daß zwei Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators  $A$ , die zu verschiedenen Eigenwerten gehören orthogonal sind. Es sei:

$$\begin{aligned} A\Psi_1 &= a_1\Psi_1 \\ A\Psi_2 &= a_2\Psi_2 \quad , \quad a_1 \neq a_2 \end{aligned} \quad (10.5)$$

Existiert nun das Integral

$$\int d^3x \Psi_2^* A\Psi_1 = a_1 \int d^3x \Psi_2^* \Psi_1 \quad (10.6)$$

so gilt auch

$$\int d^3x \Psi_2^* A\Psi_1 = \int d^3x (A\Psi_2)^* \Psi_1 = a_2 \int d^3x \Psi_2^* \Psi_1 \quad (10.7)$$

Das kann nur richtig sein, wenn

$$\int d^3x \Psi_2^* \Psi_1 = 0 \quad (10.8)$$

gilt, d.h. beide Eigenfunktionen sind zueinander orthogonal.

Um mehr über dieses Eigenwertproblem zu lernen, wenden wir uns dem Impulsoperator zu.

$$-i\hbar \nabla \Psi_{\mathbf{k}} = \hbar \vec{k} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (10.9)$$

Diese Differentialgleichung ist leicht zu lösen:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (10.10)$$

Für alle reellen Eigenwerte  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  existiert also eine Lösung dieser Differentialgleichung, und dies sind auch die einzigen brauchbaren Lösungen. Wäre nämlich  $\mathbf{p}$  komplex, dann würde die Eigenfunktion in bestimmte Richtungen für  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$  divergieren, die Funktion nicht quadratintegrierbar sein.

Nun sind die Funktionen  $\Psi_{\mathbf{k}}$  zwar nicht so vernünftig, gleich quadratintegrierbar zu sein. Wir kennen sie jedoch von der Fouriertransformation und wissen mit ihnen umzugehen.

Hier wollen wir uns zunächst davon überzeugen, daß die Impulseigenfunktionen auch eine physikalisch sinnvolle Interpretation erlauben. Wir haben sie in Kapitel 3 als ebene Wellen kennengelernt und wissen, daß sie im Einklang mit der Unschärferelation einen Zustand konstanter Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte darstellen. Pro Volumen  $V$  werden sich in diesem Zustand

$$N = \int_V d^3x A^* A = A^* A V. \quad (10.11)$$

Teilchen befinden. Demnach hat  $A^* A$  die Dimension  $[l^{-3}]$ .

Betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (4.1), so finden wir

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} A^* A = \mathbf{v} A^* A \quad (10.12)$$

Es werden also  $v A^* A$  Teilchen pro Zeiteinheit durch eine Flächeneinheit strömen.  $\mathbf{j}$  hat, wie auch aus (4.6) ersichtlich, die Dimension  $[sec^{-1}l^{-2}]$ . Die Zahl der Teilchen, die sich in einem Zylinder der Länge  $v$  hinter der auf der zur Ausbreitungsrichtung senkrechten Einheitsfläche befinden, ist genau  $v A^* A$ . Dies ist auch die Zahl der Teilchen, die infolge ihrer Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  pro Zeiteinheit durch die Einheitsfläche strömen. Die ebene Welle (10.10) repräsentiert sinngemäß einen Teilchenstrahl mit Impuls  $\hbar \mathbf{k}$  und einer Teilchendichte  $A^* A$ .

Dies ist natürlich ein sehr idealisierter Zustand, der experimentell sicher nicht präpariert werden kann. Wir werden es experimentell immer mit einer Impulsverteilung zu tun haben:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3x}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (10.13)$$

Spezielle experimentelle Ergebnisse, die von der speziellen Impulsverteilung  $C(\mathbf{k})$  abhängen, werden uns aber meist auch nicht interessieren - Experimentalphysiker werden versuchen, diese Impulsverteilung so gut als möglich einer ebenen Welle anzunähern - auch sie haben einen idealisierten Zustand im Sinn, genauso wie Theoretiker, für die es eben einfacher ist, mit der Experimentalfunktion zu rechnen.

Wir können natürlich versuchen, die Wellenfunktionen auf ein endliches Volumen zu beschränken, das so groß ist, daß die Einflüsse des Randes dieses Volumens das eigentlich zu untersuchende physikalische System nicht mehr stören. Wir wählen einen Kubus mit Kantenlänge  $L$  und werden nur periodische Funktionen zulassen, sodaß die Randtherme beim partiellen Integrieren keine Rolle spielen.

Wir beschränken uns demnach auf Lösungen der Eigenwertgleichung (10.9) der Form

$$u_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{x}\mathbf{n}\frac{2\pi}{L}} \quad (10.14)$$

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) \quad , \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad \text{ganze Zahlen}$$

$$-\frac{L}{2} \leq x^l \leq \frac{L}{2}$$

Die Funktionen (10.14) sind normiert:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} d^3x u_{\mathbf{n}}^* u_{\mathbf{n}} = 1 \quad (10.15)$$

Diese Normierung nennt man Box-Normierung. Das Volumen kann natürlich beliebig groß und soll sehr groß im Verhältnis zur Versuchsanordnung sein.

Die Impulse haben nun diskrete Eigenwerte:

$$\mathbf{p} = \hbar \frac{2\pi\mathbf{n}}{L}, \quad \mathbf{n} \in \mathbb{Z} \quad (10.16)$$

Der Abstand dieser Eigenwerte wird mit wachsendem  $L$  kleiner.

Vom Fouriertheorem <sup>6</sup> wissen wir, daß die Funktion (10.14) für die periodischen Funktionen, und die Funktionen (10.13) für die quadratintegrierbaren Funktionen ein

---

<sup>6</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.17,23  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

vollständiges und orthogonales Funktionensystem bilden: Orthogonal:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} d^3x u_{\mathbf{m}}^* u_{\mathbf{n}} = \delta_{\mathbf{m},\mathbf{n}} \quad (10.17)$$

$$\int d^3x u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{l}} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \quad (10.18)$$

Wobei die Funktionen (10.14) wie folgt zu normieren sind:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (10.19)$$

Vollständig:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) u_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{y}) &= \delta_L(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &= \delta_L(x^1 - y^1) \delta_L(x^2 - y^2) \delta_L(x^3 - y^3) \\ \int d^3k u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{y}) &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &= \delta(x^1 - y^1) \delta(x^2 - y^2) \delta(x^3 - y^3) \end{aligned} \quad (10.20)$$

$\delta_L$  ist die periodische  $\delta$  Funktion. wir können also jede Funktion durch ihre Fourierkomponenten darstellen:

$$\begin{aligned} \Psi_L(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \\ \Psi(\mathbf{x}) &= \int d^3k c(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (10.22)$$

Die Entwicklungskoeffizienten berechnen sich infolge der Orthogonalitätsrelation:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{n}} &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} d^3x u_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) \Psi_L(\mathbf{x}) \\ c(\mathbf{k}) &= \int d^3x u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (10.23)$$

Aus der Vollständigkeitsrelation folgt dann

$$\begin{aligned} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} d^3x \Psi_L^* \Psi_L &= \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}^* c_{\mathbf{n}} \\ \int d^3x \Psi^* \Psi &= \int d^3k c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (10.24)$$

Bei der Zerlegung in Fouriermoden (10.29) haben wir wirklich keinen Beitrag vergessen.  
Aus (10.24) folgt nun:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} d^3x \Psi_L^* \mathbf{p} \Psi_L = \sum_{\mathbf{n}} \left( \frac{\hbar 2\pi}{L} \mathbf{n} \right) c_{\mathbf{n}}^* c_{\mathbf{n}} \quad (10.25)$$

$$\int d^3x \Psi^* \mathbf{p} \Psi = \int d^3k (\hbar \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}} \quad (10.26)$$

wir können also  $c^*c$  tatsächlich als Wahrscheinlichkeitsdichte für den Impuls interpretieren. Wird der Zustand eines Teilchens durch eine Impulseigenfunktion beschrieben, dann ist in der Box-Normierung die Wahrscheinlichkeit, den entsprechenden Eigenwert zu messen, gleich eins, für alle anderen Eigenwerte ist sie gleich Null.

Eine solche Eigenschaft hätten wir gerne für jede Observable. Wir werden als Observable nur solche Differentialoperatoren zulassen, die hermitisch sind, und die ein vollständiges und orthogonales Eigenfunktionensystem besitzen.

Wir verzichten hier darauf, diese Klasse von Differentialoperatoren mathematisch genauer zu definieren, es sei nur erwähnt, daß in diesem Zusammenhang die Begriffe “selbstadjungiert” und “wesentlich selbstadjungiert” eine wichtige Rolle spielen. Wir begnügen uns mit der Aussage, daß es eine genügende Anzahl solcher Operatoren gibt.

Zusammenfassend verlangen wir für eine Observable, daß sie durch einen hermiteschen Differentialoperator dargestellt wird, nennen wir ihn  $A$ , und daß  $A$  ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem besitzt. Die Menge dieser Eigenwerte, die wir Eigenwertspektrum nennen, kann diskret oder kontinuierlich sein. Im folgenden werden wir sehen, daß bei Hamiltonoperatoren beide Fälle auftreten können.

Für Observable werden dann die Eigenfunktionen dieselbe Rolle spielen, wie wir sie für den Impuls diskutiert haben. Jede Wellenfunktion läßt sich nach diesen Eigenfunktionen entwickeln, die Darstellung durch Eigenfunktionen ist vollständig, und das Absolutquadrat der Entwicklungskoeffizienten gibt die Wahrscheinlichkeit an, den entsprechenden Eigenwert zu messen.

Daraus ergibt sich die weitere Eigenschaft von Observablen, daß bei einer genauen Messung immer nur ein Eigenwert gemessen werden kann. Gleichzeitig ist es sinnvoll zu postulieren, daß bei einer so genauen Messung die Wellenfunktion auf die entsprechende Eigenfunktion reduziert wird. Wir wollen nicht darauf eingehen, was bei einer solchen Messung tatsächlich vor sich geht - einfach deshalb, weil es niemand wirklich weiß.

Dieses Postulat der Quantenmechanik zeigt uns, wie wir Zustände präparieren können - durch eine genaue Messung. Die Wellenfunktion, selbst keine meßbare Größe, kann jedoch präpariert werden.

Als weiteres Beispiel wollen wir noch die Ortseigenfunktionen betrachten. Wir beschränken uns dabei auf eine Dimension.

Die Eigenfunktionen sind die  $\delta$  Funktion:

$$x\delta(x-a) = a\delta(x-a) \quad (10.27)$$

Sie sind orthogonal:

$$\int dx \delta(x-a)\delta(x-b) = \delta(a-b) \quad (10.28)$$

Sie sind vollständig:

$$\int da \delta(x-a)\delta(x'-a) = \delta(x-x') \quad (10.29)$$

Jede Funktion läßt sich nach diesen Eigenfunktionen entwickeln:

$$\Psi(x) = \int da \delta(x-a)\Psi(a) \quad (10.30)$$

Der Wellenfunktion kommt demnach die Rolle des Entwicklungskoeffizienten nach Orts-eigenfunktionen zu.

Wir wissen, daß Impuls und Koordinaten nicht gleichzeitig scharf messbar sind. Aus der Relation (8.31) folgt für beliebige Observable, daß sie nur dann scharf messbar sind, wenn ihre Differentialoperatoren vertauschen. Nur dann wird es ein Funktionensystem geben, das für beide Observable gleichzeitig ein System von Eigenfunktionen bildet. Denn gibt es ein solches System  $\Psi_S(x)$ , dann gilt für jede solche Funktion

$$AB\Psi_S = aB\Psi_S = BA\Psi_S \quad (10.31)$$

Da das Funktionensystem im Hilbertraum dicht liegt, folgt daraus

$$[A, B] = 0 \quad (10.32)$$

Wir postulieren noch, daß es für jedes System einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen gibt. Eine gleichzeitige genaue Messung aller dieser Observablen soll dann den Zustandsvektor des Systems bis auf eine Phase eindeutig festlegen.

## 11 Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wir beschränken uns jetzt auf Potentiale, die zeitunabhängig sind.  
Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \Psi = H\Psi \quad (11.1)$$

Das Potential  $V$  hängt nicht explizit von der Zeit ab.

Die Gleichung (11.1) lösen wir mit einem Produktansatz:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \varphi(t) \cdot u(\mathbf{x}) \quad (11.2)$$

Wenn wir (11.2) in (11.1) einsetzen, erhalten wir

$$i\hbar \dot{\varphi}(t) u = \varphi(t) H u \quad (11.3)$$

Wir dividieren diese Gleichung durch  $\Psi = \varphi u$ :

$$i\hbar \frac{\dot{\varphi}(t)}{\varphi} = \frac{H u}{u} \quad (11.4)$$

Da die linke Seite nur von der Zeit  $t$  und die rechte Seite nur von den Koordinaten  $\mathbf{x}$  abhängt, muß die rechte und die linke Seite eine von Zeit und Ort unabhängige Konstante sein.

Wir bezeichnen diese Separationskonstante mit  $E$ :

$$i\hbar \frac{\dot{\varphi}(t)}{\varphi} = E \quad , \quad i\hbar \dot{\varphi} = E\varphi \quad (11.5)$$

und

$$\frac{H u}{u} = E \quad , \quad H u = E u \quad (11.6)$$

Beide Gleichungen haben die Gestalt einer Eigenwertgleichung. (11.5) läßt sich unmittelbar lösen.

$$\varphi \sim e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = e^{-i\omega t} \quad (11.7)$$
$$\hbar\omega = E$$

Die Gleichung (11.6) ist eine Eigenwertgleichung für den Hamiltonoperator, sie heißt zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H u_n = E_n u_n \quad (11.8)$$

wobei  $n$  die Eigenfunktionen durchnumeriert. Für  $n \neq m$  muß der Eigenwert  $E_n$  nicht notwendigerweise von  $E_m$  verschieden sein. Gibt es zu einem Eigenwert  $E_n$  mehrere linear unabhängige Eigenfunktionen, dann sagen wir, daß der Eigenwert entartet ist.

Die Wellenfunktion (11.2) nenn man stationäre Lösungen der Schrödingergleichung (11.1).

$$\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} u_E(\mathbf{x}) \quad (11.9)$$

Stationär deshalb, weil die Erwartungswerte von Observablen, die nicht explizit von der Zeit abhängen, zeitlich konstant sind.

Wir zeigen nun, daß alle Lösungen von (11.1) sich als Superposition von stationären Lösungen schreiben lassen.

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} u_n(\mathbf{x}) \quad (11.10)$$

Zur Zeit  $t = 0$  wird dies zu

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = \sum_n c_n u_n(\mathbf{x}) \quad (11.11)$$

Nun erinnern wir uns daran, daß  $H$  eine Observable sein soll und damit die Eigenfunktionen ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem bilden. Die Superposition (11.11) stellt demnach eine allgemeine Wellenfunktion dar

$$\sum_n c_n u_n(\mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x}) \quad (11.12)$$

Die Entwicklungskoeffizienten berechnen sich aus dem vorgegebenen Wellenpaket wie folgt:

$$c_n = \int d^3x u_n^*(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}) \quad (11.13)$$

Geben wir zu einer bestimmten Zeit ( $t = 0$ ) die Wellenfunktion  $\chi$  vor, so ergibt sich aus (11.10) die Wellenfunktion als Lösung der Schrödingergleichung zur Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, t) &= \sum_n \int d^3y u_n^*(\mathbf{y}) \chi(\mathbf{y}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} u_n(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3y \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} u_n(\mathbf{x}) u_n^*(\mathbf{y}) \chi(\mathbf{y}) \end{aligned} \quad (11.14)$$

Die Summe unter dem Integral kann man für vorgegebenes  $H$  unabhängig von den Anfangswerten  $\chi(\mathbf{x})$  berechnen.

$$\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} u_n(\mathbf{x}) u_n^*(\mathbf{y}) = G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \quad (11.15)$$

Die Funktion  $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ , die man auch Propagator nennt,<sup>7</sup> propagiert die Wellenfunktion von der Zeit  $t = 0$  hin zur Zeit  $t = t$ :

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3y G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \Psi(\mathbf{x}, 0) \quad (11.16)$$

Da die Vorgabe zur Zeit  $t = 0$  beliebig und die Lösung durch diese Vorgabe auch eindeutig bestimmt ist, haben wir die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung (11.1) gefunden.

---

<sup>7</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.11,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

## Teil II

# Eindimensionale Systeme

Wie in der Mechanik wenden wir uns zunächst den eindimensionalen Problemen zu, von denen einige analytisch streng lösbar sind. An diesen Beispielen werden die Eigenheiten quantenmechanischer Systeme deutlich, und wir lernen die durch die Quantenmechanik bedingte physikalische Situation kennen.

## 12 Kräftefreies Teilchen

Der einfachste Fall ist sicher der eines freien Teilchens, also  $V=0$ . Hamiltonoperator:

$$H = \frac{1}{2m}p^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \quad (12.1)$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(\mathbf{x}) = Eu(\mathbf{x}) \quad (12.2)$$

Die entsprechenden Eigenfunktionen sind die Impulseigenfunktionen:

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad (12.3)$$

Das Eigenwertspektrum ist kontinuierlich, der Eigenwert  $E$  ist entartet, zu jedem Eigenwert  $E > 0$  gibt es genau zwei linear unabhängige Wellenfunktionen

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}, \quad u_{-k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx} \quad (12.4)$$

Diese Entartung haben wir erwartet, da die Gleichung (12.2) invariant unter Spiegelung ist:

$$P : \quad x' = -x \quad (12.5)$$

Daraus folgt, daß mit  $u(x)$  auch  $u(-x)$  eine Lösung der Gleichung (12.2) sein muß. Um dies zu zeigen, bezeichnen wir die Funktion  $u(-x)$  mit  $\tilde{u}(x)$ :

$$\tilde{u}(x) = u(-x) = u(x') \quad (12.6)$$

Dies definiert die Funktion  $\tilde{u}(x)$ . Für die Ableitungen gilt nun:

$$\frac{d}{dx}\tilde{u}(x) = -\frac{d}{dx'}u(x'), \quad \frac{d^2}{dx^2}\tilde{u}(x) = \frac{d^2}{dx'^2}u(x') \quad (12.7)$$

Aus der Schrödingergleichung (12.2) folgt:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\tilde{u}(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}u(x') = \\ &= Eu(x') = E\tilde{u}(x) \end{aligned} \quad (12.8)$$

Die Funktion  $\tilde{u}(x)$  ist demnach Lösung der Schrödingergleichung zum gleichen Energieeigenwert  $E$  wie  $u(x)$ . Dies bedingt die Entartung. Damit sind auch die Linearkombinationen

$$\begin{aligned} u_s(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(u(x) + u(-x)) \\ u_a(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(u(x) - u(-x)) \end{aligned} \quad (12.9)$$

Lösungen der Eigenwertgleichung (12.2) zum gleichen Eigenwert;  $u_s(x)$  ist eine gerade Funktion,  $u_a(x)$  ungerade.

Wir betrachten jetzt noch ein Anfangswertproblem. Zur Zeit  $t = 0$  sei die Wellenfunktion als Gaußsches Wellenpaket vorgegeben:

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}ax^2} \quad (12.10)$$

$\Psi(x, 0)$  ist normiert:

$$\int d^3x \Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int d^3x e^{-ax^2} = 1 \quad (12.11)$$

Wir wollen sehen, wie sich dieses Gaußsche Wellenpaket mit der Zeit ändert. Dazu superponieren wir stationäre Lösungen:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk c(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}. \quad (12.12)$$

Die Koeffizienten  $c(k)$  werden durch die Fouriertransformierten von (12.10) bestimmt:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x, 0) e^{-ikx} \quad (12.13)$$

Um die Integrationen auszuführen, werden wir folgende Integrale verwenden:

$$\begin{aligned} \int dx e^{-ax^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ \int dx x^2 e^{-ax^2} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \\ \int dx e^{-ax^2 \pm ibx} &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}} \end{aligned} \quad (12.14)$$

Für  $c(k)$  erhalten wir :

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int dx e^{-ikx} e^{-\frac{a}{2}x^2} = \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2a}} \quad (12.15)$$

die Fouriertransformierte des Gaußschen Wellenpaketes ist wieder ein Gaußsches Wellenpaket.

Das Schwankungsquadrat der Koordinaten berechnet sich für die Wellenfunktion (12.10) mit Hilfe von (12.14) zu:

$$(\Delta x^2)^2|_{t=0} = \frac{1}{2a} \quad (12.16)$$

In gleicher Weise berechnet sich das Schwankungsquadrat des Impulses aus:

$$(\Delta p^2)^2|_{t=0} = \frac{a\hbar^2}{2} \quad (12.17)$$

Das ist genau das Ergebnis, das wir aus der Unschärferelation erwartet haben.

Das Integral (12.12) berechnen wir wiederum mit Hilfe von (12.14)

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} \cdot \left(\frac{1}{\pi a}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2a}} \\ &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar a t}{m}}} e^{-\frac{1}{2}\left(x^2 \frac{a}{1 + \frac{i\hbar a t}{m}}\right)} \end{aligned} \quad (12.18)$$

Wir sehen, daß das Wellenpaket auseinander fließt. Die Wellenfunktion (12.18) ist kein Gaußsches Wellenpaket mehr, wohl aber die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(x) = \Psi^*(x)\Psi(x) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 a^2 t^2}{m^2}}} e^{-\left(x^2 \frac{a}{1 + \frac{\hbar^2 a^2 t^2}{m^2}}\right)} \quad (12.19)$$

Auch für die Wellenfunktion (12.17) können wir das Schwankungsquadrat der Ortskoordinate berechnen, wiederum mit Hilfe von (12.14). Wir erhalten:

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t_0}^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2(\Delta x)_{t_0}^2} \quad (12.20)$$

Die ‘‘Geschwindigkeit’’, mit der das Wellenpaket auseinanderfließt, ist demnach durch seine Breite zur Zeit  $t = 0$ ,  $((\Delta x)_{t=0}^2)$  bestimmt. Das Schwankungsquadrat nimmt um den Betrag  $\hbar^2 t^2 / 4m^2 (\Delta x)_{t=0}^2$  zu. Sind Zeit und Masse im Bereich unserer täglichen Erfahrung, dann sieht man, daß der Faktor  $\hbar^2$  eine Beobachtung solcher Phänomene ausschließt.

Verwenden wir nun die Unschärferelation zur Zeit  $t = 0$ , so folgt aus (12.19):

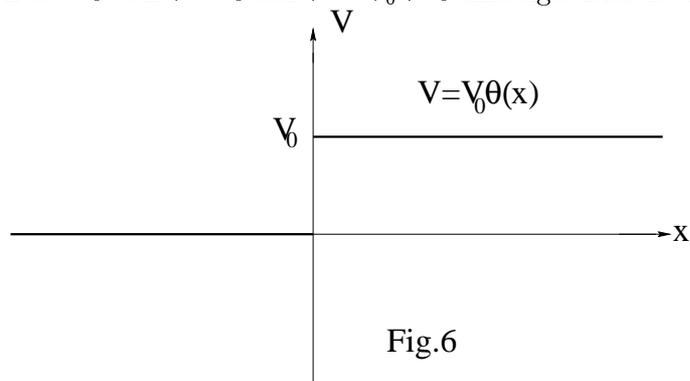
$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_{t_0}^2 + \frac{(\Delta p)_{t=0}^2 t^2}{m^2} \quad (12.21)$$

Wir verstehen also das Auseinanderfließen als Folge der Unschärferelation. Im ursprünglichen Wellenpaket  $t = 0$  sind Impulskomponenten der Größenordnung  $(\Delta p)_{t=0}$ , damit auch Geschwindigkeitskomponenten der Größenordnung  $(\Delta v)_{t=0} = \frac{(\Delta p)_{t=0}}{m}$  enthalten. Genau diese Komponenten treten in (12.21) auf. Es ist die Breite  $(\Delta x)_{t=0}$ , die diese Größenordnung bestimmt, da zu einer späteren Zeit die Wellenfunktion nicht mehr die Gestalt eines Gaußschen Wellenpaketes (9.19) hat.

Das Auseinanderfließen des Wellenpaketes eines freien Teilchens ist ein typisch quantenmechanisches Phänomen, die klassische Mechanik kennt dies nicht.

### 13 Die Potentialstufe

Im folgenden werden wir Probleme behandeln, bei denen das Potential an bestimmten Stellen unstetig ist. Das einfachste Beispiel ist eine Potentialstufe, bei der das Potential bei sagen wir  $x = 0$  von  $V = 0$  auf  $V = V_0 > 0$  ansteigt. Dies ist in Fig.(6) dargestellt:



Natürlich ist eine solche Unstetigkeit nur ein idealisierter Grenzfall eines in einem kleinen Intervall sehr schnell ansteigenden Potentials. Eine exakte Lösung der Schrödingergleichung für das tatsächliche Potential mag aber beliebig kompliziert sein. Außerdem sind wir an Effekten, die vom speziellen Verlauf des Potentialanstiegs abhängen, auch nicht interessiert. Daher ist es sinnvoll, den idealisierten Fall zu betrachten.

Bevor wir die entsprechende Schrödingergleichung lösen, müssen wir einige prinzipielle Bemerkungen vorwegschicken. Die Schrödingergleichung enthält die zweite Ableitung nach den Koordinaten. Ist eine Wellenfunktion zweimal stetig differenzierbar, dann kann das Potential keine Unstetigkeit besitzen. Eine Unstetigkeit des Potentials bedingt, daß die Wellenfunktion nicht zweimal stetig differenzierbar ist.

Ist die erste Ableitung nur stetig, jedoch nicht stetig differenzierbar, dann wird die zweite Ableitung eine Sprungstelle aufweisen. Dies entspricht der Gleichung:

$$\frac{d}{dx}|x| = \theta(x) \tag{13.1}$$

Für die Wellenfunktion werden wir an der Sprungstelle  $x_0$  demnach verlangen, daß die Funktion sowie die erste Ableitung stetig sind:

$$\begin{aligned} \Psi_{<}(x_0) &= \Psi_{>}(x_0) \\ \Psi'_{<}(x_0) &= \Psi'_{>}(x_0) \end{aligned} \tag{13.2}$$

Hier bezeichnet  $\Psi_{<}(x_0)$  bzw.  $\Psi_{>}(x_0)$  den Wert der Funktion  $\Psi$ , den sie von links kommend bzw. von rechts kommend an der Stelle  $x_0$  annimmt.

Hat das Potential jedoch eine unendliche Sprungstelle, dann wird die erste Ableitung

der Wellenfunktion an dieser Stelle unstetig sein. Dies entspricht der Gleichung:

$$\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x) \quad (13.3)$$

In diesem Fall werden wir nur die Bedingung

$$\Psi_{<}(x_0) = \Psi_{>}(x_0) \quad (13.4)$$

fordern können.

Nun zu unserem Beispiel der Potentialstufe: Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + \theta(x)V_0\Psi = E\Psi \quad (13.5)$$

Wir werden diese Gleichung zunächst für  $x < 0$  und dann für  $x > 0$  lösen und die Lösungen entsprechend (13.2) an der Sprungstelle des Potentials aneinander fügen.

Als erstes suchen wir die Lösungen für  $E < V_0$  und erhalten die Gleichungen für die beiden Bereiche  $x < 0$  und  $x > 0$ :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{<}(x) &= E\Psi_{>}(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{>}(x) &= (E - V_0)\Psi_{>}(x) \end{aligned} \quad (13.6)$$

Es ist natürlich die Bezeichnung

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad \text{und} \quad K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (13.7)$$

einzuführen. Wir finden für (13.6) die Lösungen:

$$\begin{aligned} \Psi_{<} &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \Psi_{>} &= Ce^{-Kx} \end{aligned} \quad (13.8)$$

Für  $x > 0$  gibt es nur diese eine Lösung, die für  $x \rightarrow \infty$  nicht divergiert.

Aus (13.2) folgt

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ ik(A - B) &= -KC \end{aligned} \quad (13.9)$$

Dies sind zwei Gleichungen für drei Unbekannte, zwei der Konstanten lassen sich demnach als Funktion der anderen Konstante ausrechnen. Bevor wir dies tun, überlegen wir uns die physikalische Bedeutung der Konstanten.

Die Konstante  $A$  ist die Amplitude der von links einlaufenden Welle. Der Wahrscheinlichkeitsstrom und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der einlaufenden Well  $\Psi_{ein} = Ae^{ikx}$  beträgt

$$\begin{aligned} j_{ein} &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = |A|^2 v \\ \rho_{ein} &= |A|^2 \end{aligned} \quad (13.10)$$

Die Konstante  $B$  ist die Amplitude der nach links auslaufenden Welle  $\Psi_{aus} = Be^{-ikx}$

$$\begin{aligned} j_{aus} &= -|B|^2 \frac{\hbar k}{m} = |B|^2 v \quad , \quad v = -\frac{\hbar k}{m} \\ \rho_{aus} &= |B|^2 \end{aligned} \quad (13.11)$$

Für die Wellenfunktion  $\Psi = e^{-Kx}$  verschwindet der Wahrscheinlichkeitsstrom, wie für jede reelle Wellenfunktion. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte beträgt:

$$\rho = |C|^2 e^{-2Kx}, \quad (13.12)$$

fällt also exponentiell ab.

Wir werden mit der Schödingergleichung (13.2) die folgende experimentelle Situation beschreiben wollen:

Links von der Potentialstufe befindet sich eine Quelle einlaufender Teilchen. Die Intensität des Strahles, d.h. die Konstante  $A$ , ist durch die Quelle bestimmt. Der Strahl trifft auf die Potentialstufe und wird reflektiert. Die Zahl der reflektierten Teilchen, also die Amplitude  $B$ , muß berechnet werden. Demnach werden wir  $A$  als freien Parameter bei der Lösung der Gleichungen (13.9) betrachten. Wir finden:

$$\begin{aligned} B &= \frac{k - iK}{k + iK} A \quad , \quad C = \frac{2k}{k + iK} A \\ |B|^2 &= |A|^2 \quad , \quad |C|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + K^2} |A|^2 \end{aligned} \quad (13.13)$$

Die Zahl der pro Zeiteinheit nach links auslaufenden Teilchen geteilt durch die Zahl der pro Zeiteinheit von links einlaufenden Teilchen nennen wir den Reflexionskoeffizienten.

$$r = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (13.14)$$

In unserem Fall finden wir  $r = 1$ , alle Teilchen werden reflektiert. Dies entspricht dem klassischen Fall. Wir finden aber auch, daß die Welle in den klassisch verbotenen Bereich  $x > 0$  eindringt. Die Wahrscheinlichkeit für  $x > 0$ , ein Teilchen zu finden, ist gegeben durch

$$\rho_{>} = |C|^2 e^{-2Kx} = \frac{4k^2}{k^2 + K^2} e^{-2Kx} |A|^2 \quad (13.15)$$

Dies ist eine typisch quantenmechanische Eigenschaft, die in der klassischen Mechanik nicht auftritt.

Wir betrachten die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und die Stromdichte für  $x < 0$ :

$$\begin{aligned}
\rho_{<} &= |Ae^{ikx} + Be^{-ikx}|^2 & (13.16) \\
&= 2A^*A \left( 1 + \frac{k^2 - K^2}{k^2 + K^2} \cos 2kx - \frac{2kK}{k^2 + K^2} \sin 2kx \right) \\
j_{<} &= \frac{\hbar k}{2m} \left\{ (A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}) (Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) \right. \\
&\quad \left. + (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) (A^*e^{-ikx} - B^*e^{ikx}) \right\} \\
&= v(A^*A - B^*B) = 0
\end{aligned}$$

Messen wir mit  $\rho_{<}$  für  $x < 0$  die Zahl der Teilchen unabhängig von ihrer Flugrichtung, so zeigt (13.21) ein typisches Interferenzbild. Durch diese Messung können wir sogar den Parameter  $K$  und damit via (13.7) die Potentialhöhe  $V_0$  bestimmen. Messen wir jedoch  $j_{<}$  und damit auch die Flugrichtung der Teilchen, so erhalten wir das typisch klassische Ergebnis. Die Zahl der ein- wie auslaufenden Teilchen ist gleich.

Wird die Potentialstufe unendlich,  $V_0 = \infty$ , so wird auch  $K$  unendlich. Rechts von der Potentialstufe verschwindet die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zu finden. Außerdem erhalten wir aus (13.13)  $B = -A$ . Damit wird (13.8) zur stehenden Welle:

$$\Psi_{<} = 2iA \sin kx, \quad \Psi_{>} = 0 \quad (13.17)$$

Dies hätten wir auch aus der Bedingung (12.12) erhalten, da ja  $\Psi_{>}$  in diesem Fall Null sein muß.

Nun suchen wir noch die Lösungen für  $E > V_0$ . Es ist natürlich, die Bezeichnung

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad \text{und} \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \quad (13.18)$$

einzuführen. Wir finden die Lösungen für (13.6):

$$\begin{aligned}
\Psi_{<} &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (13.19) \\
\Psi_{>} &= Ce^{iqx} + De^{-iqx}
\end{aligned}$$

Aus (13.2) folgt nun

$$\begin{aligned}
A + B &= C + D & (13.20) \\
k(A - B) &= q(C - D)
\end{aligned}$$

Dies sind zwei Gleichungen für vier Unbekannte. In der experimentellen Situation, die wir beschreiben wollen, sollten nur Teilchen von links aus einer Quelle einlaufen, von

rechts sollten keine Teilchen auf die Potentialstufe zulaufen. Dementsprechend wählen wir  $A$  als freien Parameter und setzen  $D$  gleich Null. Aus (13.19) ergeben sich  $B$  und  $C$ :

$$B = \frac{k - q}{k + q}A \quad , \quad C = \frac{2k}{k + q}A \quad (13.21)$$

Wenn wir nun die Zahl der pro Zeiteinheit nach rechts auslaufenden Teilchen durch die Zahl der von links einlaufenden Teilchen teilen, erhalten wir neben dem Reflexionskoeffizienten  $r$  auch den Transmissionskoeffizienten  $t$ :

$$\begin{aligned} r &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k - q)^2}{(k + q)^2} \\ t &= \frac{q|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kq}{(k + q)^2} \end{aligned} \quad (13.22)$$

Da die Teilchenzahl erhalten bleibt, gilt natürlich

$$r + t = 1 \quad (13.23)$$

Außerdem folgt aus (13.16) und (13.21):

$$\begin{aligned} j_{<} &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar}{m} \frac{4k^2 q}{(k + q)^2} |A|^2 \\ j_{>} &= \frac{\hbar q}{m} |C|^2 = \frac{\hbar}{m} \frac{4k^2 q}{(k + q)^2} |A|^2 \end{aligned} \quad (13.24)$$

Der Strom bleibt erhalten.

Die Zahl der reflektierten Teilchen nimmt mit zunehmender Energie ab, da mit  $E \rightarrow \infty$  gemäß (13.18)  $k \rightarrow q$  strebt. Dementsprechend finden wir auch  $t \rightarrow 1$ . Wir nähern uns damit immer mehr dem klassischen Fall, in dem es keine Reflexion gibt. Das Auftreten der Reflexion ist eine typisch quantenmechanische Erscheinung.

## 14 Die Potentialschwelle

Wir betrachten nun ein Potential mit endlicher Reichweite. Das Potential verschwindet für  $|x| > a$  und ist konstant für  $|x| < a$ . Dies ist in Fig. 7 dargestellt. Es wäre nahe-

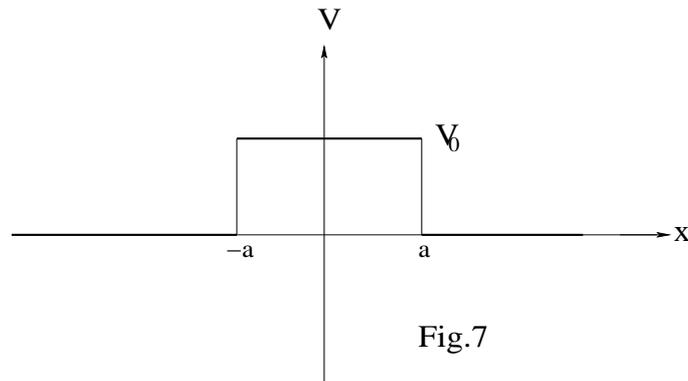


Fig.7

liegend, die Spiegelungssymmetrie dieses Potentials zu nutzen und nach geraden und ungeraden Lösungen der Schrödingergleichung zu suchen. Dies würde es uns erlauben, die Anschlußbedingung (??) nur an einer Sprungstelle des Potentials zu berücksichtigen, an der anderen Sprungstelle wäre sie infolge der Symmetrie erfüllt. Da aber die Randbedingung, die wir an die Lösung stellen wollen, nur ein von links einlaufender Teilchenstrahl, die Symmetrie verletzt, würden wir die Arbeit bei der Anpassung der Lösung an die Randbedingung zu leisten haben. Wir verzichten daher auf diese Möglichkeit, wollen aber das Anschließen der Lösungen etwas systematisieren.

Die Schrödingergleichung, eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, wird im allgemeinen in jedem Bereich zwei linear unabhängige Lösungen besitzen:

$$\begin{aligned}\Psi_{<} &= Au_{<}^{(1)} + Bu_{<}^{(2)} \\ \Psi_{>} &= Cu_{>}^{(1)} + Du_{>}^{(2)}\end{aligned}\tag{14.1}$$

Die Anschlußbedingung führt nun zu zwei linear unabhängigen Gleichungen für die vier Konstanten  $A, B, C, D$ . Daraus können immer die Konstanten der angeschlossenen Lösung aus den Konstanten der anzuschließenden Lösung berechnet werden. Gleichungen:

$$\begin{aligned}Au_{<}^{(1)}(x_0) + Bu_{<}^{(2)}(x_0) &= Cu_{>}^{(1)}(x_0) + Du_{>}^{(2)}(x_0) \\ Au_{<}^{\prime(1)}(x_0) + Bu_{<}^{\prime(2)}(x_0) &= Cu_{>}^{\prime(1)}(x_0) + Du_{>}^{\prime(2)}(x_0)\end{aligned}\tag{14.2}$$

Wir definieren eine Matrix:

$$M_{<}(x_0) = \begin{pmatrix} u_{<}^{(1)}(x_0), & u_{<}^{(2)}(x_0) \\ u_{<}^{\prime(1)}(x_0), & u_{<}^{\prime(2)}(x_0) \end{pmatrix} \quad (14.3)$$

und eine analoge Matrix  $M_{>}(x_0)$ . Die Gleichung (14.2) schreiben wir damit in Matrixform:

$$M_{<}(x_0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M_{>}(x_0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (14.4)$$

Das erwünschte Ergebnis ist:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_{>}^{-1}(x_0) M_{<}(x_0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = G_{><}(x_0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (14.5)$$

So können wir bei jeder Sprungstelle verfahren. Die Matrix  $G$  propagiert sozusagen die Konstanten aus einem Bereich in den nächsten Bereich. Für diese Propagation gilt Stromerhaltung. Um dies zu zeigen, schreiben wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (14.2) für die Wellenfunktion:

$$\Psi = Au^{(1)}(x) + Bu^{(2)}(x) \quad (14.6)$$

Indem wir auch hier die Matrix  $M$  wie in (14.3) einführen.

$$\begin{aligned} j &= \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Psi' - (\Psi^*)' \Psi) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (A^* B^*) M^\dagger(x) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} M(x) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.7)$$

Die letzte Zeile erfordert eine kurze Rechnung, die aber leicht nachzuvollziehen ist.

Damit wird die Stromdichte an der Stelle  $x_0$  für die Wellenfunktion rechts der Sprungstelle:

$$j_{>}(x_0) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{i\hbar}{2m} (C^*, D^*) M_{>}^\dagger(x_0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} M_{>}(x_0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (14.8)$$

Wir setzen nun (14.5) für  $(C, D)$  ein. Dies ergibt:

$$\begin{aligned} (A^+, B^+) G_{><}^\dagger(x_0) M_{>}^\dagger(x_0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} M_{>}(x_0) G_{><}(x_0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \\ (A^+, B^+) M_{<}^\dagger(x_0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} M_{<}(x_0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.9)$$

und damit haben wir gezeigt, daß

$$j_{>}(x_0) = j_{<}(x_0) \quad (14.10)$$

gilt. Bei der Potentialschwelle gibt es zwei Sprungstellen. Die Bereiche wollen wir mit  $I, II, III$  wie folgt bezeichnen:

$$\begin{aligned} I &: x < -a \\ II &: -a < x < a \\ III &: x > a \end{aligned} \quad (14.11)$$

Für die Konstanten wählen wir  $(A, B), (C, D), (F, G)$ .  $E$  ist wegen der Energie zu kostbar. Aus der Gleichung (14.5) folgt in:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= G_{II-I}(-a) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} &= G_{III-II}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.12)$$

und schließlich:

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = G_{III-II}(a) G_{II-I}(-a) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (14.13)$$

Es bleiben noch die Matrizen  $M$  zu bestimmen.

Wir betrachten zunächst den Fall  $E < V_0$ : Es ist wieder zweckmäßig, die Variablen:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{2m}}, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{(V_0 - E)}{2m}} \quad (14.14)$$

einzuführen. Die Lösungen lauten dann:

$$\begin{aligned} u_I &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ u_{II} &= Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (14.15)$$

$$u_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad (14.16)$$

Dies führt zu folgenden Matrizen:

$$\begin{aligned} M_I(x_0) &= \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & e^{-ikx_0} \\ ike^{ikx_0} & -ike^{-ikx_0} \end{pmatrix} = M_{III}(x_0) \\ M_{II}(x_0) &= \begin{pmatrix} e^{\kappa x_0} & e^{-\kappa x_0} \\ \kappa e^{\kappa x_0} & -\kappa e^{-\kappa x_0} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.17)$$

$M_I(x_0) = M_{III}(x_0)$  gilt für unser spezielles Potential, hier macht sich die Symmetrie bemerkbar.

Zwei mal zwei Matrizen sind leicht zu invertieren und zu multiplizieren. Als Ergebnis finden wir (mit  $\alpha = \kappa + ik$ ):

$$G_{II-I}(x_0) = \frac{1}{2\kappa} \begin{pmatrix} \alpha e^{-\alpha^* x_0} & \alpha^* e^{-\alpha x_0} \\ \alpha^* e^{\alpha x_0} & \alpha e^{\alpha^* x_0} \end{pmatrix} \quad (14.18)$$

wir brauchen noch  $G_{III-II}(x_0)$ . Es ist aber

$$G_{III-II}(x_0) = \sigma_{II-III}^{-1}(x_0) \quad (14.19)$$

und wegen der Symmetrie des Potentials:

$$G_{II-III}(x_0) = G_{II-I}(x_0) \quad (14.20)$$

Wir setzen dies in (14.13) ein und erhalten

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} &= G_{II-I}^{-1}(a) G_{II-I}(-a) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2ik\kappa} \begin{pmatrix} e^{-2ika} [(\kappa^2 - k^2) \sinh(2\kappa a) + 2ik\kappa \cosh(2\kappa a)] & (\kappa^2 + k^2) \sinh(2\kappa a) \\ -(\kappa^2 + k^2) \sinh(2\kappa a) & e^{2ika} [-(\kappa^2 - k^2) \sinh(2\kappa a) + 2ik\kappa \cosh(2\kappa a)] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.21)$$

Unsere Randbedingung, ein von links einlaufender Teilchenstrahl, bedeutet, daß wir über  $A$  frei verfügen wollen. Rechts soll es nur einen auslaufenden Strahl geben, d.h.  $G = 0$ . Aus dieser Bedingung folgt aus (14.21)

$$\frac{B}{A} = \frac{(\kappa^2 + k^2) \sinh(2\kappa a)}{e^{2ika} [(\kappa^2 - k^2) \sinh(2\kappa a) - 2ik\kappa \cosh(2\kappa a)]} \quad (14.22)$$

Die Amplitude der reflektierten Welle ist durch die Amplitude  $A$  der einlaufenden Welle bestimmt. Der Reflexionskoeffizient berechnet sich zu

$$r = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\sinh^2(2\kappa a)}{\sinh^2(2\kappa a) + 4k^2\kappa^2(k^2 + \kappa^2)^{-2}} \quad (14.23)$$

Um die Amplitude  $F$  der auslaufenden Welle zu berechnen, empfiehlt es sich, die Matrix in (14.21) zu invertieren. Da wir in (??)  $G = 0$  verlangt haben, folgt

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\kappa a) - \frac{\kappa^2 - k^2}{2ik\kappa} \sinh(2\kappa a)} \quad (14.24)$$

Dies ergibt den Transmissionskoeffizienten:

$$t = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2 (\kappa^2 + k^2)^{-2}}{\sinh^2(2\kappa a) + 4k^2 \kappa^2 (k^2 + \kappa^2)^{-2}} = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2 \kappa^2} \sinh^2(2\kappa a)} \quad (14.25)$$

Es ergibt sich natürlich  $r + t = 1$  wie es auch sein muß.

Den rein quantenmechanischen Effekt, daß es auch für  $E < V_0$  eine endliche Wahrscheinlichkeit  $t$  gibt, daß der Teilchenstrom die Potentialschwelle überwindet, nennt man Tunneleffekt. Dies ist ein Effekt, der an vielen quantenmechanischen Systemen beobachtet wird.

Um den Fall  $E > V_0$  zu beschreiben, müssen wir nur  $\kappa$  durch  $iq = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E - V_0}{2m}}$  ersetzen. Die gesamte Rechnung bleibt unverändert. Wie aus (14.25) ersichtlich, wird bei bestimmten Energien  $t = 1$ , nämlich bei  $2\kappa a = \pi \cdot n$ . Dazwischen nimmt  $t$  immer ein Minimum an, nämlich bei  $2\kappa a = \frac{1}{2}\pi(2n + 1)$ .

## 15 Gebundene Zustände im Potentialtopf

Damit gebundene Zustände auftreten können, soll das Potential für  $|x| < a$  negativ sein.

$$V(x) = -V_0 \Theta(a - |x|); \quad V_0 > 0 \quad (15.1)$$

Die Wellenfunktionen gebundener Zustände sollen im Unendlichen verschwinden und quadratintegrierbar sein. Dies ist eine unter der Spiegelung (1.5) symmetrische Randbedingung, wir werden daher gerade und ungerade Eigenfunktionen betrachten.

Schrödingergleichung:

$$|x| > a : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = E \Psi \quad (15.2)$$

$$|x| < a : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = (E + V_0) \Psi \quad (15.3)$$

Die Gleichung (15.2) hat nur für  $E < 0$  normierbare Lösungen. Die normierbare Lösung für den Bereich I,  $x < -a$ , hat die Form

$$\Psi_I = e^{Kx}, \quad K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)} \quad (15.4)$$

Dementsprechend finden wir für den Bereich III,  $x > a$ :

$$\Psi_{III} = e^{-Kx} \quad (15.5)$$

Im Bereich II,  $|x| < a$ , gibt es zwei linear unabhängige Lösungen:

$$\Psi_{II} = A \cdot \cos(kx) + B \cdot \sin(kx), \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (15.6)$$

Wir betrachten zunächst die *geraden* Wellenfunktionen.

$$\Psi_{II} = A \cos(kx), \quad \Psi_I = e^{Kx}, \quad \Psi_{III} = e^{-Kx} \quad (15.7)$$

Es genügt, die Anschlußbedingungen bei  $x = a$  zu erfüllen, bei  $x = -a$  sind sie dann infolge der Symmetrie erfüllt:

$$\begin{aligned} A \cos(ka) &= e^{-Ka} \\ kA \sin(ka) &= Ke^{-Ka} \end{aligned} \quad (15.8)$$

Daraus ergibt sich die transzendente Gleichung

$$\tan(ka) = \frac{K}{k} \quad (15.9)$$

Es sind die Werte von  $k$  zu finden, für die diese Gleichung erfüllt ist. Wir betrachten (15.9) als Funktion der Variablen  $Z = ka$  und natürlich  $K$  als Funktion von  $k$

$$K^2 = -k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \quad (15.10)$$

Die zu lösende Gleichung lautet nun:

$$\tan Z = \frac{\sqrt{c^2 - Z^2}}{Z} \quad (15.11)$$

Hier haben wir die dimensionslose Konstante

$$c = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \quad (15.12)$$

eingeführt. Die Lösungen von (15.11) lassen sich graphisch leicht finden. wir zeichnen die linke Seite und die rechte Seite der Gleichung (15.11) (Abb.) und finden graphisch die Schnittstellen. Im Bereich  $Z > 0$  ist die linke Seite monoton ansteigend und die rechte Seite monoton fallend. Die rechte Seite wird bei  $Z = c$  gleich Null. Da wir gebundene Zustände für  $-V_0 < E < 0$  erwarten, ist sowohl  $K$  als auch  $k$  positiv, die Schnittstellen der beiden Funktionen müssen also im ersten Quadranten liegen. Dort finden wir in jedem Intervall  $n\pi < Z < (n+1)\pi$  genau eine Schnittstelle, solange  $(n+1)\pi < c$  gilt. Die Zahl  $N_g$  der gebundenen Zustände hängt somit von  $c$  ab und beträgt:

$$N_g = \left[ \frac{c}{\pi} \right] \quad (15.13)$$

wobei  $\left[ \frac{c}{\pi} \right]$  die nächstgrößere natürliche Zahl zu  $\frac{c}{\pi}$  ist. Ist  $c > 0$ , so gibt es mindestens einen gebundenen Zustand mit einer geraden Wellenfunktion.

Die Energieeigenwerte ergeben sich aus (15.6)

$$E_0 = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2ma^2} Z_s^2 \quad (15.14)$$

wobei  $Z_s$  die  $s$ -te Schnittstelle in Fig.() ist  $s = 1 \cdots \left[ \frac{c}{\pi} \right]$ .

Nun betrachten wir die ungeraden Wellenfunktionen:

$$\Psi_{II} = B \sin(kx), \quad \Psi_I = e^{Kx}, \quad \Psi_{III} = -e^{-Kx} \quad (15.15)$$

Anschlußbedingung:

$$\begin{aligned} B \sin(ka) &= -e^{-Ka} \\ kB \cos(ka) &= Ke^{-Ka} \end{aligned} \quad (15.16)$$

Daraus ergibt sich die transzendente Gleichung

$$\cotan Z = \frac{\sqrt{c^2 - Z^2}}{Z} \quad (15.17)$$

Die Funktionen sind in Fig.() gezeichnet.  $c$  muß größer als  $\pi/2$  sein, damit es eine ungerade Lösung gibt. Für die Zahl der ungeraden Lösungen  $N_u$  gilt:

$$\pi/2 (2N_u - 1) < c < \pi/2 (2N_u + 1) \quad (15.18)$$

Daraus folgt:

$$N_0 = \left[ \frac{c}{\pi} - \frac{1}{2} \right] \quad (15.19)$$

Es gilt natürlich wieder Gleichung (15.14) mit  $Z_u$  als Schnittstelle.

Gerade und ungerade Wellenfunktionen wechseln einander mit wachsender Energie ab.

Bei unendlich tiefem Potentialtopf bleibt nur die Anschlußbedingung

$$\cos(ka) = 0, \quad ka = (n + 1/2)\pi \quad (15.20)$$

für die geraden Wellenfunktionen und

$$\sin(ka) = 0, \quad ka = n\pi \quad (15.21)$$

für die ungeraden Wellenfunktionen.

Im Kapitel () haben wir gezeigt, daß bei Spiegelsymmetrie mit  $\Psi(x)$  auch  $\Psi(-x)$  eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist. Die beiden Lösungen haben wir dann zu geraden und ungeraden Lösungen kombiniert, dabei kann natürlich eine der Kombinationen identisch Null sein. Bei den gebundenen Zuständen im Potentialtopf ist dies der Fall, wie wir soeben gesehen haben. dies liegt daran, daß bei gebundenen Zuständen nur eine Lösung für  $x \rightarrow \pm \infty$  zulässig ist.

Wir zeigen nun, daß bei eindimensionalen Problemen kein gebundener Zustand entartet sein kann. Dazu nehmen wir an, daß es zwei normierbare Lösungen gibt, die zur gleichen Energie gehören:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_1'' + V\Psi_1 &= E\Psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2'' + V\Psi_2 &= E\Psi_2 \end{aligned} \quad (15.22)$$

Daraus folgt:

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) \quad (15.23)$$

Diese Gleichung besagt aber, daß  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  unabhängig sind:

$$\Psi_1''\Psi_2 - \Psi_2''\Psi_1 = 0 \quad (15.24)$$

Daraus folgt

$$\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1 = \text{const.} \quad (15.25)$$

Da aber  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  im Unendlichen verschwinden müssen, folgt ebenfalls:

$$\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_2'\Psi_1 = 0 \quad (15.26)$$

Dies bedingt, daß  $\Psi_1 = c \cdot \Psi_2$ , da sich der  $\log \Psi_1$  vom  $\log \Psi_2$  nur um eine Konstante unterscheiden kann.

## 16 Der harmonische Oszillator

Wie wir in der klassischen Mechanik <sup>8</sup> gesehen haben, bietet sich der harmonische Oszillator für Systeme, die eine Ruhelage besitzen, als erste Näherung an. Diese seine Rolle behält er in der Quantenmechanik bei - ein Grund, ihn eingehend zu behandeln.

Wir quantisieren den harmonischen Oszillator, indem wir in der Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2 \quad (16.1)$$

den Impuls durch den entsprechenden Differentialoperator (3.7) ersetzen. So erhalten wir den Hamiltonoperator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (16.2)$$

Hier haben wir die "Federkonstante"  $K$  durch die klassische Frequenz  $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$  ersetzt. Nun gilt es, die entsprechende Eigenwertgleichung zu lösen.

$$H\Psi_E = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right) \Psi_E = E\Psi_E \quad (16.3)$$

Wir versuchen erst die in dieser Gleichung auftretenden Konstanten möglichst zu eliminieren, um eine charakteristischere Form der Differentialgleichung zu erhalten. dies tun wir, indem wir zunächst eine dimensionslose Variable  $\xi$  einführen:

$$\xi = \alpha x, \quad \frac{d}{dx} = \alpha \frac{d}{d\xi}, \quad \Psi(x) = \Psi\left(\frac{1}{\alpha}\xi\right) = u(\xi) \quad (16.4)$$

Damit wird (??), wenn wir die Ableitung von  $n$  nach  $\xi$  mit  $u'$  bezeichnen, zu:

$$\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} u'' - \frac{m\omega^2}{2\alpha^2} \xi^2 u + Eu = 0 \quad (16.5)$$

Nun multiplizieren wir die Gleichung (16.5) mit einer Konstanten, um den Term  $\xi^2 u$  von seinem Faktor zu befreien:

$$\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m^2 \omega^2} u'' - \xi^2 u + \frac{2\alpha^2}{m\omega^2} Eu = 0 \quad (16.6)$$

Wählen wir nun für  $\alpha$

$$\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (16.7)$$

---

<sup>8</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.11,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

und bezeichnen  $\frac{2\alpha^2}{m\omega^2}$  mit  $\lambda$ :

$$\lambda = \frac{2\alpha^2}{m\omega^2}E = \frac{2m}{\hbar^2\omega}E \quad (16.8)$$

so erhält (??) eine sehr charakteristische Form:

$$u'' = (\lambda - \xi^2)u = 0 \quad (16.9)$$

In dieser Form können wir die Differentialgleichung und ihre Lösungen auch in der mathematischen Literatur finden. Wir wollen aber die Lösungen hier explizit berechnen und dabei die Standardschritte bei der Lösung solcher Differentialgleichungen skizzieren.

Wir lösen die Gleichung (??) erst im asymptotischen Bereich  $\xi \rightarrow \infty$ , wobei wir nur die in diesem hinaus führenden Terme beibehalten:

$$u'' - \xi^2 u \sim 0 \quad (16.10)$$

Asymptotisch ist diese Gleichung gelöst durch

$$\begin{aligned} u &= e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ u' &= -\xi u \quad , \quad u'' \sim \xi^2 u \end{aligned} \quad (16.11)$$

Dies ist eine Lösung, die im Unendlichen sehr schnell gegen Null konvergiert.

Nun multiplizieren wir die asymptotische Lösung mit einer Funktion  $H(\xi)$ :

$$u(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (16.12)$$

und leiten aus (??) die Differentialgleichung für  $H(\xi)$  her:

$$\begin{aligned} u'(\xi) &= (H' - \xi H)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ u''(\xi) &= (H'' - 2\xi H' - H + \xi^2 H)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned} \quad (16.13)$$

Dies in (16.10) eingesetzt ergibt:

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0 \quad (16.14)$$

Es ist sofort einsichtig, daß eine Konstante  $H_0 = c_0$  die Gleichung löst, für den Eigenwert  $\lambda$  erhalten wir dann  $\lambda=1$  oder mit (16.7)

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (16.15)$$

Dies ist ein Eigenwert der Gleichung (??), die entsprechende normierte Wellenfunktion ist.

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad , \quad \alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (16.16)$$

Um weitere Lösungen zu erhalten, machen wir für  $H$  einen Potenzreihenansatz:

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^{2n} \quad (16.17)$$

Negative Potenzen von  $\xi$  kommen nicht in Frage, da  $H(\xi)$  sonst bei  $\xi=0$  divergent wäre. Mit diesem Ansatz gehen wir in die Gleichung (??) und erhalten:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{n(n-1)c_n \xi^{n-2} - 2nc_n \xi^n + (\lambda-1)c_n \xi^n\} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0 \quad (16.18)$$

Wir vergleichen die gleichen Potenzen von  $\xi$  und erhalten

$$(n+1)(n+2)c_{n+2} - 2nc_n + (\lambda-1)c_n = 0 \quad (16.19)$$

Negative potenzen von  $\xi$  treten dabei in (16.18) nie auf, da die entsprechenden Terme von  $\xi^{n-2}$  mit  $n(n-1)$  multipliziert sind. Die Gleichung (16.19) ist eine Rekursionsformel, für die Koeffizienten  $c_n$ . Die Lösung

$$c_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} c_n \quad (16.20)$$

verbindet gerade (ungerade) Werte von  $n$  mit geraden (ungeraden) Werten. Dies war zu erwarten, da wegen der Spiegelungsinvarianz der Differentialgleichung (??) gerade und ungerade Funktionen für sich Lösungen sind, wie es in (12.9) diskutiert wurde.

Um das Konvergenzverhalten der Reihe (??) abzuschätzen, betrachten wir das Verhältnis  $c_{n+2}$  zu  $c_n$  im limes  $n \rightarrow \infty$ :

$$\frac{c_{n+2}}{c_n} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (16.21)$$

Vergleichen wir dies mit dem Verhalten von  $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ , so sehen wir, daß die Funktion  $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$  von  $H$  für  $\xi \rightarrow \infty$  majorisiert wird. Dies würde für die Wellenfunktion  $\Psi(x)$  bedeuten, daß sie im Unendlichen divergiert, außer die Reihe bricht ab. Dies wird für  $\lambda=2n+1$  der Fall sein. In diesem Fall wird  $H$  ein Polynom, und  $\Psi(x)$  ist eine quadratintegrierbare Wellenfunktion. Das Polynom ist dann ein Polynom nten Grades, da aus (16.20) folgt, daß  $c_{n+2}$  verschwindet,  $c_n$  jedoch von Null verschieden ist, wenn nicht  $H$  identisch Null sein soll. Das Polynom bezeichnen wir mit  $H$ , es heißt hermisches Polynom n-ten Grades.

Aus der Forderung nach Normierbarkeit der Wellenfunktion finden wir, daß die Eigenwerte nur diskrete Werte annehmen können:

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \lambda = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad , n = 0, 1, 2, \dots \quad (16.22)$$

Die entsprechenden Eigenfunktionen sind

$$\Psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (16.23)$$

Die Normierungskonstante  $N_n$  wird noch berechnet werden.

Wir sehen, daß der Energieeigenwert (16.15) der niedrigste Energieeigenwert ist. Wir bezeichnen diesen Zustand des harmonischen Oszillators als Grundzustand und die Wellenfunktion (16.16) als Grundzustandswellenfunktion. Sie ist eine Gaußsche Glockenfunktion.

Den niedrigsten Energieeigenwert des harmonischen Oszillators hätten wir auch über die Unschärferelation wie beim Wasserstoffatom in Kapitel 2 abschätzen können. Dies hätte den exakten Energieeigenwert (16.15) ergeben, da die Gaußsche Wellenfunktion ja gleichzeitig das minimale Wellenpaket ist. Die nicht verschwindende Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators ist also eine Folge der Unschärferelation.

## 17 Hermite Polynome

Für die Hermiteschen Polynome gibt es ein erzeugendes Funktional:

$$\begin{aligned} S(\xi, s) &= e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) s^n, \quad 0! = 1 \end{aligned} \quad (17.1)$$

Wir behaupten, daß die Entwicklungskoeffizienten der Funktion  $S$  nach der Veränderlichen  $s$  bis auf einen Faktor  $(n!)^{-1}$  die Hermiteschen Polynome sind. Zunächst sind die Funktionen  $H_n(\xi)$  in (17.1) offenbar Polynome von höchstens  $n$ -tem Grad. Dies sieht man, indem man die Exponentialfunktion in (17.1) nach  $S$  entwickelt.

Nun wollen wir noch zeigen, daß die Funktionen  $H_n(\xi)$  auch der Hermiteschen Differentialgleichung ( ) genügen.

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \quad (17.2)$$

Um dies zu zeigen, differenzieren wir  $S$  nach  $\xi$ :

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2se^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n}{n!} s^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n' s^n \quad (17.3)$$

Durch Koeffizientenvergleich finden wir:

$$H_n' = 2nH_{n-1} \quad (17.4)$$

Dies gilt auch für  $n = 0$ , da aus (17.1)  $H_0 = 1$  folgt. Differenzieren wir (17.4) nochmals nach  $\xi$ , dann erhalten wir:

$$H_n'' = 2nH_{n-1}' = 2n(n-1)H_{n-2} \quad (17.5)$$

Nun differenzieren wir  $S$  nach  $s$  und erhalten:

$$\frac{\partial S}{\partial s} = 2(-s + \xi)e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_n \frac{1}{(n-1)!} H_n(\xi) s^{n-1} \quad (17.6)$$

Wir entwickeln nun auch die Exponentialfunktion in (17.6) nach  $s$  und erhalten:

$$\begin{aligned} \sum_n 2(-s + \xi) \frac{1}{n!} s^n H_n(\xi) &= 2 \sum_n \frac{1}{n!} H_n(\xi) (-s^{n+1} + \xi s^n) \\ &= 2 \sum_n \frac{1}{n!} (-nH_{n-1} + \xi H_n) s^n \end{aligned} \quad (17.7)$$

Vergleichen wir die Koeffizienten von  $S$  in (17.6) und (17.7), so ergibt dies:

$$\begin{aligned} H_{n+1} &= 2\xi H_n - 2nH_{n-1} & \text{oder} & & (17.8) \\ H_n &= 2\xi H_{n-1} - 2(n-1)H_{n-2} \end{aligned}$$

Ersetzen wir nun  $H_{n-1}$  und  $H_{n-2}$  in (17.8) durch Ableitungen von  $H_n$ , wie dies mit Hilfe von (17.4) und (17.5) möglich ist, dann erhalten wir aus (17.8) genau die Hermitesche Differentialgleichung (17.2).

Die Gleichung (17.1) erlaubt es, die Hermiteschen Polynome einigermaßen mühelos zu berechnen.

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} S|_{n=0} = H_n \quad (17.9)$$

folgt aus (17.1). Wir formen dies noch einmal um:

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} S = e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-\xi)^2} = e^{\xi^2} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(s-\xi)^2} \quad (17.10)$$

Wir erhalten damit aus (17.9)

$$H_n = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2} \quad (17.11)$$

Die ersten Hermiteschen Polynome sind:

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4 &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \\ H_5 &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \end{aligned} \quad (17.12)$$

Die Eigenfunktionen (16.23) des harmonischen Oszillators sind

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \\ \alpha^2 &= \frac{m\omega}{\hbar} \end{aligned} \quad (17.13)$$

Der Normierungsfaktor  $N_n$  ist durch die Normierungsbedingung

$$\int dx \Psi_n^* \Psi_n = |N_n|^2 \int dx |H_n(\alpha x)|^2 e^{-\alpha^2 x^2} = 1 \quad (17.14)$$

bestimmt. Um dieses Integral zu berechnen, nehmen wir das erzeugende Funktional (17.1) zu Hilfe und verwenden (13.6) zur Integration:

$$\begin{aligned} \int d\xi S(\xi, s)S(\xi, t)e^{-\xi^2} &= \int d\xi e^{-s^2-t^2+2(s+t)\xi-\xi^2} & (17.15) \\ &= \int d\xi e^{-(\xi-s-t)^2+2st} \\ &= \sqrt{\pi}e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2^n s^n t^n \end{aligned}$$

Setzen wir die Entwicklung (17.1) nach Hermite Polynomen in dieses Integral ein, so ergibt dies

$$\int d\xi S(\xi, s)S(\xi, t)e^{-\xi^2} = \sum_{n,l} \frac{1}{n!} \frac{1}{l!} \int d\xi H_n(\xi)H_l(\xi)e^{-\xi^2} s^n t^l \quad (17.16)$$

Vergleichen wir dies mit (17.15), so erhalten wir das Ergebnis:

$$\int d\xi H_n(\xi)H_l(\xi)e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_{n,m} \quad (17.17)$$

Die Eigenfunktionen

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (17.18)$$

bilden demnach ein orthogonales und normiertes Funktionensystem:

$$\int dx \Psi_n^*(x)\Psi_m(x) = \delta_{n,m} \quad (17.19)$$

Auf den Beweis, daß dieses Funktionensystem auch vollständig ist, wollen wir hier verzichten und verweisen auf die einschlägige mathematische Literatur. So wie wir experimentelle Ergebnisse "glauben", ohne die Experimente selbst nachzuvollziehen, wollen wir auch mathematische Ergebnisse glauben, ohne die Beweise selbst nachzuvollziehen.

Die Hermiteschen Polynome kann man auch als Polynome auffassen, die mit dem Maß  $e^{-\xi^2}$  orthogonalisiert sind. Dazu die ersten Beispiele.

$H_0 = 1$  legt die Normierung des Polynoms 0-ter Ordnung fest. Das Polynom 1-ten Grades, das zu  $H_0$  orthogonal ist, ist  $H_1 = 2\xi$ , wobei die Normierung wiederum willkürlich gewählt ist. Das Integral

$$\int d\xi H_0 H_1 e^{-\xi^2} = 0 \quad (17.20)$$

verschwindet, da der Integrand antisymmetrisch unter  $\xi \rightarrow -\xi$  ist. Nun wollen wir das Polynom zweiter Ordnung berechnen.

$$\int d\xi H_0(c_1 + c_2\xi^2)e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}(c_1 + \frac{1}{2}c_2) = 0 \quad (17.21)$$

Daraus folgt  $c_2 = -2c_1$ , in Übereinstimmung mit (17.12). Einen linearen Term haben wir weggelassen (17.21), da der Integrand wieder antisymmetrisch wäre. Desgleichen ist  $H_1$  in  $H_2$  orthogonal.

So könnten wir Ordnung für Ordnung verfahren und mit Hilfe des Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens () die Hermite Polynome konstruieren. Die entsprechenden Integrale kann man immer wieder durch Differenzieren des ersten Integrals von (13.6) nach  $\alpha$  berechnen.

Die Kenntnis der Hermite Polynome erlaubt es uns, das Verhalten der Eigenfunktionen  $\Psi_n$  des harmonischen Oszillators für Größen  $n$ , d.h. für große Energie, zu untersuchen. Wir wollen zeigen, daß sich  $|\Psi_n|^2$  für großes  $n$  der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit nähert.

Dazu müssen wir zunächst den Begriff der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit einführen. Wir denken uns dazu die Beobachtung des harmonisch schwingenden Teilchens durch ein Fenster, das nur den Blick auf einen kleinen Bereich der Bahnkurve freigibt. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in diesem Fenster zu sehen, wird natürlich proportional zur Zeit sein, die das Teilchen auf diesem Teil der Bahnkurve während einer Schwingung verbringt.

$$\begin{aligned} \rho_{kl}(x)dx &= \frac{1}{T}dt = \frac{1}{T} \frac{dx}{v} \\ \rho_{kl}(x) &= \frac{1}{v(x)} \frac{1}{T} \end{aligned} \quad (17.22)$$

Lösen wir Bewegungsgleichung der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit maximaler Auslenkung  $x_0$ , so erhalten wir

$$v = \omega\sqrt{x_0^2 - x^2} \quad , \quad T = \frac{\pi}{\omega} \quad (17.23)$$

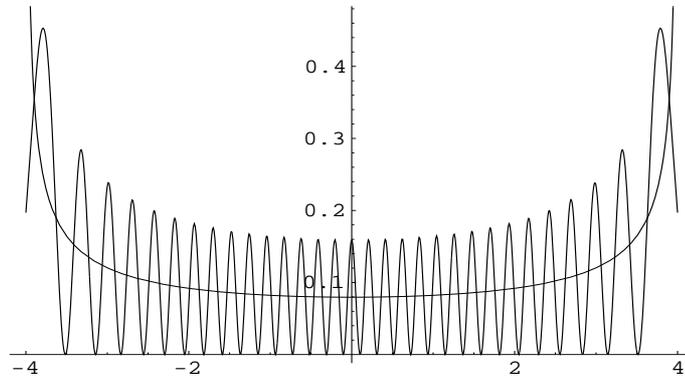
Daraus ergibt sich

$$\rho_{kl}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}} \quad (17.24)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist so normiert, daß

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx \rho_{kl}(x) = 1$$

gilt. Wir vergleichen dies graphisch mit der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x) = |\Psi_n(x)|^2$ .



Für großes  $n$  nähert sich die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Dies ist Ausdruck des Bohrschen Korrespondenzprinzips, das besagt, daß ein quantenmechanisches System für große Quantenzahlen (in unserem Fall  $n$ ) sich dem klassischen System annähert. Große Quantenzahl bedeutet dabei, daß  $\hbar\omega n$ , also die Energie, groß gegen  $\hbar\omega$ , also dem quantenmechanischen Energieintervall, dem Energiequant, sein soll.

## 18 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Der harmonische Oszillator erlaubt eine algebraische Behandlung, die einen neuen Einblick in die Struktur quantenmechanischer Systeme ermöglicht.

Wir gehen dabei von den kanonischen Vertauschungsrelationen (7.19)

$$[x, p] = i\hbar \quad (18.1)$$

aus, ohne daran zu denken, daß der Operator  $p$  durch die Quantisierungsvorschrift (3.7) definiert ist. Die Gleichung (18.1) ist ein Beispiel einer algebraischen Relation.

Wir werden sehen, daß diese Relation gemeinsam mit der Annahme, daß es sich bei den Größen  $x$  und  $p$  um lineare Operatoren in einem Hilbertraum handelt, sehr viel über ein quantenmechanisches System lernen kann.

Als spezielles System wählen wir den harmonischen Oszillator. Die klassische Hamiltonfunktion ist die Summe zweier reeller Quadrate und läßt sich demnach als Absolutquadrat einer komplexen Zahl schreiben. Bis auf einen Normierungsfaktor wäre dies für

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \{m\omega x + ip\} \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \{m\omega x - ip\} \end{aligned} \quad (18.2)$$

der Fall. Nun sollten aber  $a$  und  $a^\dagger$  lineare Operatoren sein, deren algebraische Struktur durch (18.1) definiert ist. Aus (18.1) folgt:

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (18.3)$$

Dies ist leicht zu zeigen:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2m\hbar\omega} [m\omega x + ip, m\omega x - ip] = \frac{1}{2m\hbar\omega} (\hbar m\omega + \hbar m\omega) = 1 \quad (18.4)$$

Der Normierungsfaktor für  $a$  und  $a^\dagger$  würde so gewählt, daß in (18.3) die linke Seite gerade 1 ergibt.

Wir berechnen nun  $aa^\dagger$ :

$$\begin{aligned} aa^\dagger &= \frac{1}{2m\hbar\omega} (m\omega x - ip)(m\omega x + ip) \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega} \{m^2\omega^2 x^2 + p^2 + m\omega i[x, p]\} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (18.5)$$

Wir finden als wichtiges Ergebnis:

$$H = \hbar\omega\left(aa^\dagger + \frac{1}{2}\right) \quad (18.6)$$

Verwenden wir weiterhin die Relation (18.3), so folgt:

$$[a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a \quad (18.7)$$

und

$$[a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger \quad (18.8)$$

Hier haben wir die letzte Relation aus (7.15) benützt. Es gilt demnach:

$$[H, a] = -\hbar\omega a \quad (18.9)$$

$$[H, a^\dagger] = -\hbar\omega a^\dagger \quad (18.10)$$

Bisher haben wir nur die algebraische Relation (18.1) verwendet. Nun nehmen wir auch noch an, daß  $x$  und  $p$  Observablen sind, d.h. hermitesche lineare Operatoren mit einem vollständigen und orthogonalen System von Eigenvektoren.

Der Operator  $a^\dagger$  in (18.2) sei der zu  $a$  adjungierte Operator.<sup>9</sup>

Für die weitere Behandlung empfiehlt es sich, die Notation von Kap.7 zu übernehmen. Daß  $a^\dagger$  der zu  $a$  adjungierte Operator ist, bedingt dann:

$$\begin{aligned} \langle \Phi, a\Psi \rangle &= \langle a^\dagger\Phi, \Psi \rangle \\ \langle \Phi, a^\dagger\Psi \rangle &= \langle a\Phi, \Psi \rangle \end{aligned}$$

Daraus folgt wiederum

$$\langle \Psi, a^\dagger a\Psi \rangle = \langle a\Psi, a\Psi \rangle \geq 0 \quad (18.11)$$

Wir sehen, daß alle Erwartungswerte des hermiteschen Operators  $a^\dagger a$  bzw.  $H$  nicht nur reell, sondern auch positiv sind. dies gilt dann auch für die Eigenwerte.

Nehmen wir nun an,  $H$  hätte einen positiven reellen Eigenwert  $E$

$$H\Psi_E = E\Psi_E \quad (18.12)$$

wobei  $\Psi_E$  ein Vektor im Hilbertraum sein soll. Dann sind auch  $a^\dagger\Psi_E$  ( $a\Psi_E$ ), falls diese wieder Vektoren im Hilbertraum sind, Eigenvektoren von  $H$ . Dies zeigen wir nun mit Hilfe von (18.9)

$$\begin{aligned} H a^\dagger \Psi_E &= (H a^\dagger - a^\dagger H + a^\dagger H) \Psi_E \\ &= [H, a^\dagger] \Psi_E + a^\dagger E \Psi_E = (E + \hbar\omega) a^\dagger \Psi_E \end{aligned} \quad (18.13)$$

---

<sup>9</sup>Ist  $p$  der durch  $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$  dargestellte Differenzialoperator, dann müßte man strenggenommen noch zeigen, daß der zu  $a$  adjungierte Operator und der in (18.2) definierte Operator  $a^\dagger$  den gleichen Definitionsbereich, dicht in  $L^2$ , besitzen.

$a^\dagger \Psi_E$  ist demnach Eigenvektor zum Eigenwert  $E + \hbar\omega$ .

Nun gilt aber auch in gleicher Weise

$$Ha\Psi_E = (E - \hbar\omega)a\Psi_E \quad (18.14)$$

$a\Psi_E$ , falls es als Vektor im Hilbertraum existiert, ist Eigenvektor zum Eigenwert  $E - \hbar\omega$ . Da aber alle Eigenwerte von  $H$  positiv sind, muß es einen Eigenwert  $E_0$  geben, sodaß

$$a\Psi_{E_0} = 0 \quad (18.15)$$

gilt. Sonst könnte man mit (18.14) zu negativen Eigenwerten weitergelangen. Diesen Zustand nennen wir den Grundzustand und  $E_0$  die Grundzustandsenergie.

Der Grundzustand ist demnach durch (18.15) definiert, und aus (18.6) folgt:

$$H\Psi_{E_0} = \frac{1}{2}\hbar\omega\Psi_{E_0} \quad (18.16)$$

Dies ist auch das Ergebnis von (16.22). Die weiteren Eigenwerte von  $H$  folgen aus (18.13), sie sind  $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ . Den entsprechenden Eigenvektor bezeichnen wir mit  $\Psi_n$ :

$$H\Psi_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\Psi_n \quad (18.17)$$

Dies ist wiederum genau unser Ergebnis aus (16.23). Die Zustände  $\Psi_n$  können durch wiederholte Anwendung des Operators  $a^\dagger$  auf  $\Psi_0$  ( $\Psi_{E_0}$ ) erzeugt werden. Dies rechtfertigt die Bezeichnung  $a$  als Vernichtungsoperator und  $a^\dagger$  als Erzeugungsoperator. Sie vernichten bzw. erzeugen jeweils ein Energiequant  $\hbar\omega$ . Im gleichen Sinne heißt der Operator  $a^\dagger a$  Besetzungszahloperator.

Nun noch zur Normierung der Zustände. Sei  $\Psi_n$  ein normierter Zustand:

$$\langle \Psi_n, \Psi_n \rangle = 1 \quad (18.18)$$

Dann folgt:

$$\langle a\Psi_n, a\Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, a^\dagger a\Psi_n \rangle = n \quad (18.19)$$

und

$$\langle a^\dagger \Psi_n, a^\dagger \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, a a^\dagger \Psi_n \rangle = n + 1 \quad (18.20)$$

Damit sind die normierten Zustände  $\Psi_{n-1}$  bzw.  $\Psi_{n+1}$  gegeben durch:

$$\Psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger \Psi_n \quad (18.21)$$

bzw.

$$\Psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} a \Psi_n \quad (18.22)$$

Ist der Grundzustand  $\Psi_0$  normiert, so folgt daraus:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \Psi_0 \quad (18.23)$$

Damit haben wir alle Energieeigenvektoren konstruiert. Wir zeigen noch, daß sie ein orthogonales System von Eigenvektoren bilden. Da sie Eigenvektoren von  $H$  sind, folgt

$$\begin{aligned} H\Psi_n &= E_n\Psi_n \\ H\Psi_m &= E_m\Psi_m \end{aligned} \quad (18.24)$$

$H$  ist hermitisch, demnach gilt

$$\begin{aligned} \langle \Psi_m, H\Psi_n \rangle &= \langle H\Psi_m, \Psi_n \rangle \\ E_n \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle &= E_m \langle \Psi_m, \Psi_n \rangle \end{aligned} \quad (18.25)$$

Für  $E_m \neq E_n$ , d.h.  $m \neq n$  folgt daraus

$$\langle \Psi_m, \Psi_n \rangle = 0 \quad (m \neq n) \quad (18.26)$$

Ergebnis:

$$\langle \Psi_m, \Psi_n \rangle = \delta_{n,m} \quad (18.27)$$

Das Schwankungsquadrat von  $x$  bzw.  $p$  ist für diese Funktionen leicht zu berechnen. Wir lösen (18.2) nach  $x(p)$  auf:

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (a + a^\dagger) \\ p &= -i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} (a - a^\dagger) \end{aligned} \quad (18.28)$$

Man sieht daraus unmittelbar, daß alle Erwartungswerte von  $x$  bzw.  $p$  für Energieeigenvektoren verschwinden, da

$$\langle \Psi_n, a\Psi_n \rangle = \langle \Psi_n, a^\dagger\Psi_n \rangle = 0 \quad (18.29)$$

für alle  $\Psi_n$  gilt.

Um  $(\Delta x)_{\Psi_n}^2$  zu berechnen, müssen wir demnach den Erwartungswert von  $x^2$  berechnen:

$$\begin{aligned} (\Delta x)_{\Psi_n}^2 &= \langle \Psi_n, x^2\Psi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\omega} \langle \Psi_n, (a + a^\dagger)^2\Psi_n \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m\omega} \langle \Psi_n, (aa^\dagger + a^\dagger a)\Psi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (18.30)$$

Wollen wir die Wellenfunktionen als Funktionen der Koordinaten berechnen, so müssen wir von der Darstellung (3.7) des Operators  $p$  ausgehen und die Grundzustandseigenfunktion gemäß der Definition von (18.15) berechnen:

$$(m\omega x + \hbar \frac{\partial}{\partial x})\Psi_0(x) = 0 \quad (18.31)$$

Als Lösung ergibt sich die normierte Grundzustandsfunktion

$$\Psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (18.32)$$

Dies ist genau die Wellenfunktion (??). Die Wellenfunktionen  $\Psi_n$  ergeben sich dann aus (18.23) durch Anwenden des Differentialoperators  $a^\dagger$  auf  $\Psi_0(x)$ . Dies reproduziert die Funktionen (17.18).

Wir haben in diesem Kapitel angenommen, daß  $H$  ein hermitischer Operator mit einem vollständigen und orthogonalen System von Eigenvektoren ist. Im Falle, daß wie (3.7)  $p$  durch  $-i\hbar\frac{d}{dx}$  dargestellt wird, ist dies auch der Fall. Man kann aber auch zeigen, daß alle Darstellungen von  $p$  äquivalent zu dieser Darstellung sind, wenn man fordert, daß  $x, p$  und der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators Observable sind.

## 19 Kohärente Zustände

Die Grundzustandsfunktion des harmonischen Oszillators (??) ist ein Gaußsches Wellenpaket. Anders als beim freien Teilchen zerläuft dieses Wellenpaket nicht. Durch das Potential entsteht eine rücktreibende Kraft, die aus dem Wellenpaket einen stationären Zustand macht.

Nun wollen wir dieses Wellenpaket aus dem Ursprung verschieben:

$$\Psi_d(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x-d)^2} \quad (19.1)$$

und berechnen, wie sich dieses Wellenpaket zeitlich verändert. Wir werden wiederum feststellen, daß dieses Wellenpaket nicht zerfließt, sein Absolutquadrat wohl aber nach der klassischen Frequenz  $\omega$  um den Ursprung schwingt.

Wir zeigen zunächst, daß das Wellenpaket (19.1) Eigenzustand des Vernichtungsoperators  $a$  ist. Die Definition von  $a$  finden wir in (18.2):

$$\begin{aligned} a\Psi_d &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx})\Psi_d & (19.2) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}d\Psi_d = \tilde{d}\Psi_d \\ \tilde{d} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}d \quad \text{ist dimensionslos.} \end{aligned}$$

Dies bedeutet jedoch keinesfalls, daß die kohärenten Zustände  $\Psi_d$  ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem bilden. Der Operator  $a$  ist ja nicht einmal hermitisch, die Konstante  $d$  kann in (19.2) auch komplex sein, die Eigenwertgleichung ist auch dann erfüllt.

Wir werden nun die Relation (19.2) verwenden, um im algebraischen Kalkül möglichst viel über den in (19.1) definierten Zustand des kohärenten Zustands, oder auch Glauberzustand (Roy Glauber), zu erfahren, vor allem seine zeitliche Entwicklung interessiert uns. Dazu werden wir den Zustand  $\Psi_d$  nach den Eigenfunktionen  $\Psi_n$  des harmonischen Oszillators entwickeln:

$$\begin{aligned} \Psi_d &= \sum_n c_n \Psi_n & (19.3) \\ c_n &= c\langle\Psi_n, \Psi_d\rangle \end{aligned}$$

Hier verwenden wir die Notation von Kap. .

Der Zustand  $\Psi_n$  wurde algebraisch in (18.26) definiert. Wir verwenden diese Definition, um  $c_n$  zu berechnen.

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \Psi_n, \Psi_d \rangle \quad (19.4)$$

Verwenden wir (18.12), so folgt unmittelbar:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \Psi_n, a^n \Psi_d \rangle = \frac{\tilde{d}^n}{\sqrt{n!}} \langle \Psi_n, \Psi_d \rangle \quad (19.5)$$

Da  $\Psi_d$  eine normierte Wellenfunktion sein sollte, gilt

$$\begin{aligned} \langle \Psi_d, \Psi_d \rangle &= 1 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n \frac{|\tilde{d}|^{2n}}{n!} |\langle \Psi_n, \Psi_d \rangle|^2 \\ &= e^{|\tilde{d}|^2} |\langle \Psi_d, \Psi_d \rangle|^2 \end{aligned} \quad (19.6)$$

Daraus ergibt sich der Normierungsfaktor

$$|\langle \Psi_d, \Psi_d \rangle| = e^{-\frac{1}{2}|\tilde{d}|^2} \quad (19.7)$$

Wir haben den Entwicklungskoeffizienten  $c_n$  bis auf eine gemeinsame Phase, die die Gleichung (19.2) so nicht festlegen kann, berechnet. Dazu wählen wir frei:

$$\Psi_d = e^{-\frac{1}{2}|\tilde{d}|^2} \sum_n \frac{\tilde{d}^n}{\sqrt{n!}} \Psi_n \quad (19.8)$$

Die kohärenten Zustände sind keineswegs stationäre bzw. Energieeigenzustände. Die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Energieeigenwert zu messen, beträgt:

$$\omega_n = c_n^* c_n = \frac{1}{n!} \tilde{d}^n e^{-|\tilde{d}|^2} \quad (19.9)$$

Dies nennt man eine Poissonverteilung (Simeon Denis Poisson, Frankreich 1781-1840).

Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion berechnen wir gemäß (13.7):

$$\begin{aligned} \Psi_d(x, t) &= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} t E_n} \Psi_n \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\tilde{d}|^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \tilde{d}^n e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})} \Psi_n \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\tilde{d}|^2} e^{-\frac{i}{2}\omega t} \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} (\tilde{d} e^{-i\omega t})^n \Psi_n \end{aligned} \quad (19.10)$$

Vergleichen wir dies mit (19.8), so sehen wir, daß die Summe in (19.10) leicht zu berechnen ist, wir müssen in (19.8)  $d$  nur durch  $\tilde{d} e^{-i\omega t}$  ersetzen. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \Psi_d(x, t) &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} \Psi_{d e^{-i\omega t}}(x, 0) \\ &= \left( \frac{\pi \hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - d e^{-i\omega t})^2} \end{aligned} \quad (19.11)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für die Wellenfunktion (19.11) erhält eine sehr einfache und physikalisch einsichtige Form:

$$\rho_d = \Psi_d^*(x, t) \Psi_d(x, t) = \left( \frac{\pi \hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} (x - d \cos \omega t)^2} \quad (19.12)$$

Um von (19.11) zu (19.12) zu gelangen, haben wir  $e^{-i\omega t} = \cos \omega t - i \sin \omega t$  verwendet und dann das Absolutquadrat gebildet. Dabei haben wir vorausgesetzt, daß  $d$  in (19.11) reell ist.

Mit Hilfe der algebraischen Methode ist es auch einfach, den Erwartungswert des Ortes und des Impulses zu berechnen. Wir gehen von (18.29) aus.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{d(t)}, x \Psi_{d(t)} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \Psi_{d(t)}, (a + a^\dagger) \Psi_{d(t)} \rangle & (19.13) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \langle \Psi_{d(t)}, a \Psi_{d(t)} \rangle + \langle a \Psi_{d(t)}, \Psi_{d(t)} \rangle \} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} d (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= d \cos \omega t. \end{aligned}$$

Genauso:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{d(t)}, p \Psi_{d(t)} \rangle &= -i \sqrt{\frac{m\omega \hbar}{2}} \langle \Psi_{d(t)}, (a - a^\dagger) \Psi_{d(t)} \rangle & (19.14) \\ &= -m\omega d \sin \omega t \end{aligned}$$

Dies ist eine schöne Bestätigung des Ehrenfest'schen Theorems aus Kap.7.

## 20 Drehimpuls

Den Differentialoperator, der der Observablen Drehimpuls entsprechen sollte, erhalten wir aus dem klassischen Drehimpuls durch unsere Quantisierungsvorschrift (3.7) oder (5.13):

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) & (20.1) \\ L_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ L_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ L_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\end{aligned}$$

Wie in der klassischen Mechanik auch, hat der Drehimpuls auch in der Quantenmechanik eine intime Beziehung zu Drehungen. Wir gehen daher auch hier wieder von den Drehungen im dreidimensionalen Raum, der Gruppe  $SO(3)$ , aus. Eine Drehung um die  $z$ -Achse transformiert die Ortskoordinaten wie jeden Vektor wie folgt:

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \varphi - y \sin \varphi = x - \phi y + \dots & (20.2) \\ y' &= x \sin \varphi + y \cos \varphi = y + \phi x + \dots \\ z' &= z & = z\end{aligned}$$

Hier handelt es sich um eine Drehung entgegengesetzt dem Uhrzeigersinn. Rechts haben wir die ersten Terme einer Potenzreihenentwicklung in  $\varphi$  hingeschrieben. Ist  $\varphi$  infinitesimal, und vernachlässigen wir alle höheren Potenzen von  $\varphi$ , so ergibt dies die inifinitesimale Drehung:

$$\begin{aligned}\delta x &= x' - x = -\varphi y & (20.3) \\ \delta y &= y' - y = \varphi x \\ \delta z &= z' - z = 0\end{aligned}$$

Wir erinnern daran, daß eine inifinitesimale Drehung um die Drehachse  $\boldsymbol{\varphi}$  und den infinitesimalen Betrag  $|\boldsymbol{\varphi}|$  wie folgt geschrieben werden kann:

$$\delta \mathbf{x} = [\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{x}] \quad (20.4)$$

Nun betrachten wir die Änderung einer Funktion der Koordinaten unter einer inifinitesimalen Drehung (9.15):

$$\begin{aligned}\delta \Psi(\mathbf{x}) &= \Psi(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{x}) & (20.5) \\ &= \delta \mathbf{x} \nabla \Psi = (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{x}) \nabla \Psi \\ &= \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varphi} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) \Psi = \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L} \Psi\end{aligned}$$

In diesem Sinne sagen wir, daß der Drehimpuls die Drehung erzeugt.

In der kanonischen Mechanik erzeugt die Poissonklammer mit dem Drehimpuls ebenfalls die Drehung an den Orts- und Impulsvariablen.<sup>10</sup> Daher liegt es nahe, die entsprechenden Kommutatorrelationen zu untersuchen. Verwenden wir die kanonischen Vertauschungsrelationen (7.19), so sehen wir, daß der Drehimpulsoperator auch in diesem Sinne die Drehung erzeugt.

$$\begin{aligned} [(\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}), \mathbf{x}] &= -i\hbar\delta\mathbf{x} \\ [(\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}), \mathbf{p}] &= -i\hbar\delta\mathbf{p} \end{aligned} \quad (20.6)$$

Wobei  $\delta\mathbf{x}$  bzw.  $\delta\mathbf{p}$  der infinitesimalen Drehung (9.4) entsprechen. Dies ergibt eine einfache Rechnung.

Die Vertauschungsrelationen (9.6) kann man auch mit Hilfe des  $\epsilon$ -Tensors formulieren ( $\epsilon_{123} = 1$ ):

$$\begin{aligned} [L^i, x^k] &= i\hbar\epsilon_{ikl}x^l \\ [L^i, p^k] &= i\hbar\epsilon_{ikl}p^l \end{aligned} \quad (20.7)$$

Da der Drehimpuls selbst auch ein Vektor ist, ergibt sich ohne weitere Rechnung:

$$[L^i, L^j] = i\hbar\epsilon_{ikl}L^k \quad (20.8)$$

Dies sind die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses. Wir wissen auch, daß sich die Länge eines Vektors bei Drehungen nicht ändert, die Länge eines Vektors ist ein Skalar. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} [L^i, \mathbf{L}^2] &= 0 \\ \mathbf{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \end{aligned} \quad (20.9)$$

Die Relationen (9.8) und (9.9) sind für die quantenmechanische Interpretation des Drehimpulses von größter Bedeutung. Aus ihnen folgt, daß im allgemeinen die Komponenten des Drehimpulses nicht gleichzeitig scharf gemessen werden können, wohl aber eine Komponente des Drehimpulses. Wir wählen  $L_z$  und  $\mathbf{L}^2$ .

Die Operatoren  $L_z$  und  $\mathbf{L}^2$  sind natürlich hermitisch, und wir werden zeigen, daß es ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem gibt, dessen Funktionen gleichzeitig Eigenfunktionen von  $L_z$  und  $\mathbf{L}^2$  sind.  $L^i$  und  $\mathbf{L}^2$  sind demnach Observable im strengen Sinn.

---

<sup>10</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.11,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

Bei rotationsinvarianten oder kovarianten Problemen empfiehlt es sich, zu Polarkoordinaten überzugehen.<sup>11</sup>

$$\begin{aligned}x &= r \cos \varphi \sin \theta \\y &= r \sin \varphi \sin \theta \\z &= r \cos \theta\end{aligned}\tag{20.10}$$

Wir berechnen zunächst die Ableitungen nach den Winkeln  $\varphi$  und  $\theta$ .

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \varphi} &= -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} \\&= -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} L_z\end{aligned}\tag{20.11}$$

ebenso:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = r \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial z}\tag{20.12}$$

Um die rechte Seite wieder durch Koordinaten ausdrücken zu können, multiplizieren wir (9.13) mit  $\sin \varphi$  und erhalten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \theta} &= r \cos \theta \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \frac{\partial}{\partial z} \\&= r \cos \theta \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} - \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \frac{\partial}{\partial z} \\&= z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} + r \cos \varphi \cot \theta \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right)\end{aligned}\tag{20.13}$$

Kombinieren wir dies mit (9.12), so erhalten wir

$$\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} = -\frac{i}{\hbar} L_x\tag{20.14}$$

und ebenso bei Multiplikation mit  $\cos \varphi$  von (9.13)

$$-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} = -\frac{i}{\hbar} L_y\tag{20.15}$$

---

<sup>11</sup>Siehe die Diskussion in Theoretische Mechanik, Kap.11,  
<http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~wess>

Wir fassen zusammen:

$$\begin{aligned}L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\L_x &= i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\L_y &= i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\L^2 &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}\end{aligned}\tag{20.16}$$

## 21 Drehimpulseigenfunktionen

Auf Grund der Vertauschungsrelationen (16.2) und (16.2) kann nur eine Komponente des Drehimpulses mit dem Betrag des Drehimpulses ein gemeinsames System von Eigenfunktionen besitzen. Die Wahl von  $L_Z$  ist durch die Auszeichnung der  $Z$  Komponente bei den Polarkoordinaten schon vorweggenommen.

Die Eigenwertgleichung für  $L_Z$  lautet:

$$L_Z \Psi_m(\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_m(\varphi) = \hbar m \Psi_m(\varphi) \quad (21.1)$$

wobei  $m$  zunächst irgend eine Zahl sein kann. Berücksichtigen wir jedoch die Randbedingung  $\Psi(0) = \Psi(2\pi)$ , die besagt, daß sich die Wellenfunktion bei einer Drehung um  $2\pi$  nicht ändern soll, so finden wir als Eigenfunktionen

$$\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m \text{ ganzzahlig} \quad (21.2)$$

Diese Funktionen bilden nach dem Fouriertheorem für periodische Funktionen im Intervall von 0 bis  $2\pi$  ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem.

Nun zu  $\mathbf{L}^2$ . In Polarkoordinaten lautet die Eigenwertgleichung infolge von (16.2):

$$\mathbf{L}^2 \Psi_\lambda(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi_\lambda(\theta, \varphi) = \hbar^2 \lambda \Psi_\lambda(\theta, \varphi) \quad (21.3)$$

wobei  $\lambda$  zunächst willkürlich ist. Die Wellenfunktion soll im Bereich  $0 \leq \theta \leq \pi$  und  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  quadratintegrierbar sein, was unter anderem bedingt, daß  $\Psi$  bei  $\theta = 0$  und  $\theta = \pi$  endlich sein soll.

Die Wellenfunktion  $\Psi_\lambda$  soll gleichzeitig Eigenfunktion von  $L_Z$  sein.  $\Psi_\lambda(\theta, \varphi)$  muß demnach die Form

$$\Psi_{\lambda, m}(\theta, \varphi) = \chi_{\lambda, m}(\theta) e^{im\varphi} \quad (21.4)$$

haben. Dies ergibt für  $\chi_{\lambda, m}(\theta)$  die Gleichung:

$$\left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \lambda \right) \chi_{\lambda, m}(\theta) = 0 \quad (21.5)$$

Nun empfiehlt sich eine Variablensubstitution:

$$\omega = \cos \theta, \quad \frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \omega}, \quad \chi_{\lambda, m}(\theta) = P_{l, m}(\omega), \quad \lambda = l(l+1) \quad (21.6)$$

Dann wird aus (21.5):

$$\left\{ \frac{d}{d\omega} (1 - \omega^2) \frac{d}{d\omega} + \lambda - \frac{m^2}{1 - \omega^2} \right\} P_{l,m}(\omega) = 0 \quad (21.7)$$

Da bei der höchsten Ableitung der Faktor  $(1 - \omega^2)$  auftritt, werden die Funktionen im allgemeinen bei  $\omega^2 = 1$  Singularitäten aufweisen, außer wenn  $P_m(\theta)$  ein Polynom ist. Dies kann durch eine Potenzreihenentwicklung, ähnlich wie beim harmonischen Oszillator, gezeigt werden. Polynome existieren als Lösung von (21.7) für  $\lambda = l(l + 1)$ ,  $l$  ganzzahlig. Dies sind dann die assoziierten Legendrepolynome  $P_l^m$ .

Den einfachsten Fall erhalten wir für  $m = 0$ , dann heißen die Polynome Legendrepolynome  $P_l$  (Adrien-Marie Legendre, Frankreich 1752-1832). Wir betrachten zunächst diesen Fall:

$$\left( \frac{d}{d\omega} (1 - \omega^2) \frac{d}{d\omega} + \lambda \right) P_l(\omega) = 0 \quad (21.8)$$

Wir könnten wie beim harmonischen Oszillator wieder mit einer Potenzreihenentwicklung beginnen, ziehen es aber vor, gleich die erzeugende Funktion der Legendrepolynome anzugeben.

$$T(\omega, s) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2s\omega + s^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\omega) s^l \quad (21.9)$$

Es ist zunächst sofort einsichtig, daß die Entwicklungskoeffizienten  $P_l$  Polynome in  $\omega$  von der Ordnung  $l$  sind. Weiter finden wir für  $\omega = 1$  und für  $\omega = -1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - s} &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(1) s^l \\ \frac{1}{1 + s} &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(-1) s^l \end{aligned} \quad (21.10)$$

Daraus folgt unmittelbar

$$P_l(1) = 1, \quad P_l(-1) = (-1)^l \quad (21.11)$$

Zu zeigen ist, daß die so definierten Polynome  $P_l$  der Differentialgleichung (18.9) mit  $\lambda = l(l + 1)$  genügen. Dazu betrachten wir zunächst die Ableitung der erzeugenden Funktion  $T$  nach  $s$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} T(\omega, s) &= \frac{\omega - s}{1 - 2s\omega + s^2} T \\ (-2s\omega + s^2) \frac{\partial}{\partial s} T &= (\omega - s) T \end{aligned} \quad (21.12)$$

Entwickeln wir  $T$  nach Potenzen von  $s$  und vergleichen die gleichen Potenzen von  $s$ , so ergibt dies

$$(l + 1)P_{l+1} = (2l + 1)\omega P_l - lP_{l-1} \quad (21.13)$$

Dies ist eine Gleichung, die Polynome mit unterschiedlichen Werten von  $l$  in Beziehung setzt. Wir brauchen jedoch eine Gleichung, die Ableitungen des Polynoms für einen Wert von  $l$  in Beziehung setzt. Dies sollte dann die Gleichung

## 22 Algebraische Behandlung des Drehimpulses

Auf Grund der kanonischen Vertauschungsrelationen (7.19) erfüllen die Komponenten des Drehimpulses die algebraische Relation:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (22.1)$$

Durch zyklisches Vertauschen der Indizes erhält man alle weiteren Relationen. Die so definierte Algebra ist ein Beispiel einer Lie Algebra, die Elemente dieser Algebra (hier die  $L_i$ ) heißen Erzeugende der Algebra.

Lie Algebren wurden in der Mathematik unabhängig von der Quantenmechanik untersucht. In der Darstellungstheorie der Lie Algebren kommt der Frage nach endlichdimensionalen Matrizen, die auf Grund der Matrixmultiplikation die algebraischen Relationen erfüllen, besondere Bedeutung zu. Man sagt, die Erzeugenden werden dargestellt.

Wir wollen im Folgenden nur die Relationen (22.1) verwenden, um die Drehimpulskomponenten (durch Matrizen) darzustellen. Dabei nehmen wir Methoden aus der Darstellungstheorie zu Hilfe.

Zunächst führen wir eine neue Linearkombination der Erzeugenden ein.

$$\begin{aligned} L_{\pm} &= L_x \pm iL_y \\ L_3 &= L_z \end{aligned} \quad (22.2)$$

Für diese Elemente ergibt sich aus (22.1):

$$\begin{aligned} [L_{\pm}, L_3] &= [L_x \pm iL_y, L_z] = i\hbar(-L_y \pm iL_x) \\ &= \mp\hbar L_{\pm} \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar L_3 \end{aligned} \quad (22.3)$$

Die erste Relation erinnert uns an die Relationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des harmonischen Oszillators.  $L_+$  ( $L_-$ ) werden hier Aufsteige- (Absteige-) Operatoren genannt, wir werden gleich sehen, daß sie den Eigenwert von  $L_3$  um  $\hbar$  erhöhen (erniedrigen).

In der Drehimpulsalgebra sind die  $L_i$  hermitesche Operatoren, in der Darstellung sollen sie demnach durch hermitesche Matrizen dargestellt werden.

Eine hermitesche Matrix kann diagonalisiert werden. Wir nehmen daher an, daß  $L_3$  diagonal ist. Gleichzeitig können wir das Quadrat des Drehimpulses diagonalisieren, da

$\mathbf{L}^2$  mit  $L_3$  vertauscht.

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_+L_- + L_3^2 - \hbar L_3 \quad (22.4)$$

Die Eigenvektoren von  $L_3$  und  $\mathbf{L}^2$  berechnen wir mit  $\Psi_l^m$ , sie sind jetzt Vektoren in einem endlichdimensionalen Raum.

$$\begin{aligned} L_3 \Psi_l^m &= \hbar m \Psi_l^m \\ \mathbf{L}^2 \Psi_l^m &= \hbar^2 l(l+1) \Psi_l^m \end{aligned} \quad (22.5)$$

Die Eigenwerte  $\hbar m$  und  $\hbar^2 l(l+1)$  sind zunächst beliebige reelle Zahlen, da  $L_3$  und  $\mathbf{L}^2$  hermitesche Matrizen sind. Multiplizieren wir nun einen solchen Eigenvektor mit  $L^+$  ( $L^-$ ), so erhalten wir einen Eigenvektor mit dem Eigenwert  $\hbar(m+1)$  bzw.  $\hbar(m-1)$ .

$$\begin{aligned} L_3 L_{\pm} \Psi_l^m &= \{\hbar L_{\pm} L_3 \pm L_{\pm}\} \Psi_l^m \\ &= \hbar(m \pm 1) L_{\pm} \Psi_l^m \end{aligned} \quad (22.6)$$

Der Eigenwert von  $\mathbf{L}^2$  ändert sich nicht, da  $\mathbf{L}^2$  mit  $L_+$  ( $L_-$ ) vertauscht.

Die Eigenvektoren sind sicher orthogonal für unterschiedliche Eigenwerte, wir nehmen an, daß sie auch normiert sind. Dies ergibt für das Skalarprodukt der Vektoren:

$$\langle \Psi_{l'}^{m'}, \Psi_l^m \rangle = \delta_{m,n'} \delta_{l,l'} \quad (22.7)$$

Somit folgt aus (22.6)

$$\begin{aligned} L_+ \Psi_l^m &= \beta_{m+1}^l \Psi_{m+1} \\ L_- \Psi_l^m &= \alpha_m^l \Psi_{m-1} \end{aligned} \quad (22.8)$$

Die Normierungskonstanten  $\alpha$  und  $\beta$  müssen noch berechnet werden. Da die Darstellungsmatrizen endlichdimensional sein sollten, muß es einen größten bzw. kleinsten Eigenwert von  $L_3$  geben. Wir nennen diese Eigenwerte  $\overline{m}$  bzw.  $\underline{m}$ . aus (22.8) folgt nun:

$$\begin{aligned} L_+ \Psi_{\overline{m}}^{\overline{m}} &= 0 & , & & \beta_{\overline{m}+1}^{\overline{m}} &= 0 \\ L_- \Psi_{\underline{m}}^{\underline{m}} &= 0 & , & & \alpha_{\underline{m}}^{\underline{m}} &= 0 \end{aligned} \quad (22.9)$$

Wir wenden nun  $L_+L_-$  auf  $\Psi_l^m$  an:

$$L_+L_- \Psi_l^m = \alpha_m^l L_+ \Psi_l^{m-1} = \alpha_m^l \beta_m^l \Psi_l^m \quad (22.10)$$

Die Matrix  $L_+L_-$  läßt sich aber auch durch  $\mathbf{L}^2$  und  $L_3$  ausdrücken, wie aus (22.4) ersichtlich ist:

$$\begin{aligned} L_+L_- \Psi_l^m &= (\mathbf{L}^2 - L_3^2 + \hbar L_3) \Psi_l^m \\ &= \hbar^2(l(l+1) + m - m^2) \Psi_l^m \end{aligned} \quad (22.11)$$

Vergleichen wir (22.11) mit (22.10), so erhalten wir:

$$\alpha_m^l \beta_m^l = \hbar^2(l(l+1) - m(m-1)) \quad (22.12)$$

Wählen wir für  $m$  den größten Eigenwert  $\bar{m}$ , so folgt aus (22.9):

$$L_+ L_- \Psi_l^{\bar{m}} = [L_+, L_-] \Psi_l^{\bar{m}} = 2\hbar L_3 \Psi_l^{\bar{m}} = 2\hbar^2 \bar{m} \Psi_l^{\bar{m}} \quad (22.13)$$

Kombinieren wir dies mit (22.11), so sehen wir, daß

$$l(l+1) - \bar{m}(\bar{m}-1) = 2\bar{m} \quad (22.14)$$

gilt. Dies ergibt die Beziehung zwischen dem größten Eigenwert von  $L_3$  und dem Eigenwert von  $\mathbf{L}^2$

$$\bar{m} = l \quad (22.15)$$

Bisher wissen wir noch nicht, ob  $l$  bzw.  $m$  ganzzahlig sein müssen. Nun muß es aber auch einen kleinsten Eigenwert geben. Wir könnten das gleiche Spiel für den kleinsten Eigenwert wiederholen oder aber aus (22.9) und (22.12) folgern:

$$\alpha_{\underline{m}}^l \beta_{\underline{m}}^l = 0 = \hbar(l(l+1) - \underline{m}(\underline{m}-1)) \quad (22.16)$$

Die Nullstellen der rechten Seite sind  $\underline{m} = l+1$  und  $\underline{m} = -l$ . Der Wert  $l+1$  kommt nicht als kleinster Eigenwert in Frage, da er größer als der größte Eigenwert ist. Es bleibt die Beziehung:

$$\underline{m} = -l \quad (22.17)$$

vom größten Eigenwert  $\bar{m} = l$  kommt man durch  $L_-$  in ganzzahligen Schritten zum kleinsten Eigenwert  $\underline{m} = -l$ . Dies sind  $2l+1$  Schritte. Die Darstellung (die Darstellungsmatrizen) ist demnach  $2l+1$ -dimensional. Da dies eine gerade Zahl  $n$  sein muß folgt

$$2l+1 = n \quad , \quad l = \frac{1}{2}(n-1) \quad (22.18)$$

$l$  kann demnach ganz- oder halbzahlig sein.

Als Ergebnis erhalten wir, daß es in jedem ganz- oder halbzahligen Wert von  $l$  eine Darstellung der Drehimpulsalgebra durch  $(2l+1)$ -dimensionale Matrizen gibt.

Es bleibt noch  $\alpha$  und  $\beta$  zu berechnen. Aus der Hermizität von  $L_x$  und  $L_y$  folgt:

$$L_+^\dagger = L_- \quad (22.19)$$

was für die Matrixelemente besagt:

$$\langle \Psi_l^{m'}, L_- \Psi_l^m \rangle = \langle \Psi_l^{m'}, L_+^\dagger \Psi_l^m \rangle = \langle \Psi_l^m, L_+ \Psi_l^{m'} \rangle^* \quad (22.20)$$

Für die  $\alpha, \beta$  folgt daraus

$$\alpha_l^m = \beta_l^{*m} \quad (22.21)$$

Da die Phase der Eigenvektoren frei wählbar ist, können wir aus (22.12) schließen:

$$\beta_l^m = \alpha_m^l = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (22.22)$$

Die Darstellungsmatrizen wirken demnach wie folgt auf die Eigenvektoren:

$$\begin{aligned} L_3 &= \Psi_l^m = \hbar m \Psi_l^m & (22.23) \\ L_+ \Psi_l^m &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \Psi_l^{m+1} \\ L_- \Psi_l^m &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \Psi_l^{m-1} \\ \mathbf{L}^2 \Psi_l^m &= \hbar l(l+1) \Psi_l^m \end{aligned}$$

Dabei ist  $l$  ganz- oder halbzahlig,  $m$  durchläuft in ganzzahligen Schritten die Werte von  $-l$  bis  $+l$ , die Darstellung ist  $(2l+1)$ -dimensional.

wir haben bei der Konstruktion der Darstellung (22.23) angenommen, daß man mit  $L^+$  bzw.  $L^-$  von jedem Vektor der Basis  $\Psi_l^m$  zu jedem anderen Vektor der Basis gelangen kann. Solche Darstellungen nennt man irreduzibel, der Darstellungsraum, auf den die Matrizen wirken, zerfällt nicht in invariante Teilräume. Bis auf Ähnlichkeitstransformationen sind die in (22.23) angegebenen Matrizen die einzigen irreduziblen Darstellungen der Algebra (22.1). Durch Aneinanderfügen von irreduziblen Darstellungen kann man zu neuen, aber dann reduziblen Darstellungen gelangen.

Am Ende wollen wir nun noch die Darstellungsmatrizen für  $l = \frac{1}{2}$  aus (22.23) ablesen. Es gibt zwei linear unabhängige vektoren  $\Psi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}, \Psi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}$ . In dieser Basis finden wir für

$$\begin{aligned} L_3 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & (22.24) \\ L_+ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ L_- &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Lösen wir (22.2) nach  $L_x, L_y$  und  $L_z$  auf, so erhalten wir:

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (22.25)$$

Mit den Paulimatrizen:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (22.26)$$

Daß die in (22.24) definierten Matrizen die Relation (22.1) erfüllen, ist durch einfaches Nachrechnen leicht zu überprüfen.

Kasimiroperator.

$$[\mathbf{L}, \mathbf{L}^2] = 0$$

Darstellung.

$$\begin{aligned}
 L_3 \Psi_m &= m \hbar \Psi_m \\
 L_3 L_{\pm} \Psi_m &= (L_{\pm} L_3 \pm \hbar L_{\pm}) \Psi_m \\
 L_3 L_{\pm} \Psi_m &= (m \pm 1) \hbar L_{\pm} \Psi_m \\
 L_+ \Psi_m &= \beta_{m+1} \Psi_{m+1} \\
 L_- \Psi_m &= \alpha_m \Psi_{m-1}
 \end{aligned}
 \tag{22.27}$$

Höchstes  $m$ : Darstellung soll endlichdimensional sein.  $\overline{m} = l$

$$\begin{aligned}
 L_+ \Psi_l &= 0 \quad , \quad L_- \Psi_l = \alpha_l \Psi_{l-1} \\
 L_+ L_- \Psi_l &= \alpha_l \beta_l \Psi_l = [L_+, L_-] \Psi_l = 2 \hbar L_3 \Psi_l = 2 \hbar^2 l \Psi_l \\
 \alpha_l \beta_l &= 2 \hbar^2 l
 \end{aligned}$$

## 23 Bahndrehimpuls und Spin

Den Drehimpuls haben wir gemäß der klassischen Mechanik in (22.23) durch

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (23.1)$$

definiert. Dieser Drehimpuls ist mit der Bewegung des Teilchens verknüpft, der Erwartungswert verschwindet für Zustände mit verschwindendem Impuls. Wir nennen ihn daher Bahndrehimpuls. Wie in der klassischen Mechanik gilt auch hier für den Bahndrehimpuls

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{L} = 0 \quad (23.2)$$

Im Kapitel 19 haben wir Eigenfunktionen von  $L_z$  und  $\mathbf{L}^2$  konstruiert. Dabei konnten wir feststellen, daß die Eigenwerte von  $L_z$  ganzzahlige Vielfache von  $\hbar$  sind. Der Bahndrehimpuls führt demnach nur zu ganzzahligen Darstellungen der Lie Algebra (22.1).

Die Eigenfunktionen zu den Eigenwerten  $m = 0$  und  $l$  haben wir als die Legendrepolynome erkannt. Wir können nun die Methoden des vorangehenden Kapitels zu Hilfe nehmen und durch Anwenden des Differentialoperators  $L_+$  ( $L_-$ ) die Eigenfunktionen für  $m > 0$  ( $m < 0$ ) aus den Eigenfunktionen mit  $m = 0$  erzeugen.

Die Operatoren  $L_{\pm}$  berechnen sich aus (22.23) wie folgt.

$$L_{\pm} = \hbar e^{i\varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \quad (23.3)$$

wir zeigen nun, daß wir durch Anwenden von  $L_+$  auf die Kugelfunktionen  $Y_l^m$  aus (21.3) für  $m > 0$  die Kugelfunktionen  $Y_l^{m+1}$  erhalten. Dazu berechnen wir erst aus (21.7)  $m \geq 0$ :

$$\frac{d}{d\omega} P_l^m(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\omega^2}} P_l^{m+1} - m\omega \frac{1}{1-\omega^2} P_l \quad (23.4)$$

Benutzen wir dieses Ergebnis, um den Operator  $L_+$  (23.3) auf  $Y_l^m$  (21.3) anzuwenden, so finden wir

$$L_+ Y_l^m = (-1)^{m+1} (-\hbar) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{i(m+1)\varphi} P_l^{m+1} \quad (23.5)$$

Wir wissen aber auch, daß nach (22.8) und (22.22)

$$L_+ Y_l^m = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_l^{m+1} \quad (23.6)$$

gelten muß. Dies führt dann genau zu dem Ergebnis von (23.5) für  $Y_l^{m+1}$ . Wir verstehen nun auch den  $\epsilon$  Faktor in (22.3). Analog verläuft die Rechnung für  $L_-$  bei  $m \leq 0$ .

Die Kugelflächenfunktionen bilden demnach eine Basis im Hilbertraum  $L^2$ , in der der Bahndrehimpuls in eine Summe von Darstellungen mit ganzzahligen Werten von  $l$  zerfällt. Jeder solcher Wert von  $l$  kommt genau einmal vor.

Experimente, etwa Ablenkung des Elektrons in einem magnetischen Feld, zeigen, daß das Elektron zwei Polarisationsmöglichkeiten des Drehimpulses besitzt. Auch wenn das Elektron in Ruhe ist, kann es in einem magnetischen Feld zwei unterschiedliche Energieniveaus einnehmen. Dies kann man mit einem Eigendrehimpuls (Spin) des Elektrons erklären, der zum Wert  $l = \frac{1}{2}$  des Drehimpulses gehört.

Die Natur macht also auch von den halbzahligen Werten von  $l$  Gebrauch, die entsprechenden Darstellungen haben wir konstruiert.

Um zu sehen, wie wir einen halbzahligen Spin in unseren Formalismus einbauen können, gehen wir zurück zur Schrödingergleichung (3.10). Diese Gleichung ist invariant unter Drehungen, wenn sich die Wellenfunktion bei Drehungen wie eine skalare Funktion verhält:

$$\delta\Psi = \Psi'(x') - \Psi(x) = \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\varphi}\mathbf{L}\Psi \quad (23.7)$$

Vergleiche dazu (3.10).

Wir wissen aber aus der Elektrodynamik, daß es auch Vektorfelder gibt, das elektrische und das magnetische Feld. Diese Felder gehören dann zu einer dreidimensionalen Darstellung der Lie Algebra (22.1), somit zu  $l = 1$ . Das Vektorpotential transformiert sich demnach wie folgt:

$$\delta A^i = \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}_S)_k^i A^k + \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varphi} \cdot [\mathbf{r} \times \mathbf{p}])A^i \quad (23.8)$$

Die Matrizen  $\mathbf{L}_S$  sind die dreidimensionalen Darstellungsmatrizen ( $l = 1$ ) des vorigen Kapitels, während  $\mathbf{L}$  der Differentialoperator (20.1) ist.

Genauso kann es natürlich auch Felder geben, die sich nach halbzahligen Darstellungen transformieren. Nach der oben erwähnten Erfahrung mit dem Elektron wird das Feld, das das Elektron beschreibt, eine solche Transformationseigenschaft haben:

$$\delta\Psi_\alpha = i\frac{\boldsymbol{\varphi}}{2}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\Psi_\beta + \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\varphi} \cdot [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]\Psi_\alpha \quad (23.9)$$

Hier haben wir die zweidimensionale Darstellung gemäß (22.25) verwendet.

Felder, die sich nach halbzahligen Darstellungen transformieren, nennt man Spinorfelder, sie beschreiben Teilchen mit halbzahligem Spin, die man auch Fermionen nennt. Teilchen mit ganzzahligem Spin nennt man Bosonen.

Die Transformationsgesetze (23.8) und (23.9) kann man in Matrixschreibweise noch kompakter schreiben:

$$\delta A = \left\{ \left( \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}_S \right) \otimes 1 + 1 \otimes \left( \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L} \right) \right\} A \quad (23.10)$$

$$\delta\Psi = \left\{ \left( \frac{i}{2} \boldsymbol{\varphi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \otimes 1 + 1 \otimes \left( \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L} \right) \right\} \Psi$$

In dieser Schreibweise haben wir das Symbol  $\otimes$  für ein Tensorprodukt verwendet. Der Faktor vor dem Tensorprodukt soll als Matrix auf die Indizes des Feldes wirken, während der zweite Faktor als Differentialoperator wirkt.

## 24 Addition des Drehimpulses

In der klassischen Mechanik besteht der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens aus der Summe der einzelnen Drehimpulse.

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1] + [\mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2] = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \quad (24.1)$$

Dies übernehmen wir auch in der Quantenmechanik, wobei wir annehmen, daß die dynamischen Variablen verschiedener Teilchen miteinander vertauschen. Dann folgt aus (24.1):

$$[L_i, L_k] = i\hbar\epsilon_{ikj}L_j \quad (24.2)$$

Der Gesamtdrehimpuls erfüllt dieselben algebraischen Relationen wie die Drehimpulse der einzelnen Teilchen.

Der Gesamtdrehimpuls wirkt auf Wellenfunktionen, die von den Koordinaten des ersten Teilchens sowie des zweiten Teilchens abhängen. Wir gehen nun davon aus, daß das erste (zweite) Teilchen je von einer Wellenfunktion beschrieben wird, die zu bestimmten Quantenzahlen  $l_1, m_1$  ( $l_2, m_2$ ) gehört. Das Produkt dieser beiden Wellenfunktionen ist dann eine Zweiteilchenwellenfunktion, von der wir wissen, daß wir bei einer genauen Messung der Einzeldrehimpulse die Werte  $l_i, m_i$  erhalten.

$$\Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} = \Psi_{l_1}^{m_1} \Psi_{l_2}^{m_2} \quad (24.3)$$

Was erhalten wir bei einer Messung des Gesamtdrehimpulses? Dies ist genau die Frage, die wir uns in diesem Kapitel stellen.

Aus (24.1) folgt, daß  $L_z$  und  $L_{1z}$  mit  $L_{2z}$  vertauscht:

$$[L_z, L_{1z}] = [L_z, L_{2z}] = 0 \quad (24.4)$$

Die Wellenfunktion (24.3) wird also auch Eigenfunktion von  $L_z$  zum Eigenwert  $m = m_1 + m_2$  sein.

$$L_z \Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} = \hbar(m_1 + m_2) \Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} = \hbar m \Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} \quad (24.5)$$

Nun betrachten wir  $\mathbf{L}^2$ :

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 \quad (24.6)$$

Wir sehen, daß weder  $L_{1z}$  noch  $L_{2z}$  mit  $\mathbf{L}^2$  vertauscht, die Wellenfunktionen 24.3 werden demnach nicht Eigenfunktionen von  $\mathbf{L}^2$  sein.

Wir gehen nun daran, Eigenfunktionen von  $\mathbf{L}^2$  zu konstruieren. Sie werden Linearkombinationen der Funktionen (24.3) sein. Wir wissen auch aus der allgemeinen Analyse der Darstellungen, daß nur Eigenwerte der Form  $\hbar^2 l(l+1)$  auftreten können.

$$\Psi_l^m = \sum_{m_1, m_2} C_{l_1, l_2, m_1, m_2}^{l, m} \Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} \quad (24.7)$$

Die hier auftretenden Koeffizienten wollen wir berechnen. Sie heißen Clebsch-Gordon Koeffizienten und können unter diesem Namen in der Literatur gefunden werden. (Clebsch), (Gordon).

Aus (24.3) folgt bereits, daß  $C_{l_1, l_2; m_1, m_2}^{l, m}$  nur von Null verschieden ist, falls  $m = m_1 + m_2$  ist.

Aus (24.5) folgt aber auch, daß der größte Eigenwert von  $L_z$  gleich  $\hbar(l_1 + l_2)$  sein muß und daß es für diesen Eigenzustand von  $L_z$  genau nur eine Wellenfunktion gibt. Der größte Gesamtdrehimpuls  $l$  muß demnach auch genau  $l_1 + l_2$  sein, und er kann nicht entartet sein.

$$\Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2} = \Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2} \quad (24.8)$$

Nun wenden wir den Operator  $L_-$  auf diese Wellenfunktion an. Für die linke Seite erhalten wir nach (24.8) und

$$L_- \Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2} = \alpha_{l_1+l_2}^{l_1+l_2} \Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2-1} = \hbar \sqrt{2(l_1 + l_2)} \Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2-1} \quad (24.9)$$

Erinnern wir uns an die Definition (24.3) von  $\Psi_{l_1, l_2}^{m_1, m_2}$ , so finden wir für die rechte Seite:

$$L_- \Psi_{l_1}^{l_1} \Psi_{l_2}^{l_2} = \sqrt{2l_1} \Psi_{l_1}^{l_1-1} \Psi_{l_2}^{l_2} + \sqrt{2l_2} \Psi_{l_1}^{l_1} \Psi_{l_2}^{l_2-1} \quad (24.10)$$

Vergleichen wir beide Seiten, so ergibt dies:

$$\Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2-1} = \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}} \Psi_{l_1}^{l_1-1} \Psi_{l_2}^{l_2} + \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} \Psi_{l_1}^{l_1} \Psi_{l_2}^{l_2-1} \quad (24.11)$$

Wir haben die Clebsch-Gordon Koeffizienten

$$C_{l_1, l_2; l_1-1, l_2}^{l_1+l_2, l_1+l_2-1} \quad \text{und} \quad C_{l_1, l_2; l_1, l_2-1}^{l_1+l_2, l_1+l_2-1}$$

berechnet. Durch Fortsetzen des obigen Verfahrens, nämlich durch sukzessives Anwenden von  $L_-$ , können wir alle Koeffizienten

$$C_{l_1, l_2; m_1, m-m_1}^{l_1+l_2, m}$$

berechnen.

Dies ergibt genau  $2(l_1 + l_2)$ , linear unabhängige Wellenfunktionen, die orthogonal normiert sind.

Zur Quantenzahl  $m = l_1 + l_2 - 1$  gibt es nur eine zweite linear unabhängige Wellenfunktion, die aus den Wellenfunktionen  $\Psi_{l_1}^{l_1-1} \Psi_{l_2}^{l_2}$  und  $\Psi_{l_1}^{l_1} \Psi_{l_2}^{l_2-1}$  kombiniert werden kann. Wir wählen eine Wellenfunktion, die normiert und zu (24.11) orthogonal ist.

$$\Psi_{l_1+l_2-1}^{l_1+l_2-1} = \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} \Psi_{l_1}^{l_1-1} \Psi_{l_2}^{l_2} - \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}} \Psi_{l_1}^{l_1} \Psi_{l_2}^{l_2-1} \quad (24.12)$$

Man überzeugt sich leicht, daß

$$\langle \Psi_{l_1+l_2-1}^{l_1+l_2-1}, \Psi_{l_1+l_2-1}^{l_1+l_2-1} \rangle = 1$$

und

$$\langle \Psi_{l_1+l_2}^{l_1+l_2-1}, \Psi_{l_1+l_2-1}^{l_1+l_2-1} \rangle = 0$$

gilt. Die Wellenfunktion  $\Psi_{l_1+l_2-1}^{l_1+l_2-1}$  gehört nicht zu der Darstellung von  $\mathbf{L}$  mit der Quantenzahl  $l=l_1+l_2$ . Es ist dies eine Wellenfunktion, die den höchsten noch zur Verfügung stehenden Eigenwert  $\hbar(l_1+l_2-1)$  von  $L_2$  repräsentiert. Sie wird demnach, wie schon in der Notation (24.12), angedeutet, zur Quantenzahl  $l=l_1+l_2-1$  gehören. Auf die Wellenfunktion (24.12) können wir wiederum den Operator  $L_-$  anwenden und erhalten dann die  $2(l_1+l_2-1)+1$  linear unabhängigen Funktionen  $\Psi_{l_1+l_2-1}^m$  und die entsprechenden Clebsch-Gordon Koeffizienten  $C_{l_1, l_2; m_1, m-m_1}^{l_1+l_2-1, m}$ . Dieses Verfahren können wir fortsetzen, bis wir alle linear unabhängigen Funktionen (24.8) ausgeschöpft haben. Davon gibt es genau  $(2l_1+1)(2l_2+1)$ . Bilden wir die Summe:

$$\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \{2l+1\} = (2l_1+1)(2l_2+1).$$

Daraus schließen wir, daß die Quantenzahl  $l$  genau von  $|l_1-l_2|$  bis  $l_1+l_2$  läuft.

Die Darstellung des Gesamtdrehimpulses  $\mathbf{L}^2$ , die wir durch das Produkt der Darstellungen  $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$  erhielten, zerfällt demnach in die Darstellungen mit Gesamtdrehimpuls  $l=l_1+l_2$  bzw  $l=|l_1-l_2|$ .

Wir sind bei dieser Betrachtung von Wellenfunktionen  $\Psi_l^m$  ausgegangen. Alle weiteren Schritte waren jedoch rein algebraischer Natur und hätten genau zum gleichen Ergebnis geführt, wenn wir von endlichdimensionalen Darstellungen von  $\mathbf{L}_1$  und  $\mathbf{L}_2$  ausgegangen wären und statt der Wellenfunktionen die entsprechenden Vektoren im endlichdimensionalen Vektorraum betrachtet hätten. Dabei hätten wir auch halbzahligen Drehimpuls mit berücksichtigen können.

Wir sehen also, daß sich zwei Darstellungen des Drehimpulses mit den Quantenzahlen  $l_1$  und  $l_2$  als Produkt zu den Darstellungen des Drehimpulses mit den Quantenzahlen  $l=l_1+l_2$  bzw  $l=|l_1-l_2|$  kombinieren lassen, wobei  $l$  in ganzen Schritten von  $l_1+l_2$  bis  $|l_1-l_2|$  jeden Wert genau einmal einnimmt.

Ganzzahlige Darstellungen kombinieren immer zu ganzzahligen, zwei halbzahlige zu ganzzahligen, und eine halb- mit einer ganzzahligen Darstellung zu einer halbzahligen Darstellung.

Die hier angegebene Methode erlaubt es nicht, die Clebsch-Gordon Koeffizienten für generisches  $l_1$  und  $l_2$  anzugeben, bei vorgegebenen Werten von  $l_1$  und  $l_2$  können die Clebsch-Gordon Koeffizienten berechnet werden.

Die Clebsch-Gordon Koeffizienten  $l_1, l_2 = \frac{1}{2}$  sind:

$l$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$l + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j+m+\frac{1}{2}}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j-m+\frac{1}{2}}{2j+1}}$
$l - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j-m+\frac{1}{2}}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j+m+\frac{1}{2}}{2j+1}}$

(24.13)

## 25 Störungsrechnung

Es gibt nicht viele Hamiltonoperatoren, deren Eigenfunktionen und Eigenwerte wie beim freien Teilchen, dem harmonischen Oszillator oder dem Wasserstoffatom analytisch exakt berechenbar sind. Sie stellen auch physikalisch nur einen Idealfall, wie vollkommen kräftefrei, harmonische Kräfte (xxxxxbereich) oder reines Coulombpotential, dar. Für das relativistische physikalische System werden wir weitere Kräfte berücksichtigen müssen, die dann zu einem Hamiltonoperator führen, dessen Eigenfunktionen wir dann nicht mehr exakt angeben können. In vielen Fällen werden aber diese zusätzlichen Kräfte "klein" sein, sodaß wir mit einer näherungsweise Berechnung der Eigenwerte und Eigenfunktionen zufrieden sein können, wenn es um den Vergleich mit experimentellen Daten geht. Die Störungsrechnung liefert eine sehr allgemeine Methode, wie solche "störenden" Einflüsse näherungsweise berechnet werden können.

Wir gehen dabei von einem Hamiltonoperator aus, der in zwei Teile zerfällt, einen streng lösbaren Hamiltonoperator  $H_0$  und einen Operator, den wir  $H_I$  nennen:

$$H = H_0 + \lambda H_I \quad (25.1)$$

Wir führen einen zusätzlichen Parameter  $\lambda$  ein, für  $\lambda = 0$  haben wir das ungestörte Problem, das wir nach Voraussetzung exakt beherrschen, für einen speziellen Wert für  $\lambda$  haben wir das relativistische Problem. Wir nehmen nun an, daß  $\lambda$  so klein ist, daß eine Potenzreihenentwicklung in  $\lambda$  erfolgreich ist.

Relativistisches Problem:

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (25.2)$$

Idealisiertes Problem:

$$H_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (25.3)$$

Potenzreihenentwicklung:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda H_I \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \\ \Psi_n &= \Psi_n^0 + \lambda \Psi_n^1 + \lambda^2 \Psi_n^2 + \dots \end{aligned} \quad (25.4)$$

Diese Potenzreihenentwicklung setzen wir in (25.2) ein und vergleichen die Potenzen in  $\lambda$ :

$$(H_0 + \lambda H_I) (\Psi_n^0 + \lambda \Psi_n^1 + \lambda^2 \Psi_n^2 + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) (\Psi_n^0 + \lambda \Psi_n^1 + \dots) \quad (25.5)$$

Vergleich:

$$\begin{aligned} \lambda^0 : H_0 \Psi_n^0 &= E_n^0 \Psi_n^0 \\ \lambda^1 : H_0 \Psi_n^1 + H_I \Psi_n^0 &= E_n^0 \Psi_n^1 + E_n^1 \Psi_n^0 \\ \lambda^2 : H_0 \Psi_n^2 + H_I \Psi_n^1 &= E_n^0 \Psi_n^2 + E_n^1 \Psi_n^1 + E_n^2 \Psi_n^0 \end{aligned} \quad (25.6)$$

Nach Voraussetzung ist das Problem in 0-ter Ordnung in  $\lambda$  streng gelöst. Wir kennen alle Eigenfunktionen, und sie bilden ein orthogonales und vollständiges Funktionensystem.

$$(\Psi_n^0, \Psi_m^0) = \delta_{n,m} \quad (25.7)$$

und jede zulässige (quadratintegrierbare) Funktion läßt sich nach diesen Eigenfunktionen entwickeln.

$$\chi = \sum_n c_n \Psi_n^0, \quad c_n = (\Psi_n^0, \chi) \quad (25.8)$$

Wir studieren zunächst den einfachen Fall, daß die Eigenwerte  $E_n^0$  nicht entartet sind, zu jedem Eigenwert  $E_n^0$  gehört genau eine Eigenfunktion.

### 25.1 Nichtentartete Störungsrechnung

Wir betrachten in den Gleichungen (25.6) die Gleichung zur 1-ten Ordnung in  $\lambda$  und schreiben die Terme mit  $\Psi_n^1$  links, und die mit  $\Psi_n^0$  rechts in der Gleichung:

$$(H_0 - E_n^0) \Psi_n^1 = (E_n^1 - H_I) \Psi_n^0 \quad (25.9)$$

Wir multiplizieren nun diese Gleichung mit  $\Psi_n^{0*}$  und integrieren über das ganze Volumen:

$$(\Psi_n^0, (H_0 - E_n^0) \Psi_n^1) = (\Psi_n^0, (E_n^1 - H_I) \Psi_n^0) \quad (25.10)$$

Da  $H_0$  ein hermitescher Operator sein soll, können wir die linke Seite umformen:

$$(\Psi_n^0, (H_0 - E_n^0) \Psi_n^1) = ((H_0 - E_n^0) \Psi_n^0, \Psi_n^1) = 0 \quad (25.11)$$

da  $\Psi_n^0$  Eigenfunktion von  $H_0$  zum Eigenwert  $E_n^0$  ist. Da die Eigenfunktionen  $\Psi_n^0$  auch normiert sein sollen, erhalten wir nun aus der Gleichung (25.10):

$$E_n^1 = (\Psi_n^0, H_I \Psi_n^0) \quad (25.12)$$

Wir können die erste Korrektur  $E_n^1$  zu  $E_n$  berechnen, ohne die entsprechende Korrektur der Wellenfunktion zu kennen. In vielen Fällen werden wir mit (25.12) schon einen Betrag zum Energieeigenwert berechnet haben, der den Vergleich mit dem physikalischen System realistischer macht.

Wir berechnen nun die Korrektur der Wellenfunktion in 1-ter Ordnung in  $\lambda$ . Dazu invertieren wir formal den Differentialoperator  $H_0 - E_n^0$  und erhalten aus (25.2)

$$\Psi_n^1 = (H_0 - E_n^0)^{-1} (E_n^1 - H_I) \Psi_n^0 \quad (25.13)$$

Um diesen formalen Schritt sinnvoll zu machen, entwickeln wir  $\Psi_n^1$  nach den Eigenfunktionen  $\Psi_n^0$ , wie dies für jede Funktion möglich sein sollte:

$$\Psi_n^1 = \sum_l c_l \Psi_l^0, \quad c_l = (\Psi_l^0, \Psi_n^1) \quad (25.14)$$

Ist  $l \neq n$ , so können wir  $c_l$  aus (25.13) berechnen:

$$\begin{aligned}
c_l &= \left( \Psi_l^0, (H_0 - E_n^0)^{-1} (E_n^1 - H_I) \Psi_0^n \right) = \\
&= \frac{1}{E_l^0 - E_n^0} \left( \Psi_l^0, (E_n^1 - H_I) \Psi_0^n \right) = \\
&= \frac{1}{E_n^0 - E_l^0} \left( \Psi_l^0, H_I \Psi_0^n \right) \tag{25.15}
\end{aligned}$$

Hier haben wir wieder benutzt, daß  $H_0$  hermitisch ist, und daß die Eigenfunktionen  $\Psi_0^n$  und  $\Psi_0^l$  orthogonal sind für  $l \neq n$ .

Nun zeigen wir, daß mit  $\Psi_n^1$  auch die Funktion  $\chi_n^1 = \Psi_n^1 + \alpha \Psi_n^0$  mit beliebigem  $\alpha \in \mathbb{C}$  der Gleichung (25.9) genügt:

$$\begin{aligned}
\chi_n^1 &= \Psi_n^1 + \alpha \Psi_n^0 \\
(H_0 - E_n^0) \chi_n^1 &= (H_0 - E_n^0) \Psi_n^1 = (E_n^1 - H_I) \Psi_n^0 \tag{25.16}
\end{aligned}$$

Die Konstante  $c_n$  (25.14) ist durch (25.9) nicht bestimmt. Wir können sie demnach gleich Null setzen oder durch eine geeignete Normierungsbedingung festlegen. Fordern wir

$$(\Psi_n^0, \Psi_n) = 1 \tag{25.17}$$

als Normierungsbedingung, so ergibt sich aus(25.17)

$$(\Psi_n^0, \Psi_n^1) = c_n = 0 \tag{25.18}$$

Wir haben  $\Psi_n^1$  berechnet, wir müssen nun (25.15) in (25.14) einsetzen:

$$\Psi_n^1 = \sum_{l \neq n} \frac{(\Psi_l^0, H_I \Psi_n^0)}{E_n^0 - E_l^0} \Psi_l^0 \tag{25.19}$$

Die Größe  $(\Psi_l^0, H_I \Psi_n^0)$  nennt man ein Übergangsmatrixelement. Das entsprechende Integral mag beliebig kompliziert sein - auch hier wird man im allgemeinen zu Näherungsmethoden greifen müssen. Die Beiträge zu  $\Psi_n^1$  sind demnach mit dem Faktor  $E_n^0 - E_l^0$  gewichtet. Je größer der Energieunterschied, desto geringer der Beitrag vom Übergangsmatrixelement.

Wiederum schreiben wir die Beiträge von  $\Psi_n^2$  in der Gleichung (25.6) nach links:

$$(H_0 - E_n^0) \Psi_n^2 = (E_n^1 - H_I) \Psi_n^1 + E_n^2 \Psi_n^0 \tag{25.20}$$

Multiplizieren wir mit  $\Psi_n^0$  und integrieren, so empfiehlt sich

$$E_n^2 = (\Psi_n^0, (H_I - E_n^1) \Psi_n^1) = (\Psi_n^0, H_I \Psi_n^1) \tag{25.21}$$

Dies nun wegen der Hermitizität von  $H_0$  und der Normierungsbedingung (25.17). Wir haben demnach  $E_n^2$  berechnet:

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \sum_{l \neq n} \frac{(\Psi_n^0, H_I \Psi_l^0) (\Psi_l^0, H_I \Psi_n^0)}{E_n^0 - E_l^0} \\ &= \sum_{l \neq n} \frac{|(\Psi_n^0, H_I \Psi_l^0)|^2}{E_n^0 - E_l^0} \end{aligned} \quad (25.22)$$

Die Energiedifferenz  $E_n^0 - E_l^0$  bestimmt das Vorzeichen von  $E_n^2$ . Für den Grundzustand, den Zustand mit kleinstem Eigenwert  $E_n^0$ , ist die Korrektur  $E_n^2$  immer negativ.

Die Korrektur  $\Psi_n^2$  zur Eigenfunktion berechnen wir wieder durch formales Invertieren von  $(H_0 - E_n^0)$  in (25.20) und durch eine Entwicklung von  $\Psi_n^2$  nach den ungestörten Wellenfunktionen  $\Psi_n^0$ . Dies kann nun beliebig fortgesetzt werden, und wir können nur hoffen, daß die Potenzreihe rasch konvergiert.

Darüber kann aber nur bei ganz speziellem  $H_0$  und  $H_I$  eine Aussage gemacht werden.

Nun betrachten wir den Fall, daß die Eigenwerte  $E_n^0$  entartet sind. Dies wird in der Regel der Fall sein, wir müssen uns nur an das Wasserstoffatom erinnern.

## 25.2 Entartete Störungsrechnung

Wir nehmen nun an, daß der  $n$ -te Energieeigenwert von  $H_0$   $N$ -fach entartet ist,  $N$  wird natürlich von  $n$  abhängen. Diese Eigenfunktionen numerieren wir mit einer zusätzlichen Quantenzahl:

$$\begin{aligned} H_0 \Psi_n^{0,r} &= E_n^0 \Psi_n^{0,r}, \quad r = 1, \dots, N \\ (\Psi_{n'}^{(0)r'}, \Psi_n^{(0)r}) &= \delta_{nn'} \delta_{r'r'} \end{aligned} \quad (25.23)$$

Wir wollen nun den Eigenwert  $E_n^r$  und die Eigenfunktion  $\Psi_n^r$  von  $H$  berechnen, die sich durch die Störung aus  $E_n^0$  und  $\Psi_n^{0,r}$  ergibt.

In 1-ter Ordnung in  $\lambda$  wird aus (25.6):

$$(H_0 - E_n^0) \Psi_n^{1,r} = (E_n^{1,r} - H_I) \Psi_n^{0,r} \quad (25.24)$$

Wir verfahren wie zuvor, multiplizieren mit  $\Psi_n^{*0,r'}$  und integrieren. Wir erhalten:

$$E_n^{1,r} \delta_{r'r'} = (\Psi_n^{0,r'}, H_I \Psi_n^{0,r}) \quad (25.25)$$

Gehen wir von einer beliebigen Wahl der Eigenfunktionen aus, so wird die Gleichung (25.25) nicht nötig sein. Dies war aus physikalischer Sicht auch zu erwarten. Wenn  $H_I$  die Entartung aufhebt, dann wird das gestörte System sich in einem ganz bestimmten

Zustand befinden - die Natur braucht ja keine Störungsrechnung, um diesen Zustand zu finden. Schalten wir dann die Störung ab ( $\lambda \rightarrow 0$ ), dann werden wir auch bei einem ganz bestimmten Zustand ankommen. Diesen müssen wir nun auch wählen, um mit der Potenzreihenentwicklung in  $\lambda$  Erfolg zu haben.

Die Gleichung (25.25) können wir also zunächst als Bedingungsgleichung für die Wahl der Funktionen  $\Psi_n^{0r}$  auffassen. Wir zeigen zunächst, daß es solche Funktionen immer gibt. Wir beginnen mit einer beliebigen Basis der entarteten Eigenfunktionen  $\Psi_n^{0t}$  und berechnen:

$$\left( \Psi_n^{0t'}, H_I \Psi_n^{0t} \right) = W^{t,t'} \quad (25.26)$$

$W^{t,t'}$  ist eine  $N$  mal  $N$  Matrix, wir zeigen, daß sie hermitisch ist:

$$W^{t,t'*} = \left( \Psi_n^{0t'}, H_I \Psi_n^{0t} \right) = \left( \Psi_n^{0t}, H_I \Psi_n^{0t'} \right) = W^{t't} \quad (25.27)$$

weil  $H_I$  hermitisch ist.

Eine endlichdimensionale hermitische Matrix kann man immer diagonalisieren:

$$C^+ W C = D \quad (25.28)$$

wo  $D$  diagonal ist. In Komponenten:

$$C_{t'r'}^* W^{t't} C_{tr} = \delta_{r'r'} W^{(r)} \quad (25.29)$$

Dies entspricht aber genau der Basiswahl:

$$\Psi_{(n)}^{0,r} = \Psi_n^{0,t} C_{tr} \quad (25.30)$$

In dieser Basis ist somit die Gleichung (25.25) richtig, und wir haben  $E_n^{1r}$  berechnet:

$$E_n^{1,r} = W^r = \left( \Psi_n^{0r}, H_I \Psi_n^{0r} \right) \quad (25.31)$$

Bei der Berechnung von  $\Psi_n^{1r}$  nach  $\Psi_l^{0r}$  bemerken wir, daß die Beiträge von  $\Psi_n^{0r}$  an  $\Psi_n^{1r}$  durch die Gleichung (25.24) nicht bestimmt sind. Wir forcieren sie durch die Normierung:

$$\left( \Psi_n^{0r'}, \Psi_n^r \right) = \delta^{r'r'} \quad (25.32)$$

Gleichbedeutend in der 1-ten Ordnung Störungsrechnung mit:

$$\left( \Psi_n^{0r'}, \Psi_n^{1r} \right) = 0 \quad (25.33)$$

Die Beiträge mit  $l \neq n$  zur Entwicklung von  $\Psi_n^{1r}$  berechnen wir analog zum nichtentarteten Fall. Wir erhalten:

$$\Psi_n^{1r} = \sum_{l \neq n; r'} \frac{\left( \Psi_l^{0,r'}, H_I \Psi_n^{0,r} \right)}{E_n^0 - E_l^0} \Psi_l^{0,r'} \quad (25.34)$$

Analog verfahren wir in der nächsten Ordnung. Es ergibt sich keine neue Bedingung für die Wahl der Funktionen  $\Psi_n^{0r}$ , da immer nur Matrixelemente von  $H_I$  auftreten, die schon diagonalisiert sind.

## 26 Wechselwirkung des Schrödingerfeldes mit dem elektromagnetischen Feld - Eichfeldtheorie

Das elektromagnetische Feld wird durch das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  und das magnetische Feld  $\mathbf{H}$  beschrieben, diese lassen sich durch ein skalares und ein Vektorpotential ausdrücken:

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} \\ \mathbf{H} &= \nabla \times \mathbf{A}\end{aligned}\quad (26.1)$$

Der Zusammenhang zwischen den Feldstärken und dem Potential ist nicht eindeutig. Addiert man zu  $\mathbf{A}$  den Gradienten eines Skalarfeldes und zu  $\Phi$  dessen Zeitableitung, so ändert sich  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  nicht:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}' &= \mathbf{A} + \nabla\Lambda, \quad \mathbf{H}' = \mathbf{H} \\ \Phi' &= \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Lambda, \quad \mathbf{E}' = \mathbf{E}\end{aligned}\quad (26.2)$$

Dies nennt man eine Eichtransformation.

Wir gehen nun von der freien Schrödingergleichung aus:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\quad (26.3)$$

und stellen fest, daß diese Gleichung kovariant unter einer Phasentransformation ist.

$$\Psi'(\mathbf{x}, t) = e^{i\lambda}\Psi(\mathbf{x}, t)\quad (26.4)$$

Eine Eichfeldtheorie wird nun so konstruiert, daß diese Kovarianz auch für orts- und zeitabhängige Phasen gilt.

$$\Psi'(\mathbf{x}, t) = e^{ig\Lambda(\mathbf{x}, t)}\Psi(\mathbf{x}, t)\quad (26.5)$$

Die Konstante  $g$  ist zunächst frei wählbar. Die Gleichung (26.3) besitzt natürlich keine solche Kovarianzeigenschaft, sie muß abgeändert werden, um dem Prinzip der Eichinvarianz zu genügen. Dies geschieht mit Hilfe von kovarianten Ableitungen. Wir berechnen zunächst  $\nabla\Psi'$ :

$$\nabla\Psi' = ig\nabla\Lambda e^{ig\Lambda} + e^{ig\Lambda}\nabla\Psi\quad (26.6)$$

und erinnern uns daran, daß ein Term  $\nabla\Lambda$  auch im Transformationsverhalten (26.2) des Vektorpotentials auftritt. Addieren wir einen Term  $\mathbf{A}\Psi$  zur Ableitung in (26.6), so erhalten wir eine kovariante Ableitung.

$$(\nabla - ig\mathbf{A}')\Psi' = e^{ig\Lambda}(\nabla - ig\mathbf{A})\Psi\quad (26.7)$$

Wir haben also eine kovariante Ableitung konstruiert:

$$\mathcal{D} = \nabla - ig\mathbf{A} \quad (26.8)$$

In gleicher Weise erhalten wir eine kovariante Zeitableitung:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_t \Psi &= \left( \frac{\partial}{\partial t} + igc\Phi \right) \Psi \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} + i\frac{g}{c}\Phi' \right) \Psi' &= e^{ig\Lambda} \left( \frac{\partial}{\partial t} + igc\Phi \right) \Psi \end{aligned} \quad (26.9)$$

Ersetzen wir in der freien Schrödingergleichung die Ableitungen durch kovariante Ableitungen, so erhalten wir eine eichkovariante Gleichung.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{D}\mathcal{D}\Psi = i\hbar \mathcal{D}_t \Psi \quad (26.10)$$

Wir behaupten, daß die Gleichung (26.10) die Wechselwirkung des Schrödingerfeldes  $\Psi$  und der elektromagnetischen Felder richtig beschreibt.

Um dies zu zeigen, gehen wir zunächst von der Wechselwirkung mit einem elektrostatischen Feld aus:

$$\mathbf{A} = 0, \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi \quad (26.11)$$

Dann wird die Gleichung (26.10) zu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + gc\hbar\Phi\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (26.12)$$

Das Coulombpotential einer Ladung  $e_p$  ist durch

$$\Phi = \frac{e_p}{r} \quad (26.13)$$

gegeben. Vergleichen wir dies mit der potentiellen Energie in (1.7), so erhalten wir Übereinstimmung, wenn wir  $g$  wie folgt wählen:

$$g = \frac{e_e}{\hbar c} \quad (26.14)$$

wobei  $e_e$  die Ladung des Elektrons ist ( $e_e = -e_p = -e_0$ )

Die Konstante  $g$ , die wir in (26.5) zunächst willkürlich eingeführt haben, hängt somit von der Ladung  $e$  des Teilchens ab, das durch die Wellenfunktion beschrieben wird. Dies gilt dann auch für das Transformationsverhalten der Wellenfunktion:

$$\Psi'(x, t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Lambda(\mathbf{x}, t)} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (26.15)$$

Für neutrale Teilchen ist demnach  $e = 0$ , die Wellenfunktion transformiert sich nicht.

Nun ist auch die Stärke der Ankopplung des magnetischen Feldes an die Wellenfunktion bestimmt.

$$\mathcal{D}\Psi = \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \Psi \quad (26.16)$$

Multiplizieren wir dies mit  $-i\hbar$  und bezeichnen  $-i\hbar\mathcal{D}$  als verallgemeinerten Impuls, so erhalten wir die bekannte Bezeichnung

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (26.17)$$

Die Schrödingergleichung (26.10), die die Ankopplung eines elektromagnetischen Feldes an ein Teilchen mit Ladung  $e$  beschreibt, erhält die Form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + i \frac{e\hbar}{mc} \mathbf{A} \nabla \Psi + \frac{ie\hbar}{2mc} (\nabla \mathbf{A}) \Psi + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A} \mathbf{A} \Psi + e\Phi \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (26.18)$$

In der Coulombrechnung gilt  $\nabla \mathbf{A} = 0$ , damit verschwindet dieser Term in der Gleichung (26.18).

Um die Ankopplung des magnetischen Feldes an das Schrödingerfeld zu verdeutlichen, betrachten wir die Gleichung (26.18) für ein konstantes magnetisches Feld  $\mathbf{H}$ . Das dazugehörige Vektorpotential in der Coulombrechnung ist:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{x} \quad (26.19)$$

Davon überzeugt man sich leicht durch Einsetzen in (26.1).

Damit erhalten wir aus (26.18) den Wechselwirkungsterm:

$$i \frac{e\hbar}{mc} \mathbf{A} \nabla \Psi = \frac{ie\hbar}{2mc} (\mathbf{H} \times \mathbf{x}) \nabla \Psi = -i \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{H} (\mathbf{x} \times \nabla) \Psi = -\frac{e}{2mc} \mathbf{H} \cdot \mathbf{L} \Psi \quad (26.20)$$

Das magnetische Feld koppelt demnach an den Bahndrehimpuls, die Kopplungsdichte ist durch die Ladung, und diese durch die Masse des Teilchens bestimmt. Die Größe  $\frac{|e|\hbar}{2mc}$  bezeichnet man als Bohrsches Magneton (Niels Bohr, Dänemark 1885-1962).

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \frac{erg}{G} \quad (26.21)$$

Die bewegte Ladung des Elektrons führt demnach zu einem magnetischen Moment

$$\mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \quad (26.22)$$

und entsprechend zu einem Beitrag in der Energie:

$$E_M = \mathbf{H} \cdot \mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{H} \cdot \mathbf{L} \quad (26.23)$$

Der Beitrag zur Wechselwirkung  $\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A} \mathbf{A}$  in (26.18) kann für schwache magnetische Felder zunächst vernachlässigt werden. Demnach liefert der Wechselwirkungshamiltonoperator (26.23) für ein  $H$ -Atom in einem schwachen konstanten magnetischen Feld den wesentlichen Beitrag zur Energieaufspaltung. Dies ist in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, die demnach unser Eichprinzip bestätigen.