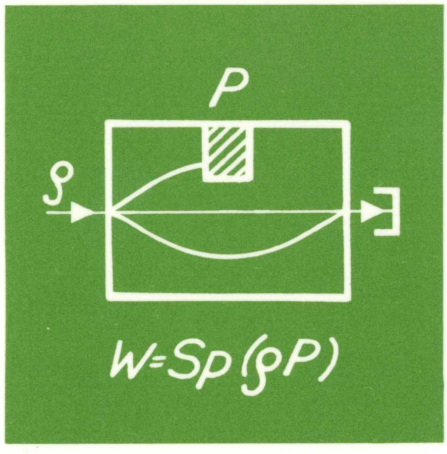
Dietrich Grau

Übungsaufgaben zur Quantentheorie



Quanten-theoretische Grundlagen

Version 5.22 [2012-05-16]
Jeweils neueste Version: siehe http://www.dietrich-grau.at/

Erstellt mit pdfLaTeX, KOMA-Script, AutoCAD, microtype, graphicx, amsmath und hyperref

Dr. Dietrich Grau
Assistenzprofessor und Universitätslektor i. R.
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Version 1.0 dieser Aufgabensammlung erschien 1975 als Buch im Verlag Karl Thiemig München (ISBN 3-521-06095-0), zwei weitere, überarbeitete und erweiterte Auflagen, die Versionen 2.0 und 3.0, erschienen 1988 und 1993 im Carl Hanser Verlag München (ISBN 3-446-15225-3 und ISBN 3-446-16566-5).

© 2005 Dietrich Grau

Die PDF-Datei dieses Werkes darf in keiner Weise verändert werden. Sie darf ausgedruckt, weitergegeben, in Dateiarchiven gespeichert und auf Webseiten gestellt werden. Das Werk darf in unveränderter Form sowohl elektronisch als auch auf Papier weitergegeben werden, für die Weitergabe darf aber kein Entgelt verlangt werden, das über die reinen Selbstkosten — wie Druck- oder Kopierkosten — hinausgeht.

Die Aufgabensammlung will den Studierenden helfen, selbständig Aufgaben zu den quantentheoretischen Grundlagen zu lösen und sich diese Grundlagen damit wirklich anzueignen.

Im Vordergrund steht deshalb die systematische Anwendung, Illustration und Vertiefung des Stoffes einer Standardvorlesung über nichtrelativistische Quantentheorie. Neben Aufgaben mit detailliert ausgearbeiteten Lösungen enthält die Sammlung vertiefende Diskussionen und weiterführende Erörterungen sowie eine Formelsammlung und „Testaufgaben“ zum vollständig selbständigen Bearbeiten, welche die Möglichkeit geben sollen, zu überprüfen, ob man wirklich gelernt hat, auf eigenen Beinen zu stehen.

Durch die ausführliche Formulierung der Angaben und zusätzliche Anleitungen bei schwierigen Problemstellungen können die Aufgaben auch sehr gut bei Prüfungen eingesetzt werden.

Verba docent,
exempla trahunt.

Vorwort

Es ist ein offenes Geheimnis, dass die Mehrzahl der Hörer einer Vorlesung über Quantentheorie nur einen geringen Bruchteil des vorgetragenen Stoffes versteht und assimiliert. Dies ist nur teilweise auf mangelndes Interesse oder mangelnde Begabung der Studierenden zurückzuführen. Der berechtigte Wunsch der Lehrenden trotz geringen Stundenzahlen zu aktuellen Anwendungsgebieten vorzudringen, gibt den Lernenden oft nicht ausreichend Zeit und Möglichkeit, mit dem mathematischen Formalismus und den grundlegenden Konzepten und Methoden vertraut zu werden. Wird man als Normalsterblicher zu früh mit Anwendungsbeispielen aus Atom-, Kern- oder Festkörperphysik konfrontiert, so wird man im Allgemeinen weder die angewendete Methode selbst noch ihre spezielle Beziehung zum betreffenden physikalischen Problem voll erfassen können. Im Dickicht der Quantenzahlen und Variablen, im Kleinkrieg mit Matrixelementen und Säkulargleichungen ist es für den künftigen Jünger der Quantentheorie nicht leicht, zum Kern eines praktisch bedeutungsvollen Problems vorzudringen.

Auch die existierenden Beispielsammlungen sind größtenteils auf Anwendungen hin ausgerichtet. Sie bieten Material für die Gestaltung von Übungen und leisten dem Studierenden als Lektüre zu den praktischen Anwendungen wertvolle Dienste, für eine vollkommen selbständige Bearbeitung durch den Studierenden sind die Angaben meist zu spartanisch formuliert, und die Aufgaben meist zu schwierig. Eine Ausnahme bildet zum Teil die umfangreiche englischsprachige Sammlung von F. Constantinescu und E. Magyari [15], die in ihrer Fülle (320 Beispiele) für jeden etwas bietet. An einem solchen Werk kann man natürlich nicht einfach vorbeisehen, auch dann nicht, wenn man sich ein anderes Ziel gesetzt hat, was sich u. a. in der Formulierung der Angaben, den gewählten Lösungswegen, der Ausführlichkeit der Ausarbeitungen und den Kommentaren zu den Ergebnissen manifestieren wird.

Die vorliegende Aufgabensammlung soll den Studierenden helfen, selbständig Aufgaben zu den quantentheoretischen Grundlagen zu lösen und sich diese Grundlagen damit wirklich anzueignen. Grundsätzlich habe ich nur solche Aufgaben aufgenommen, die nach meiner Erfahrung der begabte und mit dem Stoff einer Standardvorlesung aus Quantentheorie vertraute Student selbständig lösen kann. Durch entsprechende Formulierung der Angaben (Unterteilung in einzelne Punkte, versteckte Hinweise innerhalb der Angaben und Anleitungen im Anschluss an die Angaben) konnten auch einige verhältnismäßig schwierige Probleme einbezogen werden.

Zur Erarbeitung der grundlegenden Begriffe und Methoden habe ich stets die einfachsten Systeme betrachtet (spinloses Teilchen in einer Raumdimension, Oszillator, Spin-$\frac{1}{2}$- und Spin-1-Systeme). Die systematische Anwendung, Illustration und Vertiefung des in der Vorlesung gebotenen Grundwissens anhand mathematisch einfacher, leicht überschaubarer Probleme scheint mir aus didaktischen Gründen unumgänglich zu sein, auch wenn derartige Aufgaben meist keine unmittelbare praktische Bedeutung besitzen und deshalb von jenen, die sie nicht zusammenbringen, gerne als „unphysikalisch“ bezeichnet werden. – Wer von einer tiefen Frustration befallen wird, wenn ihm zugemutet wird, eine Übungsaufgabe über ein Kastenpotential zu rechnen, ohne gleich mit experimentellen Werten für Quantendots vergleichen zu können, der sei auf die Aufgabensammlung von J.-L. Basdevant und J. Dalibard [25] verwiesen. Dort

lautet das erste Kapitel nicht „Vektoren und lineare Operatoren. Matrixdarstellungen“, sondern „Colored Centers in Ionic Crystals“...

Die Aufgaben sind nach dem im Vordergrund stehenden Übungszweck thematisch einem der neun Kapitel zugeordnet, es liegt aber in der Natur der Sache, dass viele Aufgaben inhaltlich ebenso gut in andere Kapitel passen würden. Entsprechende Hinweise zu Beginn der einzelnen Kapitel sollen dem Leser helfen, weitere einschlägige Aufgaben zu finden. – Die Beschränkung auf die nichtrelativistische Quantentheorie im Rahmen dieser Aufgabensammlung ergibt sich aus ihrer Zielsetzung: In der relativistischen Quantentheorie kommt der Anfänger ohnehin nicht über das Problem des kräftefreien Teilchens hinaus. – In das schöne, aber rauhe Leben der praktischen Anwendungen tritt der Leser erst in den letzten beiden Kapiteln, insbesondere im Kapitel 9, das Anwendungsbeispiele aus der Atomphysik behandelt. Was zuerst fein säuberlich getrennt wurde („Bahnbewegung“, Spin, Antisymmetrisierung, Näherungsmethoden) tritt hier zu einem gemeinsamen Konzert auf. Wer diese Aufgaben selbständig gelöst hat und mehr über die vielfältigen Anwendungen der Quantentheorie erfahren möchte, den verweise ich auf das Werk von S. Flügge [16], das wohl längere Zeit in seiner Art konkurrenzlos bleiben wird.

Was die mathematische Strenge betrifft, wäre es kaum sinnvoll, wenn der Autor einer Aufgabensammlung bei der Formulierung der Angaben und der Präsentation der Lösungen einen wesentlich höheren Ehrgeiz entwickeln würde als dies die Autoren der Standardlehrbücher und die Vortragenden in Vorlesungen tun. Eleganz, äußere Klarheit und Durchschlagskraft des diracschen Formalismus sind leider mit der Einführung mathematischer Fiktionen erkauft, etwa dass jeder lineare Operator einen (eindeutig bestimmten, für mehr als den Nullvektor definierten) Adjungierten besitzt, und dass alle Operatoren den ganzen Hilbertraum zum Definitionsbereich haben. Der diracsche Formalismus kann dadurch zum „Schiffbruch“ führen. Dazu kommt die Einführung so genannter „nicht normierbarer Vektoren“ und „kontinuierlicher Basissysteme“, Variablen werden als „kontinuierliche Indizes“, Integrationen als „kontinuierliche Summationen“ interpretiert usf. Es entsteht eine formale „Maschinerie“, deren Bedeutung gerade für den Anfänger oft undurchsichtig ist, und deren Problematik er nicht erkennen kann. Dieser Erfahrung aus meiner langjährigen Lehrtätigkeit trage ich – vor allem im mathematischen Einführungskapitel – auf folgende Weise Rechnung: Da der Studierende zunächst *jene* Formalismen üben muss, die er in „seiner“ Vorlesung kennen gelernt hat, formuliere ich Angaben und Lösungen im Allgemeinen unter Verwendung der üblichen Schreib- und Redeweisen. Im Anschluss an die rein formale diracsche Behandlung führe ich aber die Schreibweise der Mathematik vor und diskutiere anhand dieser Schreibweise, in welcher Hinsicht ein höheres Maß an mathematischer Strenge angestrebt werden müsste, und wodurch es zu Fehlern kommen kann. Der kritische Leser soll dadurch angeregt werden, einmal ein Buch zur Hand zu nehmen, das eine mathematisch strenge Darstellung des Gegenstandes bietet. In diesem Zusammenhang empfehle ich die Bücher von E. Prugovečki [12] und W. Thirring [13].

Ein weiteres Problem stellt die Tatsache dar, dass die Standardlehrbücher und die üblichen Kursvorlesungen nicht oder nur in geringem Maße auf Fragen der Interpretation der Quantentheorie eingehen. Ausnahmen stellen die Lehrbücher von L. E. Ballentine [4] und G. Ludwig [14] dar, die jeder an einem tieferen Verständnis der Quantentheorie Interessierte einmal zur Hand nehmen sollte. – Eine Aufgabensammlung zur Quantentheorie könnte einen bedeutend größeren Beitrag zum Verständnis liefern, wenn beim durchschnittlichen Leser einschlägige Kenntnisse vorhanden wären. Unter den gegebenen Umständen ist es aber nur in

eingeschränktem Maße möglich, nicht ausreichend präzisierte Kurzsprechweisen wie „Zustand eines Systems“, „zeitliche Änderung bzw. Reduktion des Zustandes eines Systems“, „Messung einer Observablen“, „Unschärfe einer Observablen“, „gleichzeitige Messung verträglicher Observablen“ etc. zu vermeiden oder ausführlicher zu diskutieren. In der Regel behalte ich deshalb die eingebürgerten Kurzsprechweisen bei. In einigen Aufgaben, die sich mit Gedankenexperimenten mit Anordnungen von Stern-Gerlach-Apparaten befassen, versuche ich aber, dieses Korsett zu sprengen. In diesen Aufgaben unterscheide ich systematisch zwischen System und Gesamtheit von Systemen, zwischen Präparation, Umpräparation und Messung usf. Ein eigener Anhang dient zur Einführung in diese Aufgaben.

Die Formelanhänge am Ende der Sammlung gewährleisten ein gewisses Maß an Unabhängigkeit gegenüber der nicht gerade billigen Welt der Quantentheorie-Lehrbücher.

Dem Spektrum der Begabung, des Interesses und der Vorbildung der Studierenden versuche ich nicht nur mit Aufgaben von verschiedenem Schwierigkeitsgrad, sondern auch durch eine Strategie der abgestuften Anforderung gerecht zu werden: Aufgaben mit „Stern“ sollen den Tüchtigen und Ehrgeizigen herausfordern; Lösungshinweise im Anschluss an die Angabe laden zu einem neuen Anlauf unter leichteren Startbedingungen ein und machen die Aufgaben großteils auch für Prüfungszwecke verwendbar; eine bis ins Detail ausgeführte Ausarbeitung der Lösung soll dem Gescheiterten weiteren Anstoß und Kontrollmöglichkeit auf allen Stufen des Lösungsweges geben; weiterführende Diskussionen und Bemerkungen im Anschluss an viele Lösungen bieten vertiefende Ergänzungen an und zeigen Zusammenhänge mit anderen Aufgaben auf. Durch diese Ergänzungen konnte auch relativ viel an „echter Physik“ integriert und der Aufgabensammlung ein gewisser Lehrbuchcharakter gegeben werden. – Der Leser sollte von jeder der gebotenen Hilfestellungen erst bei einem Scheitern nach ernsthaftem Bemühen Gebrauch machen. Detailliert ausgearbeitete Lösungen stellen zweifellos eine Verlockung zu einem bequemen Durchblättern und „Überfliegen“ dar. Als Lernmethode verspricht diese Vorgangsweise keinen Gewinn von bleibendem Wert.

Im Text habe ich nur an solchen Stellen Literatur zitiert, an denen entweder mathematische Hilfsmittel verwendet werden, die nicht zum allgemeinen Rüstzeug gehören, bzw. an denen Fragestellungen aus der Quantentheorie erörtert werden, die nicht in einem beliebigen einschlägigen Standardlehrbuch nachgeschlagen werden können. Zeitschriftenartikel habe ich nur ausnahmsweise zitiert, nämlich dann, wenn das betreffende Problem in keinem der mir bekannten Bücher über Quantentheorie oder Atomphysik behandelt ist.

Im Literaturverzeichnis habe ich einige Lehrbücher und Monographien aus den folgenden Gebieten zusammengestellt: Quantentheorie (allgemeine Lehrbücher und Aufgabensammlungen), mathematische Grundlagen der Quantentheorie, axiomatische Darstellung und Interpretation der Quantentheorie, Atomphysik. Vollständigkeit habe ich dabei – außer bei den Aufgabensammlungen – nicht angestrebt, und wenn ein Werk dort nicht genannt ist, so bedeutet dies keinesfalls, dass ich es nicht schätze. Die im Literaturverzeichnis angeführten Bücher werden im Text durch Nummern in eckigen Klammern zitiert.

Verweise auf Aufgaben, Abbildungen, Tabellen oder Formeln beginnen jeweils mit der Kapitelnummer bzw. mit der Bezeichnung des betreffenden Anhanges; Beispiele: Gl. (8.3-15) steht für Gleichung 15 von Aufgabe 3 aus Kapitel 8 und Gl. (A.6-23) weist auf Gleichung 23 des Anhanges A.6 hin. Die wichtigsten im Text verwendeten Bezeichnungen, Symbole und Abkürzungen sind am Ende der Sammlung angeführt. Hier sei nur auf zwei Dinge hingewiesen:

Operatoren werden mit Großbuchstaben bezeichnet (Ausnahme: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren), bei wellenmechanischen Operatoren wird zwischen Orts- und Impulsdarstellung durch ein zusätzliches hochgestelltes Symbol unterschieden, und Matrizen werden durch ein „Dach“ gekennzeichnet, wobei die Darstellung nur dann explizit dazugeschrieben wird, wenn dies zur Unterscheidung nötig ist. Zustandsfunktionen bzw. Zustandsvektoren werden mit ψ und $|\,\psi\,\rangle$ (bei Spins mit χ und $|\,\chi\,\rangle$), Eigenfunktionen bzw. Eigenvektoren zu Messgrößen werden mit u_n bzw. $|\,u_n\,\rangle \equiv |\,n\,\rangle$ etc. bezeichnet.

Was das Maßsystem betrifft, so wurde das gaußsche cgs-System beibehalten, da nach wie vor fast alle Quantentheorie-Lehrbücher dieses Maßsystem zugrunde legen. Der Studierende soll bei der Behandlung von Übungsaufgaben „seine“ Lehrbuch- oder Vorlesungsformeln ohne Modifikationen benützen können. Bei der Diskussion von konkreten Ergebnissen anhand von Zahlenbeispielen gehe ich aber immer dann zu SI-Einheiten über, wenn mir – wie wohl auch dem Leser – die gaußschen cgs-Einheiten nichts „sagen“. Wer weiß schon, ob $3{,}4 \cdot 10^{-3}$ erg$^{\frac{1}{2}}$ cm$^{-\frac{1}{2}}$ eine hohe oder niedrige elektrische Spannung ist? Hört man, dass dies 1 Volt entspricht, so weiß man Bescheid. Die für derartige Umrechnungen benötigten Tabellen stehen dem Leser in einem Anhang am Ende der Sammlung zur Verfügung.

Eine erste Version der Aufgabensammlung ist 1975 als Taschenbuch im Verlag Karl Thiemig München erschienen. Zwei weitere, überarbeitete und erweiterte Auflagen dieses Buches erschienen 1988 und 1993 im Carl Hanser Verlag München. Als mir der Carl Hanser Verlag 2005 die Rechte zurückgab, weil er keine weitere Auflage herausbringen wollte, entschloss ich mich, eine neuerlich überarbeitete und erweiterte Version (Version 4 genannt) für Dozenten und Studierende kostenlos als PDF-Datei ins Internet zu stellen.

Für die Version 4.00 habe ich alle mir bekannt gewordenen Fehler korrigiert und zahllose kleine inhaltliche Verbesserungen vorgenommen. Bei einer Aufgabe wurde ein zusätzlicher Punkt hinzugenommen, eine Aufgabe habe ich durch eine illustrativere ersetzt und darüber hinaus habe ich vier neue Aufgaben aufgenommen, von denen ich denke, dass man aus ihnen viel lernen kann. Außerdem habe ich das ursprünglich in Plain-TEX geschriebene Manuskript unter Verwendung des Layouts der KOMA-Script-Buchklasse vollkommen neu in $\mathcal{AMS}$-LATEX geschrieben, um das typographische Erscheinungsbild zu verbessern und Flexibilität für die Zukunft zu gewinnen. Im Zuge dieser Änderung habe ich die Kapitelnummerierung von römischen auf arabische Ziffern umgestellt, weil eine römische Kapitelnummerierung in LATEX zu unvorteilhaft langen Gleichungsnummern wie (VIII.11-39) führen würde. Mithilfe des hyperref-Pakets wurden in der PDF-Datei Lesezeichen und „anklickbare“ Hyperlinks erzeugt.

Die Beschreibung künftiger inhaltlicher Änderungen (Versionen 4.01 etc.) findet man auf der Homepage unter dem Link „Änderungen“.

Bei den ersten beiden Auflagen hat mich Herr R. Höglinger tatkräftig unterstützt. Sein kritischer Rat sowie seine konstruktiven Vorschläge fachlicher und didaktischer Natur waren für mich sehr wertvoll. Mein unentbehrlicher TEX- und AutoCAD-Berater war Herr Ch. Foidl. Ihnen sowie meiner Frau Renate, die den Angabenteil gesetzt hat, bin ich zu großem Dank verpflichtet. Im Voraus möchte ich allen jenen Lesern danken, welche sich der Mühe unterziehen, mir Verbesserungsvorschläge und Kommentare zu senden.

Wien, November 2005

Dietrich Grau
d.grau@kabsi.at
http://www.dietrich-grau.at/

Inhaltsverzeichnis

I. Vektoren und Operatoren im Hilbertraum 1

1. Vektoren und lineare Operatoren. Matrixdarstellungen 3
Angaben . . . 3
Lösungen . . . 12
Testaufgaben . . . 61

II. Quantentheorie 67

2. Energieeigenzustände. Parität. Translationen 69
Angaben . . . 69
Lösungen . . . 79
Testaufgaben . . . 136

3. Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte. Darstellungen 141
Angaben . . . 141
Lösungen . . . 151
Testaufgaben . . . 194

4. Bewegungsgleichungen. Bilder 199
Angaben . . . 199
Lösungen . . . 204
Testaufgaben . . . 225

5. Störungstheorie. Variationsverfahren 229
Angaben . . . 229
Lösungen . . . 236
Testaufgaben . . . 275

6. Drehimpuls. Drehungen 281
Angaben . . . 281
Lösungen . . . 290
Testaufgaben . . . 332

7. Permutationen. Identische Teilchen **339**
Angaben . . . 339
Lösungen . . . 345
Testaufgaben . . . 369

8. Streuung **373**
Angaben . . . 373
Lösungen . . . 379
Testaufgaben . . . 403

9. Anwendungsbeispiele aus der Atomphysik **407**
Angaben . . . 407
Lösungen . . . 414
Testaufgaben . . . 475

III. Anhänge und Verzeichnisse **481**

A. Formelsammlung **483**
A.1. Diracsche Deltafunktion . . . 483
A.2. Vollständige Orthonormalsysteme . . . 484
A.3. Diracformalismus . . . 491
A.3.1. Mathematischer Hintergrund . . . 491
A.3.2. Schreibweise in der Mathematik und Diracschreibweise . . . 492
A.3.3. Diracschreibweise: Formale Rechenregeln . . . 493
A.4. Lösungen quantenmechanischer Eigenwertprobleme . . . 495
A.5. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . 499
A.6. Quantenmechanische Störungstheorie . . . 500
A.7. Drehimpuls. Drehungen . . . 503
A.8. Permutationen. Identische Teilchen . . . 511
A.9. Streuung . . . 513
A.10. Statistische Aussagen der Quantentheorie . . . 517
A.11. Definition der Eulerwinkel . . . 520

B. Physikalische Konstanten **523**

Literaturverzeichnis **527**

Sachverzeichnis **531**

Abkürzungen. Bezeichnungen. Symbole **541**

Teil I

Vektoren und Operatoren im Hilbertraum

1. Vektoren und lineare Operatoren. Matrixdarstellungen

Angaben

1.1 Was ergibt sich für das innere Produkt $\langle u \,|\, v \rangle$ zweier proportionaler („paralleler“) Einheitsvektoren $|\, u \rangle$, $|\, v \rangle$ eines komplexen Hilbertraumes? Was ergibt sich im Falle eines reellen Hilbertraumes?

1.2 In einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum sei ein Einheitsvektor $|\, u \rangle$ gegeben. Wie viele zu $|\, u \rangle$ orthogonale („senkrechte“) Einheitsvektoren $|\, v \rangle$ gibt es in diesem Raum? Was ergibt sich im Falle eines reellen Hilbertraumes?

1.3 Durch $\{|\, a_1 \rangle, |\, a_2 \rangle\}$ sei in einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum eine orthonormierte Basis gegeben (Basis der $\{a\}$-Darstellung). Zwei Vektoren $|\, b_1 \rangle$, $|\, b_2 \rangle$ seien durch

$$|\, b_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\, a_1 \rangle + i \,|\, a_2 \rangle) \,, \qquad |\, b_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\, a_1 \rangle - i \,|\, a_2 \rangle)$$

gegeben. Zeige, dass die Vektoren $|\, b_1 \rangle$, $|\, b_2 \rangle$ ebenfalls eine orthonormierte Basis bilden (Basis der $\{b\}$-Darstellung). Welche Matrizen sind den Ketvektoren $|\, a_1 \rangle$, $|\, a_2 \rangle$, $|\, b_1 \rangle$, $|\, b_2 \rangle$ in der $\{a\}$-Darstellung zugeordnet? Welche Matrizen sind den Bravektoren $\langle b_1 \,|$, $\langle b_2 \,|$ in der $\{a\}$-Darstellung zugeordnet, und wie schreiben sich die inneren Produkte $\langle b_1 \,|\, b_1 \rangle$, $\langle b_1 \,|\, b_2 \rangle$ und $\langle b_2 \,|\, b_2 \rangle$ als Matrizenprodukte? Welche Matrizen sind den Ketvektoren $|\, a_1 \rangle$, $|\, a_2 \rangle$ in der $\{b\}$-Darstellung zugeordnet?

1.4 $\mathscr{H}$ sei ein endlich oder unendlich dimensionaler komplexer Hilbertraum, und A, B, C seien auf ganz $\mathscr{H}$ definierte lineare Operatoren. Falls $[A, C] = \mathbb{0}$, $[B, C] = \mathbb{0}$ gilt, folgt dann daraus auch $[A, B] = \mathbb{0}$?

1.5 A, B seien lineare Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A, B] = i\,\mathbb{1}$ erfüllen. Beweise formal mittels vollständiger Induktion, dass für $n \in \mathbb{N}$

$$\text{(a)} \quad [A, B^n] = inB^{n-1} \quad \text{und} \quad \text{(b)} \quad [B, A^n] = -inA^{n-1} \quad \text{gilt.}$$

1.6 $\mathscr{H}$ sei ein endlich oder unendlich dimensionaler komplexer Hilbertraum, und A, B seien zwei selbstadjungierte Operatoren, welche auf ganz $\mathscr{H}$ definiert sind. Unter welcher Voraussetzung ist dann der Produktoperator AB ebenfalls selbstadjungiert?

1.7 In einem komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ sei durch $T := |\,u\,\rangle\langle\,u\,|$ ($|\,u\,\rangle \neq \emptyset$ vorgegebener Vektor) ein linearer Operator definiert.

(a) Ist T selbstadjungiert?

(b) Welche Eigenschaft muss der Vektor $|\,u\,\rangle$ besitzen, damit T Projektionsoperator ist?

(c) Es sei B ein beliebiger linearer Operator. Zeige, dass die Spur des Operators TB durch $\langle\,u\,|\,B\,|\,u\,\rangle$ gegeben ist.

1.8 Zeige, dass die Spur des Operators $T := |\,u\,\rangle\langle\,v\,|$ ($|\,u\,\rangle, |\,v\,\rangle$ vorgegebene Vektoren) durch $\langle\,v\,|\,u\,\rangle$ gegeben ist.

1.9 Gegeben seien zwei Vektoren $|\,u\,\rangle \neq \emptyset$, $|\,v\,\rangle \neq \emptyset$ eines Hilbertraumes. Drücke die zu $|\,v\,\rangle$ proportionale („parallele“) bzw. die zu $|\,v\,\rangle$ orthogonale („senkrechte“) Komponente des Vektors $|\,u\,\rangle$ durch $|\,u\,\rangle$, $|\,v\,\rangle$ und deren innere Produkte aus. Zeige, dass die Operatoren P, Q, deren Anwendung auf $|\,u\,\rangle$ die Parallel- bzw. Orthogonalkomponente von $|\,u\,\rangle$ bezüglich $|\,v\,\rangle$ ergibt, einander ausschließende Projektionsoperatoren sind (d. h. P, Q Projektionsoperatoren mit $PQ = \mathbb{0}$).

1.10

(a)* Zeige, dass $PQ = \mathbb{0}$ notwendig und hinreichend dafür ist, dass mit P und Q auch $P + Q$ Projektionsoperator ist.

(b) Zeige, dass $[P_1, P_2] = \mathbb{0}$ notwendig und hinreichend dafür ist, dass mit P_1 und P_2 auch $P_1 P_2$ Projektionsoperator ist.

1.11 Durch $\{\,|\,a_1\,\rangle, |\,a_2\,\rangle\}$ sei in einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum eine orthonormierte Basis gegeben (Basis der $\{a\}$-Darstellung). Eine weitere orthonormierte Basis $\{\,|\,b_1\,\rangle, |\,b_2\,\rangle\}$ sei durch

$$|\,b_1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\,a_1\,\rangle + i\,|\,a_2\,\rangle)\,, \qquad |\,b_2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\,a_1\,\rangle - i\,|\,a_2\,\rangle)$$

gegeben (Basis der $\{b\}$-Darstellung; s. Aufgabe 1.3).

(a) Drücke den unitären Operator U, der den Basiswechsel (Übergang von der $\{a\}$-Darstellung zur $\{b\}$-Darstellung) vermittelt, durch die Vektoren $|\,a_j\,\rangle$, $|\,b_k\,\rangle$ aus. Welche Matrix ist diesem Operator U in der $\{a\}$-Darstellung zugeordnet?

(b) Ein Vektor $|\,\chi\,\rangle$ sei in der $\{a\}$-Darstellung durch die Matrix

$$\widehat{\chi}^{\{a\}} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

gegeben. Wie lautet die Matrix $\widehat{\chi}^{\{b\}}$ von $|\,\chi\,\rangle$ in der $\{b\}$-Darstellung?

(c) Ein linearer Operator T sei in der $\{a\}$-Darstellung durch die Matrix

$$\widehat{T}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

gegeben. Wie lautet die Matrix $\widehat{T}^{\{b\}}$ von T in der $\{b\}$-Darstellung?

1.12 $\{\,|\,a_i\,\rangle,\ i \in \mathbb{N}\,\}$ und $\{\,|\,b_i\,\rangle,\ i \in \mathbb{N}\,\}$ seien zwei vollständige Orthonormalsysteme in einem unendlich dimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$. Durch

$$I := \sum_{i=1}^{\infty} |\,b_{i+1}\,\rangle\langle\,a_i\,|$$

sei in $\mathscr{H}$ ein linearer Operator definiert. Ist der Operator I unitär?

1.13 In einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum sei ein linearer Operator A durch seine Wirkung auf die Vektoren einer orthonormierten Basis $\{\,|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle\}$ folgendermaßen definiert:

$$A\,|\,e_1\,\rangle := -\,|\,e_2\,\rangle\,, \qquad A\,|\,e_2\,\rangle := |\,e_1\,\rangle\,.$$

(a) Schreibe den Operator A als Linearkombination von Ket-Bra-Ausdrücken $|\,e_j\,\rangle\langle\,e_k\,|$, $j,k = 1,2$, an.

(b) Ist A Normaloperator? Ist A selbstadjungiert? Ist A unitär? Ist A idempotent? Existiert A^{-1}?

(c) Besitzt A nur reelle Eigenwerte? Besitzt A orthogonale Eigenvektoren?

(Hinweis: Ein beschränkter Operator heißt *Normaloperator*, wenn er mit seinem Adjungierten vertauscht. Normaloperatoren besitzen ein vollständiges System orthogonaler Eigenvektoren. S. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.26, in denen alle wesentlichen Eigenschaften der Normaloperatoren angeführt sind.)

1.14 Im Hilbertraum der absolut quadratisch integrierbaren komplexwertigen Funktionen einer reellen Variablen ξ aus einem Intervall $\mathbb{I} \subseteq \mathbb{R}$

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{I}) = \left\{ f\colon \mathbb{I} \to \mathbb{C} \;\middle|\; (g,h) := \int_{\mathbb{I}} d\xi\, g^*(\xi)\, h(\xi)\,;\ (f,f) < +\infty \right\}$$

sei ein linearer Operator durch die Operationsvorschrift

$$\big(Af\big)(\xi) := -i\alpha f'(\xi)\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+$$

und einen Definitionsbereich $\mathscr{D}_A \subset \mathscr{H}$ gegeben. Zeige, dass A in $\mathscr{D}_A$ hermitesch ist, wenn $\mathbb{I}$ und $\mathscr{D}_A$ auf eine der folgenden Arten festgelegt werden:

(I) $\mathbb{I} = [a,b]$ $(a,b$ endlich, $b > a)$
$\mathscr{D}_A = \{u \in \mathscr{H} \mid u$ stetig differenzierbar in $[a,b];\ u(a) = u(b) = 0\}$;

(II)* $\mathbb{I} = \mathbb{R}$
$\mathscr{D}_A = \{u \in \mathscr{H} \mid u$ stetig differenzierbar in $\mathbb{R};\ u' \in \mathscr{H}\}$;

(III)* $\mathbb{I} = \mathbb{R}_0^+$
$\mathscr{D}_A = \{u \in \mathscr{H} \mid u$ stetig differenzierbar in $\mathbb{R}_0^+;\ u(0) = 0;\ u' \in \mathscr{H}\}$;

(IV) $\mathbb{I} = [a,b]$ $(a,b$ endlich, $b > a)$
$\mathscr{D}_A = \{u \in \mathscr{H} \mid u$ stetig differenzierbar in $[a,b];\ u(b) = u(a)\}$.

(Da die Diracschreibweise das Eingehen auf Definitionsbereichsfragen nicht gestattet, wird bei dieser Aufgabe die Schreibweise des Mathematikers verwendet. Siehe auch die Bemerkungen im Anschluss an die Lösung.)

(Hinweis: Beachte, dass (g,h) für beliebige $g,h \in L^2(\mathbb{I})$ existiert; s. dazu z. B. [11].)

1.15* Im Hilbertraum der absolut quadratisch integrierbaren komplexwertigen Funktionen einer reellen Variablen $x \in \mathbb{R}$

$$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; (g,h) := \int_{\mathbb{R}} dx\, g^*(x)\, h(x)\,;\ (f,f) < +\infty \right\}$$

seien zwei lineare Operatoren durch die folgenden Operationsvorschriften und Definitionsbereiche gegeben:

$$\big(Af\big)(x) := -i\alpha f'(x)\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+,$$
$$\mathscr{D}_A = \{u \in \mathscr{H} \mid u \text{ stetig differenzierbar in } \mathbb{R};\ u' \in \mathscr{H}\}\,;$$
$$\big(Bf\big)(x) := x\, f(x)\,,$$
$$\mathscr{D}_B = \{u \in \mathscr{H} \mid Bu \in \mathscr{H}\}\,.$$

(a) Zeige, dass diese beiden Operatoren hermitesch sind.

(b) Zeige, dass der durch $C := \frac{1}{2}(AB + BA)$ definierte Operator hermitesch ist.

(Da die Diracschreibweise das Eingehen auf Definitionsbereichsfragen nicht gestattet, wird bei dieser Aufgabe die Schreibweise des Mathematikers verwendet. Siehe auch die Bemerkungen im Anschluss an die Lösung von Aufgabe 1.14.)

(Hinweis: Beachte, dass (g,h) für beliebige $g,h \in L^2(\mathbb{R})$ existiert; s. dazu z. B. [11].)

1.16 Die Ableitung einer stetigen operatorwertigen Funktion $A(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$, ist durch

$$\frac{dA(\lambda)}{d\lambda} := \lim_{\epsilon \to 0} \frac{A(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)}{\epsilon}$$

definiert (vorausgesetzt, dass der Grenzwert existiert). Zeige:

(a) $\quad \dfrac{d}{d\lambda}(AB) = \dfrac{dA}{d\lambda} B + A \dfrac{dB}{d\lambda}$;

(b)* $\quad \dfrac{d}{d\lambda} A^{-1} = -A^{-1} \dfrac{dA}{d\lambda} A^{-1}$;

(c) $\quad \dfrac{d}{d\lambda} e^{\lambda C} = C\, e^{\lambda C}$, $\quad$ falls $\quad C \neq C(\lambda)$;

(d) $\quad \dfrac{d}{d\lambda} A^n = \displaystyle\sum_{l=1}^{n} A^{l-1} \frac{dA}{d\lambda} A^{n-l}$, $\quad n \in \mathbb{N}$.

Berechne speziell für $A \neq A(\lambda)$, $B \neq B(\lambda)$ die Ableitungen

(e) $\quad \dfrac{d}{d\lambda}\left(e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B}\right)$ $\quad$ und $\quad$ (f) $\quad \dfrac{d}{d\lambda}\left(e^{\lambda A}\, e^{\lambda B}\right)$.

(Anleitung zu (b): Benütze $A^{-1}A = \mathbb{1}$ und die Produktregel von (a).)

1.17 Gegeben sei die selbstadjungierte Matrix

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} .$$

(a) Berechne die matrixwertige Funktion

$$\hat{T}(\alpha) := e^{i\alpha\hat{A}} , \qquad \alpha \in \mathbb{R}$$

(a1) mithilfe der Matrix-Exponentialreihe;

(a2) mithilfe der Spektraldarstellung.

(b) Verifiziere, dass

$$\left(\frac{d\hat{T}(\alpha)}{d\alpha}\right)_{jk} = \frac{dT_{jk}(\alpha)}{d\alpha}$$

gilt.

(Anleitung: Verwende die Formel von Aufgabe 1.16(c). S. ferner die Bemerkungen zu Aufgabe 1.16, insbesondere Gl. (1.16-10), (1.16-11), (1.16-12) und (1.16-15).)

1.18 A, B seien lineare Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A, B] = i\mathbb{1}$ erfüllen. Ferner seien die Operatorpolynome

$$F(A) = \sum_{n=0}^{N} \alpha_n A^n \,, \qquad G(B) = \sum_{m=0}^{M} \beta_m B^m$$

gegeben ($\alpha_n,\ \beta_m \in \mathbb{C},\ \forall\, n,\ \forall\, m$). Berechne formal die Kommutatoren

$$\text{(a)} \quad [A, G(B)] \qquad \text{und} \qquad \text{(b)} \quad [B, F(A)] \,.$$

(Anleitung: Verwende die Formeln von Aufgabe 1.5.)

1.19 A, B seien selbstadjungierte Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A, B] = i\mathbb{1}$ erfüllen. Ferner sei durch

$$F(A, B) := \Big[B + C(A)\Big]^2$$

eine Operatorfunktion gegeben, und es existiere $dC(A)/dA$. Berechne die Kommutatoren

$$\text{(a)} \quad [A, F(A, B)] \qquad \text{und} \qquad \text{(b)} \quad [B, F(A, B)] \,.$$

(Anleitung: S. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.18.)

1.20* Zeige: Sind A, B beliebige lineare Operatoren $A \neq A(\lambda)$, $B \neq B(\lambda)$, so gilt

$$e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B} \;=\; A + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\, [B, A]_{(n)} \,, \qquad \lambda \in \mathbb{C}$$

mit

$$[B, A]_{(n)} = [B, [B, A]_{(n-1)}] \,, \quad n = 2, 3, 4, \ldots; \quad [B, A]_{(1)} := [B, A] \,.$$

Berechne mithilfe dieser Formel speziell

$$\begin{array}{lllll} \text{(a)} & e^{-iBd}\, A\, e^{iBd} & \text{mit} & [A, B] = i\mathbb{1} \,, & d \in \mathbb{R}\,; \\ \text{(b)} & e^{iB^2 c}\, A\, e^{-iB^2 c} & \text{mit} & [A, B] = i\mathbb{1} \,, & c \in \mathbb{R}\,; \\ \text{(c)} & e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B} & \text{mit} & [B, A] = \mathbb{1} \,, & \lambda \in \mathbb{C}\,. \end{array}$$

(Anleitung: Entwickle $e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B}$ in eine Taylorreihe in λ und benütze die Formeln von Aufgabe 1.16.)

1.21* Zeige: Sind A, B lineare Operatoren, für welche

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

gilt, so folgt

$$e^{A+B} = e^A\, e^B\, e^{-(1/2)[A,B]} = e^B\, e^A\, e^{(1/2)[A,B]} \,.$$

Berechne speziell

(a) $e^{-iB_1 d_1}\, e^{-iB_2 d_2}\, e^{-iB_3 d_3}$ mit $[B_j, B_k] = \mathbb{0}\,, \quad \forall\, j,k\,; \quad d_j \in \mathbb{R}\,, \quad \forall\, j\,;$

(b) $e^{-iBd}\, e^{iAc}\, e^{iBd}$ mit $[A,B] = i\,\mathbb{1}\,, \quad c \in \mathbb{R}\,, \quad d \in \mathbb{R}\,.$

(Anleitung: Stelle mithilfe der Formel (1.16-6) eine Operator-Differentialgleichung für die operatorwertige Funktion $G(\lambda) := e^{\lambda A}\, e^{\lambda B}$ auf, berücksichtige die Formel (1.20-1) und integriere die für $G(\lambda)$ erhaltene Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $G(0) = \mathbb{1}$.)

1.22 * $\mathscr{H}$ sei ein endlich oder unendlich dimensionaler komplexer Hilbertraum, und A, B, C seien selbstadjungierte Operatoren, welche auf ganz $\mathscr{H}$ definiert sind. Das Spektrum von C sei rein diskret, alle Eigenwerte von C seien nicht entartet. Falls die Vertauschungsbeziehungen $[A,C] = \mathbb{0}$, $[B,C] = \mathbb{0}$ gelten, folgt dann daraus auch $[A,B] = \mathbb{0}$?

1.23 Löse das Eigenwertproblem der selbstadjungierten Matrix

$$\widehat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}.$$

Verifiziere, dass die Eigenlösungen orthogonal sind und normiere sie auf eins.

1.24 In einem dreidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ seien zwei lineare Operatoren A, B durch ihre Wirkung auf die Vektoren einer orthonormierten Basis $\{\,|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} A\,|\,e_1\,\rangle &:= 3\,|\,e_1\,\rangle - i\sqrt{2}\,|\,e_2\,\rangle + |\,e_3\,\rangle\,, & B\,|\,e_1\,\rangle &:= |\,e_1\,\rangle + i\sqrt{2}\,|\,e_2\,\rangle + |\,e_3\,\rangle\,, \\ A\,|\,e_2\,\rangle &:= i\sqrt{2}\,|\,e_1\,\rangle + 2\,|\,e_2\,\rangle - i\sqrt{2}\,|\,e_3\,\rangle\,, & B\,|\,e_2\,\rangle &:= -i\sqrt{2}\,|\,e_1\,\rangle + i\sqrt{2}\,|\,e_3\,\rangle\,, \\ A\,|\,e_3\,\rangle &:= |\,e_1\,\rangle + i\sqrt{2}\,|\,e_2\,\rangle + 3\,|\,e_3\,\rangle\,; & B\,|\,e_3\,\rangle &:= |\,e_1\,\rangle - i\sqrt{2}\,|\,e_2\,\rangle + |\,e_3\,\rangle\,. \end{aligned}$$

(a) Berechne die Matrizen $\widehat{A}^{\{e\}}$, $\widehat{B}^{\{e\}}$, welche den Operatoren A, B in der Basis $\{\,|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ zugeordnet sind.

(b) Zeige, dass die Operatoren A, B selbstadjungiert und vertauschbar sind.

(c) Bestimme die Eigenwerte von A und B und deren Vielfachheiten sowie ein Orthonormalsystem $\{\,|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle, |\,f_3\,\rangle\}$ gemeinsamer Eigenvektoren von A, B.

(d) Bildet einer der beiden Operatoren A, B für sich allein schon einen „vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren“ in $\mathscr{H}$? Falls dies nicht zutrifft: Bilden A, B zusammen einen solchen vollständigen Satz?

(e) Welche Matrizen $\widehat{A}^{\{f\}}$, $\widehat{B}^{\{f\}}$ sind den Operatoren A, B in der Basis $\{\,|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle, |\,f_3\,\rangle\}$ zugeordnet?

(f) Existieren A^{-1}, B^{-1} ? Falls ja, gib ihre Wirkung auf die Basisvektoren $|\,e_1\,\rangle$, $|\,e_2\,\rangle$, $|\,e_3\,\rangle$ an.

1.25 Löse das Eigenwertproblem des in Aufgabe 1.14, Fall IV, definierten hermiteschen Operators. Setze dabei $a = -\frac{L}{2}$, $b = +\frac{L}{2}$ (L Länge des „Periodizitätsintervalles“). Bilden die Eigenfunktionen im Hilbertraum $\mathscr{H} = L^2\big(\big[-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\big]\big)$ ein vollständiges Orthogonalsystem?

1.26* Zeige: Besitzt ein linearer Operator A die Eigenschaft $AA^\dagger = A^\dagger A$ und ist $|\,a\,\rangle$, $\langle\,a\,|\,a\,\rangle = 1$, Eigenvektor von A zum Eigenwert a, so ist $|\,a\,\rangle$ auch Eigenvektor von $A^\dagger$, und der zugehörige Eigenwert von $A^\dagger$ ist a^*.

1.27 Gegeben sei ein linearer Operator A, dessen Inverser A^{-1} existiert. Der Vektor $|\,a\,\rangle \neq \emptyset$ sei Eigenvektor von A zum Eigenwert a. Zeige, dass dann $|\,a\,\rangle$ auch Eigenvektor von A^{-1} ist. Wie lautet der zugehörige Eigenwert von A^{-1} ?

1.28 Ein auf ganz $\mathscr{H}$ definierter selbstadjungierter Operator A heißt *positiv definit*, falls $\langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle > 0$ gilt für alle Vektoren $|\,u\,\rangle \neq \emptyset$, $|\,u\,\rangle \in \mathscr{H}$.

(a)* Beweise unter der Annahme, dass A ein rein diskretes Spektrum besitzt, die folgenden Sätze:

(a1) Notwendig und hinreichend für positiv definites A ist, dass alle Eigenwerte a_i von A positiv sind.

(a2) Ist A positiv definit, so existiert A^{-1} und ist ebenfalls positiv definit.

(b) $\mathscr{H}$ sei dreidimensional und A sei durch die Wirkung auf die Vektoren einer orthonormierten Basis $\{\,|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} A\,|\,e_1\,\rangle &:= |\,e_1\,\rangle - \sqrt{2}\,|\,e_3\,\rangle\,, \\ A\,|\,e_2\,\rangle &:= 3\,|\,e_2\,\rangle\,, \\ A\,|\,e_3\,\rangle &:= -\sqrt{2}\,|\,e_1\,\rangle + 5\,|\,e_3\,\rangle\,. \end{aligned}$$

Zeige, dass A selbstadjungiert und positiv definit ist.

(Anleitung zu (a): Verwende die Spektraldarstellung des Operators A; s. Gl. (1.16-11), (1.16-12) von Aufgabe 1.16.)

1.29* In einem n-dimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ sei ein selbstadjungierter Operator A mit den Eigenwerten $a_1 < a_2 < \ldots < a_n$ und den zugehörigen normierten Eigenvektoren $|\,a_1\,\rangle, |\,a_2\,\rangle, \ldots, |\,a_n\,\rangle$ gegeben. Kann aus

$$\langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle = a_k\,, \qquad \langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1$$

geschlossen werden, dass der Vektor $|\,u\,\rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert a_k sein muss?

1.30 Zeige: Ein Vektor $|\,u\,\rangle$, $\langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1$, ist dann und nur dann Eigenvektor des selbstadjungierten Operators A, wenn die so genannte Unschärfe

$$\Delta a := \sqrt{\langle\,u\,|\,\big[A - \langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle\,\mathbb{1}\big]^2\,|\,u\,\rangle}$$

null ist.

1.31* In einem endlich dimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ soll $\{B, C\}$ einen vollständigen Satz von vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren bilden. Weiter sei in $\mathscr{H}$ ein linearer Operator A definiert, welcher mit C vertauscht. Zeige, dass alle Matrixelemente von A zwischen gemeinsamen Eigenzuständen von B und C zu verschiedenen Eigenwerten von C null sind, und somit insbesondere dem Operator A im Basissystem der gemeinsamen Eigenzustände von B und C im Eigenraum zu einem vorgegebenen Eigenwert von B eine Diagonalmatrix zugeordnet ist.

Lösungen

1.1 Komplexer Hilbertraum:

$$\left.\begin{array}{lcll} \text{„Parallelität“ von } |\,u\,\rangle, |\,v\,\rangle & \Longleftrightarrow & |\,v\,\rangle = \alpha\,|\,u\,\rangle\,, & \alpha \in \mathbb{C} \\ |\,u\,\rangle, |\,v\,\rangle \text{ Einheitsvektoren} & \Longleftrightarrow & \langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1\,, & \langle\,v\,|\,v\,\rangle = 1 \end{array}\right\} \quad \Rightarrow$$

$$\langle\,v\,| = \alpha^*\langle\,u\,|\,, \quad \langle\,v\,|\,v\,\rangle = |\alpha|^2\,\langle\,u\,|\,u\,\rangle = |\alpha|^2 = 1\,,$$

$$\alpha = e^{i\gamma}\,, \qquad \gamma \in [0, 2\pi)\,.$$

Somit also

$$\langle\,u\,|\,v\,\rangle = e^{i\gamma}\,, \qquad \gamma \in [0, 2\pi)\,. \tag{1.1-1}$$

Reeller Hilbertraum: $\alpha \in \mathbb{R}$, d. h. $\gamma = 0$ oder π, bzw. $|\,v\,\rangle = \pm\,|\,u\,\rangle$ und $\langle\,u\,|\,v\,\rangle = \pm 1$.

Bemerkungen

Im Falle des n-dimensionalen reellen Vektorraumes mit $n \leq 3$ kann die obige Aussage wie in Abb. 1.1-1 dargestellt durch „Vektorpfeile“ der Länge eins veranschaulicht werden.

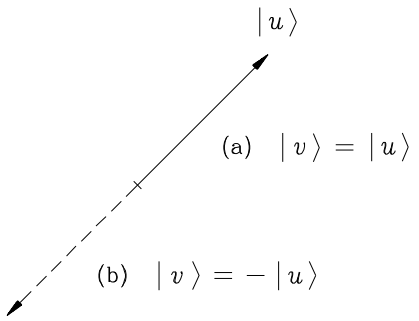


Abb. 1.1-1: Anschauliche geometrische Darstellung der Parallelität von Einheitsvektoren in einem reellen Vektorraum:
(a) gleich gerichtet parallel;
(b) entgegengesetzt gerichtet parallel

Den für den komplexen Vektorraum vorliegenden Sachverhalt, die Existenz von nicht abzählbar unendlich vielen zu $|\,u\,\rangle$ proportionalen Einheitsvektoren $|\,v\,\rangle$, kann man nur für die Dimension $n \leq 2$ anschaulich darstellen. Für $n = 1$ lassen sich die Einheitsvektoren $|\,v\,\rangle \equiv v \in \mathbb{C}$ in der bekannten Weise durch „Vektorpfeile“ („Zeiger“) veranschaulichen, deren Endpunkte auf dem durch $|v|^2 = 1$ gegebenen Kreis $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$ liegen, wobei $\mathrm{Re}\,v$, $\mathrm{Im}\,v$ als Koordinaten des $\mathbb{R}^2$ gewählt werden. Veranschaulichungen für $n = 2$ sind wesentlich komplizierter, ihre Diskussion würde den Rahmen dieser Bemerkungen sprengen.[1]

In Vorlesungen und Lehrbüchern werden gelegentlich aus didaktischen Gründen Beziehungen zwischen Vektoren bzw. zwischen Vektoren und Operatoren in unendlich dimensionalen komplexen Hilberträumen durch jene Bilder illustriert, welche die entsprechenden Beziehungen in der Vektor- und Tensorrechnung des zwei- oder dreidimensionalen reellen Vektorraumes veranschaulichen. Man muss sich darüber im klaren sein, dass bei einer solchen Veranschaulichung entscheidende Sachverhalte verloren gehen können.

[1] Siehe Urbantke, H.: Am. J. Phys. 59, 503 (1991).

1.2 Ich verwende für die Rechnung ein Basissystem $\{\,|\,a_1\,\rangle,\,|\,a_2\,\rangle\}$:

$$\langle\,a_j\,|\,a_k\,\rangle = \delta_{jk}\,, \quad j,k=1,2\,; \qquad \sum_{i=1,2} |\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,| = \mathbb{1}\,; \tag{1.2-1}$$

$$\begin{aligned} \text{Orthogonalität von } |\,u\,\rangle \text{ und } |\,v\,\rangle \quad &\Longleftrightarrow \quad \langle\,u\,|\,v\,\rangle = \sum_{i=1,2} \langle\,u\,|\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\,v\,\rangle = 0\,; \\ |\,u\,\rangle,\,|\,v\,\rangle \text{ Einheitsvektoren} \quad &\Longleftrightarrow \quad \langle\,u\,|\,u\,\rangle = \sum_{i=1,2} |\langle\,a_i\,|\,u\,\rangle|^2 = 1\,, \\ &\qquad\quad\; \langle\,v\,|\,v\,\rangle = \sum_{i=1,2} |\langle\,a_i\,|\,v\,\rangle|^2 = 1\,. \end{aligned}$$

Mit den Bezeichnungen $u_i := \langle\,a_i\,|\,u\,\rangle$, $v_i := \langle\,a_i\,|\,v\,\rangle$ („Koordinaten“ von $|\,u\,\rangle$ bzw. $|\,v\,\rangle$ im Basissystem $\{\,|\,a_1\,\rangle,\,|\,a_2\,\rangle\}$) haben wir im Falle des komplexen Hilbertraumes die Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} u_1^*\,v_1 + u_2^*\,v_2 &= 0 \\ |u_1|^2 + |u_2|^2 &= 1 \\ |v_1|^2 + |v_2|^2 &= 1 \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad v_1 = u_2^*\,e^{i\gamma}\,, \quad v_2 = -u_1^*\,e^{i\gamma}\,, \quad \gamma\in[0,2\pi)$$

und

$$|\,v\,\rangle = e^{i\gamma}\Big[\,|\,a_1\,\rangle\langle\,a_2\,|\,u\,\rangle^* - |\,a_2\,\rangle\langle\,a_1\,|\,u\,\rangle^*\Big]\,, \qquad \gamma\in[0,2\pi) \tag{1.2-2}$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$|\,v\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \widehat{v}^{\{a\}} \equiv \widehat{v} = \begin{bmatrix} \langle\,a_1\,|\,v\,\rangle \\ \langle\,a_2\,|\,v\,\rangle \end{bmatrix} = e^{i\gamma} \begin{bmatrix} \langle\,a_2\,|\,u\,\rangle^* \\ -\langle\,a_1\,|\,u\,\rangle^* \end{bmatrix}\,, \qquad \gamma\in[0,2\pi)\,. \tag{1.2-3}$$

Es gibt somit eine nicht abzählbar unendliche Menge von zu $|\,u\,\rangle$ orthogonalen Einheitsvektoren $|\,v\,\rangle$.

Reeller Hilbertraum: $u_i\in\mathbb{R},\ v_i\in\mathbb{R},\ i=1,2 \quad\Rightarrow\quad$ (a): $\gamma=0$, (b): $\gamma=\pi$, d. h.

$$\text{(a)} \quad \widehat{v} = \begin{bmatrix} u_2 \\ -u_1 \end{bmatrix} =: \widehat{w}\,, \qquad \text{(b)} \quad \widehat{v} = \begin{bmatrix} -u_2 \\ u_1 \end{bmatrix} = -\widehat{w}\,. \tag{1.2-4}$$

Bemerkungen

Die geometrische Veranschaulichung für den zweidimensionalen reellen Vektorraum zeigt die Abb. 1.2-1.

Bezüglich der Möglichkeit einer geometrischen Veranschaulichung für den zweidimensionalen komplexen Vektorraum s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.1.

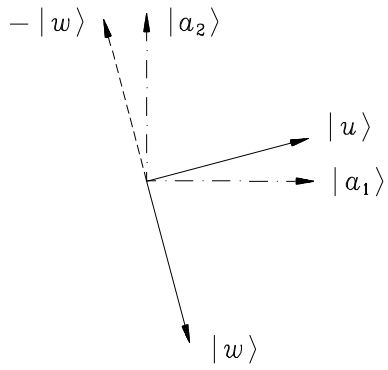


Abb. 1.2-1: Anschauliche geometrische Darstellung der Orthogonalität von Einheitsvektoren $|\,u\,\rangle, |\,v\,\rangle$ in einem zweidimensionalen reellen Vektorraum:
(a) $|\,v\,\rangle = |\,w\,\rangle$;
(b) $|\,v\,\rangle = -|\,w\,\rangle$

1.3

$$\left.\begin{aligned} |\,b_1\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\,a_1\,\rangle + i\,|\,a_2\,\rangle) \quad \Longleftrightarrow \quad \langle\,b_1\,| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\,a_1\,| - i\,\langle\,a_2\,|\,) \\ |\,b_2\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|\,a_1\,\rangle - i\,|\,a_2\,\rangle) \quad \Longleftrightarrow \quad \langle\,b_2\,| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\,a_1\,| + i\,\langle\,a_2\,|\,) \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \qquad (1.3\text{-}1)$$

(beachte, dass $\langle\,a_j\,|\,a_k\,\rangle = \delta_{jk}$ gilt)

$$\begin{aligned} \langle\,b_1\,|\,b_1\,\rangle &= \tfrac{1}{2}\Big[\langle\,a_1\,|\,a_1\,\rangle + i\,\langle\,a_1\,|\,a_2\,\rangle - i\,\langle\,a_2\,|\,a_1\,\rangle + \langle\,a_2\,|\,a_2\,\rangle\Big] = 1\,, \\ \langle\,b_2\,|\,b_2\,\rangle &= \tfrac{1}{2}\Big[\langle\,a_1\,|\,a_1\,\rangle - i\,\langle\,a_1\,|\,a_2\,\rangle + i\,\langle\,a_2\,|\,a_1\,\rangle + \langle\,a_2\,|\,a_2\,\rangle\Big] = 1\,, \\ \langle\,b_1\,|\,b_2\,\rangle &= \tfrac{1}{2}\Big[\langle\,a_1\,|\,a_1\,\rangle - i\,\langle\,a_1\,|\,a_2\,\rangle - i\,\langle\,a_2\,|\,a_1\,\rangle - \langle\,a_2\,|\,a_2\,\rangle\Big] = 0\,, \end{aligned}$$

also

$$\langle\,b_j\,|\,b_k\,\rangle = \delta_{jk}\,, \quad j,k = 1,2\,. \qquad (1.3\text{-}2)$$

Die Orthogonalität von $|\,b_1\,\rangle, |\,b_2\,\rangle$ impliziert bereits die Vollständigkeit des Vektorsystems $\{\,|\,b_1\,\rangle, |\,b_2\,\rangle\}$, da es sich um einen zweidimensionalen Vektorraum handelt.

$\{a\}$-Darstellung: Allgemein gilt

$$|\,u\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \widehat{u}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} \langle\,a_1\,|\,u\,\rangle \\ \langle\,a_2\,|\,u\,\rangle \end{bmatrix}, \qquad \langle\,u\,| \xrightarrow{\{a\}} \widehat{u}^{\{a\}\dagger} = \Big[\langle\,a_1\,|\,u\,\rangle^* \;\; \langle\,a_2\,|\,u\,\rangle^*\Big]\,,$$

$$\langle\,u\,|\,v\,\rangle = \widehat{u}^{\{a\}\dagger}\,\widehat{v}^{\{a\}}.$$

Somit folgt

$$|\,a_1\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad |\,a_2\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad (1.3\text{-}3)$$

$$|\,b_1\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \qquad |\,b_2\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}, \qquad (1.3\text{-}4)$$

$$\langle\, b_1 \,| \xrightarrow{\{a\}} \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}, \qquad \langle\, b_2 \,| \xrightarrow{\{a\}} \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & i\end{bmatrix}; \tag{1.3-5}$$

$$\langle\, b_1 \,|\, b_1 \,\rangle = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ i\end{bmatrix} = \tfrac{1}{2}(1+1) = 1\,,$$

$$\langle\, b_2 \,|\, b_2 \,\rangle = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -i\end{bmatrix} = \tfrac{1}{2}(1+1) = 1\,,$$

$$\langle\, b_1 \,|\, b_2 \,\rangle = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -i\end{bmatrix} = \tfrac{1}{2}(1-1) = 0\,.$$

$\{b\}$-Darstellung:

$$|\, a_1 \,\rangle \xrightarrow{\{b\}} \begin{bmatrix}\langle\, b_1 \,|\, a_1 \,\rangle\\ \langle\, b_2 \,|\, a_1 \,\rangle\end{bmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}, \quad |\, a_2 \,\rangle \xrightarrow{\{b\}} \begin{bmatrix}\langle\, b_1 \,|\, a_2 \,\rangle\\ \langle\, b_2 \,|\, a_2 \,\rangle\end{bmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-i\\ i\end{bmatrix}. \tag{1.3-6}$$

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 1.11.

1.4 *Nein.* Gegenbeispiel: Es seien A, B lineare Operatoren mit $[A,B] \neq \mathbb{0}$ und $C = \mathbb{1}$. Aus $[A,C] = \mathbb{0}$, $[B,C] = \mathbb{0}$ kann dann nicht $[A,B] = \mathbb{0}$ folgen, sonst ergäbe sich ein Widerspruch zur obigen Annahme.

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 1.22 und die Bemerkungen dazu.

1.5 A, B seien lineare Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A,B] = i\,\mathbb{1}$ erfüllen.

(a) *Annahme:* Die Beziehung $[A, B^n] = in\,B^{n-1}$ sei für ein gegebenes $n \in \mathbb{N}$ richtig.
Schluss: Die Beziehung ist dann auch für $n \to n+1$ richtig, denn es folgt

$$[A, B^{n+1}] = \underbrace{A\,B^{n+1}}_{(i\,\mathbb{1} + BA)B^n} - B^{n+1}A = iB^n + B\,\underbrace{(A\,B^n - B^n A)}_{inB^{n-1}} = i(n+1)B^n.$$

Nun ist die Beziehung $[A, B^n] = inB^{n-1}$ voraussetzungsgemäß für $n = 1$ richtig und somit gilt sie für *alle* $n \in \mathbb{N}$.

(b) Beweisführung analog.

Bemerkungen

Man kann zeigen, dass von zwei *selbstadjungierten* Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A, B] = i\mathbb{1}$ erfüllen, *zumindest einer* nicht beschränkt ist.[2] (Bezüglich des Begriffes des beschränkten Operators s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, insbesondere Gl. (1.14-19).) Der entsprechende Hilbertraum $\mathscr{H}$ besitzt somit unendliche Dimension, und die Definitionsbereiche $\mathscr{D}_A$, $\mathscr{D}_B$ umfassen jedenfalls nicht beide ganz $\mathscr{H}$. Strebt man mathematische Strenge an, so muss man daher auf die Definitionsbereiche achten.

Während in der formalen Beziehung $[A, B] = i\mathbb{1}$ die rechte Seite auf ganz $\mathscr{H}$ definiert ist, kann die linke Seite nur auf Vektoren aus $(\mathscr{D}_{AB} \cap \mathscr{D}_{BA}) \subset \mathscr{H}$ angewendet werden. Man müsste deshalb streng genommen $[A, B] \subset i\mathbb{1}$ schreiben. Analoge Überlegungen sind zu den formalen Beziehungen

$$\frac{1}{i}\,[A, B^n] = nB^{n-1}\,, \qquad -\frac{1}{i}\,[B, A^n] = nA^{n-1}\,, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{1.5-1}$$

anzustellen.

Der Leser beachte ferner die Ähnlichkeit der „Wirkung“ von $\frac{1}{i}\,[A, \,.\,]$ auf B^n bzw. von $-\frac{1}{i}\,[B, \,.\,]$ auf A^n mit einer Differentiation $(\xi^n)' = n\,\xi^{n-1}$. In den Bemerkungen zu Aufgabe 1.16 wird erläutert, in welchem Sinne man für *selbstadjungierte Operatoren* A, B

$$\frac{1}{i}\,[A, B^n] = \frac{dB^n}{dB}\,, \qquad -\frac{1}{i}\,[B, A^n] = \frac{dA^n}{dA}\,, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{1.5-2}$$

schreiben kann (s. Aufgabe 1.16, Gl. (1.16-13), (1.16-14) sowie (1.16-17) und (1.16-18)).

S. auch Aufgabe 1.18.

1.6

$$\left.\begin{aligned} A^\dagger &= A \\ B^\dagger &= B \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA \quad \Rightarrow$$

AB ist dann und nur dann selbstadjungiert, falls $[A, B] = \mathbb{0}$ gilt. (1.6-1)

Bemerkungen

Die oben angeschriebenen Operatorgleichungen stellen unter den in der Angabe formulierten Voraussetzungen, welche die Beschränktheit aller auftretenden Operatoren garantieren, mathematisch strenge Beziehungen dar. (Bezüglich des Begriffes des beschränkten Operators s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, insbesondere Gl. (1.14-19).) Im Falle von *unendlich dimensionalen Hilberträumen* $\mathscr{H}$ und *nicht beschränkten selbstadjungierten Operatoren* A, B – mit solchen hat man es in der Quantenmechanik meist zu tun – trifft dies aber nicht mehr zu. Nicht beschränkte selbstadjungierte Operatoren können prinzipiell nicht auf ganz $\mathscr{H}$ definiert sein. Anstelle von $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$ gilt dann (s. z. B. [10]) $(AB)^\dagger \supset B^\dagger A^\dagger = BA$, und es folgt die Bedingung $AB \supset BA$, welche nur auf dem Teilraum $\mathscr{D}_{BA} = \{\, u \in \mathscr{D}_A \,|\, Au \in \mathscr{D}_B \,\}$ die Form $[A, B] = \mathbb{0}$ annimmt.

[2] Siehe z. B. Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. I: Functional Analysis. Academic Press, New York 1980.

1.7

(a) *Lösungsweg 1:* Im Diracformalismus gilt

$$\Big[\,|\,\varphi\rangle\langle\,\chi\,|\,\Big]^\dagger = |\,\chi\rangle\langle\,\varphi\,|\,, \tag{1.7-1}$$

womit für $T = |\,u\rangle\langle\,u\,|$ unmittelbar $T^\dagger = T$ folgt.

Lösungsweg 2: Mit der Definition des zu einem Operator adjungierten Operators

$$\Big[\langle\,\varphi\,|\,T\,|\,\psi\,\rangle\Big]^* = \langle\,\psi\,|\,T^\dagger\,|\,\varphi\,\rangle\,, \qquad \forall\,|\,\varphi\rangle, |\,\psi\,\rangle \in \mathscr{H} \tag{1.7-2}$$

erhalten wir

$$\Big[\langle\,\varphi\,|\,u\,\rangle\langle\,u\,|\,\psi\,\rangle\Big]^* = \langle\,\varphi\,|\,u\,\rangle^*\langle\,u\,|\,\psi\,\rangle^* = \langle\,\psi\,|\,u\,\rangle\langle\,u\,|\,\varphi\,\rangle\,, \quad \forall\,|\,\varphi\rangle, |\,\psi\,\rangle \in \mathscr{H} \quad \Rightarrow$$

$$T^\dagger = |\,u\rangle\langle\,u\,| = T\,. \tag{1.7-3}$$

Lösungsweg 3: Verwendung eines orthonormierten Basissystems $\{\,|\,a_i\,\rangle,\ i = 1, 2, 3, \dots\}$ (endlich oder abzählbar unendlich viele Vektoren, je nachdem, ob die Dimension des Hilbertraumes $\mathscr{H}$ endlich oder unendlich ist)

$$\langle\,a_j\,|\,a_k\,\rangle = \delta_{jk}\,, \qquad \sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,| = \mathbb{1} \tag{1.7-4}$$

gibt für T und $T^\dagger$ die Matrixdarstellung

$$T \xrightarrow{\{a\}} \widehat{T}^{\{a\}} \equiv \widehat{T}\,, \qquad \big(\widehat{T}\big)_{jk} = \langle\,a_j\,|\,T\,|\,a_k\,\rangle\,, \tag{1.7-5}$$

$$T^\dagger \xrightarrow{\{a\}} \widehat{T^\dagger}^{\{a\}} \equiv \widehat{T^\dagger}\,, \qquad \big(\widehat{T^\dagger}\big)_{jk} = \big(\widehat{T}^\dagger\big)_{jk} = \Big[\langle\,a_k\,|\,T\,|\,a_j\,\rangle\Big]^*. \tag{1.7-6}$$

Zu untersuchen ist, ob $\widehat{T^\dagger} = \widehat{T}$ gilt (was $T^\dagger = T$ impliziert):

$$\begin{aligned}\Big[\langle\,a_k\,|\,T\,|\,a_j\,\rangle\Big]^* &= \Big[\langle\,a_k\,|\,u\,\rangle\langle\,u\,|\,a_j\,\rangle\Big]^* = \langle\,a_k\,|\,u\,\rangle^*\langle\,u\,|\,a_j\,\rangle^* \\ &= \langle\,a_j\,|\,u\,\rangle\langle\,u\,|\,a_k\,\rangle = \langle\,a_j\,|\,T\,|\,a_k\,\rangle\,, \quad \forall\,j,k \quad \Rightarrow \quad \widehat{T^\dagger} = \widehat{T}\,.\end{aligned}$$

(b) T Projektionsoperator $\iff$ $T^\dagger = T$ und $T^2 = T$ in $\mathscr{H}$

(1) $T^\dagger = T$ erfüllt;

(2) $T^2 = |\,u\rangle\langle\,u\,|\,u\rangle\langle\,u\,| = T = |\,u\rangle\langle\,u\,| \iff \langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1$ (1.7-7)

$\Rightarrow |\,u\,\rangle$ muss Einheitsvektor sein.

(c) Unter Verwendung des Basissystems $\{\,|\,a_i\,\rangle,\ i=1,2,3,\dots\}$ von (a) folgt

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}\,(TB) &= \sum_i \langle\,a_i\,|\,TB\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i \langle\,a_i\,|\,u\,\rangle\langle\,u\,|\,B\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i \langle\,u\,|\,B\,|\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\,u\,\rangle \\ &= \langle\,u\,|\,B\Big(\sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\Big)|\,u\,\rangle = \langle\,u\,|\,B\,|\,u\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{1.7-8}$$

Mit $B=\mathbb{1}$ erhält man daraus speziell

$$\mathrm{Sp}\,T = \langle\,u\,|\,u\,\rangle \qquad \text{(reell und positiv)}. \tag{1.7-9}$$

Bemerkungen

Wenn wir von einem *Hilbertraum* sprechen, meinen wir einen *vollständigen und separablen unitären oder euklidischen Vektorraum* (separablen Hilbertraum). Im Falle unendlicher Dimension ist also die Existenz von Basissystemen mit *abzählbar* unendlich vielen Vektoren gesichert.

Für einen *beschränkten* auf ganz $\mathscr{H}$ definierten Operator (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, insbesondere Gl. (1.14-19)) ist auch der dazu adjungierte Operator beschränkt und auf ganz $\mathscr{H}$ definiert. Da $T = |\,u\,\rangle\langle\,u\,|$ ein solcher Operator ist, stellt (1.7-2) eine mathematisch vollkommen korrekte Definition dar. (Der Mathematiker würde allerdings die Beziehung (1.7-2) in der Form $(T\psi,\varphi) = (\psi, T^\dagger\varphi)$, $\forall\,\varphi,\psi \in \mathscr{H}$, schreiben.) Auch Matrixdarstellungen solcher Operatoren machen keinerlei mathematische Schwierigkeiten.

Falls der Operator B von (c) nicht auf ganz $\mathscr{H}$ definiert ist, muss für die Gültigkeit von (1.7-8) vorausgesetzt werden, dass die Basisvektoren und der Vektor u zum Definitionsbereich von B gehören.

1.8 $\{\,|\,a_i\,\rangle,\ i=1,2,3,\dots\}$ sei ein (beliebiges) orthonormiertes Basissystem des betrachteten Hilbertraumes (endlich oder abzählbar unendlich viele Vektoren, je nachdem, ob die Dimension des Hilbertraumes endlich oder unendlich ist): s. (1.7-4). Dann folgt

$$\mathrm{Sp}\,T = \sum_i \langle\,a_i\,|\,T\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i \langle\,a_i\,|\,u\,\rangle\langle\,v\,|\,a_i\,\rangle = \sum_i \langle\,v\,|\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\,u\,\rangle = \langle\,v\,|\,u\,\rangle\,. \tag{1.8-1}$$

Bemerkungen

S. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.7.

1.9

$$|\,u\,\rangle = |\,u_\parallel\,\rangle + |\,u_\perp\rangle \qquad \text{mit} \qquad |\,u_\parallel\,\rangle = \alpha\,|\,v\,\rangle\,,\quad \langle\,v\,|\,u_\perp\rangle = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\langle\,v\,|\,u\,\rangle = \alpha\underbrace{\langle\,v\,|\,v\,\rangle}_{>0} + \underbrace{\langle\,v\,|\,u_\perp\rangle}_{0}\,, \qquad \alpha = \frac{\langle\,v\,|\,u\,\rangle}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle}\,,$$

$$|\,u_\parallel\rangle = \frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|\,u\rangle}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle} = P\,|\,u\,\rangle\,, \qquad P := \frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle}\,, \tag{1.9-1}$$

$$|\,u_\perp\rangle = |\,u\,\rangle - |\,u_\parallel\rangle = |\,u\,\rangle - \frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|\,u\rangle}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle} = Q\,|\,u\,\rangle\,, \qquad Q := \mathbb{1} - P\,; \tag{1.9-2}$$

P, Q Projektionsoperatoren, denn

$$P^\dagger = \left[\frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle}\right]^\dagger = \frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle} = P\,, \quad Q^\dagger = (\mathbb{1}-P)^\dagger = \mathbb{1} - P^\dagger = \mathbb{1} - P = Q\,,$$

$$P^2 = \frac{|\,v\rangle\langle\,v\,|\,v\rangle\langle\,v\,|}{\langle\,v\,|\,v\,\rangle\langle\,v\,|\,v\,\rangle} = P\,, \qquad Q^2 = (\mathbb{1}-P)^2 = \mathbb{1} - 2P + P^2 = \mathbb{1} - P = Q\,;$$

P, Q einander ausschließend („orthogonal“), denn

$$PQ = P(\mathbb{1} - P) = P - P^2 = P - P = \mathbb{0}\,.$$

1.10

(a)* $PQ = \mathbb{0}$ *notwendig*, denn mit der Annahme

$$\begin{array}{l} P,\,Q,\,P+Q \\ \text{Projektionsoperatoren} \end{array} \iff \left\{ \begin{array}{ll} P^\dagger = P\,, & P^2 = P \\ Q^\dagger = Q\,, & Q^2 = Q \\ (P+Q)^\dagger = P+Q\,, & (P+Q)^2 = P+Q \end{array} \right.$$

folgt

$$(P+Q)^2 = \underbrace{P^2}_{P} + PQ + QP + \underbrace{Q^2}_{Q} = P+Q \quad \Rightarrow$$

$$\left.\begin{array}{ll} P\cdot| & PQ + QP = \mathbb{0} \\ & PQ + PQP = \mathbb{0} \quad |\cdot P \\ & 2\,PQP = \mathbb{0} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad PQ = QP = \mathbb{0}\,;$$

$PQ = \mathbb{0}$ *hinreichend*, denn mit der Annahme

$$\left.\begin{array}{l} P, Q \quad \text{Projektionsoperatoren} \\ \\ PQ = \mathbb{0} \end{array}\right\} \iff \left\{ \begin{array}{ll} P^\dagger = P\,, & P^2 = P \\ Q^\dagger = Q\,, & Q^2 = Q \\ PQ = \mathbb{0} \end{array} \right.$$

folgt

$$\left.\begin{array}{l} (P+Q)^\dagger = P^\dagger + Q^\dagger = P+Q \\ (P+Q)^2 = \underbrace{P^2}_{P} + \underbrace{PQ}_{\mathbb{0}} + QP + \underbrace{Q^2}_{Q} \\ \mathbb{0} = (PQ)^\dagger = Q^\dagger P^\dagger = QP \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad (P+Q)^2 = P+Q\,.$$

(b) $[P_1, P_2] = \mathbb{0}$ *notwendig*, denn

$$P_1\,,\ P_2\,,\ P_1P_2 \quad \text{Projektionsoperatoren} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} P_1^\dagger = P_1\,, & P_1{}^2 = P_1 \\ P_2^\dagger = P_2\,, & P_2{}^2 = P_2 \\ (P_1P_2)^\dagger = P_1P_2\,, & (P_1P_2)^2 = P_1P_2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad (P_1P_2)^\dagger = P_2^\dagger P_1^\dagger = P_2P_1 = P_1P_2\,, \qquad [P_1, P_2] = \mathbb{0}\,;$$

$[P_1, P_2] = \mathbb{0}$ *hinreichend*, denn

$$\left.\begin{array}{l} P_1\,,\ P_2 \quad \text{Projektionsoperatoren} \\ \\ [P_1, P_2] = \mathbb{0} \end{array}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} P_1^\dagger = P_1\,, & P_1{}^2 = P_1 \\ P_2^\dagger = P_2\,, & P_2{}^2 = P_2 \\ [P_1, P_2] = \mathbb{0} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad (P_1P_2)^\dagger = P_2^\dagger P_1^\dagger = P_2P_1 = P_1P_2\,,$$
$$(P_1P_2)^2 = P_1 \underbrace{P_2P_1}_{P_1P_2} P_2 = P_1{}^2P_2{}^2 = P_1P_2\,.$$

Bemerkungen

Da Projektionsoperatoren beschränkt sind (s. Gl. (1.14-19)) und den ganzen Hilbertraum zum Definitionsbereich haben, sind die obigen Beweise mathematisch streng.

1.11

(a)

$$|\,b_j\,\rangle = U\,|\,a_j\,\rangle\,, \quad \langle\,a_j\,|\,a_k\,\rangle = \delta_{jk}\,, \quad \sum_i |\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,| = \mathbb{1} \quad \Rightarrow$$

$$U = \sum_i |\,b_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\,, \tag{1.11-1}$$

$$U \xrightarrow{\{a\}} \widehat{U}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} \langle\,a_1\,|\,U\,|\,a_1\,\rangle & \langle\,a_1\,|\,U\,|\,a_2\,\rangle \\ \langle\,a_2\,|\,U\,|\,a_1\,\rangle & \langle\,a_2\,|\,U\,|\,a_2\,\rangle \end{bmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix}; \tag{1.11-2}$$

(b)

$$|\,\chi\,\rangle \xrightarrow{\{a\}} \widehat{\chi}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} \langle\,a_1\,|\,\chi\,\rangle \\ \langle\,a_2\,|\,\chi\,\rangle \end{bmatrix} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad |\,\chi\,\rangle \xrightarrow{\{b\}} \widehat{\chi}^{\{b\}} = \begin{bmatrix} \langle\,b_1\,|\,\chi\,\rangle \\ \langle\,b_2\,|\,\chi\,\rangle \end{bmatrix}; \tag{1.11-3}$$

$$\langle\,b_j\,|\,\chi\,\rangle = \langle\,a_j\,|\,U^\dagger\,|\,\chi\,\rangle = \sum_i \langle\,a_j\,|\,U^\dagger\,|\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|\,\chi\,\rangle = (\widehat{U}^{\{a\}\dagger}\widehat{\chi}^{\{a\}})_j\,,$$

$$\widehat{\chi}^{\{b\}} = \widehat{U}^{\{a\}\dagger}\widehat{\chi}^{\{a\}} = \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} 1-i \\ 1+i \end{bmatrix}; \tag{1.11-4}$$

(c)

$$T \xrightarrow{\{a\}} \widehat{T}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} \langle a_1 | T | a_1 \rangle & \langle a_1 | T | a_2 \rangle \\ \langle a_2 | T | a_1 \rangle & \langle a_2 | T | a_2 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \tag{1.11-5}$$

$$T \xrightarrow{\{b\}} \widehat{T}^{\{b\}} = \begin{bmatrix} \langle b_1 | T | b_1 \rangle & \langle b_1 | T | b_2 \rangle \\ \langle b_2 | T | b_1 \rangle & \langle b_2 | T | b_2 \rangle \end{bmatrix}; \tag{1.11-6}$$

$$\begin{aligned} (\widehat{T}^{\{b\}})_{jk} &= \langle b_j | T | b_k \rangle = \langle a_j | U^\dagger T U | a_k \rangle = (\widehat{U^\dagger T U})^{\{a\}}_{jk} \\ &= \sum_{lm} \langle a_j | U^\dagger | a_l \rangle \langle a_l | T | a_m \rangle \langle a_m | U | a_k \rangle \\ &= (\widehat{U}^{\{a\}\dagger} \widehat{T}^{\{a\}} \widehat{U}^{\{a\}})_{jk}\,, \end{aligned} \tag{1.11-7}$$

$$\widehat{T}^{\{b\}} = \widehat{U}^{\{a\}\dagger} \widehat{T}^{\{a\}} \widehat{U}^{\{a\}} = \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{1.11-8}$$

Bemerkungen

Wie man aus (1.11-1) bzw. aus (1.11-7) (mit $T \to U$) sieht, gilt $\widehat{U}^{\{a\}} = \widehat{U}^{\{b\}}$.

1.12

$$I \text{ unitär} \iff \exists\, I^{-1},\ I^\dagger = I^{-1} \text{ in } \mathscr{H} \iff I^\dagger I = \mathbb{1}\,,\ I I^\dagger = \mathbb{1} \text{ in } \mathscr{H}. \tag{1.12-1}$$

Besitzt der gegebene Operator diese Eigenschaften? – Mit

$$I = \sum_{i=1}^{\infty} | b_{i+1} \rangle \langle a_i |\,, \qquad I^\dagger = \sum_{i=1}^{\infty} | a_i \rangle \langle b_{i+1} |$$

folgt unter Beachtung der Beziehungen (1.7-4) für die Basis $\{ | a_i \rangle,\ i \in \mathbb{N} \}$ und der analogen Beziehungen für die Basis $\{ | b_i \rangle,\ i \in \mathbb{N} \}$

$$I^\dagger I = \sum_{i,k=1}^{\infty} | a_i \rangle \langle b_{i+1} | b_{k+1} \rangle \langle a_k | = \sum_{i=1}^{\infty} | a_i \rangle \langle a_i | = \mathbb{1} \quad \text{in } \mathscr{H}, \tag{1.12-2}$$

$$\begin{aligned} I I^\dagger &= \sum_{i,k=1}^{\infty} | b_{i+1} \rangle \langle a_i | a_k \rangle \langle b_{k+1} | = \sum_{i=1}^{\infty} | b_{i+1} \rangle \langle b_{i+1} | \\ &= \mathbb{1} - | b_1 \rangle \langle b_1 | \neq \mathbb{1} \quad \text{in } \mathscr{H},\ I \text{ ist also nicht unitär in } \mathscr{H}. \end{aligned} \tag{1.12-3}$$

Bemerkungen

Dass I in $\mathscr{H}$ nicht unitär ist, sieht man auch unmittelbar aus $I^\dagger | b_1 \rangle = \emptyset$, was bedeutet, dass $I^\dagger$ keinen Inversen besitzt.

Hingegen ist I in dem von den Vektoren $\{\,|\,b_i\,\rangle,\ i=2,3,4,\dots\}$ aufgespannten Teilraum $\mathscr{H}'$ (dem „orthogonalen Komplement“ von $\{\,|\,b_1\,\rangle\}$ bzgl. $\mathscr{H}$) unitär, denn für jedes $|\,u\,\rangle \in \mathscr{H}'$ gilt $|\,b_1\,\rangle\langle\,b_1\,|\,u\,\rangle = \emptyset$ und somit $I I^\dagger = \mathbb{1}$ in $\mathscr{H}'$.

Ganz allgemein heißt ein Operator I in $\mathscr{D}_I = \mathscr{H}$ mit der Eigenschaft $I^\dagger I = \mathbb{1}$, also $(Iu, Iv) = (u, v)$, $\forall u, v \in \mathscr{H}$, *isometrisch* („längen- und winkeltreu“). Für den Wertebereich eines solchen Operators gilt $\mathscr{W}_I \subseteq \mathscr{H}$. Im Fall $\mathscr{W}_I = \mathscr{H}$ ist ein isometrischer Operator sogar unitär.

1.13

(a)

$$\begin{aligned} A = A\mathbb{1} = A \sum_{i=1,2} |\,e_i\,\rangle\langle\,e_i\,| &= A\,|\,e_1\,\rangle\langle\,e_1\,| + A\,|\,e_2\,\rangle\langle\,e_2\,| \\ &= |\,e_1\,\rangle\langle\,e_2\,| - |\,e_2\,\rangle\langle\,e_1\,|\,. \end{aligned} \tag{1.13-1}$$

(b)

$$A^\dagger = |\,e_2\,\rangle\langle\,e_1\,| - |\,e_1\,\rangle\langle\,e_2\,| = -A\,, \tag{1.13-2}$$

$$\begin{aligned} A^2 &= \Big(|\,e_1\,\rangle\langle\,e_2\,| - |\,e_2\,\rangle\langle\,e_1\,|\Big)\Big(|\,e_1\,\rangle\langle\,e_2\,| - |\,e_2\,\rangle\langle\,e_1\,|\Big) \\ &= -|\,e_1\,\rangle\langle\,e_1\,| - |\,e_2\,\rangle\langle\,e_2\,| = -\mathbb{1}\,. \end{aligned} \tag{1.13-3}$$

Somit:

$$\begin{aligned} [A, A^\dagger] = [A, -A] = \mathbb{0} \quad &\Rightarrow \quad A \text{ ist Normaloperator;} \\ A^\dagger \neq A \quad &\Rightarrow \quad A \text{ ist nicht selbstadjungiert;} \\ A^\dagger A = A A^\dagger = -A^2 = \mathbb{1} \quad &\Rightarrow \quad A \text{ ist unitär;} \\ A^2 \neq A \quad &\Rightarrow \quad A \text{ ist nicht idempotent;} \\ A \text{ unitär} \quad &\Rightarrow \quad \exists\, A^{-1}\colon \quad A^{-1} = A^\dagger = -A\,. \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} A \text{ nicht selbstadjungiert} \quad &\Rightarrow \quad \text{EW } a_1\,,\, a_2 \text{ sicher nicht } \textit{beide} \text{ reell;} \\ A \text{ Normaloperator} \quad &\Rightarrow \quad \text{EV } |\,a_1\,\rangle,\, |\,a_2\,\rangle \text{ orthogonal.} \end{aligned}$$

Bemerkungen

Die Lösung von Punkt (b) kann auch unter Benützung der $\{e\}$-Darstellung gefunden werden. Der Leser schreibe die Matrizen für $A, A^\dagger, A^2$ etc. selbst an.

Über die Eigenwerte von A kann man – ohne dazu das Eigenwertproblem von A lösen zu müssen – noch wesentlich mehr aussagen. A ist unitär, also müssen die Eigenwerte von A unimodular sein. Als Operator mit der Eigenschaft $A^\dagger = -A$ (so genannter *antiselbstadjungierter* Operator) lässt sich A in der Form $A = iS$ mit selbstadjungiertem S schreiben (s. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.26). Die Eigenwerte von A müssen daher rein imaginär sein. Wegen $S \neq \pm\mathbb{1}$ erhält man damit insgesamt für A die Eigenwerte $a_1 = +i$, $a_2 = -i$. Der Leser löse das Eigenwertproblem von A und verifiziere auf diese Weise, dass tatsächlich $a_1 = +i$, $a_2 = -i$ sowie $\langle\,a_1\,|\,a_2\,\rangle = 0$ gilt.

1.14

$$\left.\begin{array}{l} A \text{ in } \mathscr{D}_A \\ \text{hermitesch} \end{array}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad (Au,v) = (u,Av)\,, \quad \forall\, u,v \in \mathscr{D}_A\,. \tag{1.14-1}$$

(Im Allgemeinen wird noch zusätzlich verlangt, dass $\mathscr{D}_A$ dichter Teilraum von $\mathscr{H}$ ist. Siehe diesbezüglich die Bemerkungen im Anschluss an die Lösung.)

(I), (IV): Mit der Operationsvorschrift (Rechenvorschrift)

$$\Big(Af\Big)(\xi) := -i\alpha f'(\xi)\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+ \tag{1.14-2}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} (Au,v) - (u,Av) \;&= \int_a^b d\xi \left[\Big(Au\Big)(\xi)\right]^* v(\xi) \;- \int_a^b d\xi\, u^*(\xi)\Big(Av\Big)(\xi) \\ &= i\alpha\left[\int_a^b d\xi\, u^{*\prime} v \;+ \int_a^b d\xi\, u^* v'\right] = i\alpha \int_a^b d\xi\, (u^* v)' \\ &= i\alpha\Big[u^*(b)\,v(b) - u^*(a)\,v(a)\Big] = 0\,, \quad \forall\, u,v \in \mathscr{D}_A\,. \end{aligned} \tag{1.14-3}$$

Beachte, dass alle angeschriebenen Integrale für beliebige $u,v \in \mathscr{D}_A$ existieren. In den Fällen (I) und (IV) ist somit

$$A \text{ in } \mathscr{D}_A \text{ hermitesch.} \tag{1.14-4}$$

(II)*: In diesem Fall erhält man in Analogie zu (1.14-3) zunächst

$$\begin{aligned} (Au,v) - (u,Av) \;&= i\alpha\left[\int_{\mathbb{R}} d\xi\, u^{*\prime} v \;+ \int_{\mathbb{R}} d\xi\, u^* v'\right] = i\alpha \int_{\mathbb{R}} d\xi\, (u^* v)' \\ &= i\alpha \lim_{a\to-\infty} \lim_{b\to+\infty} \Big[u^*(b)\,v(b) - u^*(a)\,v(a)\Big]\,, \quad \forall\, u,v \in \mathscr{D}_A\,. \end{aligned} \tag{1.14-5}$$

Da $u,v \in \mathscr{D}_A$ unter anderem $u,v,u',v' \in \mathscr{H}$ gewährleistet, existieren alle in (1.14-5) vorkommenden uneigentlichen Integrale. Berücksichtigt man noch, dass

$$\lim_{\xi\to\pm\infty} w(\xi) = 0\,, \qquad \forall\, w \in \mathscr{D}_A \tag{1.14-6}$$

gilt (Beweis s. unten), so folgt

$$(Au,v) - (u,Av) \;=\; 0\,, \qquad \forall\, u,v \in \mathscr{D}_A\,.$$

Es ist somit auch im Fall (II)

$$A \text{ in } \mathscr{D}_A \text{ hermitesch.} \tag{1.14-7}$$

(III)*: Analoger Beweis wie bei (II).

Bemerkungen

Der Leser beachte, dass im Fall (II) $w \in \mathscr{H}$ *nicht* ausreicht, um die Existenz eines Grenzwertes von w für $\xi \to \pm\infty$ zu garantieren.[3] Dagegen gilt für beliebiges $w \in \mathscr{D}_A$ und $b > 0$

$$|w(b)|^2 = \int_0^b d\xi\,(w^*w)' + |w(0)|^2 = 2\,\mathrm{Re}\int_0^b d\xi\,w^*w' + |w(0)|^2\,. \tag{1.14-8}$$

Für $w \in \mathscr{D}_A$ gilt ferner $|w(0)|^2 < +\infty$ und $w, w' \in \mathscr{H}$, womit (w, w') und $\int_0^{+\infty} d\xi\; w^*w'$ existieren. Daraus folgt aber, dass $|w(b)|^2$ für $b \to +\infty$ einen Grenzwert besitzt, und dieser muss null sein, sonst könnte $\int_0^b d\xi\,|w|^2$ für $b \to +\infty$ (entgegen der Annahme $w \in \mathscr{D}_A \subset \mathscr{H}$) nicht konvergieren. Mit dem Absolutquadrat von $w(b)$ muss aber auch $w(b)$ selbst gegen null streben. Damit ist (1.14-6) für $\xi \to +\infty$ gezeigt, der Beweis für $\xi \to -\infty$ erfolgt analog.

Manche Autoren definieren den Begriff des hermiteschen Operators gemäß (1.14-1) (s. z. B. [11], [12]). In der Standarddefinition, der wir uns in der Folge anschließen, wird er jedoch mit dem in der Funktionalanalysis benützten Begriff des *symmetrischen* Operators identifiziert[4] (siehe auch [13]):

$$\left.\begin{array}{l} A \text{ in } \mathscr{D}_A \\ \text{hermitesch (symmetrisch)} \end{array}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} (Au, v) = (u, Av)\,, \quad \forall\, u, v \in \mathscr{D}_A \\ \mathscr{D}_A \text{ dichter Teilraum von } \mathscr{H}. \end{array}\right. \tag{1.14-9}$$

Es wird also von dem Teilraum $\mathscr{D}_A$ noch eine zusätzliche Eigenschaft verlangt, nämlich dass es zu jedem $f \in \mathscr{H}$ ein $g \in \mathscr{D}_A$ gibt, sodass $\|f - g\|$ kleiner als eine beliebig vorgegebene Schranke ε ist ($\|u\| := (u, u)^{1/2}$ Norm des Vektors u). In der Praxis ist „das Rennen gelaufen“, wenn man ein vollständiges Orthonormalsystem $\{\, e_n,\, n \in \mathbb{N}\,\}$ mit der Eigenschaft $e_n \in \mathscr{D}_A$, $\forall n$, angeben kann. Nach dem Entwicklungssatz lässt sich jedes $f \in \mathscr{H}$ (auch ein f, welches nicht zu $\mathscr{D}_A$ gehört) in der Form

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, f)\, e_n \tag{1.14-10}$$

darstellen, was eine symbolische Kurzschreibweise für

$$\lim_{N\to\infty} \|f - \sum_{n=1}^{N} (e_n, f)\, e_n\| \;=\; 0 \tag{1.14-11}$$

ist. Mit den e_n ist auch jede *endliche Linearkombination* der e_n Element von $\mathscr{D}_A$, insbesondere gilt also

$$g_N := \sum_{n=1}^{N} (e_n, f)\, e_n \;\in\; \mathscr{D}_A\,, \tag{1.14-12}$$

[3] Bzgl. eines einfachen Beispiels dazu s. Abschnitt 3.3 von Hellwig, G.: Differentialoperatoren der mathematischen Physik. Springer-Verlag, Berlin 1964.

[4] Achieser, N. I., und I. M. Glasmann: Theorie der linearen Operatoren im Hilbert-Raum. Verlag H. Deutsch, Frankfurt am Main 1981.
Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. I: Functional Analysis. Academic Press, New York 1980.

und wegen (1.14-11) folgt

$$\|f - g_N\| < \varepsilon\,, \quad \text{wofern} \;\; N > N_0(\varepsilon) \tag{1.14-13}$$

gewählt wird. Kann man also ein vollständiges Orthonormalsystem von Vektoren angeben, welche alle Elemente von $\mathscr{D}_A$ sind, so ist damit gezeigt, dass $\mathscr{D}_A$ dicht in $\mathscr{H}$ ist.

Bei der oben behandelten Aufgabe kann man in allen vier Fällen ein vollständiges Orthonormalsystem mit den erforderlichen Eigenschaften angeben:
(I):

$$e_n(\xi) \;=\; \sqrt{\frac{2}{b-a}}\,\sin\frac{n\pi(b-\xi)}{b-a}\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,. \tag{1.14-14}$$

(In der Quantenmechanik werden diese Funktionen als Energieeigenfunktionen für ein Teilchen in einem unendlich tiefen Kastenpotential, welches sich über das Intervall $[a, b]$ erstreckt, erhalten; siehe Aufgabe 2.10.)
(II):

$$e_n(\xi) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!\,\sqrt{\pi}}}\; e^{-\xi^2/2}\, H_n(\xi)\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{1.14-15}$$

(In der Quantenmechanik werden diese Funktionen als Energieeigenfunktionen eines linearen harmonischen Oszillators mit $m\omega/\hbar = 1$ erhalten; s. Anhang A.5.)
(III):

$$e_n(\xi) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2^{2n}\,(2n+1)!\,\sqrt{\pi}}}\; e^{-\xi^2/2}\, H_{2n+1}(\xi)\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{1.14-16}$$

(In der Quantenmechanik werden diese Funktionen als Energieeigenfunktionen eines durch eine undurchdringliche Wand in der „Bewegung“ auf die positive ξ-Achse eingeschränkten linearen harmonischen Oszillators mit $m\omega/\hbar = 1$ erhalten; s. Aufgabe 2.15.)
(IV):

$$e_n(\xi) \;=\; \frac{1}{\sqrt{b-a}}\,\exp\frac{2n\pi i}{b-a}\,\xi\,, \qquad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{1.14-17}$$

(fouriersche Eigenfunktionen; s. Aufgabe 1.25).

Mit diesen Ergänzungen haben wir ein für unsere Zwecke vernünftiges Maß an mathematischer Strenge erreicht. Um den Mathematiker ganz zufrieden zu stellen, müsste man noch alle angeschriebenen Integrale im lebesgueschen Sinne verstehen, und es müsste die Forderung der stetigen Differenzierbarkeit durch die der absoluten Stetigkeit ersetzt werden. Zu diesen und den in der Folge skizzierten Begriffen und Aussagen siehe die im Literaturverzeichnis zitierten Bücher [10] bis [13].

In der Diracschreibweise geht man von der Fiktion aus, dass alle Operatoren den ganzen Hilbertraum zum Definitionsbereich haben. Man kann dann zwischen Hermitezität und Selbstadjungiertheit nicht unterscheiden und schreibt

$$\left.\begin{array}{l} A \text{ hermitesch} \\ \text{(selbstadjungiert)} \end{array}\right\} \quad\Longleftrightarrow\quad \big[\langle\, v \,|\, A \,|\, u \,\rangle\big]^* = \langle\, u \,|\, A \,|\, v \,\rangle\,, \quad \forall\, |\, u \,\rangle\,, |\, v \,\rangle \in \mathscr{H}. \tag{1.14-18}$$

Hat man es (wie bei der eben behandelten Aufgabe) mit nicht beschränkten Operatoren zu tun, so stellt die Diracschreibweise keine mathematisch korrekte Schreibweise dar. Ich werde in den

Bemerkungen zu Aufgabe 3.11 zwei Beispiele vorführen, bei denen die Diracschreibweise zu falschen Ergebnissen bzw. zu Widersprüchen führt.[5]

Ein Operator heißt *beschränkt*, wenn es eine endliche Zahl $\alpha \in \mathbb{R}_0^+$ gibt, sodass

$$\|Au\| \leq \alpha \|u\| , \qquad \forall\, u \in \mathscr{D}_A \tag{1.14-19}$$

gilt. Ist ein linearer Operator auf ganz $\mathscr{H}$ definiert, so genügen kleine zusätzliche Eigenschaften, um seine Beschränktheit zu garantieren (s. z. B. Abschnitt 5.6 von [10]). Da man von den in der Quantenmechanik auftretenden Operatoren immer derartige Eigenschaften (etwa die Eigenschaft der Selbstadjungiertheit oder der Unitarität) fordert, kann ihr Definitionsbereich im Falle der Nichtbeschränktheit also nur ein echter Teilraum von $\mathscr{H}$ sein, und man muss bei mathematisch strenger Vorgangsweise auf Definitionsbereichsfragen eingehen. Der Diracformalismus gestattet dies nicht, da er für zwei Ausdrücke, welche unter *verschiedenen* Voraussetzungen sinnvoll sind, nämlich für den Ausdruck (u, Av) [sinnvoll für $u \in \mathscr{H}$, $v \in \mathscr{D}_A$] und für den Ausdruck $(A^\dagger u, v)$ [sinnvoll für $u \in \mathscr{D}_{A^\dagger}$, $v \in \mathscr{H}$], von vornherein nur *ein* Symbol, nämlich $\langle\, u \,|\, A \,|\, v \,\rangle$, hat. Beachte, dass im Diracformalismus *per Definition* $\langle\, u \,|\, A \,|\, v \,\rangle = \langle\, u \,|\, [A \,|\, v \,\rangle] = [\langle\, u \,|\, A] \,|\, v \,\rangle$ gilt. Das obligatorische Setzen von Klammern, welche vorschreiben, auf welche Seite man einen Operator wirken lassen muss, würde die formalen Rechenvorteile des Formalismus zunichte machen. – Siehe dazu auch den Anhang A.3.

Da die Diracschreibweise das Eingehen auf Definitionsbereichsfragen nicht gestattet, gestattet sie für nicht beschränkte Operatoren auch keine adäquate Definition des Begriffes des zu A adjungierten Operators $A^\dagger$. Jedem linearen Operator A in $\mathscr{D}_A$, dessen Definitionsbereich dichter Teilraum von $\mathscr{H}$ ist („dicht in $\mathscr{H}$ ist“), lässt sich durch

$$(u, Av) = (A^\dagger u, v) , \qquad \forall\, v \in \mathscr{D}_A , \quad \forall\, u \in \mathscr{D}_{A^\dagger} \tag{1.14-20}$$

ein eindeutig bestimmter linearer Operator $A^\dagger$ in $\mathscr{D}_{A^\dagger}$ zuordnen („adjungieren“). Man nennt $A^\dagger$ in $\mathscr{D}_{A^\dagger}$ den zu A in $\mathscr{D}_A$ *adjungierten* Operator. Dabei ist $\mathscr{D}_{A^\dagger}$ die Menge aller jener Vektoren $u \in \mathscr{H}$, für die es einen Vektor $\widetilde{u} = \widetilde{u}(A; u)$ gibt, sodass für *alle* $v \in \mathscr{D}_A$ die Beziehung

$$(\widetilde{u}, v) = (u, Av)$$

gilt, und die Operationsvorschrift $A^\dagger$ ist durch

$$A^\dagger u := \widetilde{u}(A; u)$$

gegeben. Ist A in $\mathscr{D}_A = \mathscr{H}$ beschränkt, so gilt auch $\mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{H}$ und $A^\dagger$ in $\mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{H}$ ist ebenfalls beschränkt. Ist jedoch A in $\mathscr{D}_A$ nicht beschränkt, so muss $\mathscr{D}_{A^\dagger}$ nicht einmal dicht in $\mathscr{H}$ sein, ja es kann sogar (obwohl $\mathscr{D}_A$ dichter Teilraum von $\mathscr{H}$ ist) vorkommen, dass $\mathscr{D}_{A^\dagger}$ nur den Nullvektor enthält. (In der „Alltagssprache“ sagt man dann, dass $A^\dagger$ nicht existiert.)

[5] Weitere Beispiele und eine ausführliche Diskussion der mathematischen Mängel des Diracformalismus sowie einen konkreten Kompromissvorschlag, wie man die wesentlichen Vorteile der Diracschreibweise unter Vermeidung der mathematischen Mängel beibehalten kann, findet man in dem ausführlichen, sachlich sorgfältig abwägenden Artikel „Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics“ von Gieres, F.: Rep. Prog. Phys. 63, 1893-1931 (2000).

Ein Operator heißt *selbstadjungiert*, wenn er gleich seinem Adjungierten ist, wenn also gilt:

$$A^\dagger = A\,, \quad \text{d. h.} \quad A^\dagger u = A\,u\,, \quad \forall\, u \in \mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}_A \quad (\text{dicht in } \mathscr{H})\,. \tag{1.14-21}$$

Während für beschränkte auf ganz $\mathscr{H}$ definierte lineare Operatoren (insbesondere für Operatoren in endlich dimensionalen Hilberträumen) die Begriffe selbstadjungiert und hermitesch generell zusammenfallen, gilt dies für nicht beschränkte Operatoren nicht mehr. Für einen *hermiteschen* Operator A in $\mathscr{D}_A$ ist dann lediglich

$$A^\dagger u = A\,u\,, \qquad \forall\, u \in \mathscr{D}_A \ (\text{dicht in } \mathscr{H}); \quad \mathscr{D}_{A^\dagger} \supseteq \mathscr{D}_A \tag{1.14-22}$$

gesichert. Es gibt also hermitesche Operatoren, welche nicht selbstadjungiert sind, während jeder selbstadjungierte Operator auch hermitesch ist.

In der obigen Aufgabe wurde nur die *Hermitezität* von A in $\mathscr{D}_A$ bewiesen. Wie man zeigen kann, ist A in $\mathscr{D}_A$ in den Fällen (II) und (IV) sogar selbstadjungiert, in den Fällen (I) und (III) dagegen ist A in $\mathscr{D}_A$ *nicht* selbstadjungiert. Im Fall (III) lässt sich dieser „Mangel“ auch nicht durch Abänderung des Definitionsbereiches beheben: es gibt auf dem halbunendlichen Intervall keinen selbstadjungierten Operator mit der Operationsvorschrift (1.14-2) (s. z. B. [10]).

In der Wellenmechanik (Quantenmechanik in der Orts- bzw. in der Impulsdarstellung) spielen Funktionenräume und zugehörige nicht beschränkte Operatoren („multiplikative“ Operatoren, Differentialoperatoren, Integraloperatoren und aus diesen mithilfe der Operatoralgebra gebildete Operatoren) eine bedeutende Rolle. Von jenen Operatoren, welche physikalische Messgrößen, so genannte *Observablen*, repräsentieren, muss man Selbstadjungiertheit verlangen, da nur dann reelle Eigenwerte und die Existenz eines Entwicklungssatzes bzw. einer Spektralform garantiert sind. Lehrbücher der Mathematischen Physik bzw. axiomatische Darstellungen der Quantentheorie (wie die im Literaturverzeichnis angeführten Werke [10] bis [14]) behandeln die mit Definitionsbereichsfragen zusammenhängenden Probleme. Die in den Grundvorlesungen verwendeten Quantentheorie-Lehrbücher gehen aber i. Allg. nicht auf diese Probleme ein und unterscheiden entsprechend i. Allg. nicht zwischen Hermitezität und Selbstadjungiertheit. (Von den im Literaturverzeichnis genannten Lehrbüchern [1] bis [9] gehen nur [2], [4] und [8] auf Definitionsbereichsfragen ein.) Ferner wird nicht $(Af)(\xi)$, sondern $A\,f(\xi)$ mit

$$A = -i\alpha\,\frac{d}{d\xi} \tag{1.14-23}$$

etc. geschrieben. Bei der Behandlung der Wellenmechanik im zweiten Teil dieser Aufgabensammlung werden wir uns dieser traditionellen Schreibweise anschließen. (Siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 2.2 und die Bemerkungen zu Aufgabe 2.3.)

Beispiele aus der Quantenmechanik in der Ortsdarstellung

zu (II): $\xi = x \in \mathbb{R},\ \alpha = \hbar,\ P^{\{x\}} = -i\hbar\,\dfrac{d}{dx}$ wellenmechanischer Impulsoperator

Die Eigenfunktionen

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\exp\Big[\,\frac{i}{\hbar}\,px\,\Big]\,, \qquad p \in \mathbb{R} \tag{1.14-24}$$

sind nicht quadratisch integrierbar, sie sind nur auf die diracsche δ-Funktion normierbar (*uneigentliche Eigenfunktionen*; s. „Fourier“-Darstellung der δ-Funktion Gl. (A.1-18) von Anhang A.1). Dennoch kann man $P^{\{x\}}$ als Operator zu einer Observablen ansehen, da $P^{\{x\}}$ im

Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ mit obigem Definitionsbereich selbstadjungiert ist, was garantiert, dass jede Funktion aus $L^2(\mathbb{R})$ nach den Eigenfunktionen von $P^{\{x\}}$ „entwickelt“ werden kann (Fourierintegral); s. auch die Bemerkungen zu Fall (IV) sowie Anhang A.4.

zu (III): $\xi = r \in \mathbb{R}_0^+,\ \alpha = \hbar,\ A_r^{\{\vec{r}\}} = -i\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial r}$

Setzt man $u(r) = r\,\chi(r),\ v(r) = r\,\varphi(r),\ \ldots$ und definiert man

$$\langle \chi, \varphi \rangle := (u, v) = \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \chi^*(r)\, \varphi(r)\,, \tag{1.14-25}$$

$$\begin{aligned} \langle \chi, \widetilde{A}\varphi \rangle := (u, Av) &= \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \chi^*(r) \Big[\frac{1}{r}\, A^{\{\vec{r}\}}\, r\, \varphi(r) \Big] \\ &= \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \chi^*(r) \big(\widetilde{A}^{\{\vec{r}\}}\, \varphi(r) \big)\,, \end{aligned} \tag{1.14-26}$$

so stellt der zu obigem $A_r^{\{\vec{r}\}}$ gehörige Operator $\widetilde{A}_r^{\{\vec{r}\}}$ den Operator des so genannten „Radialimpulses“ dar:

$$\widetilde{A}_r^{\{\vec{r}\}} \equiv P_r^{\{\vec{r}\}} = -i\hbar\, \frac{1}{r}\, \frac{\partial}{\partial r}\, r\,. \tag{1.14-27}$$

Der Operator $P_r^{\{\vec{r}\}}$ ist also im Raum der bzgl. des inneren Produktes $\langle \chi, \varphi \rangle$ normierbaren Funktionen $\chi, \varphi, \ldots$ hermitesch, falls die Funktionen aus seinem Definitionsbereich die Randbedingung

$$\lim_{r \to 0} \big(r\, \chi(r) \big) = 0\,, \quad \lim_{r \to 0} \big(r\, \varphi(r) \big) = 0\,, \ \ldots \tag{1.14-28}$$

erfüllen. Da aber – wie oben ausgeführt – keine selbstadjungierte Erweiterung dieses Operators existiert, kann der „Radialimpuls“ nicht als echte quantenmechanische Observable angesehen werden.

zu (IV):

(a) $\xi = x \in [a, b];\ a = -\frac{L}{2},\ b = +\frac{L}{2};\ \alpha = \hbar;$

$u(+\frac{L}{2}) = u(-\frac{L}{2})\,,\ \ v(+\frac{L}{2}) = v(-\frac{L}{2})\,,\ \ldots$ „Periodizitätsbedingung“ („periodische RB“);

$P^{\{x\}} = -i\hbar\,\dfrac{d}{dx}$ wellenmechanischer Impulsoperator

(Zur Bezeichnung *Periodizitätsbedingung* s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.25.)

Die Eigenfunktionen sind trigonometrische Funktionen (s. Aufgabe 1.25)

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\, \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\, p_n x \Big]\,, \qquad p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}\, n = \frac{h}{L}\, n\,, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1.14-29}$$

und bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im gegebenen Funktionenraum: $P^{\{x\}}$ ist nicht nur hermitesch, sondern sogar selbstadjungiert und repräsentiert eine Observable.

Im Grenzfall $L \to +\infty$ wird das Spektrum „quasikontinuierlich“, und die Entwicklung nach den Funktionen (1.14-29), die eine Fourierentwicklung darstellt, geht in ein Fourierintegral über; s. die Bemerkungen zu (II) sowie Anhang A.4.

(b) $\xi = \varphi$ Polarwinkel; $a = 0$, $b = 2\pi$; $\alpha = \hbar$;

$$u(0) = u(2\pi),\ v(0) = v(2\pi),\ \ldots\ ;$$

$$L^{\{\varphi\}} = -i\hbar\,\frac{d}{d\varphi}\ \text{ wellenmechanischer Bahndrehimpulsoperator in } \mathscr{H} = L^2([0,2\pi)).$$

Die Eigenfunktionen

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{im\varphi}\,, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{1.14-30}$$

von $L^{\{\varphi\}}$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen $u, v, \ldots$ (s. Anhang A.2, Gl. (A.2-2), (A.2-3)): $L^{\{\varphi\}}$ ist nicht nur hermitesch, sondern sogar selbstadjungiert, entspricht also einer Observablen. Siehe dazu die Aufgabe T2.9.

1.15*

(a) In Aufgabe 1.14, Fall (II), wurde bereits gezeigt, dass A in $\mathscr{D}_A$ hermitesch ist. Für B in $\mathscr{D}_B$ folgt mit der Operationsvorschrift $\big(Bf\big)(x) := x\,f(x)$

$$\begin{aligned}(Bu, v) - (u, Bv) \;&= \int_{\mathbb{R}} dx\,\Big[\big(Bu\big)(x)\Big]^*\,v(x) - \int_{\mathbb{R}} dx\,u^*(x)\,\big(Bv\big)(x)\\ &= \int_{\mathbb{R}} dx\,x\,u^*(x)\,v(x) - \int_{\mathbb{R}} dx\,x\,u^*(x)\,v(x) = 0\,,\\ &\qquad\qquad \forall\, u, v \in \mathscr{D}_B\,.\end{aligned} \tag{1.15-1}$$

Die Existenz des angeschriebenen uneigentlichen Integrals ist dabei für beliebige $u, v \in \mathscr{D}_B$ gewährleistet, da $u, v \in \mathscr{D}_B$ unter anderem $u, v, Bu, Bv \in \mathscr{H}$ bedeutet. Es ist somit auch B in $\mathscr{D}_B$ hermitesch.

(b) *Lösungsweg 1:* Formaler Beweis (s. die Bemerkungen unten)

$$\left.\begin{aligned} C &:= \tfrac{1}{2}(AB + BA)\\ A^\dagger &= A\\ B^\dagger &= B\end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \begin{aligned} C^\dagger &= \tfrac{1}{2}\Big[(AB)^\dagger + (BA)^\dagger\Big]\\ &= \tfrac{1}{2}(B^\dagger A^\dagger + A^\dagger B^\dagger)\\ &= \tfrac{1}{2}(BA + AB) = C\,.\end{aligned} \tag{1.15-2}$$

Lösungsweg 2: Operationsvorschrift:

$$\begin{aligned}\big(Cf\big)(x) :&= \frac{1}{2}\Big\{\big[A(Bf)\big](x) + \big[B(Af)\big](x)\Big\}\\ &= -\frac{i\alpha}{2}\Big[\big(x\,f(x)\big)' + x\,f'(x)\Big] = -i\alpha\Big[\frac{f(x)}{2} + x\,f'(x)\Big]\,;\end{aligned} \tag{1.15-3}$$

Definitionsbereich:

$$\begin{aligned}\mathscr{D}_C &= \mathscr{D}_{AB} \cap \mathscr{D}_{BA} \\ &= \{\, u \in \mathscr{H} \,|\, u \in \mathscr{D}_B\,;\ Bu \in \mathscr{D}_A \} \cap \{\, u \in \mathscr{H} \,|\, u \in \mathscr{D}_A\,;\ Au \in \mathscr{D}_B \} \\ &= \{\, u \in \mathscr{H} \,|\, u \text{ stetig differenzierbar in } \mathbb{R};\ Bu \in \mathscr{H},\ Bu' \in \mathscr{H} \,\}\,.\end{aligned} \tag{1.15-4}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}&(Cu, v) - (u, Cv) \\ &\quad = \int\limits_{\mathbb{R}} dx \left[(-i\alpha)\left(\frac{u}{2} + x u'\right)\right]^* v - \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^* (-i\alpha)\left(\frac{v}{2} + x v'\right) \\ &\quad = i\alpha \left[\int\limits_{\mathbb{R}} dx\, x\, u^{*\prime} v + \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, x\, u^* v' + \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^* v \right] \\ &\quad = i\alpha \int\limits_{\mathbb{R}} dx \left(x\, u^* v\right)', \qquad \forall\, u, v \in \mathscr{D}_C .\end{aligned} \tag{1.15-5}$$

Alle angeschriebenen uneigentlichen Integrale existieren für beliebige $u, v \in \mathscr{D}_C$, und man erhält

$$(Cu, v) - (u, Cv) \;=\; i\alpha \lim_{a \to -\infty} \lim_{b \to +\infty} \left[\, b\, u^*(b)\, v(b) - a\, u^*(a)\, v(a) \,\right]. \tag{1.15-6}$$

Da ferner

$$\lim_{x \to \pm\infty} \left[\sqrt{x}\, w(x)\right] = 0\,, \qquad \forall\, w \in \mathscr{D}_C \tag{1.15-7}$$

gilt (Beweis analog wie für (1.14-6)), folgt

$$(Cu, v) - (u, Cv) \;=\; 0\,, \qquad \forall\, u, v \in \mathscr{D}_C\,, \tag{1.15-8}$$

womit gezeigt ist, dass C in $\mathscr{D}_C$ hermitesch ist.

Bemerkungen

Zunächst einmal studiere der Leser die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, falls er dies nicht schon getan hat. Aus diesen Bemerkungen ergibt sich, dass der Lösungsweg 2 zu (b) (abgesehen von mathematischen „Subtilitäten“) als vollständig und korrekt anzusehen ist. Vom Lösungsweg 1 kann man dies nicht sagen. Unter (a) wurde für A in $\mathscr{D}_A$ und B in $\mathscr{D}_B$ nur die *Hermitezität* gezeigt, sodass der Lösungsweg 1 am Anfang mit den Prämissen $A^\dagger = A$, $B^\dagger = B$, welche *Selbstadjungiertheit* bedeuten, „in der Luft hängt“. Geht man auf Definitionsbereichsfragen nicht ein, so kann man es nicht besser machen, da man dann zwischen Hermitezität und Selbstadjungiertheit nicht unterscheiden kann. – Weiß man allerdings schon von anderswo, dass die (nicht beschränkten) Operatoren A in $\mathscr{D}_A$ und B in $\mathscr{D}_B$ nicht nur hermitesch, sondern sogar selbstadjungiert sind, so stellt (1.15-2) eine korrekte Kette von Operatorgleichungen in $\mathscr{D}_C = \mathscr{D}_{AB} \cap \mathscr{D}_{BA}$ dar, und das Ergebnis zeigt die Selbstadjungiertheit von C in $\mathscr{D}_C$, was die Hermitezität von C in $\mathscr{D}_C$ einschließt.

In der Wellenmechanik stellen in der Ortsdarstellung $X^{\{x\}} = x$ („multiplikativer“ Operator) und $P^{\{x\}} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ (Differentialoperator) die Operatoren der Observablen Teilchenort und Teilchenimpuls dar. Die Operatoren $X^{\{x\}}P^{\{x\}}$ und $P^{\{x\}}X^{\{x\}}$ sind jeder für sich nicht hermitesch (damit erst recht nicht selbstadjungiert), erst durch „Hermitesierung“ von $X^{\{x\}}P^{\{x\}}$ oder $P^{\{x\}}X^{\{x\}}$, d. h. Übergehen auf $\frac{1}{2}(X^{\{x\}}P^{\{x\}} + P^{\{x\}}X^{\{x\}})$, wird ein hermitescher (sogar selbstadjungierter) Operator erhalten. Die entsprechende Observable spielt bei der Ableitung des quantenmechanischen Virialtheorems nach der Methode von Aufgabe 4.6 eine Rolle.

Der Leser zeige selbst, dass für die in der obigen Aufgabe definierten Operatoren weder AB in $\mathscr{D}_{AB}$ noch BA in $\mathscr{D}_{BA}$ einen hermiteschen Operator darstellt.

1.16

(a) Unter der Voraussetzung der Stetigkeit der operatorwertigen Funktionen $A(\lambda)$, $B(\lambda)$ und der Existenz aller auftretenden Grenzwerte (s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe) folgt aus der Definition

$$\frac{d}{d\lambda}(AB) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{A(\lambda+\epsilon)\,B(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)\,B(\lambda)}{\epsilon}$$

unmittelbar

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}(AB) &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\big[A(\lambda+\epsilon) - A(\lambda)\big]B(\lambda) + A(\lambda+\epsilon)\big[B(\lambda+\epsilon) - B(\lambda)\big]}{\epsilon}\\ &= \frac{dA}{d\lambda}\,B \;+\; A\,\frac{dB}{d\lambda}\;. \end{aligned} \tag{1.16-1}$$

(b)* Mit $A^{-1}A = \mathbb{1}$ und der Produktregel von (a) erhält man

$$\begin{aligned}&\frac{d}{d\lambda}(A^{-1}A) \;=\; \frac{dA^{-1}}{d\lambda}\,A \;+\; A^{-1}\,\frac{dA}{d\lambda} \;=\; 0\,, \qquad |\cdot A^{-1} \quad\Rightarrow\\ &\frac{d}{d\lambda}\,A^{-1} = -A^{-1}\,\frac{dA}{d\lambda}\,A^{-1}\,.\end{aligned} \tag{1.16-2}$$

(c) Anschreiben der Definition der Ableitung gibt zunächst

$$\frac{d}{d\lambda}\,e^{\lambda C} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{e^{(\lambda+\epsilon)C} - e^{\lambda C}}{\epsilon}\;.$$

Da $e^{A+B} = e^A\,e^B$ gilt, falls die Operatoren A und B vertauschbar sind (s. auch Aufgabe 1.21, Gl. (1.21-2)), folgt weiter

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}\,e^{\lambda C} &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{e^{\epsilon C} - \mathbb{1}}{\epsilon}\;e^{\lambda C} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\mathbb{1} + \epsilon\,C + O(\epsilon^2) - \mathbb{1}}{\epsilon}\;e^{\lambda C}\\ &= C\,e^{\lambda C} = e^{\lambda C}\,C\,.\end{aligned} \tag{1.16-3}$$

(d) Vollständige Induktion:
Annahme: Die Beziehung

$$\frac{d}{d\lambda}A^n = \sum_{l=1}^{n} A^{l-1}\,\frac{dA}{d\lambda}\,A^{n-l} \tag{1.16-4}$$

sei für ein gegebenes $n \in \mathbb{N}$ richtig.
Schluss: Die Beziehung ist dann auch für $n \to n+1$ richtig, denn es folgt mit Gl. (1.16-1)

$$\frac{d}{d\lambda}A^{n+1} = \underbrace{\frac{dA^n}{d\lambda}}_{\text{s. (1.16-4)}}A + A^n\,\frac{dA}{d\lambda} = \sum_{l=1}^{n+1} A^{l-1}\,\frac{dA}{d\lambda}\,A^{n+1-l}\,.$$

Nun ist aber die Beziehung für $n = 1$ richtig und somit gilt sie für *alle* $n \in \mathbb{N}$.

(e)
$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}\left(e^{\lambda B}A\,e^{-\lambda B}\right) &= \frac{de^{\lambda B}}{d\lambda}A\,e^{-\lambda B} + e^{\lambda B}A\,\frac{de^{-\lambda B}}{d\lambda}\\ &= e^{\lambda B}\,BA\,e^{-\lambda B} - e^{\lambda B}AB\,e^{-\lambda B}\\ &= e^{\lambda B}\,[B,A]\,e^{-\lambda B}\,;\end{aligned} \tag{1.16-5}$$

(f)
$$\frac{d}{d\lambda}\left(e^{\lambda A}\,e^{\lambda B}\right) = \frac{de^{\lambda A}}{d\lambda}\,e^{\lambda B} + e^{\lambda A}\,\frac{de^{\lambda B}}{d\lambda} = e^{\lambda A}\,(A+B)\,e^{\lambda B}\,. \tag{1.16-6}$$

Bemerkungen

Der Physiker bezeichnet die *Operatorenschar* $\{A(\lambda),\ \lambda \in \mathbb{R}\}$ meist nicht als operatorwertige Funktion, sondern als λ-abhängigen Operator bzw. als Operator $A(\lambda)$.

In der Mathematik unterscheidet man für Folgen von Operatoren drei Arten von Konvergenz (s. dazu [10] bis [12]):

1) gleichmäßige Konvergenz (Normkonvergenz [Operatornorm s. unten]; u ... „uniform“):

$$\lim_{\nu\to\infty}\|A - A_\nu\| = 0\,, \qquad \text{geschrieben} \quad A = \text{u-}\lim_{\nu\to\infty} A_\nu \tag{1.16-7}$$

2) starke Konvergenz (s ... „strong“):

$$\lim_{\nu\to\infty}\|Af - A_\nu f\| = 0\,, \quad \text{geschrieben} \quad A = \text{s-}\lim_{\nu\to\infty} A_\nu \qquad \forall\, f \in \mathscr{D}_A \cap \mathscr{D}_{A_1} \cap \mathscr{D}_{A_2} \cap \ldots \tag{1.16-8}$$

3) schwache Konvergenz (w ... „weak“):

$$\lim_{\nu\to\infty}(g, A_\nu f) = (g, Af)\,, \quad \text{geschrieben} \quad A = \text{w-}\lim_{\nu\to\infty} A_\nu \qquad \forall\, g \in \mathscr{H},\ \forall\, f \in \mathscr{D}_A \cap \mathscr{D}_{A_1} \cap \mathscr{D}_{A_2} \cap \ldots \tag{1.16-9}$$

In (1.16-7) bedeutet $\|B\|$ die so genannte *Operatornorm*, das ist die kleinste Zahl $\beta \in \mathbb{R}_0^+$, für die

$$\|Bu\| \leq \beta \|u\|\,, \qquad \forall\, u \in \mathscr{D}_B$$

gilt. Gleichmäßige Konvergenz impliziert starke Konvergenz, diese wiederum impliziert schwache Konvergenz.

Für operatorwertige Funktionen gibt es entsprechend drei (im Allgemeinen verschiedene) Arten von Stetigkeit und Differenzierbarkeit, je nachdem, in welchem Sinne man das Symbol „lim“ interpretiert. Die formalen Rechenregeln (1.16-1) bis (1.16-6) sind aber immer dieselben. (Bei (b) muss natürlich die Existenz von $A^{-1}(\lambda)$ vorausgesetzt werden.)

Hat man es mit *analytischen* Funktionen zu tun, so fallen die Unterschiede zwischen den drei Arten von Stetigkeit und Differenzierbarkeit weg. Mit derartigen operatorwertigen Funktionen kann man „wie gewohnt“ rechnen, man kann Taylorentwicklungen durchführen (s. Aufgabe 1.20), Differentialgleichungen aufstellen und lösen (s. Aufgabe 1.21) usf. Man muss lediglich auf die Einhaltung von Reihenfolgen in Operatorprodukten achten, wenn Nichtvertauschbarkeit ins Spiel kommt.

Eine zusätzliche Schwierigkeit bringen allerdings Definitionsbereichsfragen mit sich, die auftreten, wenn die betrachteten Operatoren nicht beschränkt sind. (S. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14.) So ist z. B. die Definition der unter (c), (e) und (f) vorkommenden Operator-Exponentialfunktion

$$F(A) = e^{\lambda A}\,, \quad \lambda \in \mathbb{C} \ \text{(fest)}$$

gemäß

$$e^{\lambda A} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\, A^n \tag{1.16-10}$$

für beliebiges beschränktes A (s. Aufgabe 1.14, Gl. (1.14-19)) brauchbar, für nicht beschränktes A trifft dies aber nicht zu, da die Definitionsbereiche der Potenzen A^n mit wachsendem n immer „kleiner“ werden. Für nicht beschränkte *selbstadjungierte* Operatoren gibt es aber einen Ausweg: die Definition über die Spektraldarstellung.

Um die Schreibweise einfach zu halten, nehme ich für das Folgende an, der *selbstadjungierte Operator* A besitze ein rein diskretes Spektrum, doch gelten analoge Beziehungen für kontinuierliche oder „gemischte“ Spektren. Die *Spektraldarstellung* von A in $\mathscr{D}_A \subseteq \mathscr{H}$ (A beschränkt oder nicht beschränkt) lautet dann formal ($a_j \in \mathbb{R}$ EW von A, P_j Projektionsoperator zum Eigenraum $\mathscr{H}(a_j)$, Summation über das gesamte Spektrum von A)

$$A = \sum_i a_i\, P_i \tag{1.16-11}$$

mit

$$P_j^\dagger = P_j\,, \qquad P_j\, P_k = \delta_{jk}\, P_j \tag{1.16-12a}$$

$(P_j\, P_k = \mathbb{0},\ j \neq k,$ Orthogonalität der Eigenräume zu verschiedenen EW);

$$\sum_i P_i = \mathbb{1} \qquad \text{(Vollständigkeitsbeziehung).} \tag{1.16-12b}$$

Die genaue Bedeutung der formalen Beziehung (1.16-11) ist in den Bemerkungen zu Aufgabe 3.11 erklärt (s. Gl. (3.11-17) bis (3.11-19)).

Es sei nun F eine beliebige stetige (reell- oder komplexwertige) Funktion einer reellen Variablen ξ. Beachte, dass F nicht einmal eine Potenzreihenentwicklung besitzen muss. Es wird dann durch

$$F(A) := \sum_i F(a_i)\, P_i \,, \tag{1.16-13a}$$

$$\mathscr{D}_{F(A)} := \Big\{ f \in \mathscr{H} \;\Big|\; \sum_i |F(a_i)|^2 \, \|P_i f\|^2 < +\infty \Big\} \tag{1.16-13b}$$

eine Operatorfunktion $F(A)$ in $\mathscr{D}_{F(A)}$ definiert. Ist die Funktion F nicht nur stetig, sondern auch stetig differenzierbar, so kann man durch

$$F'(A) \equiv \frac{dF(A)}{dA} := \sum_i F'(a_i)\, P_i \,, \tag{1.16-14a}$$

$$\mathscr{D}_{F'(A)} := \Big\{ f \in \mathscr{H} \;\Big|\; \sum_i |F'(a_i)|^2 \, \|P_i f\|^2 < +\infty \Big\} \tag{1.16-14b}$$

eine weitere Operatorfunktion definieren, welche man als *Ableitung der Operatorfunktion* $F(A)$ *nach dem selbstadjungierten Operator* A bezeichnen kann. (Beachte, dass $F(A)$ und $F'(A)$ nur dann selbstadjungiert sind, falls F reellwertig ist.)

Setzt man speziell $F(\xi) = e^{\lambda\xi}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ (fest), so erhält man

$$e^{\lambda A} := \sum_i e^{\lambda a_i} P_i \,, \tag{1.16-15}$$

$$\frac{d e^{\lambda A}}{dA} := \lambda\, e^{\lambda A} \,, \tag{1.16-16}$$

setzt man $F(\xi) = \xi^n$, $n \in \mathbb{N}$, so erhält man

$$A^n := \sum_i a_i^n P_i \,, \tag{1.16-17}$$

$$\frac{dA^n}{dA} := n A^{n-1} \,. \tag{1.16-18}$$

Die jeweiligen Definitionsbereiche ergeben sich aus (1.16-13b) bzw. (1.16-14b). Die Definition von A^n Gl. (1.16-17) fällt mit der üblichen Definition der n-ten Potenz eines selbstadjungierten Operators zusammen. Ebenso fallen die Definitionen (1.16-10) und (1.16-15) zusammen, falls A selbstadjungiert und *beschränkt* ist. (Siehe dazu Aufgabe 1.17, Punkt(a).)

Die Beziehung von Punkt (e) hat eine wichtige Anwendung in der Quantenmechanik. In der Quantenmechanik ist die Zeitabhängigkeit des Operators einer (nicht explizit zeitabhängigen) Observablen $\mathcal{C}$ im Heisenbergbild durch (H Hamiltonoperator, C Operator zu $\mathcal{C}$ im Schrödingerbild)

$$C_{\mathrm{H}}(t) = e^{(i/\hbar)Ht}\, C\, e^{-(i/\hbar)Ht} \qquad (\text{VS: } H \neq H(t)\,) \tag{1.16-19}$$

gegeben. Wie man aus Gl. (1.16-5) sieht, genügt $C_{\mathrm{H}}(t)$ der Operator-Differentialgleichung

$$\frac{dC_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = e^{(i/\hbar)Ht}\,[(i/\hbar)\,H, C]\,e^{-(i/\hbar)Ht} = (1/i\hbar)\,[C, H]_{\mathrm{H}}(t) = (1/i\hbar)\,[C_{\mathrm{H}}(t), H] \qquad (1.16\text{-}20)$$

(*heisenbergsche Bewegungsgleichung*).

1.17

(a) (a1)

$$\widehat{T}(\alpha) = e^{i\alpha\widehat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!}\,\widehat{A}^n\;; \qquad (1.17\text{-}1)$$

$$\widehat{A} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \widehat{A}^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \;\Rightarrow\; \widehat{A}^{2k} = \widehat{\mathbb{1}}\,, \quad \widehat{A}^{2k+1} = \widehat{A}\,, \qquad (1.17\text{-}2)$$

$$\begin{aligned} \widehat{T}(\alpha) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2k}}{(2k)!}\,\widehat{\mathbb{1}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!}\,\widehat{A} \\ &= \cos\alpha\,\widehat{\mathbb{1}} + i\sin\alpha\,\widehat{A} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}. \end{aligned} \qquad (1.17\text{-}3)$$

(a2)

$$\widehat{T}(\alpha) = e^{i\alpha\widehat{A}} = \sum_{j=1,2} e^{i\alpha a_j}\,\widehat{P}_j\;; \qquad (1.17\text{-}4)$$

EW-Problem:

$$\widehat{A}\,\widehat{u} = a\,\widehat{u}\,, \qquad \widehat{u} \text{ Spaltenmatrix}, \quad \widehat{u} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad a \text{ EW-Parameter};$$

Säkulargleichung (charakteristische Gleichung):

$$\det(\widehat{A} - a\,\widehat{\mathbb{1}}) = 0\,, \qquad \text{d. i.} \quad \begin{vmatrix} -a & -i \\ i & -a \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{bzw.} \quad a^2 - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad a_1 = +1\,, \quad a_2 = -1\,. \qquad (1.17\text{-}5)$$

EV: $a_{1,2} = \pm 1$: $\widehat{A}\,\widehat{u}_{1,2} = \pm\widehat{u}_{1,2}$; gibt nach Normierung gemäß $\widehat{u}^{\dagger}\,\widehat{u} = 1$

$$\widehat{u}_1 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,e^{i\gamma_1}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \qquad \widehat{u}_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,e^{i\gamma_2}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}. \qquad (1.17\text{-}6)$$

Während die normierten Eigenvektoren von $\widehat{A}$ nur bis auf unimodulare Faktoren bestimmt sind, sind die Projektionsmatrizen zu den Eigenräumen eindeutig bestimmt

und durch

$$\widehat{P}_1 = \widehat{u}_1\,\widehat{u}_1^\dagger = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix} = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{bmatrix}, \tag{1.17-7a}$$

$$\widehat{P}_2 = \widehat{u}_2\,\widehat{u}_2^\dagger = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -i\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & i\end{bmatrix} = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{bmatrix} \tag{1.17-7b}$$

gegeben. Verifiziere:

$$\widehat{P}_j^\dagger = \widehat{P}_j\,, \quad \widehat{P}_j\,\widehat{P}_k = \delta_{jk}\,\widehat{P}_j\,, \quad j,k = 1,2$$
$$(\,\widehat{P}_1\,\widehat{P}_2 = \widehat{\mathbb{0}} \quad \text{Orthogonalitätsbeziehung});$$
$$\widehat{P}_1 + \widehat{P}_2 = \widehat{\mathbb{1}}$$
(Vollständigkeitsbeziehung).

Mit (1.17-4), (1.17-5) und (1.17-7) folgt

$$\widehat{T}(\alpha) = e^{i\alpha\widehat{A}} = e^{i\alpha}\,\widehat{P}_1 + e^{-i\alpha}\,\widehat{P}_2 = \begin{bmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha\\ -\sin\alpha & \cos\alpha\end{bmatrix},$$

in Übereinstimmung mit Gl. (1.17-3).

(b) Zu zeigen ist

$$\left(\frac{d\widehat{T}(\alpha)}{d\alpha}\right)_{jk} = \frac{dT_{jk}(\alpha)}{d\alpha}\,. \tag{1.17-8}$$

Mit Formel (1.16-3) von Aufgabe 1.16 folgt

$$\frac{d\widehat{T}(\alpha)}{d\alpha} = i\widehat{A}\,\widehat{T}(\alpha) = i\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha\\ -\sin\alpha & \cos\alpha\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-\sin\alpha & \cos\alpha\\ -\cos\alpha & -\sin\alpha\end{bmatrix}. \tag{1.17-9}$$

Die Elemente dieser Matrix stimmen mit den Ableitungen der Elemente der Matrix von Gl. (1.17-3) überein, womit (1.17-8) verifiziert ist.

Bemerkungen

Die Beziehung (1.17-8) gilt für die Matrixdarstellungen beliebiger beschränkter operatorwertiger Funktionen $T(\alpha)$. (Der Leser zeige dies selbst.)

Anwendung in der Quantenmechanik (s. die Aufgaben 6.4 und 6.22):

$\widehat{A} = \widehat{\sigma}_y$ Paulimatrix; $\widehat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\,\widehat{\sigma}_y$ Matrix der y-Komponente des Spinoperators $\vec{S}$ eines Spins $s = \frac{1}{2}$ in der $\{m_s\}$-Darstellung ($\widehat{S}_z$ diagonal);

$\frac{\hbar}{2}\,a_1 = +\frac{\hbar}{2}\,,\ \frac{\hbar}{2}\,a_2 = -\frac{\hbar}{2}$ mögliche Messwerte der Observablen $\mathcal{S}_y$;

$\widehat{T}(-\frac{\beta}{2}) = \widehat{d}^{(1/2)}(\beta)\,, \quad 0 \le \beta \le \pi\,,$ Drehmatrix.

1.18

(a) In Aufgabe 1.5 wurde gezeigt, dass $[A, B^m] = im\, B^{m-1}$ gilt. Mit dieser Beziehung folgt unmittelbar

$$[A, G(B)] = [A, \sum_{m=0}^{M} \beta_m\, B^m] = \sum_{m=0}^{M} \beta_m\, [A, B^m] = i \sum_{m=1}^{M} m\, \beta_m\, B^{m-1}\,. \qquad (1.18\text{-}1)$$

(b) Analog:

$$[B, F(A)] = -i \sum_{n=1}^{N} n\, \alpha_n\, A^{n-1}\,. \qquad (1.18\text{-}2)$$

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Zunächst einmal studiere der Leser – falls er dies nicht schon getan hat – die Bemerkungen zu Aufgabe 1.5 sowie die Ausführungen über Funktionen selbstadjungierter Operatoren in den Bemerkungen zu Aufgabe 1.16.

In der Quantenmechanik benötigt man die Formeln (1.18-1), (1.18-2) für *selbstadjungierte Operatoren* A, B. Da A, B dann nicht beide beschränkt sein können, haben die Operatorgleichungen (1.18-1), (1.18-2) nur auf dem Durchschnitt der Definitionsbereiche der jeweiligen linken und rechten Seiten einen Sinn. $F(A)$, $G(B)$ besitzen als Operatorpolynome selbstadjungierter Operatoren eine Spektraldarstellung. ($F(A)$, $G(B)$ selbst sind nur im Falle $\alpha_n \in \mathbb{R}$, $\forall\, n$, bzw. $\beta_m \in \mathbb{R}$, $\forall\, m$, selbstadjungiert.) Man kann daher im Sinne von Gl. (1.16-14) Ableitungen $F'(A)$, $G'(B)$ definieren. Für diese gilt, wie man aus (1.16-18) sieht,

$$F'(A) \equiv \frac{dF(A)}{dA} = \sum_{n=1}^{N} n\, \alpha_n\, A^{n-1}\,, \qquad G'(B) \equiv \frac{dG(B)}{dB} = \sum_{m=1}^{M} m\, \beta_m\, B^{m-1}\,,$$

sodass man statt (1.18-1), (1.18-2) auch

$$\frac{1}{i}\,[A, G(B)] = \frac{dG(B)}{dB}\,, \qquad -\frac{1}{i}\,[B, F(A)] = \frac{dF(A)}{dA} \qquad (1.18\text{-}3)$$

schreiben kann.

Wie man mithilfe der Spektraldarstellung zeigen kann, gelten die Formeln (1.18-3) nicht nur für Polynome, sondern für *beliebige* Funktionen $F(A)$, $G(B)$ selbstadjungierter Operatoren A bzw. B mit $[A, B] = i\mathbb{1}$. Die einzige Voraussetzung ist, dass F bzw. G als Funktionen einer gewöhnlichen reellen Variablen ξ betrachtet stetig differenzierbar sind. F, G müssen also nicht einmal eine Potenzreihenentwicklung besitzen.

Im Übrigen habe ich schon in den Bemerkungen zu Aufgabe 1.16 erwähnt, dass Potenzreihen nicht beschränkter Operatoren aus Definitionsbereichsgründen im Allgemeinen nicht brauchbar sind. Führt man mit solchen Potenzreihen formale Rechnungen durch, so kann dies zu falschen Ergebnissen führen. Ein Beispiel dafür (siehe [12][6]): Benützt man für den Operator der zeitlichen

[6] Bezüglich einer ausführlichen und leicht verständlichen Diskussion dieses Beispiels siehe Klein, J. R.: Am. J. Phys. 48, 1035 (1980).

Entwicklung $U(t)$ eines kräftefreien Teilchens die Operator-Exponentialreihe

$$U(t) = e^{-(i/\hbar)Ht} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{i}{\hbar}\,t)^n}{n!}\, H^n\,, \qquad H = \frac{P^2}{2m}\,,$$

so kann man Wellenpakete kräftefreier Teilchen erhalten, welche nicht zerfließen. Nach einem allgemeinen (auf der Spektralform von $U(t)$ basierenden) Theorem kann es aber solche Wellenpakete nicht geben. Physikalisch ist dies aufgrund der Dispersion der Partialwellen klar. Natürlich führt die formale Benützung einer solchen Operator-Potenzreihe in vielen Fällen zu völlig richtigen Ergebnissen. Ein Beispiel: Es sei

$$G(B) := e^{-iBd}\,, \quad d \in \mathbb{R}\,. \tag{1.18-4}$$

Mit der formalen Rechnung

$$\begin{aligned}\frac{1}{i}\,[A, G(B)] &= \frac{1}{i}\,[A, e^{-idB}] = \frac{1}{i}\,[A, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-id)^n}{n!}\, B^n] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-id)^n}{n!}\, \frac{1}{i}\,[A, B^n] = (-id) \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-id)^\nu}{\nu!}\, B^\nu\end{aligned}$$

folgt

$$\frac{1}{i}\,[A, G(B)] = (-id)\, e^{-iBd}\,.$$

Man erhält also dasselbe Ergebnis wie mit der auf der Spektraldarstellung der Operatorfunktion $G(B)$ beruhenden Formel (s. Gl. (1.16-16)):

$$\frac{1}{i}\,[A, G(B)] = \frac{dG(B)}{dB} = \frac{d}{dB}\, e^{-iBd} = (-id)\, e^{-iBd}\,. \tag{1.18-5}$$

Mithilfe der Formeln (1.18-3) und der allgemeinen Eigenschaften

$$\begin{aligned}[S, T_1 + T_2] &= [S, T_1] + [S, T_2]\,, \\ [S, T_1 T_2] &= [S, T_1]\, T_2 + T_1 [S, T_2]\end{aligned}$$

der Kommutatorklammern kann man dann auch Kommutatoren

$$[A, C(A, B)]\,, \qquad [B, C(A, B)] \tag{1.18-6}$$

für bestimmte Typen von Operatorfunktionen $C(A, B)$ ausrechnen. (S. dazu die Aufgabe 1.19.) Mit dem Formelrepertoire, das man auf diese Weise bereitstellen kann, findet man bei den Anwendungen in der Quantenmechanik das Auslangen.

Da die Operatoren der fundamentalen Observablen Teilchenort und Teilchenimpuls in der Quantenmechanik die kanonische Vertauschungsbeziehung $[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$ erfüllen, spielen die den Gleichungen (1.18-3) entsprechenden Beziehungen

$$\frac{1}{i\hbar}\,[X, G(P)] = \frac{dG(P)}{dP}\,, \qquad \frac{1}{i\hbar}\,[P, F(X)] = -\frac{dF(X)}{dX} \tag{1.18-7}$$

eine wichtige Rolle für die Berechnung der Kommutatoren der Operatoren von Observablen.

Insbesondere benötigt man die Beziehungen (1.18-7) im Zusammenhang mit den kanonischen Bewegungsgleichungen, den heisenbergschen Bewegungsgleichungen für $X_{\mathrm{H}}(t), P_{\mathrm{H}}(t)$; s. die Aufgaben 4.2, 4.3. Der Operator

$$T(d) := e^{-(i/\hbar)Pd}\,, \quad d \in \mathbb{R} \tag{1.18-8}$$

stellt dann den Translationsoperator dar (s. Aufgabe 2.7 bis 2.9).

Bei einem Teilchen mit drei Freiheitsgraden der räumlichen „Bewegung“ x_1, x_2, x_3 (*kartesische* Koordinaten) gelten die fundamentalen Vertauschungsbeziehungen

$$[X_j, X_k] = \mathbb{0}\,, \qquad [P_j, P_k] = \mathbb{0}\,, \qquad [X_j, P_k] = i\hbar\,\delta_{jk}\mathbb{1}\,, \tag{1.18-9}$$

und man erhält die Formeln

$$\frac{1}{i\hbar}\,[X_j, G(\vec{P})] = \frac{\partial G(\vec{P})}{\partial P_j}\,, \qquad \frac{1}{i\hbar}\,[P_j, F(\vec{R})] = -\frac{\partial F(\vec{R})}{\partial X_j}\,. \tag{1.18-10}$$

Der Beweis erfolgt analog wie für (1.18-7). Der Umstand, dass G, F nun Operatorfunktionen sind, die von jeweils *drei* Operatoren abhängen, macht keinerlei Schwierigkeiten, da diese drei Operatoren paarweise vertauschbar sind. Es muss lediglich vorausgesetzt werden, dass die partiellen Ableitungen von $G(\xi,\eta,\zeta)$, $F(\xi,\eta,\zeta)$, ξ,η,ζ gewöhnliche reelle Variable, existieren und stetig sind. In Diracschreibweise hat man dann z. B.

$$\frac{\partial G(\vec{P})}{\partial P_j} := \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\;|\,\vec{p}\,\rangle\,\frac{\partial G(\vec{p})}{\partial p_j}\,\langle\,\vec{p}\,|\,. \tag{1.18-11}$$

1.19

$$F(A,B) = \Big[B + C(A)\Big]^2 = B^2 + B\,C(A) + C(A)\,B + (C(A))^2\,; \tag{1.19-1}$$

(a) $\quad \dfrac{1}{i}\,[A, F(A,B)] = \dfrac{1}{i}\,[A, B^2] + \dfrac{1}{i}\,[A, B\,C(A)] + \dfrac{1}{i}\,[A, C(A)\,B] + \dfrac{1}{i}\,[A, (C(A))^2]\,,$

$$\frac{1}{i}\,[A, B^2] = 2B \quad \text{(s. Gl. (1.5-1))},$$

$$\frac{1}{i}\,[A, B\,C(A)] = \frac{1}{i}\,[A,B]\,C(A) = C(A)\,,$$

$$\frac{1}{i}\,[A, C(A)\,B] = C(A)\,\frac{1}{i}\,[A,B] = C(A)\,,$$

$$\frac{1}{i}\,[A, (C(A))^2] = \mathbb{0}$$

$$\Rightarrow \quad \Big[A, \Big(B + C(A)\Big)^2\Big] = 2i\Big(B + C(A)\Big)\,. \tag{1.19-2}$$

(b) $$\frac{1}{i}\,[B,F(A,B)] = \frac{1}{i}\,[B,B^2] + \frac{1}{i}\,[B,B\,C(A)] + \frac{1}{i}\,[B,C(A)\,B] + \frac{1}{i}\,[B,(C(A))^2]\,,$$

$$\frac{1}{i}\,[B,B^2] = \mathbb{0}\,,$$

$$\frac{1}{i}\,[B,B\,C(A)] = B\,\frac{1}{i}\,[B,C(A)] = -B\,\frac{dC(A)}{dA} \quad \text{(s. Gl. (1.18-3))},$$

$$\frac{1}{i}\,[B,C(A)\,B] = \frac{1}{i}\,[B,C(A)]\,B = -\frac{dC(A)}{dA}\,B\,,$$

$$\frac{1}{i}\,[B,(C(A))^2] = -2\,C(A)\,\frac{dC(A)}{dA} \quad \text{(s. Gl. (1.18-3))}$$

$$\Rightarrow \quad \Big[B,\Big(B+C(A)\Big)^2\Big] = -2i\Big\{\frac{1}{2}\Big(B\,\frac{dC(A)}{dA} + \frac{dC(A)}{dA}\,B\Big) + C(A)\,\frac{dC(A)}{dA}\Big\}\,. \tag{1.19-3}$$

Beachte, dass $C(A)$ und $dC(A)/dA$ vertauschbar sind, dass dies aber für B und $dC(A)/dA$ nicht zutrifft, ausgenommen in dem Sonderfall, dass $C(A)$ ein lineares Polynom in A ist.

Bemerkungen

Bezüglich der Definitionsbereichsproblematik siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 1.5 und die Bemerkungen zu Aufgabe 1.18.

In der Quantenmechanik benötigt man Kommutatoren der obigen Art, wenn man die kanonischen Bewegungsgleichungen, die heisenbergschen Bewegungsgleichungen für $\vec{R}_{\rm H}(t)$, $\vec{P}_{\rm H}(t)$, für ein Teilchen der Masse m und Ladung q in einem Magnetfeld anschreiben will. Mit dem zugehörigen Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r},t)$ ist der Hamiltonoperator durch

$$H(\vec{R},\vec{P}) = \frac{1}{2m}\Big[\vec{P} - \frac{q}{c}\,\vec{A}(\vec{R},t)\Big]^2$$

gegeben, und man muss die Kommutatoren

$$[X_j, H(\vec{R},\vec{P})]\,, \qquad [P_j, H(\vec{R},\vec{P})]\,, \qquad j=1,2,3$$

berechnen.

1.20 Ich setze $e^{\lambda B}A\,e^{-\lambda B} = F(\lambda)$ und nehme zunächst $\lambda \in \mathbb{R}$ an. Taylorentwicklung der operatorwertigen Funktion $F(\lambda)$ (s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe) gibt

$$F(\lambda) = F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\left[\frac{d^nF(\lambda)}{d\lambda^n}\right]_{\lambda=0}\,.$$

Nach Gl. (1.16-5) gilt

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda}\Big(e^{\lambda B}A\,e^{-\lambda B}\Big) = e^{\lambda B}\,[B,A]\,e^{-\lambda B} = e^{\lambda B}\,[B,A]_{(1)}\,e^{-\lambda B}\,.$$

Wiederholte Anwendung dieser Formel gibt

$$\frac{d^2F(\lambda)}{d\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda}\Big(e^{\lambda B}\,[B,A]_{(1)}\,e^{-\lambda B}\Big) = e^{\lambda B}\,[B,[B,A]_{(1)}]\,e^{-\lambda B} = e^{\lambda B}\,[B,A]_{(2)}\,e^{-\lambda B}\,,$$

$$\vdots$$

$$\frac{d^nF(\lambda)}{d\lambda^n} = e^{\lambda B}\,[B,A]_{(n)}\,e^{-\lambda B}\,.$$

Somit folgt für $\lambda \in \mathbb{R}$

$$e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B} \;=\; A + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\,[B,A]_{(n)} \tag{1.20-1a}$$

mit

$$[B,A]_{(n)} = [B,[B,A]_{(n-1)}]\,,\quad n = 2,3,4,\ldots;\qquad [B,A]_{(1)} := [B,A]\,. \tag{1.20-1b}$$

Da jedoch A, B beliebige Operatoren sein können, und mit $B = \alpha D,\ \alpha \in \mathbb{C}$, die Beziehung $[B,A]_{(n)} = [\alpha D, A]_{(n)} = \alpha^n\,[D,A]_{(n)}$ folgt, ist die erhaltene Formel auch für komplexes λ gültig.

Anwendung der Formel auf einige spezielle Fälle:

(a)

$$e^{-iBd}\,A\,e^{iBd} \;=\; A + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-id)^n}{n!}\,[B,A]_{(n)}\,,\qquad d \in \mathbb{R}$$

$$[B,A]_{(1)} = [B,A] = -[A,B] = -i\mathbb{1} \quad \Rightarrow$$

$$[B,A]_{(n)} = \mathbb{0}\,,\quad n \geq 2$$

$$e^{-iBd}\,A\,e^{iBd} \;=\; A - d\mathbb{1}\,,\quad \text{falls}\quad [A,B] = i\mathbb{1}\,,\qquad d \in \mathbb{R}\,. \tag{1.20-2}$$

Dieses Ergebnis wurde bereits in Aufgabe 1.18 auf einem anderen Weg abgeleitet (siehe Gl. (1.18-4), (1.18-5)).

(b)

$$e^{iB^2c}\,A\,e^{-iB^2c} = A + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ic)^n}{n!}\,[B^2,A]_{(n)}\,,\qquad c \in \mathbb{R}$$

$$[B^2,A]_{(1)} = [B^2,A] = -[A,B^2] = -2iB \quad \text{(s. (1.5-1))} \quad \Rightarrow$$

$$[B^2,A]_{(n)} = \mathbb{0}\,,\quad n \geq 2$$

$$e^{iB^2c}\,A\,e^{-iB^2c} = A + 2cB\,,\quad \text{falls}\quad [A,B] = i\mathbb{1}\,,\quad c \in \mathbb{R}\,. \tag{1.20-3}$$

(c)

$$[B,A]_{(1)} = [B,A] = \mathbb{1} \quad \Rightarrow \quad [B,A]_{(n)} = \mathbb{0}\,,\quad n \geq 2$$

$$e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B} = A + \lambda\mathbb{1}\,,\quad \text{falls}\quad [B,A] = \mathbb{1}\,,\qquad \lambda \in \mathbb{C}\,. \tag{1.20-4}$$

Bemerkungen

Mit dem zusätzlichen Symbol

$$[B, A]_{(0)} := A \tag{1.20-5}$$

kann man statt (1.20-1a) auch

$$e^{\lambda B} A\, e^{-\lambda B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}\, [B, A]_{(n)}\,, \qquad \lambda \in \mathbb{C} \tag{1.20-6}$$

schreiben.

Die bei der Ableitung von (1.20-1a) bzw. (1.20-6) formal gebildete Taylorentwicklung existiert, da die operatorwertige Funktion $F(\lambda)$ analytisch ist. (S. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.16.)

Von praktischem Nutzen ist die abgeleitete Formel nur, wenn die Reihe wie in den Beispielen (a), (b), (c) abbricht oder wenn sich zumindest das allgemeine Bildungsgesetz von $[B, A]_{(n)}$ angeben lässt. Für nicht beschränkte Operatoren muss sich außerdem die formale unendliche Operatorsumme durch einen geschlossenen Ausdruck ersetzen lassen. Diese günstigen Umstände liegen bei vielen wichtigen Anwendungen in der Quantenmechanik vor. (S. die Aufgaben 2.17, 3.24, 4.3, 4.8 und 7.4.)

Beispiele aus der Quantenmechanik zu (a), (b) und (c):

zu (a):

$A = X$ Ortsoperator; $B = P/\hbar$, P Impulsoperator;

$[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$ kanonischer Kommutator;

$T(d) = \exp\Big[-\dfrac{i}{\hbar}\, Pd\Big]$, $d \in \mathbb{R}$, Translationsoperator,

$$X' \equiv T(d)\, X\, T^{\dagger}(d) = X - d\,\mathbb{1} \tag{1.20-7}$$

Transformation des Ortsoperators bei der Translation $x' \equiv \mathscr{T}(d)\, x := x + d$

(s. die Aufgaben 2.8 und 2.9).

zu (b):

$A = X$ Ortsoperator; $B = P/\hbar$, P Impulsoperator;

$[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$ kanonischer Kommutator;

$c = \dfrac{\hbar t}{2m}$, t Zeit, m Teilchenmasse;

$U(t) = \exp\Big[-\dfrac{i}{\hbar}\, \dfrac{P^2}{2m}\, t\Big]$

Operator der zeitlichen Entwicklung (zeitlichen Translation) für ein kräftefreies Teilchen,

$$X_{\mathrm{H}}(t) = U^{\dagger}(t)\, X\, U(t) = X + \frac{P}{m}\, t \tag{1.20-8}$$

Zeitabhängigkeit des Ortsoperators eines kräftefreien Teilchens im Heisenbergbild

(s. Aufgabe 4.2).

zu (c):

$A = a^\dagger$ Erzeugungsoperator eines Oszillatorquants,
$B = a$ Vernichtungsoperator eines Oszillatorquants,
$[a, a^\dagger] = \mathbb{1}\,, \quad e^{\lambda a}\, a^\dagger e^{-\lambda a} = a^\dagger + \lambda \mathbb{1}\,.$ (1.20-9)

1.21* Mit $G(\lambda) := e^{\lambda A}\, e^{\lambda B}$ und der in Aufgabe 1.16 abgeleiteten Formel (1.16-6) folgt zunächst

$$\frac{dG}{d\lambda} = e^{\lambda A}\,(A+B)\,e^{\lambda B} = e^{\lambda A}\,(A+B)\,e^{-\lambda A}\,G = \left(A + e^{\lambda A} B\, e^{-\lambda A}\right) G\,.$$

Da voraussetzungsgemäß $[A,[A,B]] = \mathbb{0}$ gilt, folgt weiter mit der in Aufgabe 1.20 bewiesenen Formel (1.20-1)

$$e^{\lambda A} B\, e^{-\lambda A} = B + \lambda\,[A,B]\,.$$

Die operatorwertige Funktion $G(\lambda)$ muss also Lösung der Operator-Differentialgleichung

$$\frac{dG(\lambda)}{d\lambda} = \Big(A + B + \lambda\,[A,B]\Big)\, G(\lambda)$$

zur Anfangsbedingung $G(0) = \mathbb{1}$ sein. Wegen $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = \mathbb{0}$ vertauscht $A+B$ mit $[A,B]$ und man kann die Operator-Differentialgleichung wie eine Differentialgleichung für eine gewöhnliche Variable integrieren:

$$\frac{dg(\lambda)}{d\lambda} = (\alpha + \beta\lambda)\, g(\lambda)\,, \quad \text{AB: } g(0) = 1 \quad \Rightarrow \quad g(\lambda) = e^{\alpha\lambda + (\beta/2)\lambda^2}\,.$$

Es folgt daher für $G(1) = e^A\, e^B$

$$e^A\, e^B = e^{A+B+(1/2)[A,B]}\,, \tag{1.21-1a}$$
$$\text{falls} \quad [A,[A,B]] = [B,[A,B]] = \mathbb{0} \tag{1.21-1b}$$

und analog

$$e^B\, e^A = e^{B+A+(1/2)[B,A]} = e^{A+B-(1/2)[A,B]}\,.$$

Da $A+B$ mit $[A,B]$ vertauscht, kann man stattdessen auch schreiben:

$$e^{A+B} = e^A\, e^B\, e^{-(1/2)[A,B]} = e^B\, e^A\, e^{(1/2)[A,B]}\,, \tag{1.21-2a}$$
$$\text{falls} \quad [A,[A,B]] = [B,[A,B]] = \mathbb{0}\,. \tag{1.21-2b}$$

(a) Wegen $[B_j, B_k] = \mathbb{0},\ \forall\, j,k$, folgt

$$e^{-iB_1 d_1}\, e^{-iB_2 d_2}\, e^{-iB_3 d_3} = e^{-i(B_1 d_1 + B_2 d_2 + B_3 d_3)}\,. \tag{1.21-3}$$

(b) Wegen $[A, B] = i\mathbb{1}$ ist (1.21-1b) erfüllt, und es folgt mit Gl. (1.21-1a)

$$e^{iAc}\, e^{iBd} = e^{i[Ac+Bd-(cd/2)\mathbb{1}]}\,. \tag{1.21-4}$$

Da

$$[Bd, Ac + Bd - (cd/2)\mathbb{1}] = cd\,[B, A] = -icd\mathbb{1}$$

gilt, ist die Formel (1.21-1a) auch auf das Produkt von e^{-iBd} mit der rechten Seite von Gl. (1.21-4) anwendbar. Somit gilt

$$e^{-iBd}\, e^{iAc}\, e^{iBd} = e^{i(A-d\mathbb{1})c}\,. \tag{1.21-5}$$

Bemerkungen

Aus den Bemerkungen zu Aufgabe 1.16 ergibt sich, dass die Ableitung der Formel (1.21-1a) mithilfe der Operator-Differentialgleichung für $G(\lambda)$ mathematisch streng ist.

Die unter der Voraussetzung (1.21-1b) gültige Formel (1.21-1a) stellt einen Spezialfall des *Baker-Campbell-Hausdorff Theorems*[7] der Gruppentheorie dar. Dieses Theorem besagt u. a. folgendes: Bei gegebenem A, B lässt sich in

$$e^A\, e^B = e^C \tag{1.21-6}$$

der Operator C als Linearkombination von A, B, sowie des Kommutators $[A, B]$ und der mehrfachen Kommutatoren $[A, [A, B]]$, $[B, [A, B]]$, $[A, [B, [A, B]]] \equiv [B, [A, [A, B]]]$ usf. ausdrücken. Die ersten Terme dieser Linearkombination lauten

$$C = A + B + \frac{1}{2}\,[A, B] + \frac{1}{12}\,[A, [A, B]] - \frac{1}{12}\,[B, [A, B]] - \frac{1}{24}\,[A, [B, [A, B]]] + \ldots\,, \tag{1.21-7}$$

weitere Terme können aus einer Rekursionsformel bestimmt werden. Für die praktische Anwendung ist die Formel für C natürlich nur dann nützlich, wenn die mehrfachen Kommutatoren ab einer relativ niedrigen Ordnung null sind.

Unter der Voraussetzung (1.21-1b) erhält man aus (1.21-6), (1.21-7) sofort wieder die Formel (1.21-1a). Analog gilt

$$e^A\, e^B = e^{A+B+(1/2)[A,B]+(1/12)[A,[A,B]]-(1/12)[B,[A,B]]}\,, \tag{1.21-8a}$$

$$\text{falls} \quad [A, [B, [A, B]]] \equiv [B, [A, [A, B]]] = \mathbb{0} \tag{1.21-8b}$$

ist etc.

Beispiele aus der Quantenmechanik zu (a) und (b):

(S. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.18 und die Bemerkungen zu Aufgabe 1.20.)

zu (b):

$A = X$ Ortsoperator; $B = P/\hbar$, P Impulsoperator;

$[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$ kanonischer Kommutator;

$T(d) = \exp\left[-(i/\hbar)\,Pd\right]$, $d \in \mathbb{R}$, Translationsoperator,

$\left[\exp\left(iXc\right)\right]' \equiv T(d)\,\exp\left(iXc\right)T^{\dagger}(d) = \exp\left[i(X - d\mathbb{1})c\right]$

Transformation des Operators e^{iXc} bei der Translation $x' \equiv \mathscr{T}(d)\,x := x + d$.

[7] Siehe z. B. Naimark, M. A., und A. I. Štern: Theory of Group Representations. Springer-Verlag, Berlin 1982.

zu (a):

$$B_j = P_j/\hbar\,;\;\; P_j\,,\;\; j = 1,2,3\,,\;\; \text{kartesische Komponenten des Impulsoperators.}$$

Die Beziehung

$$\exp[-(i/\hbar)\,P_1 d_1]\,\exp[-(i/\hbar)\,P_2 d_2]\,\exp[-(i/\hbar)\,P_3 d_3] = \exp[-(i/\hbar)\,\vec{P}\cdot\vec{d}\,] \tag{1.21-9}$$

drückt aus: erstens die Vertauschbarkeit der Translationen $T_1(d_1)$, $T_2(d_2)$, $T_3(d_3)$ bezüglich dreier paarweise orthogonaler Raumrichtungen; zweitens die Tatsache, dass das Ergebnis der zusammengesetzten Transformation auch durch die Translation $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{T}(\vec{d})\,\vec{r} := \vec{r} + \vec{d}$, also durch eine *einzige* Translation um die Strecke $|\vec{d}\,| = (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2)^{1/2}$ in Richtung $\vec{d}/|\vec{d}\,|$, erreicht werden kann.

1.22* *Ja.* Da C selbstadjungiert ist und ein rein diskretes Spektrum besitzt, bilden die Eigenvektoren von C in dem betreffenden Hilbertraum $\mathscr{H}$ ein vollständiges Orthonormalsystem. Da die Eigenwerte von C nicht entartet sind, ist jeder Eigenvektor von C wegen $[A, C] = \mathbb{0}$ auch Eigenvektor von A und wegen $[B, C] = \mathbb{0}$ Eigenvektor von B. Damit sind den Operatoren A und B im Basissystem der Eigenvektoren von C Diagonalmatrizen $\widehat{A}, \widehat{B}$ zugeordnet. Diagonalmatrizen sind vertauschbar. Da die Eigenschaft der Vertauschbarkeit basisunabhängig ist, gilt für die Operatoren selbst $[A, B] = \mathbb{0}$.

Bemerkungen

Für *nicht beschränkte selbstadjungierte Operatoren*, deren Definitionsbereiche nur echte Teilräume des betreffenden (unendlich dimensionalen) Hilbertraumes $\mathscr{H}$ sein können (s. dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, insbesondere Gl. (1.14-19)), lassen sich die obigen Aussagen bei mathematisch strenger Betrachtungsweise nicht ohne Einschränkungen übernehmen. Schon der fundamentale Begriff der *Vertauschbarkeit selbstadjungierter Operatoren* kann dann nicht mehr über den Kommutator der Operatoren definiert werden, da die Definitionsbereiche der Operatorprodukte zu beachten sind. Näheres dazu findet der Leser in Abschnitt 18.2 von [10].

1.23 EW-Problem:

$$\widehat{A}\,\widehat{u} = a\,\widehat{u}\,, \qquad \widehat{u}\ \text{Spaltenmatrix}, \quad \widehat{u} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad a\ \text{EW-Parameter;}$$

Säkulargleichung (charakteristische Gleichung):

$$\det(\widehat{A} - a\,\widehat{\mathbb{1}}) = 0\,, \qquad \text{d. i.} \quad \begin{vmatrix} -a & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -a & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -a \end{vmatrix} = 0$$

$$\text{bzw.} \quad -a^3 + a = 0 \quad \Rightarrow \quad a_1 = +1\,, \quad a_2 = 0\,, \quad a_3 = -1 \qquad \text{(1.23-1)}$$
$$\text{EW (nicht entartet).}$$

EV: $\widehat{A}\,\widehat{u}_j = a_j\,\widehat{u}_j\,, \quad j = 1,2,3\,;$ gibt nach Normierung gemäß $\widehat{u}^\dagger\,\widehat{u} = 1$

$$\widehat{u}_1 = e^{i\gamma_1}\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \qquad \widehat{u}_2 = e^{i\gamma_2}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \qquad \widehat{u}_3 = e^{i\gamma_3}\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}. \qquad \text{(1.23-2)}$$

Die normierten Eigenmatrizen von $\widehat{A}$ sind nur bis auf unimodulare Faktoren bestimmt. Orthogonalität der Eigenmatrizen:

$$\widehat{u}_1^\dagger\,\widehat{u}_2 = e^{i(\gamma_2-\gamma_1)}\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

Analog: $\widehat{u}_1^\dagger\,\widehat{u}_3 = \widehat{u}_2^\dagger\,\widehat{u}_3 = 0\,.$

Bemerkungen

In der Quantentheorie des Drehimpulses hat die Matrix $\widehat{J}_y = \hbar\,\widehat{A}$ die Bedeutung der Matrix der y-Komponente des Operators eines Drehimpulses $j = 1$ in der $\{m_j\}$-Darstellung ($\widehat{J}_z$ diagonal). Ihre Eigenwerte $+\hbar, 0, -\hbar$ sind die möglichen Messwerte der y-Komponente des Drehimpulses, und $\widehat{u}_k,\ k = 1,2,3$, sind die Matrizen, welche die entsprechenden Eigenvektoren von J_y in der $\{m_j\}$-Darstellung repräsentieren. Siehe die Formeln (A.7-4), (A.7-5) von Anhang A.7.

1.24 **(a)** $(\widehat{A}^{\{e\}})_{jk} = \langle\, e_j \,|\, A \,|\, e_k \,\rangle\,, \quad (\widehat{B}^{\{e\}})_{jk} = \langle\, e_j \,|\, B \,|\, e_k \,\rangle\,, \quad j,k = 1,2,3 \quad \Rightarrow$

$$\widehat{A}^{\{e\}} = \begin{bmatrix} 3 & i\sqrt{2} & 1 \\ -i\sqrt{2} & 2 & i\sqrt{2} \\ 1 & -i\sqrt{2} & 3 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{B}^{\{e\}} = \begin{bmatrix} 1 & -i\sqrt{2} & 1 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 1 & i\sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}. \qquad \text{(1.24-1)}$$

(b) Die Operatoren A, B sind dann und nur dann selbstadjungiert (hermitesch), falls die Matrizen $\widehat{A}^{\{e\}}$, $\widehat{B}^{\{e\}}$ selbstadjungiert (hermitesch) sind. Die Selbstadjungiertheit dieser Matrizen ist aber aus (1.24-1) unmittelbar ersichtlich. Es gilt somit

$$A^\dagger = A\,, \qquad B^\dagger = B\,. \qquad \text{(1.24-2)}$$

Die Operatoren A, B sind dann und nur dann vertauschbar, falls die Matrizen $\widehat{A}^{\{e\}}$, $\widehat{B}^{\{e\}}$ vertauschbar sind. Die Vertauschbarkeit dieser Matrizen ist aber gezeigt, wenn die Selbstadjungiertheit von $\widehat{A}^{\{e\}}\widehat{B}^{\{e\}}$ gezeigt ist. (Siehe die Aussage (1.6-1) von Aufgabe 1.6.) Bildung des Matrizenproduktes $\widehat{A}^{\{e\}}\widehat{B}^{\{e\}}$ gibt:

$$\widehat{A}^{\{e\}}\widehat{B}^{\{e\}} = \begin{bmatrix} 2 & -2i\sqrt{2} & 6 \\ 2i\sqrt{2} & -4 & -2i\sqrt{2} \\ 6 & 2i\sqrt{2} & 2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \widehat{A}^{\{e\}}\widehat{B}^{\{e\}} = (\widehat{A}^{\{e\}}\widehat{B}^{\{e\}})^{\dagger}\,,$$

also auch

$$[A, B] = \mathbb{0}\,. \tag{1.24-3}$$

(c) *Hinweis:* Leser, die mit dem Begriff des *Normaloperators* nicht vertraut sind, sollten zuerst den Lösungsweg 2 durchrechnen, anschließend die Bemerkungen zu Aufgabe 1.26 über Normaloperatoren lesen und erst dann den Lösungsweg 1 ansehen.

Lösungsweg 1:

$$\left.\begin{array}{l} A, B \text{ selbstadjungiert} \\ [A, B] = \mathbb{0} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad C := A + iB \quad \text{ist Normaloperator}$$

und es gelten folgende Aussagen (s. dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 1.26): C besitzt ein Orthonormalsystem $\{\,|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle, |\,f_3\,\rangle\}$ von Eigenvektoren, welche gemeinsame Eigenvektoren von A und B sind. Ist $c = a + ib$ ein Eigenwert von C, so ist a ein Eigenwert von A und b ein Eigenwert von B. Kennt man die Eigenwerte von C samt ihren Vielfachheiten, so gilt dasselbe von den Eigenwerten von A bzw. von B.
EW-Problem von C:

$$C\,|\,f\,\rangle = \lambda\,|\,f\,\rangle\,, \qquad |\,f\,\rangle \neq \emptyset\,, \quad \lambda \text{ EW-Parameter.} \tag{1.24-4}$$

In $\{e\}$-Darstellung angeschrieben:

$$\widehat{C}^{\{e\}}\widehat{f}^{\{e\}} = \lambda\,\widehat{f}^{\{e\}}\,, \qquad \widehat{f}^{\{e\}} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1.24-5a}$$

mit

$$\widehat{C}^{\{e\}} = \widehat{A}^{\{e\}} + i\,\widehat{B}^{\{e\}} = \begin{bmatrix} 3+i & \sqrt{2}\,(1+i) & 1+i \\ -\sqrt{2}\,(1+i) & 2 & \sqrt{2}\,(1+i) \\ 1+i & -\sqrt{2}\,(1+i) & 3+i \end{bmatrix}. \tag{1.24-5b}$$

Säkulargleichung (charakteristische Gleichung): $\det\,(\widehat{C}^{\{e\}} - \lambda\,\widehat{\mathbb{1}}) = 0$, d. i.

$$\begin{vmatrix} 3+i-\lambda & \sqrt{2}\,(1+i) & 1+i \\ -\sqrt{2}\,(1+i) & 2-\lambda & \sqrt{2}\,(1+i) \\ 1+i & -\sqrt{2}\,(1+i) & 3+i-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \tag{1.24-6}$$

$$\lambda^3 - 2i\lambda^2 - 8\lambda^2 + 16i\lambda + 20\lambda - 40i = 0\,. \tag{1.24-7}$$

Eine Wurzel dieser Gleichung dritten Grades für λ kann man leicht erraten, denn für $\lambda = 2i$ fällt der zweite gegen den ersten, der vierte gegen den dritten und der sechste gegen den fünften Term weg. Somit: $\lambda_1 = 2i$. Wegen

$$(\lambda^3 - 2i\lambda^2 - 8\lambda^2 + 16i\lambda + 20\lambda - 40i) : (\lambda - 2i) = \lambda^2 - 8\lambda + 20$$

folgt mit $\lambda^2 - 8\lambda + 20 = 0$ weiter $\lambda_{2,3} = 4 \pm 2i$. Somit:

$$\left.\begin{array}{lll} \text{EW-Spektrum von } C: & c_1 = 2i & \text{1fach} \\ & c_2 = 4 + 2i & \text{1fach} \\ & c_3 = 4 - 2i & \text{1fach} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \tag{1.24-8}$$

$$\left.\begin{array}{lll} \text{EW-Spektrum von } A: & a_1 = 0 & \text{1fach (nicht entartet)} \\ & a_2 = 4 & \text{2fach (entartet)} \end{array}\right\} \tag{1.24-9}$$

$$\left.\begin{array}{lll} \text{EW-Spektrum von } B: & b_1 = -2 & \text{1fach (nicht entartet)} \\ & b_2 = 2 & \text{2fach (entartet)} \end{array}\right\} \tag{1.24-10}$$

Da alle Eigenwerte von C nicht entartet sind, sind die normierten Eigenvektoren $|\, f_1 \,\rangle$, $|\, f_2 \,\rangle$, $|\, f_3 \,\rangle$ von C bis auf unimodulare Faktoren eindeutig bestimmt (alle Eigenräume bzgl. C sind eindimensional). Es gilt dabei

$$|\, f_1 \,\rangle = |\, a_1\, b_2 \,\rangle\,, \quad |\, f_2 \,\rangle = |\, a_2\, b_2 \,\rangle\,, \quad |\, f_3 \,\rangle = |\, a_2\, b_1 \,\rangle\,, \tag{1.24-11}$$

d. h. $|\, f_1 \,\rangle$ ist Eigenvektor von A zum Eigenwert $a_1 = 0$ und Eigenvektor von B zum Eigenwert $b_2 = 2$ usf.

Beachte: Es gibt *keinen* gemeinsamen Eigenvektor von A, B zum Eigenwertpaar $\{a_1, b_1\}$. Da a_1 nur zusammen mit b_2 und b_1 nur zusammen mit a_2 vorkommt, könnte man auch $|\, f_1 \,\rangle = |\, a_1\, b_2 \,\rangle \equiv |\, a_1 \,\rangle$, $|\, f_3 \,\rangle = |\, a_2\, b_1 \,\rangle \equiv |\, b_1 \,\rangle$ schreiben.

EV:

$$\widehat{C}^{\{e\}}\, \widehat{f}_j^{\{e\}} = c_j\, \widehat{f}_j^{\{e\}}, \quad j = 1, 2, 3; \quad \text{gibt nach Normierung gemäß } \widehat{f}^{\{e\}\dagger}\, \widehat{f}^{\{e\}} = 1$$

$$\widehat{f}_1^{\{e\}} = e^{i\gamma_1} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \qquad \widehat{f}_2^{\{e\}} = e^{i\gamma_2} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \qquad \widehat{f}_3^{\{e\}} = e^{i\gamma_3} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Für die Ketvektoren $|\, f_1 \,\rangle$, $|\, f_2 \,\rangle$, $|\, f_3 \,\rangle$ gilt entsprechend

$$|\, f_1 \,\rangle = |\, a_1\, b_2 \,\rangle = e^{i\gamma_1} \left[\frac{1}{2} |\, e_1 \,\rangle + \frac{i\sqrt{2}}{2} |\, e_2 \,\rangle - \frac{1}{2} |\, e_3 \,\rangle \right], \tag{1.24-12a}$$

$$|\, f_2 \,\rangle = |\, a_2\, b_2 \,\rangle = e^{i\gamma_2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |\, e_1 \,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\, e_3 \,\rangle \right], \tag{1.24-12b}$$

$$|\, f_3 \,\rangle = |\, a_2\, b_1 \,\rangle = e^{i\gamma_3} \left[\frac{1}{2} |\, e_1 \,\rangle - \frac{i\sqrt{2}}{2} |\, e_2 \,\rangle - \frac{1}{2} |\, e_3 \,\rangle \right]. \tag{1.24-12c}$$

Verifiziere, dass

$$\langle f_j \,|\, f_k \rangle = \delta_{jk} \,, \qquad j,k = 1,2,3 \tag{1.24-13}$$

gilt.

Lösungsweg 2 (nur skizziert): Man löst zunächst das Eigenwertproblem von A, als wäre A alleine gegeben. Aus der Säkulargleichung erhält man die Eigenwerte $a_1 = 0$ (1fach) und $a_2 = 4$ (2fach). Da a_1 nicht entartet ist, ist der zugehörige normierte Eigenvektor $|\, g_1 \rangle \equiv |\, a_1 \rangle$ von A bis auf einen unimodularen Faktor eindeutig bestimmt und durch $|\, f_1 \rangle$ Gl. (1.24-12a) gegeben:

$$|\, g_1 \rangle = |\, f_1 \rangle \,. \tag{1.24-14}$$

Wegen (1.24-3) muss $|\, g_1 \rangle$ automatisch auch Eigenvektor von B sein. Wendet man B auf $|\, g_1 \rangle$ an, so findet man $B\,|\, g_1 \rangle = 2\,|\, g_1 \rangle$, d. h. $|\, g_1 \rangle \equiv |\, a_1 \rangle = |\, f_1 \rangle$ ist *gemeinsamer* Eigenvektor von A und B zum Eigenwert $a_1 = 0$ von A und 2 von B. (Will man die Eigenwerte von B ebenso wie die von A der Größe nach durchnummerieren, so bekommt dieser Eigenwert von B am Ende der Rechnung die Bezeichnung b_2, und es wird $|\, g_1 \rangle \equiv |\, a_1 \rangle = |\, a_1\, b_2 \rangle = |\, f_1 \rangle$.) Da a_2 entartet ist, sind die normierten Eigenvektoren von A zum Eigenwert a_2 *nicht* eindeutig (bis auf unimodulare Faktoren) bestimmt. *Jeder* Vektor des zweidimensionalen zu $|\, g_1 \rangle$ orthogonalen Teilraumes von $\mathscr{H}$, des Eigenraumes $\mathscr{H}(a_2)$ bzgl. A, ist Eigenvektor von A zum Eigenwert a_2. Wählt man auf irgendeine willkürliche Weise zwei orthonormierte derartige Vektoren $|\, g_2 \rangle \equiv |\, a_2\, 1 \rangle$, $|\, g_3 \rangle \equiv |\, a_2\, 2 \rangle$ aus, so stellt $\{\,|\, g_1 \rangle, |\, g_2 \rangle, |\, g_3 \rangle\}$ eine orthonormierte Basis von $\mathscr{H}$ dar. In dieser Basis ist die Matrix von A bereits „diagonal“,

$$\widehat{A}^{\{g\}} = \left[\begin{array}{c|cc} a_1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{array}\right], \tag{1.24-15}$$

die Matrix von B ist jedoch noch nicht „diagonal“, außer man hat zufällig in $\mathscr{H}(a_2)$ die Basis $\{\,|\, f_2 \rangle, |\, f_3 \rangle\}$ gewählt. Im Allgemeinen hat $\widehat{B}^{\{g\}}$ lediglich Blockgestalt bzgl. der Eigenräume $\mathscr{H}(a_1)$ und $\mathscr{H}(a_2)$:

$$\widehat{B}^{\{g\}} = \left[\begin{array}{c|cc} 2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & b_{32} & b_{33} \end{array}\right]. \tag{1.24-16}$$

Die Zahlen

$$b_{jk} \equiv \langle g_j \,|\, B \,|\, g_k \rangle \,, \qquad j,k = 2,3 \tag{1.24-17}$$

bilden die Elemente einer selbstadjungierten (2×2)-Matrix $\widehat{b}^{\{g\}}$, welche den Operator B im Teilraum $\mathscr{H}(a_2)$ in der Basis $\{\,|\, g_2 \rangle, |\, g_3 \rangle\}$ dieses Teilraumes repräsentiert. Wählt

man beispielsweise

$$|\,g_2\,\rangle = \frac{2+i}{2\sqrt{3}}\,|\,e_1\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\,e_2\,\rangle + \frac{2-i}{2\sqrt{3}}\,|\,e_3\,\rangle\,, \tag{1.24-18}$$

$$|\,g_3\,\rangle = \frac{1-i}{\sqrt{6}}\,|\,e_1\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,e_2\,\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{6}}\,|\,e_3\,\rangle \tag{1.24-19}$$

(verifiziere, dass $\langle\, g_j \,|\, g_k \,\rangle = \delta_{jk},\ j,k = 1,2,3$, gilt), so ergibt sich

$$b_{22} = -b_{33} = \frac{2}{3}\,, \quad b_{23} = b_{32} = \frac{4\sqrt{2}}{3}\,. \tag{1.24-20}$$

Man muss nun noch das Eigenwertproblem von $\widehat{b}^{\{g\}}$ lösen. Die zugehörige Säkulargleichung liefert (gleichgültig, welche Basis man in $\mathscr{H}(a_2)$ gewählt hat) die Eigenwerte 2 (1fach) und -2 (1fach), sodass man insgesamt für B die Eigenwerte $b_1 = -2$ (1fach) und $b_2 = 2$ (2fach) hat. Die Eigenmatrizen von $\widehat{b}^{\{g\}}$ liefern die gesuchten gemeinsamen Eigenvektoren $|\,f_2\,\rangle = |\,a_2\,b_2\,\rangle$, $|\,f_3\,\rangle = |\,a_2\,b_1\,\rangle$ in der $\{g\}$-Darstellung, und man kann daher $|\,f_2\,\rangle$, $|\,f_3\,\rangle$ als Linearkombinationen von $|\,g_2\,\rangle$, $|\,g_3\,\rangle$ anschreiben. Setzt man $|\,g_2\,\rangle$, $|\,g_3\,\rangle$ als Linearkombinationen von $|\,e_1\,\rangle$, $|\,e_2\,\rangle$, $|\,e_3\,\rangle$ ein, so erhält man schließlich die Vektoren $|\,f_2\,\rangle$, $|\,f_3\,\rangle$. Für die konkrete Wahl (1.24-18), (1.24-19) ergeben sich als Matrixelemente von $\widehat{b}^{\{g\}}$ die Zahlen von Gl. (1.24-20), und man erhält durch Lösen des Eigenwertproblems von $\widehat{b}^{\{g\}}$

$$|\,f_2\,\rangle = e^{i\gamma_2}\left[\sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,g_2\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,g_3\,\rangle\right], \tag{1.24-21}$$

$$|\,f_3\,\rangle = e^{i\gamma_3}\left[-\frac{i}{\sqrt{3}}\,|\,g_2\,\rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,g_3\,\rangle\right]. \tag{1.24-22}$$

Einsetzen von (1.24-18), (1.24-19) gibt wieder $|\,f_2\,\rangle$, $|\,f_3\,\rangle$ von Gl. (1.24-12b), (1.24-12c). Ich empfehle dem Leser, die Details der Rechnung selbständig zu ergänzen und auch eine eigene Wahl bzgl. $|\,g_2\,\rangle$, $|\,g_3\,\rangle$ zu treffen.

(d) Der Satz $\{A\}$ ist *nicht vollständig*, da ein mehrdimensionaler Eigenraum, nämlich $\mathscr{H}(a_2)$ („aufgespannt“ von $|\,f_2\,\rangle$, $|\,f_3\,\rangle$), existiert. Die Angabe eines Eigenwertes von A legt also nicht in jedem Falle einen zugehörigen normierten Eigenvektor (bis auf einen unimodularen Faktor) eindeutig fest.
Der Satz $\{B\}$ ist *nicht vollständig* (Begründung analog wie bei $\{A\}$).
Der Satz $\{A, B\}$ ist *vollständig*, da es zu jedem der möglichen Eigenwertpaare $\{a_1, b_2\}$, $\{a_2, b_2\}$, $\{a_2, b_1\}$ einen (bis auf einen unimodularen Faktor) eindeutig bestimmten normierten gemeinsamen Eigenvektor von A und B gibt, nämlich $|\,f_1\,\rangle$ bzw. $|\,f_2\,\rangle$ bzw. $|\,f_3\,\rangle$.

(e) $(\widehat{A}^{\{f\}})_{jk} = \langle\, f_j \,|\, A \,|\, f_k \,\rangle\,, \quad (\widehat{B}^{\{f\}})_{jk} = \langle\, f_j \,|\, B \,|\, f_k \,\rangle\,, \quad j,k = 1,2,3 \quad \Rightarrow$

$$\widehat{A}^{\{f\}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{B}^{\{f\}} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \tag{1.24-23}$$

(Diagonalmatrizen mit den Eigenwerten in der Hauptdiagonale).

(f) $A^{-1} \nexists$, da A den Eigenwert null besitzt ($\Rightarrow \exists\ |\,u\,\rangle \neq \emptyset$ mit $A\,|\,u\,\rangle = \emptyset$).
$B^{-1}\ \exists$, da null nicht Eigenwert von B ist. Es gilt (Spektralform von B bzw. von B^{-1}):

$$B = |\,f_1\,\rangle\,2\,\langle\,f_1\,| + |\,f_2\,\rangle\,2\,\langle\,f_2\,| + |\,f_3\,\rangle\,(-2)\,\langle\,f_3\,| \quad \Rightarrow$$

$$B^{-1} = |\,f_1\,\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle\,f_1\,| + |\,f_2\,\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle\,f_2\,| + |\,f_3\,\rangle\left(-\frac{1}{2}\right)\langle\,f_3\,| = \frac{1}{4}\,B\,, \tag{1.24-24}$$

also

$$B^{-1}\,|\,e_1\,\rangle = \frac{1}{4}\,|\,e_1\,\rangle + \frac{i\sqrt{2}}{4}\,|\,e_2\,\rangle + \frac{1}{4}\,|\,e_3\,\rangle\,, \tag{1.24-25a}$$

$$B^{-1}\,|\,e_2\,\rangle = -\frac{i\sqrt{2}}{4}\,|\,e_1\,\rangle + \frac{i\sqrt{2}}{4}\,|\,e_3\,\rangle\,, \tag{1.24-25b}$$

$$B^{-1}\,|\,e_3\,\rangle = \frac{1}{4}\,|\,e_1\,\rangle - \frac{i\sqrt{2}}{4}\,|\,e_2\,\rangle + \frac{1}{4}\,|\,e_3\,\rangle\,. \tag{1.24-25c}$$

Bemerkungen

Nehmen wir einmal an, die selbstadjungierten Operatoren A, B repräsentieren zwei Observablen $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ eines quantenmechanischen Systems. Der Satz $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$ ist dann ein *vollständiger Satz* unabhängiger verträglicher Observablen. Während man bei einer Messung von $\mathcal{A}$ *allein* als Messwert $a_1 = 0$ oder $a_2 = 4$ und bei einer Messung von $\mathcal{B}$ *allein* als Messwert $b_1 = -2$ oder $b_2 = 2$ erhalten kann, kann man bei einer Messung des *Satzes* $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$, d. h. bei einer Messung von $\mathcal{A}$ *und* $\mathcal{B}$ *zugleich*, nur eines der drei Messwertpaare $\{a_1, b_2\}$, $\{a_2, b_2\}$, $\{a_2, b_1\}$ finden. Dagegen ist $\{a_1, b_1\}$ *kein* mögliches Messwertpaar für den Observablensatz $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$.

Die Spaltenmatrizen $\widehat{f}_j^{\{e\}}$ sind mit den Spaltenmatrizen $\widehat{u}_j$ von Aufgabe 1.23, Gl. (1.23-2) identisch. Die selbstadjungierte Matrix $\widehat{A}$ von Aufgabe 1.23 muss sich daher als Linearkombination der selbstadjungierten Matrizen $\widehat{A}^{\{e\}}$, $\widehat{B}^{\{e\}}$ von Gl. (1.24-1) und der Einheitsmatrix $\widehat{\mathbb{1}}$ mit reellen Koeffizienten schreiben lassen. Der Leser bestimme diese Linearkombination.

Beim Lösen von Eigenwertproblemen hat man es in der Quantenmechanik oft mit folgender Situation zu tun: Man hat das Eigenwertproblem für einen selbstadjungierten Operator B in einem endlich dimensionalen Teilraum $\mathscr{H}$ des Zustandsraumes zu lösen, wegen der hohen Dimensionszahl dieses Teilraumes ist aber das Berechnen der Eigenwerte und Eigenvektoren nur numerisch möglich und sehr aufwendig. Kennt man dann „zufällig“ einen von B unabhängigen, mit B vertauschbaren selbstadjungierten Operator A, für den die Lösung des Eigenwertproblems in dem betreffenden Teilraum $\mathscr{H}$ bekannt ist, so wählt man als Basis in $\mathscr{H}$ die bekannten Eigenvektoren von A, wodurch die Matrix von B in $\mathscr{H}$ Blockgestalt bzgl. der Eigenräume $\mathscr{H}(a_1) \subset \mathscr{H}$, $\mathscr{H}(a_2) \subset \mathscr{H}$, ... von A annimmt. Zu lösen bleiben dann „nur“ mehr die Eigenwertprobleme für diese niedriger dimensionalen Blöcke, was den Rechenaufwand erheblich vermindert. Durch Hinzunehmen weiterer untereinander und mit B und A vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren, für welche die Lösung des Eigenwertproblems in $\mathscr{H}$ bekannt ist, kann man das Verfahren noch weiter ausbauen und noch „kleinere“ Blöcke für die Matrix von B erhalten. Unter Umständen kann man dadurch zu Säkulargleichungen gelangen, deren Grad so niedrig ist, dass die Eigenwerte durch Wurzelausdrücke darstellbar sind, sodass man

das Eigenwertproblem lösen kann, ohne numerische Methoden heranziehen zu müssen. Die Gruppentheorie liefert das mathematische Rüstzeug dafür, derartige Methoden zur Vereinfachung von Eigenwertproblemen, ausgehend von den Symmetrien quantenmechanischer Systeme, *systematisch* zu entwickeln, sodass man nicht mehr auf das „zufällige“ Kennen von Größen wie A angewiesen ist.

1.25 Eigenwertproblem von A in $\mathscr{D}_A$ (a Eigenwertparameter):

$$Au = au\,, \quad \text{d. h.} \quad -i\alpha\, u'(x) = a\, u(x)\,; \quad u \in \mathscr{D}_A\,, \quad u \neq \emptyset\,. \tag{1.25-1}$$

Allgemeine Lösung der Differentialgleichung (1.25-1) (ohne Berücksichtigung der Bedingung $u \in \mathscr{D}_A$):

$$u(x) = C\, e^{ikx}\,, \qquad k := \tfrac{a}{\alpha}\,. \tag{1.25-2}$$

Die Forderung $u \in \mathscr{D}_A$ beinhaltet für die gesuchten Eigenfunktionen die „Periodizitätsbedingung“

$$u(+\tfrac{L}{2}) = u(-\tfrac{L}{2}) \qquad \Rightarrow \qquad e^{ikL} = 1 \quad \Rightarrow \tag{1.25-3}$$

$$k = k_n = \tfrac{2\pi}{L}\, n\,, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad \Rightarrow \tag{1.25-4}$$

Eigenwerte und zugehörige Eigenfunktionen:

$$a_n = \alpha k_n = \tfrac{2\pi\alpha}{L}\, n\,, \quad u_n(x) = C_n\, e^{ik_n x}\,; \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1.25-5}$$

Das Spektrum von A in $\mathscr{D}_A$ ist rein diskret, die Eigenwerte sind nicht entartet, und die Eigenfunktionen sind normierbar. Bei Normierung der Eigenfunktionen auf eins (freie unimodulare Faktoren $e^{i\gamma_n}$ willkürlich eins gesetzt) hat man

$$C_n = \tfrac{1}{\sqrt{L}}\,, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1.25-6}$$

Die normierten Eigenfunktionen bilden im Hilbertraum $\mathscr{H} = L^2\big(\big[-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\big]\big)$ – wie von den Fourierreihen bekannt ist – ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx\, u_n^*(x)\, u_{n'}(x) = \delta_{nn'}\,, \qquad \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n^*(x)\, u_n(x') = \delta(x - x')\,. \tag{1.25-7}$$

Bemerkungen

A in $\mathscr{D}_A$ ist also nicht nur hermitesch (wie in Aufgabe 1.14 bewiesen wurde), sondern sogar selbstadjungiert. Siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14, Fall IV, und Anhang A.4, Gl. (A.4-7) bis (A.4-11).

Die Bezeichnungen *Periodizitätsbedingung* bzw. *periodische Randbedingung* bzw. *Born-Kármán-Randbedingung* und die Bezeichnung *Periodizitätsintervall* stammen aus der Festkörperphysik. Die tatsächlichen physikalischen Randbedingungen für einen endlichen Kristall hängen von

den speziellen Gegebenheiten ab und lassen sich nur sehr schwer angeben. Für einen hinreichend großen Kristall kann man sie – wie man beweisen kann[8] – näherungsweise durch „künstliche“ Randbedingungen der obigen Art ersetzen, wofern man auf Aussagen über Oberflächeneffekte verzichtet. Anschaulich kann man sich dazu in Gedanken vorstellen, man habe lauter gleichartige Kristalle periodisch mit der Periode L aneinander gereiht, und alle Eigenfunktionen erfüllten eine echte Periodizitätsbedingung $u(x+L) = u(x)\,,\ \ \forall\, x \in \mathbb{R}$.

1.26*

$$A\,|\,a\,\rangle = a\,|\,a\,\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad \langle\, a\,|\,A^\dagger = a^*\langle\, a\,| \quad \Rightarrow$$

$$\langle\, a\,|\,\underbrace{A^\dagger\,|\,a\,\rangle} = a^*\langle\, a\,|\,a\,\rangle = a^* \quad \Rightarrow$$

$$A^\dagger\,|\,a\,\rangle = a^*\,|\,a\,\rangle + |\,\chi\,\rangle \quad \text{mit} \quad \langle\, a\,|\,\chi\,\rangle = 0\,.$$

Zu zeigen bleibt $|\,\chi\,\rangle = \emptyset$ bzw. $\langle\,\chi\,|\,\chi\,\rangle = 0$:

$$\begin{aligned}
\langle\,\chi\,|\,\chi\,\rangle &= \Big[\langle\, a\,|\,A - a\,\langle\, a\,|\,\Big]\Big[A^\dagger\,|\,a\,\rangle - a^*|\,a\,\rangle\Big] \\
&= \langle\, a\,|\,A\,A^\dagger\,|\,a\,\rangle - a\underbrace{\langle\, a\,|\,A^\dagger\,|\,a\,\rangle}_{a^*} - \underbrace{a^*\langle\, a\,|}_{\langle\, a\,|\,A^\dagger} A\,|\,a\,\rangle + a\,a^*\underbrace{\langle\, a\,|\,a\,\rangle}_{1} \\
&= \langle\, a\,|\,\underbrace{(A\,A^\dagger - A^\dagger A)}_{\mathbb{0}}\,|\,a\,\rangle = 0 \quad \Rightarrow \\
&\qquad A^\dagger\,|\,a\,\rangle = a^*\,|\,a\,\rangle\,. \qquad (1.26\text{-}1)
\end{aligned}$$

Bemerkungen

Ein beschränkter linearer Operator (s. Aufgabe 1.14, Gl. (1.14-19)) heißt *Normaloperator*, wenn

$$A\,A^\dagger = A^\dagger A \qquad (1.26\text{-}2)$$

gilt, d. h. wenn er mit seinem Adjungierten vertauscht. (S. dazu die Aufgabe 1.13.) Im Falle eines nicht beschränkten linearen Operators A in $\mathscr{D}_A \subset \mathscr{H}$ muss man zusätzlich zu (1.26-2) noch verlangen, dass $\mathscr{D}_A$ dichter Teilraum von $\mathscr{H}$ ist (s. dazu Aufgabe 1.14 nach Gl. (1.14-9)) und dass

$$\mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}_A \qquad (1.26\text{-}3)$$

gilt. Ein Normaloperator A in $\mathscr{D}_A \subseteq \mathscr{H}$ besitzt eine *Spektraldarstellung*. Für den Fall eines rein diskreten Spektrums angeschrieben ($a_j \in \mathbb{C}$ EW von A, P_j Projektionsoperator zum Eigenraum $\mathscr{H}(a_j)$, Summation über das gesamte Spektrum von A):

$$A = \sum_i a_i\,P_i \qquad (1.26\text{-}4)$$

[8] Siehe z. B. Valenta, L., und E. Jäger: Vorlesungen über Festkörpertheorie. Bd. 1, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1977.

mit

$$P_j^\dagger = P_j\,, \qquad P_j\,P_k = \delta_{jk}\,P_j \tag{1.26-5a}$$

$(P_j\,P_k = \mathbb{0},\ j \neq k,$ Orthogonalität der Eigenräume zu verschiedenen EW);

$$\sum_i P_i = \mathbb{1} \qquad \text{(Vollständigkeitsbeziehung);} \tag{1.26-5b}$$

$$\mathscr{D}_A = \Big\{ f \in \mathscr{H} \;\Big|\; \sum_i |a_i|^2\, \|P_i f\|^2 < +\infty \Big\}\,. \tag{1.26-5c}$$

Für den zu einem Normaloperator A in $\mathscr{D}_A$ adjungierten Operator gilt

$$A^\dagger = \sum_i a_i^*\, P_i\,, \qquad \mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}_A\,. \tag{1.26-6}$$

Der allgemeinste Normaloperator A in $\mathscr{D}_A \subseteq \mathscr{H}$ kann in der folgenden Form geschrieben werden:

$$A = R + iS \tag{1.26-7a}$$

mit

$$R := \frac{1}{2}\,(A + A^\dagger)\,, \qquad \mathscr{D}_R = \mathscr{D}_A \quad (\mathscr{D}_R = \mathscr{H} \text{ sicher, falls } R = \mathbb{0})\,; \tag{1.26-7b}$$

$$S := \frac{1}{2i}\,(A - A^\dagger)\,, \qquad \mathscr{D}_S = \mathscr{D}_A \quad (\mathscr{D}_S = \mathscr{H} \text{ sicher, falls } S = \mathbb{0})\,; \tag{1.26-7c}$$

$$R^\dagger = R\,, \quad S^\dagger = S\,, \quad [R,S] = \mathbb{0}\,. \tag{1.26-7d}$$

Als vertauschbare selbstadjungierte Operatoren besitzen R und S gemeinsame Eigenvektoren, welche ein orthogonales Basissystem von $\mathscr{H}$ bilden. Sind $r_1 < r_2 < \ldots$ $(r_i \in \mathbb{R})$ die Eigenwerte von R, $s_1 < s_2 < \ldots$ $(s_i \in \mathbb{R})$ die Eigenwerte von S, und $\{r_j, s_k\}$ die für den *Operatorensatz* $\{R, S\}$ möglichen Eigenwertpaare, d. h. jene Eigenwertpaare, zu denen *gemeinsame Eigenvektoren* $|\, r_j\, s_k\, \alpha\,\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots, g_{jk}$ $(g_{jk} \geq 1)$, von R und S existieren, so sind die Eigenwerte von A durch $r_j + is_k \in \mathbb{C}$, und die zugehörigen Eigenvektoren von A durch die entsprechenden gemeinsamen Eigenvektoren von R und S gegeben. Durch geeignetes Durchnummerieren der Eigenwerte $r_j + is_k$ erhält man dann die einfach indizierten Eigenwerte a_i von Gl. (1.26-4).

Repräsentieren R, S zwei quantenmechanische Observablen $\mathcal{R}, \mathcal{S}$, so sind diese *verträglich*. Bei einer Messung des *Observablensatzes* $\{\mathcal{R}, \mathcal{S}\}$, d. h. wenn man $\mathcal{R}$ und $\mathcal{S}$ *zugleich* misst, können ausschließlich die Eigenwertpaare $\{r_j, s_k\}$ gefunden werden. Gibt es beispielsweise zu $\{r_2, s_3\}$ keinen gemeinsamen Eigenvektor von R und S, so stellt $\{r_2, s_3\}$ kein mögliches Eigenwertpaar für den Operatorensatz dar, und man kann $\{r_2, s_3\}$ nicht als Messwertpaar erhalten, wenn man die Observablen $\mathcal{R}, \mathcal{S}$ zugleich misst. Bei einer Messung von $\mathcal{R}$ allein kann man natürlich r_2 finden, desgleichen s_3 bei einer Messung von $\mathcal{S}$ allein. Siehe auch Aufgabe 1.24.

Fallunterscheidungen:

(1) $A^\dagger = A$, d. h. A ist *selbstadjungiert*. Es gilt dann $R = A$, $\mathscr{D}_R = \mathscr{D}_A$ und $S = \mathbb{0}$, also $a_j = r_j \in \mathbb{R}$, und (1.26-4) ist die Spektraldarstellung eines selbstadjungierten Operators (s. Aufgabe 1.16, Gl. (1.16-11), (1.16-12)).

(2) $A^\dagger = -A$, d. h. A ist *anti-selbstadjungiert*. Es gilt dann $R = \mathbb{0}$ und $S = -iA$, $\mathscr{D}_S = \mathscr{D}_A$ sowie $a_j = is_j$ (rein imaginäre Eigenwerte). Siehe Aufgabe 1.13 und die Bemerkungen dazu.

(3) $A^\dagger \neq A\,,\ A^\dagger \neq -A$

(a) B selbstadjungierter Operator; $F(B)$, $G(B)$ selbstadjungierte Operatorfunktionen von B (mithilfe der Spektralform von B definiert; s. Aufgabe 1.16, Gl. (1.16-11) bis (1.16-13)), für welche $\mathscr{D}_{F(B)} = \mathscr{D}_{G(B)} \equiv \mathscr{D}$ gilt; ferner $R = F(B)$, $S = G(B)$. Es gilt dann $\mathscr{D}_A = \mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}$. – Wie in den Fällen 1 und 2 hat man es eigentlich nur mit *einem* selbstadjungierten Operator zu tun, alle anderen auftretenden (vom Nulloperator verschiedenen) Operatoren sind Funktionen dieses einen selbstadjungierten Operators.

Spezialfall:

$$
\begin{aligned}
&R = \cos B\,, \quad S = \sin B \quad \Rightarrow \\
&\mathscr{D}_R = \mathscr{D}_S = \mathscr{H}\ ; \quad a_j = \cos b_j + i \sin b_j = e^{ib_j}\ ; \\
&A = R + iS = e^{iB}\,, \qquad \mathscr{D}_A = \mathscr{H}\ ; \\
&A^\dagger = R - iS = e^{-iB}\,, \quad \mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}_A = \mathscr{H}\ ; \\
&A^\dagger = A^{-1}\,, \quad \text{d. h. } A \text{ ist unitär.}
\end{aligned}
$$

(b) R, S unabhängig, d. h. S lässt sich nicht als Operatorfunktion von R darstellen. Man muss jedoch $\mathscr{D}_R = \mathscr{D}_S$ (entsprechend der Forderung (1.26-3)) verlangen. Es stellt dann $\{R, S\}$ einen Satz von *zwei* unabhängigen selbstadjungierten Operatoren dar, und es gelten die oben angeschriebenen allgemeinen Aussagen mit dem Zusatz, dass dann jedenfalls die Eigenwerte $r_j + is_k$ von A nicht alle reell, nicht alle imaginär, nicht alle unimodular sein können.

S. auch Aufgabe 1.24, Lösungsweg 1.

1.27

$$
\left.\begin{aligned} &A\,|\,a\,\rangle = a\,|\,a\,\rangle \\ &\exists\ A^{-1} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad |\,a\,\rangle = A^{-1}A\,|\,a\,\rangle = A^{-1}a\,|\,a\,\rangle = a\,A^{-1}\,|\,a\,\rangle \quad \Rightarrow
$$

$$
A^{-1}\,|\,a\,\rangle = \frac{1}{a}\,|\,a\,\rangle\,. \tag{1.27-1}
$$

Dabei ist $a \neq 0$ gewährleistet, denn andernfalls wäre die Existenz von A^{-1} nicht gegeben.

1.28

(a)* Spektraldarstellung von A (s. Aufgabe 1.16, Gl. (1.16-11), (1.16-12)):

$$
A = \sum_i a_i P_i \tag{1.28-1a}
$$

mit

$$a_i^* = a_i\,, \tag{1.28-1b}$$

$$P_j^\dagger = P_j\,, \qquad P_j\,P_k = \delta_{jk}\,P_j\,, \qquad \sum_i P_i = \mathbb{1}\,. \tag{1.28-1c}$$

Somit

$$\left.\begin{aligned} &|\,u\,\rangle \neq \emptyset \\ &|\,u\,\rangle = \sum_i P_i\,|\,u\,\rangle \end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; P_i\,|\,u\,\rangle \neq \emptyset \iff \langle\,u\,|\,P_i^\dagger P_i\,|\,u\,\rangle = \langle\,u\,|\,P_i\,|\,u\,\rangle \neq 0 \quad \text{für mindest ein } i\,. \tag{1.28-2}$$

(a1) $a_i > 0,\ \forall\, i,$ *hinreichend*, denn:

$$\left.\begin{aligned} &a_i > 0,\ \forall\, i \\ &\langle\,u\,|\,P_i\,|\,u\,\rangle \neq 0 \quad \text{für mindest ein } i \end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; \langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle = \sum_i a_i\,\langle\,u\,|\,P_i\,|\,u\,\rangle > 0\,. \tag{1.28-3}$$

(Beachte, dass $\langle\,u\,|\,P_j\,|\,u\,\rangle = \langle\,u\,|\,P_j^\dagger P_j\,|\,u\,\rangle \geq 0\,,\ \forall\, j,$ gilt.)

$a_i > 0,\ \forall\, i,$ *notwendig*, denn:

$$\left.\begin{aligned} &\langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle = \sum_i a_i\,\langle\,u\,|\,P_i\,|\,u\,\rangle > 0\,, \\ &\qquad\qquad \forall\ |\,u\,\rangle \neq \emptyset,\ |\,u\,\rangle \in \mathscr{H}\,; \\ &|\,u\,\rangle = P_j\,|\,u\,\rangle \neq \emptyset \quad \text{gewählt } (j \text{ fest}) \end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; \langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle = a_j\,\langle\,u\,|\,u\,\rangle > 0 \quad \Rightarrow$$

$$a_j > 0 \ \ (j \text{ fest}). \tag{1.28-4}$$

Wählt man der Reihe nach Vektoren $|\,u\,\rangle$, für welche $|\,u\,\rangle = P_1\,|\,u\,\rangle \neq \emptyset$ bzw. $|\,u\,\rangle = P_2\,|\,u\,\rangle \neq \emptyset, \ldots$ gilt, so erhält man als notwendige Bedingungen der Reihe nach $a_1 > 0,\ a_2 > 0, \ldots$

(a2) Wie oben gezeigt wurde, ist ein selbstadjungierter Operator unter den getroffenen Annahmen genau dann positiv definit, wenn er lauter positive Eigenwerte besitzt. Ist A positiv definit, so existiert A^{-1}, da A nicht den Eigenwert null besitzt. Die Eigenwerte von A^{-1} sind durch die Kehrwerte der Eigenwerte von A gegeben, welche ebenfalls positiv sind:

$$A^{-1} = \sum_i \frac{1}{a_i}\,P_i\,; \quad a_i > 0\,,\ \forall\, i \ \Rightarrow\ \langle\,u\,|\,A^{-1}\,|\,u\,\rangle > 0\,,\ \forall\,|\,u\,\rangle \in \mathscr{H},\ |\,u\,\rangle \neq \emptyset\,. \tag{1.28-5}$$

(b) *Lösungsweg 1:* In der $\{e\}$-Darstellung gilt

$$|\,u\,\rangle \xrightarrow{\{e\}} \widehat{u}^{\{e\}} \equiv \widehat{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}, \qquad A \xrightarrow{\{e\}} \widehat{A}^{\{e\}} \equiv \widehat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 3 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 \end{bmatrix}; \tag{1.28-6}$$

$$\widehat{A} \text{ selbstadjungiert} \quad \Rightarrow \quad A \text{ selbstadjungiert;} \tag{1.28-7}$$

$$\langle\,u\,|\,A\,|\,u\,\rangle = \widehat{u}^{\dagger}\widehat{A}\,\widehat{u} = \begin{bmatrix} u_1^* & u_2^* & u_3^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 3 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}$$

$$= |u_1|^2 - \sqrt{2}\,u_1^* u_3 + 3\,|u_2|^2 - \sqrt{2}\,u_1 u_3^* + 5\,|u_3|^2$$

$$= |u_1|^2 - \sqrt{2}\,u_1^* u_3 - \sqrt{2}\,u_1 u_3^* + 2\,|u_3|^2 + 3\,|u_2|^2 + 3\,|u_3|^2$$

$$= |u_1 - \sqrt{2}\,u_3|^2 + 3\,|u_2|^2 + 3\,|u_3|^2 > 0\,, \quad \forall\,|\,u\,\rangle \in \mathscr{H}, \quad |\,u\,\rangle \neq \emptyset\,.$$

Lösungsweg 2: Bis zur Aussage (1.28-7) wie oben, dann Bestimmen der Eigenwerte von A aus der Säkulargleichung $\det(\widehat{A} - \lambda\,\widehat{\mathbb{1}}) = 0$ (λ EW-Parameter):

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 3-\lambda & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 5-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow$$

$$(1-\lambda)(3-\lambda)(5-\lambda) - 2\,(3-\lambda) = 0\,;$$

$$1)\ \lambda_1 = 3\,; \qquad 2)\ \lambda^2 - 6\lambda + 3 = 0\,, \quad \lambda_{2,3} = 3 \pm \sqrt{6} \quad \Rightarrow$$

EW-Spektrum von A: $a_1 = 3 - \sqrt{6} > 0$, $a_2 = 3 > 0$, $a_3 = 3 + \sqrt{6} > 0$. Nach der Aussage von Punkt (a1) ist damit A positiv definit.

Bemerkungen

Ist A nicht beschränkt, so gilt $\mathscr{D}_A \subset \mathscr{H}$ (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14). Man muss dann zur Schreibweise des Mathematikers übergehen und $|\,u\,\rangle \in \mathscr{H}$ durch $u \in \mathscr{D}_A$ ersetzen:

$$\left.\begin{array}{l} A \text{ in } \mathscr{D}_A \\ \text{positiv definit} \end{array}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} A^{\dagger} = A \\ (u, Au) > 0\,, \quad \forall\, u \in \mathscr{D}_A\,,\ u \neq \emptyset\,. \end{array}\right. \tag{1.28-8}$$

(Mit $A^{\dagger} = A$ ist dabei die Aussage (1.14-21) gemeint.) Ferner gilt dann für die Definitionsbereiche von A in $\mathscr{D}_A$ und A^{-1} in $\mathscr{D}_{A^{-1}}$ bei rein diskretem Spektrum Gl. (1.16-13b) mit $F(\xi) = \xi$ bzw. mit $F(\xi) = \xi^{-1}$.

Auf der Grundlage des Begriffs des positiv definiten Operators kann für selbstadjungierte Operatoren das Konzept der Operatorungleichungen eingeführt werden:

$$\left.\begin{array}{l} A^\dagger = A\,, \quad B^\dagger = B \\ (u, Au) > (u, Bu)\,, \quad \forall\, u \in \mathscr{D}_A \cap \mathscr{D}_B\,,\ u \neq \emptyset \end{array}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad A > B \ \text{ in } \ \mathscr{D}_A \cap \mathscr{D}_B\,. \tag{1.28-9}$$

Einige Näherungsmethoden zur Berechnung von unteren Schranken für die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren beruhen auf diesem Konzept.[9] – Die Aussage von Punkt (b) der obigen Aufgabe schreibt sich damit einfach als

$$A > \mathbb{0} \ \text{ in } \ \mathscr{D}_A \quad \Rightarrow \quad \exists\, A^{-1}\,,\ A^{-1} > \mathbb{0} \ \text{ in } \ \mathscr{D}_{A^{-1}}\,. \tag{1.28-10}$$

1.29* Spektraldarstellung von A (s. Aufgabe 1.16, Gl. (1.16-11), (1.16-12)):

$$A = \sum_{i=1}^{n} |\, a_i \,\rangle\, a_i \,\langle\, a_i \,|\,; \quad a_j \in \mathbb{R}\,,\ \forall\, j\,, \quad a_1 < a_2 < \ldots < a_n \tag{1.29-1}$$

mit

$$\langle\, a_j \,|\, a_k \,\rangle = \delta_{jk}\,, \qquad \sum_{i=1}^{n} |\, a_i \,\rangle\langle\, a_i \,| = \mathbb{1}\,. \tag{1.29-2}$$

Somit

$$\left.\begin{array}{rcl} \langle\, u \,|\, A \,|\, u \,\rangle = a_k & \Rightarrow & \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \langle\, u \,|\, a_i \,\rangle\, a_i \,\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle = a_k \\ \langle\, u \,|\, u \,\rangle = 1 & \Rightarrow & \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \langle\, u \,|\, a_i \,\rangle\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle = 1 \end{array}\right\} \quad \Rightarrow$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \,|\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle|^2 = a_k \sum_{i=1}^{n} |\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle|^2 \quad \Rightarrow \quad \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq k}}^{n} (a_i - a_k)\,|\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle|^2 = 0\,. \tag{1.29-3}$$

Ist a_k der kleinste [der größte] Eigenwert von A, d. h. $k = 1$ $[k = n]$, so folgt wegen $a_i - a_k > 0$ $[a_i - a_k < 0]$, $i \neq k$,

$$|\langle\, a_i \,|\, u \,\rangle|^2 = 0\,, \quad \forall\, i \neq k \tag{1.29-4}$$

und

$$\langle\, u \,|\, u \,\rangle = |\langle\, a_k \,|\, u \,\rangle|^2 = 1\,; \qquad \langle\, a_k \,|\, u \,\rangle = e^{i\gamma}\,, \quad \gamma \in [0, 2\pi)$$

und somit

$$|\, u \,\rangle = e^{i\gamma}\,|\, a_k \,\rangle \quad \text{falls} \quad k = 1 \ [k = n]\,. \tag{1.29-5}$$

Aus $\langle\, u \,|\, A \,|\, u \,\rangle = a_k$, $\langle\, u \,|\, u \,\rangle = 1$, folgt also dann und nur dann, dass $|\, u \,\rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert a_k ist, wenn a_k der kleinste oder der größte Eigenwert von A ist.

[9] Siehe dazu Weinstein, A., und W. Stenger: Methods of Intermediate Problems for Eigenvalues. Academic Press, New York 1972.

(Ist a_k weder der kleinste noch der größte Eigenwert, d. h. $k \neq 1,\ k \neq n$, so kann (1.29-3) auch erfüllt sein, wenn (1.29-4) nicht gilt.)

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 1.30 und die Aufgaben 6.11, 6.12.

1.30 $\Delta a = 0$ *notwendig*, denn:

$$\left.\begin{aligned} &A\,|\,u\rangle = \lambda\,|\,u\rangle \\ &A^\dagger = A \\ &\langle u\,|\,u\rangle = 1 \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \left\{\begin{aligned} &\langle u\,|\,A\,|\,u\rangle = \lambda\,, \quad \langle u\,|\,A^2\,|\,u\rangle = \lambda^2 \\ &(\Delta a)^2 = \langle u\,|\,[A - \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle\mathbb{1}]^2\,|\,u\rangle \\ &\qquad = \langle u\,|\,A^2\,|\,u\rangle - [\langle u\,|\,A\,|\,u\rangle]^2 = 0\,; \end{aligned}\right.$$

$\Delta a = 0$ *hinreichend*, denn:

$$\left.\begin{aligned} &(\Delta a)^2 = \langle u\,|\,[A - \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle\mathbb{1}]^2\,|\,u\rangle = 0 \\ &A^\dagger = A \quad\Rightarrow\quad \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle^* = \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle \\ &\langle u\,|\,u\rangle = 1 \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow$$

$$\underbrace{\langle u\,|\,[A^\dagger - \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle^*\mathbb{1}]}_{\langle v\,|}\underbrace{[A - \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle\mathbb{1}]\,|\,u\rangle}_{|\,v\rangle} = 0\,.$$

Da für das innere Produkt allgemein $\langle v\,|\,v\rangle = 0 \iff |\,v\rangle = \emptyset$ gilt, folgt

$$A\,|\,u\rangle = \langle u\,|\,A\,|\,u\rangle\,|\,u\rangle\,,$$

d. h. $|\,u\rangle$ ist Eigenvektor von A und $\langle u\,|\,A\,|\,u\rangle$ ist Eigenwert von A.

1.31* Ist $\{B, C\}$ ein vollständiger Satz von vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren in $\mathscr{H}$, so können die gemeinsamen Eigenvektoren von B und C durch die möglichen Eigenwertpaare $\{b_i, c_j\}$ zum Operatorensatz $\{B, C\}$ *vollständig* gekennzeichnet werden: $|\,b_i\,c_j\,\rangle$. Normiert man diese Eigenvektoren auf eins, so bilden sie ein orthonormiertes Basissystem in $\mathscr{H}$. Unter den gegebenen Voraussetzungen kann man eine für viele Anwendungen wichtige Aussage bzgl. der Matrixdarstellung des Operators A in diesem Basissystem ableiten. Zunächst einmal gilt

$$\left.\begin{aligned} &[A, C] = \mathbb{0} \\ &C^\dagger = C \\ &C\,|\,b_m\,c_n\,\rangle = c_n\,|\,b_m\,c_n\,\rangle\,, \quad \forall\, m, n \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \left\{\begin{aligned} &0 = \langle b_i\,c_j\,|\,[A, C]\,|\,b_k\,c_l\,\rangle \\ &\quad = (c_l - c_j)\,\langle b_i\,c_j\,|\,A\,|\,b_k\,c_l\,\rangle\,, \\ &\qquad\qquad \forall\, i, j, k, l\,. \end{aligned}\right.$$

Wegen $c_l - c_j \neq 0$ für $l \neq j$ folgt weiter

$$\langle b_i\,c_j\,|\,A\,|\,b_k\,c_l\,\rangle = 0 \quad \text{für} \quad l \neq j\,. \tag{1.31-1}$$

Speziell ist dann dem Operator A im Eigenraum $\mathscr{H}(b_i)$ zu einem vorgegebenen Eigenwert b_i von B eine Diagonalmatrix $\widehat{A}^{(i)} = (A^{(i)}_{jl})$ zugeordnet:

$$A^{(i)}_{jl} = \langle\, b_i\, c_j \,|\, A \,|\, b_i\, c_l \,\rangle = A^{(i)}_{jj}\, \delta_{jl}\,. \tag{1.31-2}$$

Bemerkungen

Der Leser unterscheide sorgfältig zwischen den verschiedenen Bedeutungen des Wortes „Vollständigkeit“ bei den folgenden Begriffen: Vollständigkeit der Hilberträume; Vollständigkeit von Vektorsystemen bzw. von Sätzen von Projektionsoperatoren in Hilberträumen; Vollständigkeit von Sätzen vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren in einem Hilbertraum bzw. Vollständigkeit von Sätzen verträglicher Observablen für ein quantenmechanisches System.

Die Aussagen der obigen Aufgabe gelten unverändert auch für unendlich dimensionale Hilberträume, falls die betrachteten Operatoren beschränkt sind (s. Aufgabe 1.14, Gl. (1.14-19)), und B, C rein diskrete Spektren besitzen. Handelt es sich aber um nicht beschränkte Operatoren, so muss man auf Definitionsbereichsfragen achten. (S. dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14.) Man könnte nun aufgrund der oben unter Verwendung des Diracformalismus gegebenen Ableitung von (1.31-1), (1.31-2) meinen, dass dann die Zusatzforderung ausreicht, dass die gemeinsamen Eigenvektoren von B, C zum Definitionsbereich von A gehören müssen. Dies trifft nicht zu, wie die Wiederholung der Ableitung in der Schreibweise des Mathematikers zeigt. Mit

$$B\, u_{mn} = b_m\, u_{mn}\,, \qquad C\, u_{mn} = c_n\, u_{mn} \tag{1.31-3}$$

stellt nämlich

$$0 = (u_{ij}\,, [A, C]\, u_{kl}) = \underbrace{(u_{ij}\,, AC\, u_{kl})}_{c_l\,(u_{ij}\,,\, A\, u_{kl})} - (u_{ij}\,, CA\, u_{kl})\,, \quad \forall\, i, j, k, l \tag{1.31-4}$$

dann und nur dann eine sinnvolle Gleichung dar, wenn neben

$$u_{kl} \in \mathscr{D}_A\,, \quad \forall\, k, l \tag{1.31-5a}$$

auch noch

$$A\, u_{kl} \in \mathscr{D}_C\,, \quad \forall\, k, l \tag{1.31-5b}$$

erfüllt ist. Sind diese Bedingungen nicht erfüllt, so ist an dieser Stelle bereits „Endstation“. Sind sie erfüllt, so ist (1.31-4) sinnvoll, und es folgt weiter unter Beachtung von $C^\dagger = C$ und $c_j^* = c_j$

$$(u_{ij}\,, CA\, u_{kl}) = (C\, u_{ij}\,, A\, u_{kl}) = c_j\, (u_{ij}\,, A\, u_{kl})\,, \quad \forall\, i, j, k, l \quad \Rightarrow \tag{1.31-6}$$

$$0 = (u_{ij}\,, [A, C]\, u_{kl}) = (c_l - c_j)\, (u_{ij}\,, A\, u_{kl})\,, \quad \forall\, i, j, k, l \quad \Rightarrow$$

$$(u_{ij}\,, A\, u_{kl}) = 0 \quad \text{für} \quad l \neq j \quad \Rightarrow \tag{1.31-7}$$

$$A^{(i)}_{jl} = (u_{ij}\,, A\, u_{il}) = A^{(i)}_{jj}\, \delta_{jl}\,. \tag{1.31-8}$$

Siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 3.11, insbesondere die dort am Schluss gestellte „Denksportaufgabe“.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 1.1 bis 1.31 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 1.1 bis 1.31 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T1.1 Sind die folgenden Aussagen richtig oder falsch? (Kurze Begründung der Antworten, bei falscher Aussage eventuell Gegenbeispiel.)

(a) Nur selbstadjungierte Operatoren besitzen ein vollständiges Orthogonalsystem von Eigenvektoren.

(b) Das innere Produkt zweier Vektoren eines komplexen Hilbertraumes ist eine komplexe Zahl.

(c) Sind $|\,u\,\rangle$, $|\,v\,\rangle$ Vektoren eines Hilbertraumes, so stellt $\langle\,v\,|\,u\,\rangle\langle\,v\,|$ einen Operator dar.

(d) Unitäre Operatoren besitzen ein vollständiges Orthogonalsystem von Eigenvektoren.

(e) Einem unitären Operator ist in der Basis seiner Eigenvektoren eine Diagonalmatrix mit lauter reellen Diagonalelementen zugeordnet.

(f) Ist $|\,u\,\rangle$ ein beliebiger vom Nullvektor verschiedener Vektor, so ist

$$T := \mathbb{1} - \frac{|\,u\,\rangle\langle\,u\,|}{\langle\,u\,|\,u\,\rangle}$$

Projektionsoperator.

(g) Nichtvertauschbare selbstadjungierte Operatoren können keine gemeinsamen Eigenvektoren besitzen.

(h) Ist A ein selbstadjungierter Operator in einem endlich dimensionalen Hilbertraum, so ist die Spur von A eine reelle Zahl.

(i) Sind A, B beliebige lineare Operatoren in einem endlich dimensionalen Hilbertraum, so gilt

$$\mathrm{Sp}\,(AB) = \mathrm{Sp}\,(BA)\,.$$

(j) Sind P_1, P_2 beliebige Projektionsoperatoren, so ist auch $P_1 + P_2$ Projektionsoperator.

(k) Ist der Operator A selbstadjungiert, so ist der Operator $B = e^{i\alpha A}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, unitär.

T1.2 Im Folgenden seien $|\,u\,\rangle$, $|\,v\,\rangle$, $|\,w\,\rangle$ Vektoren eines komplexen Hilbertraumes $\mathscr{H}$, ferner seien A, B lineare Operatoren in $\mathscr{H}$ und α, β seien komplexe Zahlen.

Stellen die folgenden Ausdrücke im Diracformalismus sinnvolle Ausdrücke dar? Gib bei den sinnvollen Ausdrücken jeweils den Typ an (Zahl, Ketvektor, Bravektor, Operator) und schreibe den dazu adjungierten (dualen) Ausdruck an.

(a) $\langle\,v\,|\,A\,|\,u\,\rangle\langle\,w\,|\,,$

(b) $\langle\,v\,|\,u\,\rangle\,A\,\langle\,w\,|\,,$

(c) $\langle\,v\,|\,u\,\rangle\,A\,,$

(d) $\langle\,u\,|\,v\,\rangle\,\alpha\,\langle\,w\,|\,e^{-i\beta B}\,,$

(e) $|\,u\,\rangle\langle\,v\,|\,\langle\,v\,|\,w\,\rangle\,,$

(f) $|\,u\,\rangle\,e^{i\alpha A}\,\langle\,v\,|\,.$

T1.3 In einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ sei ein linearer Operator T durch

$$T = |\,u\,\rangle\langle\,v\,|\,, \quad |\,u\,\rangle = |\,e_1\,\rangle - \frac{i}{2}\,|\,e_2\,\rangle\,, \quad |\,v\,\rangle = (1-i)\,|\,e_1\,\rangle + 2\,|\,e_2\,\rangle$$

definiert. Dabei ist $\{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle\}$ eine vorgegebene orthonormierte Basis von $\mathscr{H}$.

Gegeben sei ferner der Vektor

$$|\,f\,\rangle = 2\,|\,e_1\,\rangle + i\,|\,e_2\,\rangle\,.$$

(a) Berechne den Vektor $|\,h\,\rangle = T\,|\,f\,\rangle$ und die in der $\{e\}$-Darstellung zugeordnete Spaltenmatrix.

(b) Gibt es neben $|\,f\,\rangle$ noch andere Vektoren in $\mathscr{H}$, welche durch T auf $|\,h\,\rangle$ abgebildet werden? Wenn ja, gib die betreffenden Vektoren an.

T1.4 A, B seien lineare Operatoren, welche die Vertauschungsbeziehung $[A, B] = i\mathbb{1}$ erfüllen. Die Kommutatoren

$$\text{(a)}\quad G_1(A,B) := [A, AB^3]\,, \qquad \text{(b)}\quad G_2(A,B) := [A, B^2AB]$$

sind Operatorfunktionen, welche in der Form

$$G(A,B) = \sum_{m,n=0}^{\infty} g_{mn}\,A^m B^n\,, \quad g_{mn} \in \mathbb{C}$$

geschrieben werden können. Berechne für die Fälle (a) und (b) die Koeffizienten g_{mn}.

T1.5 Beweise unter Verwendung der formalen Operatorgleichung

$$[A, B_1B_2] = [A, B_1]\,B_2 + B_1[A, B_2]$$

die formale Beziehung

$$[A, B^n] = \sum_{\nu=1}^{n} B^{\nu-1}[A, B]\,B^{n-\nu}\,, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Was ergibt sich daraus für die Kommutatoren $[A, B^n]$, $[A^m, B^n]$, $m, n \in \mathbb{N}$, wenn $[A, B] = i\mathbb{1}$ gilt?

T1.6 In einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum seien zwei orthonormierte Basen $E = \{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle\}$, $F = \{|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle\}$ gegeben, welche gemäß

$$|\,f_1\,\rangle \;=\; \tfrac{1}{2}\big(i\sqrt{3}+1\big)|\,e_2\,\rangle\,, \qquad |\,f_2\,\rangle \;=\; \tfrac{1}{2}\big(i\sqrt{3}-1\big)|\,e_1\,\rangle$$

zusammenhängen.

Löse das Eigenwertproblem des unitären Operators U, welcher den Basiswechsel von E auf F vermittelt, und gib die auf eins normierten Eigenvektoren von U als Linearkombinationen von $|\,e_1\,\rangle$, $|\,e_2\,\rangle$ an.

Ergebnis:

$$|\,u_1\,\rangle \;=\; e^{i\gamma_1}\Big[\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_1\,\rangle \;+\; \frac{\sqrt{3}-i}{2\sqrt{2}}\,|\,e_2\,\rangle\Big]\,, \qquad |\,u_2\,\rangle \;=\; e^{i\gamma_2}\Big[\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_1\,\rangle \;-\; \frac{\sqrt{3}-i}{2\sqrt{2}}|\,e_2\,\rangle\Big]\,.$$

T1.7 In einem zweidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ sei durch $\{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle\}$ eine orthonormierte Basis gegeben (Basis der $\{e\}$-Darstellung).

(a) Konstruiere eine orthonormierte Basis $\{|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle\}$ mit den folgenden Eigenschaften:

- Der Vektor $|\,f_1\,\rangle$ sei proportional zum Vektor $3i\,|\,e_1\,\rangle + 4\,|\,e_2\,\rangle$.
- Der Vektor $|\,f_1\,\rangle$ erfülle die Bedingungen $\langle\,e_1\,|\,f_1\,\rangle = +\langle\,f_1\,|\,e_1\,\rangle$, $\mathrm{Re}\,\langle\,e_1\,|\,f_1\,\rangle > 0$.
- Der Vektor $|\,f_2\,\rangle$ erfülle die Bedingungen $\langle\,e_2\,|\,f_2\,\rangle = -\langle\,f_2\,|\,e_2\,\rangle$, $\mathrm{Im}\,\langle\,e_2\,|\,f_2\,\rangle > 0$.

Gib die Vektoren $|\,f_1\,\rangle$, $|\,f_2\,\rangle$ als Linearkombinationen der Vektoren $|\,e_1\,\rangle$, $|\,e_2\,\rangle$ an.

(b) Drücke den unitären Operator U, der den Basiswechsel (Übergang von der $\{e\}$- zur $\{f\}$-Darstellung) vermittelt, durch die Vektoren $|\,e_j\,\rangle$, $|\,f_k\,\rangle$ aus. Welche Matrix ist dem Operator U in der $\{e\}$-Darstellung zugeordnet?

(c) Ein linearer Operator A sei in der $\{e\}$-Darstellung durch die Matrix

$$\widehat{A}^{\{e\}} = \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix}$$

gegeben.

(c1) Wie lautet die Matrix $\widehat{A}^{\{f\}}$ von A in der $\{f\}$-Darstellung?

(c2) Schreibe den Operator A als Linearkombination von Ket-Bra-Ausdrücken $|\,f_j\,\rangle\langle\,f_k\,|$, $j,k = 1,2$, an.

Ergebnisse zu (b) und (c1):

$$\widehat{U}^{\{e\}} = \tfrac{1}{5}\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ -4i & 3i \end{bmatrix}\,, \qquad \widehat{A}^{\{f\}} = \tfrac{1}{25}\begin{bmatrix} 49 & 7 \\ 7 & 1 \end{bmatrix}\,.$$

T1.8 Im Hilbertraum der absolut quadratisch integrierbaren komplexwertigen Funktionen einer reellen Variablen x aus dem Intervall $[a,b]$, $b>a$,

$$\mathscr{H} = L^2([a,b]) = \left\{ f\colon [a,b]\to\mathbb{C} \;\middle|\; (g,h) := \int_a^b dx\, g^*(x)\,h(x)\,;\ (f,f)<+\infty \right\}$$

sei ein linearer Operator durch die Operationsvorschrift

$$\big(Af\big)(x) := x\,\frac{d^2}{dx^2}\big(x\,f(x)\big)$$

und den Definitionsbereich

$$\mathscr{D}_A = \{u\in\mathscr{H} \mid u \text{ zweimal stetig differenzierbar in } [a,b];\ u(a)=u(b)=0\}$$

gegeben. Untersuche unter Zugrundelegung der Definition (1.14-1), ob der betreffende Operator A in $\mathscr{D}_A$ hermitesch ist.

(Zusatzfrage für Ambitionierte: Ist $\mathscr{D}_A$ dichter Teilraum von $\mathscr{H}$? — Siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14.)

T1.9 In einem dreidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ sei ein linearer Operator A durch

$$A \;=\; |\,e_1\,\rangle\langle\,e_1\,| \;+\; |\,e_1\,\rangle\frac{1+i}{\sqrt{2}}\langle\,e_2\,| \;+\; |\,e_2\,\rangle\frac{-1+i}{\sqrt{2}}\langle\,e_1\,| \;+\; |\,e_2\,\rangle\langle\,e_2\,| \;+\; |\,e_3\,\rangle(2+i)\langle\,e_3\,|$$

definiert. Dabei ist $\{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ eine vorgegebene orthonormierte Basis von $\mathscr{H}$.

(a) Löse das Eigenwertproblem von A, d. h. bestimme die Eigenwerte und zugehörige auf eins normierte Eigenvektoren von A.

(b) Bilden die Eigenvektoren von A ein vollständiges Orthonormalsystem in $\mathscr{H}$? Zu welcher speziellen Kategorie von Operatoren gehört der Operator A?

T1.10 In einem dreidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ seien zwei lineare Operatoren A, B durch ihre Wirkung auf die Vektoren einer orthonormierten Basis $\{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} A\,|\,e_1\,\rangle &:= 2\,|\,e_1\,\rangle\,, & B\,|\,e_1\,\rangle &:= \emptyset\,,\\ A\,|\,e_2\,\rangle &:= 2i\,|\,e_3\,\rangle\,, & B\,|\,e_2\,\rangle &:= 4\,|\,e_2\,\rangle - 4i\,|\,e_3\,\rangle\,,\\ A\,|\,e_3\,\rangle &:= -2i\,|\,e_2\,\rangle\,; & B\,|\,e_3\,\rangle &:= 4i\,|\,e_2\,\rangle + 4\,|\,e_3\,\rangle\,. \end{aligned}$$

(a) Zeige, dass die Operatoren A, B selbstadjungiert und vertauschbar sind.

(b) Bestimme die Eigenwerte von A und B und deren Vielfachheiten sowie ein Orthonormalsystem $\{|\,f_1\,\rangle, |\,f_2\,\rangle, |\,f_3\,\rangle\}$ gemeinsamer Eigenvektoren von A, B.

(c) Bildet einer der beiden Operatoren A, B für sich allein schon einen „vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren“ in $\mathscr{H}$? Falls dies nicht zutrifft: Bilden A, B zusammen einen solchen vollständigen Satz? (Begründe die Antworten.)

T1.11 Ein beschränkter selbstadjungierter Operator A heißt

(α) *positiv definit*, falls

$$\langle u \,|\, A \,|\, u \rangle > 0\,, \quad \forall\, |\, u \rangle \neq \emptyset\,;$$

(β) *nicht negativ*, falls

$$\langle u \,|\, A \,|\, u \rangle \geq 0\,, \quad \forall\, |\, u \rangle \neq \emptyset\,,$$
und gleich null für mindest einen Vektor $|\, u \rangle \neq \emptyset\,;$

(γ) *negativ definit*, falls

$$\langle u \,|\, A \,|\, u \rangle < 0\,, \quad \forall\, |\, u \rangle \neq \emptyset\,;$$

(δ) *nicht positiv*, falls

$$\langle u \,|\, A \,|\, u \rangle \leq 0\,, \quad \forall\, |\, u \rangle \neq \emptyset\,,$$
und gleich null für mindest einen Vektor $|\, u \rangle \neq \emptyset\,.$

Zeige, dass die im folgenden angeschriebenen beschränkten Operatoren A_1 bis A_5 selbstadjungiert sind, und untersuche, ob sie unter eine der obigen Operatorkategorien fallen.

(a) $A_1 := B^\dagger B$, B beschränkt, $B^{-1}\,\exists\,;$

(b) $A_2 := |\, v \rangle\langle\, v \,| - \mathbb{1}\,,\quad |\, v \rangle$ vorgegebener Einheitsvektor;

(c) $A_3 := |\, f \rangle\langle\, f \,| - |\, g \rangle\langle\, g \,|\,,\quad |\, f \rangle \neq \emptyset,\ |\, g \rangle \neq \emptyset$ vorgegebene linear unabhängige Vektoren;

(d) $A_4 := |\, h \rangle\langle\, h \,|\,,\quad |\, h \rangle \neq \emptyset$ vorgegebener Vektor;

(e) $A_5 := |\, \varphi \rangle\langle\, \psi \,| + |\, \psi \rangle\langle\, \varphi \,|\,,\quad |\, \varphi \rangle \neq \emptyset,\ |\, \psi \rangle \neq \emptyset$ vorgegebene linear unabhängige Vektoren.

Teil II

Quantentheorie

2. Energieeigenzustände. Parität. Translationen

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. die Kapitel 6 und 9.

Angaben

2.1 Der Zustandsraum $\mathscr{H}$ eines Systems sei zweidimensional („Zwei-Zustand-System"), und der Hamiltonoperator besitze die Form $H = H_0 + W$. Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 sei bekannt, es trete dabei keine Entartung auf, und die Matrix von W habe in der Basis der Eigenvektoren von H_0 nur in der Nebendiagonale von null verschiedene Elemente.

(a) Bestimme die exakten Eigenwerte und Eigenvektoren von H.

(b) Würde man das Problem mithilfe der zeitunabhängigen Störungstheorie behandeln (W „Störung"), unter welcher Voraussetzung bzgl. W hätte man Konvergenz des Verfahrens zu erwarten?

2.2 Betrachtet wird ein Teilchen mit einem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$. Der Operator Π, der im Zustandsraum $\mathscr{H}$ des Teilchens der Koordinatentransformation $x' \equiv \mathscr{P}x := -x$ zugeordnet ist, kann formal durch seine Wirkung im Basissystem der Eigenzustände $|\, x \,\rangle$ des Ortsoperators X gemäß $\Pi \,|\, x \,\rangle := |\, \mathscr{P}x \,\rangle = |{-x}\,\rangle$ definiert werden. Π wird als *Inversionsoperator* bzw. als *Paritätsoperator* bezeichnet. Zeige, dass

(a) $\Pi^{-1} = \Pi^\dagger = \Pi$ gilt;

(b) Π nur die Eigenwerte $\pi = +1, -1$ besitzen kann;

(c) $\langle\, u \,|\, T \,|\, v \,\rangle = 0$ ist, falls $|\, u \,\rangle$ und $|\, v \,\rangle$ Eigenvektoren von Π zum selben Eigenwert π sind, und T ein in $\mathscr{H}$ definierter *ungerader Operator* ist, d. h. ein Operator, für den $\Pi T \Pi^\dagger = -T$ gilt.

2.3 Zeige unter Zugrundelegung der in Aufgabe 2.2 gegebenen formalen Definition des Paritätsoperators Π, dass Ortsoperator X und Impulsoperator P eines Teilchens mit einem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ ungerade Operatoren sind, d. h. dass

$$\Pi X \Pi^\dagger = -X\,, \qquad \Pi P \Pi^\dagger = -P$$

gilt.

2.4 Besitzt der Hamiltonoperator für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Potential $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$, welches keine „undurchdringlichen Zwischenwände“ aufweist, diskrete Eigenwerte E_n ($E_0 < E_1 < \ldots$; so viele Eigenwerte es gibt), so sind diese nicht entartet, und die Eigenfunktion u_n zum Eigenwert E_n hat n Nullstellen („Knoten“).[1] Welche Schlüsse kann man daraus bezüglich des Verhaltens der Eigenfunktionen u_n bei räumlicher Inversion $\mathscr{P}x = -x$ ziehen, wenn das Potential die Eigenschaft $V(-x) = V(x)$ besitzt?

(Anleitung: Verwende die in den Aufgaben 2.2 und 2.3 bewiesenen Aussagen.)

2.5* Verifiziere, dass der im Zustandsraum eines Teilchens mit dem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ definierte Operator

$$\Pi = \Pi(X, P) = \exp\left[\frac{i\pi}{\hbar}\left(\frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}X^2 - \frac{1}{2}\hbar\mathbb{1}\right)\right]$$

(X Ortsoperator, P Impulsoperator, $\mu \in \mathbb{R}^+$ beliebig) die Eigenschaft

$$\Pi\,|\,x\,\rangle = |\,-x\,\rangle$$

besitzt und somit den Paritätsoperator darstellt.

(Anleitung: Beachte, dass der Operator

$$\frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}X^2$$

von der Bauart des Hamiltonoperators des linearen harmonischen Oszillators ist. Definiere einen entsprechenden Vernichtungsoperator a und Erzeugungsoperator $a^\dagger$ analog zu Anhang A.5, Gl. (A.5-1), (A.5-2), und benütze die Eigenzustände von $a^\dagger a$.)

2.6 Ein Teilchen der Masse m und Ladung q befinde sich in einem inversionssymmetrischen eindimensionalen Potential $V(x)$, welches gebundene Zustände zulässt.

(a)* Welche Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge folgen aus der Symmetrieeigenschaft $V(-x) = V(x)$ des Potentials?

(b) Welche weitere Einschränkung ergibt sich speziell für das Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$?

(Die Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge in einem Strahlungsfeld ergeben sich als Auswahlregeln für die Matrixelemente des Operators $D = qX$ des elektrischen Dipolmomentes.)

(Anleitung zu (a): Verwende die in den Aufgaben 2.2 bis 2.4 bewiesenen Aussagen.)

[1] Eine besonders ausführliche Diskussion der eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödingergleichung findet man bei Powell, J. L., und B. Craseman: Quantum Mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, Reading 1961. Reprint: Narosa Publishing House, New Delhi 1988.

2.7 Betrachtet wird ein Teilchen mit einem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$. Der Operator $T(a)$, der im Zustandsraum $\mathscr{H}$ des Teilchens der Koordinatentransformation $x' \equiv \mathscr{T}(a)\,x := x + a,\ a \in \mathbb{R}$, (Verschiebung des physikalischen Systems längs der x-Achse um die Strecke a) zugeordnet ist, kann formal durch seine Wirkung im Basissystem der Eigenzustände $|\,x\,\rangle$ des Ortsoperators X gemäß

$$T(a)\,|\,x\,\rangle := |\,\mathscr{T}(a)\,x\,\rangle = |\,x + a\,\rangle$$

definiert werden. $T(a)$ wird als *Translationsoperator* bezeichnet. Zeige, dass

(a) $T^{-1}(a) = T(-a)$ gilt und $T(a)$ unitär ist;

(b) $T(a)\,T(b) = T(b)\,T(a) = T(a+b)$ gilt.

2.8 Zeige unter Zugrundelegung der in Aufgabe 2.7 gegebenen formalen Definition des Translationsoperators $T(a)$, dass

$$T(a)\,X\,T^{\dagger}(a) = X - a\,\mathbb{1}\,, \qquad T(a)\,P\,T^{\dagger}(a) = P$$

gilt.

2.9* Der im Zustandsraum $\mathscr{H}$ eines Teilchens mit einem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ definierte Translationsoperator $T(a)$ muss sich als Operatorfunktion $T(X, P; a)$ der Operatoren der fundamentalen Observablen $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ schreiben lassen. Leite diese Operatorfunktion ausgehend von der in Aufgabe 2.7 gegebenen formalen Definition des Translationsoperators $T(a)$ ab.

2.10 Löse die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m im unendlich tiefen Kastenpotential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases}$$

und normiere die erhaltenen Eigenfunktionen auf eins.

2.11 Befindet sich ein Teilchen der Masse m in einem Potential (eindimensionales Problem), welches an der Stelle $x = x_0$ längs einer kleinen Strecke sehr stark anziehend (abstoßend) ist, so kann man diesen Sachverhalt idealisiert durch

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x - x_0) + V_1(x)\,, \qquad D > 0 \ \ (D < 0)$$

darstellen, wobei $V_1(x)$ ein in der Umgebung der Stelle $x = x_0$ bis auf einen eventuellen endlichen Sprung an der Stelle $x = x_0$ stetiges Potential ist. Zeige: Unter der Annahme der Stetigkeit der Energieeigenfunktionen u in der Umgebung von $x = x_0$ folgt mit

$$u(x_0-) = u(x_0+) \equiv u(x_0)\,,$$

dass die erste Ableitung der Energieeigenfunktionen an der Stelle $x = x_0$ einen durch

$$u'(x_0-) = u'(x_0+) + 2D\,u(x_0)$$

gegebenen Sprung besitzen muss.

(Anleitung: Integriere die zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung über ein Intervall $x_0 - \epsilon < x < x_0 + \epsilon$ und führe den Grenzübergang $\epsilon \to 0+$ durch.)

2.12 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem eindimensionalen anziehenden δ-förmigen Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x)\,, \qquad D > 0\,.$$

Löse die zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung für $E < 0$ und zeige, dass es nur einen gebundenen Zustand gibt. Wie lautet die Energie dieses gebundenen Zustandes und die zugehörige auf eins normierte Eigenfunktion?

(Anleitung: Löse die Schrödingergleichung für die Bereiche I: $x < 0$ bzw. II: $x > 0$ und verwende die in Aufgabe 2.11 abgeleiteten Anschlussbedingungen (2.11-2).)

2.13 Leite die Eigenwertbedingungen für die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände eines Teilchens der Masse m im eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad |x| < a \\ 0 & \text{für} \quad |x| > a \end{cases}\,, \qquad V_0 > 0$$

ab. Besitzt dieses Potential für beliebiges V_0 und a mindestens einen gebundenen Zustand?

(Anleitung: Mache von der Inversionssymmetrie des Potentials Gebrauch; s. dazu Aufgabe 2.4.)

2.14 Gibt es für ein Teilchen der Masse m in dem eindimensionalen Potential

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{für} \quad x < 0 \\ -V_0 & \text{für} \quad 0 \le x < a \\ 0 & \text{für} \quad x > a \end{cases}$$

mit

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

gebundene Zustände? Wenn ja, gib die Energieeigenwerte an.

2.15 Ein Teilchen der Masse m befinde sich im Potential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = \begin{cases} \dfrac{m\omega^2}{2}\,x^2 & \text{für} \quad x \ge 0 \\ +\infty & \text{für} \quad x < 0 \end{cases}\,.$$

Wie lauten die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen des Problems?

(Anleitung: Beachte, dass die Energieeigenfunktionen im Bereich $x > 0$ derselben Differentialgleichung genügen wie beim linearen harmonischen Oszillator, für welchen die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen als bekannt angenommen werden können; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5b), (A.5-7).)

2.16* Ein Teilchen der Masse m und Ladung q befinde sich in einem Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ und sei zusätzlich einem zeitlich konstanten homogenen elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\,\vec{e}_x$ ausgesetzt (eindimensionales Problem). Schreibe die exakten Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen des Systems an.

(Die Lösung für das Problem des gewöhnlichen linearen harmonischen Oszillators kann dabei als bekannt angenommen werden; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5) bis (A.5-7).)

2.17*

(a) Wie lautet der Hamiltonoperator H für ein Teilchen der Masse m und Ladung q in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$, $B > 0$, wenn man als Vektorpotential dieses Magnetfeldes $\vec{A}(\vec{r}) = (0, Bx_1, 0)$ (*Landaueichung*) wählt?

(b) Lösen des Eigenwertproblems des Hamiltonoperators H von (a) mithilfe einer geeigneten *unitären Transformation*:

(b1) Zeige, dass der Hamiltonoperator H von (a) bei der Transformation $H' = UHU^\dagger$ mit dem unitären Operator

$$U = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\,\frac{P_1 P_2}{m\omega_0}\right], \qquad \omega_0 := \frac{qB}{mc}$$

die Form

$$H' = H_{\mathrm{Osz1}} + \frac{P_3^2}{2m}\,, \qquad H_{\mathrm{Osz1}} := \frac{P_1^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\,X_1^2$$

annimmt.

(b2) H_{Osz1}, P_2 und P_3 bilden einen vollständigen Satz von untereinander und mit H' vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren. Eigenwerte und Eigenvektoren von H' können somit durch die Eigenwerte von H_{Osz1}, P_2 und P_3 gekennzeichnet werden. Wodurch sind dann die Eigenwerte und Eigenvektoren von H gegeben? Sind die Eigenwerte von H entartet? Wie lauten die zugehörigen Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung?

(c) Lösen des Eigenwertproblems des Hamiltonoperators H von (a) mithilfe einer geeigneten *kanonischen Transformation*:

(c1) Zeige, dass der Übergang von den fundamentalen Operatoren $X_1, P_1, X_2, P_2, X_3, P_3$ zu den Operatoren $\mathsf{X}_1, \mathsf{P}_1, \mathsf{X}_2, \mathsf{P}_2, \mathsf{X}_3, \mathsf{P}_3$ gemäß

$$\mathsf{X}_1 = \frac{1}{m\omega_0} P_1 \,, \qquad \mathsf{P}_1 = P_2 - m\omega_0 X_1 \,,$$

$$\mathsf{X}_2 = X_2 - \frac{1}{m\omega_0} P_1 \,, \qquad \mathsf{P}_2 = P_2 \,,$$

$$\mathsf{X}_3 = X_3 \,, \qquad \mathsf{P}_3 = P_3$$

eine kanonische Transformation darstellt, d. h. dass die neuen Operatoren ebenfalls kanonische Vertauschungsbeziehungen erfüllen.

(c2) Bestimme die Eigenwerte und Eigenvektoren von H sowie die zugehörigen Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung unter Verwendung der kanonischen Transformation von (c1).

(Energieeigenwerte und Energieeigenzustände des linearen harmonischen Oszillators können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-1) bis (A.5-7).)

(Anleitung zu (b1): Verwende die Formel (1.20-1).)

(Anleitung zu (c2): Verwende die Formel

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi \, e^{i\eta\xi} \, e^{-\xi^2/2} \, H_n(\xi) \;=\; i^n \sqrt{2\pi} \; e^{-\eta^2/2} \, H_n(\eta) \;.)$$

2.18 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem eindimensionalen Potential

$$V(x) = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{m} D \, \delta(x) & \text{für} \quad |x| \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} \,, \qquad D > 0 \,.$$

Leite die Eigenwertbedingungen für die Energieeigenwerte E_{n-1}, $n \in \mathbb{N}$, ab. Kommentiere das je nach der Größe von Da erhaltene Spektrum und untersuche speziell die Grenzfälle $Da \to 0+$ und $Da \to +\infty$.

(Die vorliegende Aufgabe eignet sich besonders gut für die Anwendung von „Wheelers erstem moralischen Prinzip“, welches besagt: Führe niemals eine Rechnung durch, bevor du die Antwort weißt.[2] – Welche Änderung des Energie-Eigenwertspektrums für das unendlich tiefe Kastenpotential der Breite $2a$ wird sich bei Hinzunahme eines anziehenden δ-förmigen Potentials $-(\hbar^2/m) D \, \delta(x)$ für kleine Werte von Da, für größere Werte von Da und im Grenzfall $Da \to +\infty$ ergeben? – Der Leser versuche diese Frage zunächst auf der Grundlage allgemeiner Prinzipien und unter Verwendung seiner Intuition so detailliert wie möglich zu beantworten. Dabei wird angenommen, dass der Leser die Aufgaben 2.10, 2.12 bereits gerechnet hat.)

[2] Wheeler's first moral principle: Never make a calculation until you know the answer. Siehe dazu die Einleitung zu den Übungen von Taylor, E. F., und J. A. Wheeler: Spacetime Physics. W. H. Freeman and Company, New York 1992.

(Anleitung zur Rechnung: Löse die Schrödingergleichung für Bereich I: $-a \leq x < 0$ und Bereich II: $0 < x \leq +a$ und verwende die in Aufgabe 2.11 abgeleiteten Anschlussbedingungen (2.11-2). Mache dabei von der Inversionssymmetrie des Potentials Gebrauch; s. dazu Aufgabe 2.4.)

2.19 Ein Strom von Teilchen der Masse m und Energie $E > 0$ falle in positiver x-Richtung laufend auf das δ-förmige Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\, D\, \delta(x)$$

ein (eindimensionales Problem; $D > 0$ anziehendes Potential, $D < 0$ Potentialwall). Berechne den Transmissionskoeffizienten und betrachte die Grenzfälle $|D| \gg k$ und $|D| \ll k$, wobei $k := [2mE/\hbar^2]^{1/2}$ ist.

(Anleitung: Löse die Schrödingergleichung für die Bereiche I: $x < 0$ bzw. II: $x > 0$ und verwende die in Aufgabe 2.11 abgeleiteten Anschlussbedingungen (2.11-2).)

2.20 Ein Strom von Teilchen der Masse m und Energie $E > V_3$ falle
(α) in positiver x-Richtung laufend; (β) in negativer x-Richtung laufend
auf das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{für} \quad x < 0 \\ V_2(x) & \text{für} \quad 0 < x < d \\ V_3 & \text{für} \quad x > d \end{cases}$$

ein (eindimensionales Problem). Dabei seien V_1, V_3 konstante Potentiale mit $V_1 \leq V_3$ und $V_2(x)$ eine beliebige für $0 < x < d$ stetige Potentialfunktion. An den Stellen $x = 0$ und $x = d$ sei das Potential entweder stetig oder es besitze einen Sprung endlicher Höhe.

(a) Zeige, dass der Transmissionskoeffizient in den Fällen (α), (β) gleich ist.

(b) Spezialisiere das Ergebnis auf den Fall einer Potentialschwelle der Höhe V_0, d. h. $V_1 = 0$, $V_2(x) = V_0$, $V_3 = 0$.

(c) Spezialisiere das Ergebnis auf den Fall eines Kastenpotentials der Tiefe V_0, d. h. $V_1 = 0$, $V_2(x) = -V_0$, $V_3 = 0$.

(d) Spezialisiere das Ergebnis auf den Fall eines „Doppelstufenpotentials“ mit der Stufenhöhe V_0, d. h. $V_1 = 0$, $V_2(x) = V_0$, $V_3 = 2V_0$.

Diskutiere die Ergebnisse der Sonderfälle (b), (c) und (d) qualitativ.

(Anleitung zu (a): Bezeichne die Funktionen einer Lösungsbasis der zeitunabhängigen Schrödingergleichung im Bereich $0 < x < d$ zur vorgegebenen Energie E mit $v(x;E) \equiv v(x)$, $w(x;E) \equiv w(x)$ und beachte den folgenden mathematischen Hinweis.
Für eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$u'' + f_1(x)\, u' + f_2(x)\, u = 0$$

ist die Differentialgleichung der Wronskideterminante $\mathcal{W}$ zweier Lösungen v, w,

$$\mathcal{W}[v,w](x) \equiv \mathcal{W}(x) := \begin{vmatrix} v(x) & w(x) \\ v'(x) & w'(x) \end{vmatrix},$$

durch

$$\mathcal{W}' + f_1(x)\mathcal{W} = 0$$

gegeben. Für die Wronskideterminante zweier linear unabhängiger Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung in einer Raumdimension gilt daher $\mathcal{W}(x) = \text{konst.} \neq 0$.)

2.21* Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem periodischen Potential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} D \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \delta(x + la)$$

($a > 0$ Gitterkonstante), wobei $D < 0$ („Dirac-Kamm“) oder $D > 0$ sei. Leite mithilfe des Blochtheorems die Eigenwertbedingung für die möglichen Energiewerte E ab und erläutere, wodurch es zum Auftreten von „erlaubten“ und „verbotenen“ Energiebereichen kommt (*Energiebänder*).

(Das Blochtheorem besagt, dass die Energieeigenfunktionen für ein Teilchen in einem periodischen Potential mit der Gitterkonstante a durch einen kontinuierlichen Parameter

$$K \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right),$$

die so genannte „Quasikreiswellenzahl“, gekennzeichnet werden können, und dass eine zu gegebenem K gehörige Energieeigenfunktion $u_K(x)$ die Eigenschaft

$$u_K(x + la) = e^{iKla}\, u_K(x), \qquad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

besitzt.)

(Anleitung: Verwende die in Aufgabe 2.11 für δ-förmige Potentiale abgeleiteten Anschlussbedingungen (2.11-2).)

2.22 Berechne die Vielfachheiten der Energieeigenwerte eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit $\omega_1 = \omega_2 =: \omega$, $\omega_3 = 2\omega$.

(Die Lösung des Eigenwertproblems des dreidimensionalen harmonischen Oszillators kann dabei als bekannt angenommen werden; s. Anhang A.4, Gl. (A.4-18) bis (A.4-23).)

2.23 Berechne die Vielfachheiten der Energieeigenwerte eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 =: \omega$

(a) unter Verwendung der durch Separation in kartesischen Koordinaten gefundenen Lösung;

(b) unter Verwendung der durch Separation in Kugelkoordinaten gefundenen Lösung.

(Die Lösung des Eigenwertproblems des dreidimensionalen harmonischen Oszillators unter Verwendung von kartesischen Koordinaten bzw. von Kugelkoordinaten kann dabei als bekannt angenommen werden; s. Anhang A.4, Gl. (A.4-18) bis (A.4-29).)

2.24 Der Hamiltonoperator eines starren Hantelmoleküls, welches im Raum um den Koordinatenursprung rotiert („Rotator“ mit zwei Freiheitsgraden, den räumlichen Polarwinkeln ϑ, φ), ist durch

$$H_0 = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

gegeben. Dabei ist $\vec{L}^2$ der Operator des Bahndrehimpulsquadrats und I das Trägheitsmoment.

(a) Wie lauten die Energieeigenwerte E^0 und die zugehörigen Energieeigenzustände des betrachteten Rotators? Sind die Energieeigenwerte entartet?

(b)* Der Rotator besitze ein elektrisches Dipolmoment mit festem Betrag d und befinde sich in einem elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\,\vec{e}_z$. Welcher Wechselwirkungsterm W kommt zu H_0 hinzu? Begründe, warum sich in erster Ordnung Störungstheorie keine von null verschiedenen Energiekorrekturen zu den ungestörten Energieeigenwerten ergeben können.

2.25

(a) Zeige, dass die Energieeigenfunktionen für die gebundenen Zustände eines Teilchens der Masse m im Topfpotential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}, \qquad V_0 > 0$$

– falls überhaupt gebundene Zustände existieren – die Form

$$u_{nlm_l}(\vec{r}\,) = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)\,,$$

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_{nl}\, j_l(K_{nl}\, r) & \text{für} \quad r < r_0 \\ B_{nl}\, h_l^{(+)}(i\kappa_{nl}\, r) & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}$$

besitzen müssen, wobei

$$K_{nl} := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 + E_{nl})}{\hbar^2}}\,, \qquad \kappa_{nl} := \sqrt{-\frac{2m\,E_{nl}}{\hbar^2}}$$

bedeutet, und $E_{nl} < 0$ die Energieeigenwerte zu den gebundenen Zuständen sind. Aus welchen Eigenwertbedingungen ergeben sich etwaige diskrete Eigenwerte E_{nl}?

(b) Schreibe speziell die Eigenwertbedingungen für s-Zustände ($l = 0$) an und zeige, dass diese keine Lösungen besitzen, dass also keine Eigenwerte E_{n0} existieren, falls

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} \leq \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

gilt. Untersuche, welche Bedingung V_0 und r_0 erfüllen müssen, damit es N gebundene s-Zustände gibt.

2.26

(a) Zeige, dass die Lösungen der zeitunabhängigen wellenmechanischen Schrödingergleichung für die ungebundenen Zustände eines Teilchens der Masse m beim Topfpotential

$$(\alpha) \qquad V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}, \quad V_0 > 0$$

bzw. für die Zustände mit $0 < E < V_0$ beim Potential

$$(\beta) \qquad V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}, \quad V_0 > 0$$

in der folgenden Form geschrieben werden können:

$$u_{klm_l}(\vec{r}) = R_{kl}(r)\, Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)\,,$$

$$R_{kl}(r) = \begin{cases} (\alpha) & A_l\, j_l(Kr) & \text{für} \quad r < r_0 \\ (\beta) & A_l\, j_l(i\kappa r) & \text{für} \quad r < r_0 \\ (\alpha),\ (\beta) & B_l\,[\cos\delta_l\, j_l(kr) + \sin\delta_l\, n_l(kr)] & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases};$$

$$k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,, \qquad A_l = A_l(k)\,, \quad B_l = B_l(k)\,, \quad \delta_l = \delta_l(k)\,;$$

$$(\alpha) \quad K = K(k) := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 + E(k))}{\hbar^2}}\,, \quad 0 < k < +\infty\,;$$

$$(\beta) \quad \kappa = \kappa(k) := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - E(k))}{\hbar^2}}\,, \quad 0 < k < \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\,.$$

Aus welchen Beziehungen erhält man die Größen $\delta_l(k)$?

(b) Berechne für die Fälle (α), (β) speziell die Größe $\delta_0(k)$.

Lösungen

2.1

(a)

$$H_0\,|\,u_n^0\,\rangle = E_n^0\,|\,u_n^0\,\rangle\,, \quad H\,|\,u_n\,\rangle = E_n\,|\,u_n\,\rangle\,, \quad n=1,2\,; \tag{2.1-1}$$

$$W_{jk} := \langle\,u_j^0\,|\,W\,|\,u_k^0\,\rangle\,, \quad j,k=1,2\,; \tag{2.1-2}$$

$$W_{11}=W_{22}=0\,, \quad W_{21}=W_{12}^* \;\; (\text{da } \; W^\dagger = W); \tag{2.1-3}$$

$$H \xrightarrow{\{|\,u_1^0\,\rangle,|\,u_2^0\,\rangle\}} \widehat{H} = \begin{bmatrix} E_1^0 & W_{12} \\ W_{12}^* & E_2^0 \end{bmatrix}. \tag{2.1-4}$$

Die Säkulargleichung $\det(\widehat{H} - E\,\widehat{\mathbb{1}}) = 0$ (E Eigenwertparameter) ergibt die Eigenwerte

$$E_1 = \frac{1}{2}\Big[\,E_1^0 + E_2^0 - \sqrt{(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2}\,\Big]\,, \tag{2.1-5a}$$

$$E_2 = \frac{1}{2}\Big[\,E_1^0 + E_2^0 + \sqrt{(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2}\,\Big]\,, \tag{2.1-5b}$$

$$\Delta E^0 := E_2^0 - E_1^0 > 0\,. \tag{2.1-5c}$$

Für die zugehörigen auf eins normierten Eigenvektoren erhält man (freie unimodulare Faktoren willkürlich eins gesetzt)

$$|\,u_1\,\rangle = N_1\Big[\,2\,W_{12}\,|\,u_1^0\,\rangle + \Big(\Delta E^0 - \sqrt{(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2}\,\Big)\,|\,u_2^0\,\rangle\,\Big]\,, \tag{2.1-6a}$$

$$|\,u_2\,\rangle = N_2\Big[\,2\,W_{12}\,|\,u_1^0\,\rangle + \Big(\Delta E^0 + \sqrt{(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2}\,\Big)\,|\,u_2^0\,\rangle\,\Big]\,, \tag{2.1-6b}$$

$$N_{1,2} := \Big\{2\Big[\,(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2 \mp \Delta E^0\sqrt{(\Delta E^0)^2 + 4\,|W_{12}|^2}\,\Big]\Big\}^{-1/2}. \tag{2.1-6c}$$

(b) Konvergenz der Störungstheorie ist für

$$|W_{12}| \le \frac{1}{2}\,(E_2^0 - E_1^0) \tag{2.1-7}$$

zu erwarten (Konvergenz der Binomialentwicklungen).

Bemerkungen

Gelingt es umgekehrt in der zeitunabhängigen Störungstheorie, das allgemeine Bildungsgesetz der Störungsreihen anzugeben und diese in ihrem Konvergenzbereich geschlossen aufzusummieren (was allerdings nur in Ausnahmefällen möglich sein wird), so können die auf diese Weise gefundenen Ausdrücke auch außerhalb des Konvergenzbereichs der Entwicklungen Lösungen darstellen. Durch Einsetzen kann man dann feststellen, ob es sich tatsächlich um Lösungen handelt. Siehe dazu Aufgabe 5.2.

2.2

(a)

$$\Pi\,|\,x\,\rangle = |\,-x\,\rangle\,,\quad x\in\mathbb{R}\quad\Rightarrow\quad \Pi^2\,|\,x\,\rangle = \Pi\,|\,-x\,\rangle = |\,x\,\rangle\,,\quad \forall\,|\,x\,\rangle\quad\Rightarrow$$

$$\Pi^{-1} = \Pi\,; \tag{2.2-1}$$

$$\langle\,x\,|\,\Pi\,|\,x_0\,\rangle = \langle\,x\,|\,-x_0\,\rangle = \delta(x+x_0) = \langle\,-x\,|\,x_0\,\rangle = \Big[\langle\,x_0\,|\,-x\,\rangle\Big]^*$$
$$= \Big[\langle\,x_0\,|\,\Pi\,|\,x\,\rangle\Big]^*,\quad \forall\,|\,x\,\rangle\,,\ |\,x_0\,\rangle\quad\Rightarrow$$

$$\Pi^\dagger = \Pi\,; \tag{2.2-2}$$

(b)

$$\left.\begin{array}{l} |\,u\,\rangle \neq \emptyset \\ \Pi\,|\,u\,\rangle = \pi\,|\,u\,\rangle \\ \Pi^2 = \mathbb{1} \end{array}\right\}\quad\Rightarrow\quad \Pi^2\,|\,u\,\rangle = \pi^2\,|\,u\,\rangle = |\,u\,\rangle\quad\Rightarrow$$

$$\pi = \pm 1\,; \tag{2.2-3}$$

(c)

$$\left.\begin{array}{l} \Pi\,|\,u\,\rangle = \pi\,|\,u\,\rangle \\ \Pi\,|\,v\,\rangle = \pi\,|\,v\,\rangle \\ \Pi T\Pi^\dagger = -T \\ \Pi^\dagger = \Pi \end{array}\right\}\quad\Rightarrow\quad \begin{aligned} \langle\,u\,|\,T\,|\,v\,\rangle &= -\langle\,u\,|\,\Pi^\dagger T\Pi\,|\,v\,\rangle \\ &= -\pi^2\,\langle\,u\,|\,T\,|\,v\,\rangle \\ &= -\langle\,u\,|\,T\,|\,v\,\rangle\quad\Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle\,u\,|\,T\,|\,v\,\rangle = 0\,. \tag{2.2-4}$$

Bemerkungen

Im Falle eines Teilchens mit drei räumlichen Freiheitsgraden x_1, x_2, x_3 (*kartesische* Koordinaten) ist der Zustandsraum $\mathscr{H}$ der Produktraum der Hilberträume $\mathscr{H}^{(i)}$ zu den eindimensionalen Problemen für die x_i-Richtungen: $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)}\otimes\mathscr{H}^{(3)}$. Ein „Basissystem“ von $\mathscr{H}$ ist durch die gemeinsamen Eigenzustände

$$|\,\vec{r}\,\rangle \equiv |\,x_1x_2x_3\,\rangle = |\,x_1\,\rangle^{(1)}\otimes|\,x_2\,\rangle^{(2)}\otimes|\,x_3\,\rangle^{(3)} \equiv |\,x_1\,\rangle^{(1)}|\,x_2\,\rangle^{(2)}|\,x_3\,\rangle^{(3)}$$

der kartesischen Komponenten X_1, X_2, X_3 des Ortsoperators $\vec{R}$ gegeben, wobei X_1 in $\mathscr{H}$ als $X_1\otimes\mathbb{1}^{(2)}\otimes\mathbb{1}^{(3)}$ zu verstehen ist, und für X_2, X_3 analoge Ausdrücke gelten. Der Paritätsoperator Π kann in $\mathscr{H}$ durch $\Pi := \Pi^{(1)}\otimes\Pi^{(2)}\otimes\Pi^{(3)}$ definiert werden, wobei die Beziehungen $\Pi^{(i)}|\,x_i\,\rangle^{(i)} = |\,-x_i\,\rangle^{(i)}$, $\Pi\,|\,\vec{r}\,\rangle = |\,-\vec{r}\,\rangle$ bestehen. Die Aussagen (a), (b), (c) gelten dann in gleicher Weise im Produktraum $\mathscr{H}$. Siehe auch Aufgabe 2.5.

Warum liebt der Physiker die Diracschreibweise und das formale Rechnen mit nicht normierbaren („nur auf die δ-Funktion normierbaren“) „Vektoren“ so sehr? Weil man sich damit einiges an Schreibarbeit erspart, weil subtilere mathematische Überlegungen von vornherein ausgeklammert bleiben, und erfahrungsgemäß (meist) ohnehin nichts „schief geht“. (Siehe dazu auch die Bemerkungen im Vorwort.)

Ich schreibe zum Vergleich die Rechnung von (a) in der Schreibweise des Mathematikers an und fordere den Leser auf, Entsprechendes für (b) und (c) – aber auch bei anderen Aufgaben – selbst zu tun.

(a) $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R})$ (s. die Angabe zu Aufgabe 1.15)

$$(\Pi u)(x) := u(\mathscr{P}^{-1}x) = u(-x)\,, \qquad \mathscr{D}_\Pi = \mathscr{H}$$

$$(\,\Pi \text{ beschränkt} \quad\Rightarrow\quad \exists\,\Pi^\dagger,\ \Pi^\dagger \text{ beschränkt},\ \mathscr{D}_{\Pi^\dagger} = \mathscr{H}\,) \quad\Rightarrow$$

$$(\Pi^2 u)(x) = u(x)\,,\ \forall\, u \in \mathscr{H} \quad\Rightarrow\quad \Pi^{-1} = \Pi\,;$$

$$(u, \Pi v) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^*(x)\,(\Pi v)(x) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^*(x)\, v(-x) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^*(-x)\, v(x)$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\big[(\Pi u)(x)\big]^* v(x) = (\Pi u, v)\,, \quad \forall\, u, v \in \mathscr{H} \quad\Rightarrow$$

Π hermitesch $\Rightarrow$ da Π auch beschränkt ist, gilt $\Pi^\dagger = \Pi$

(s. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14).

Wenn der Physiker so rechnet, sagt er, er rechne „in der Ortsdarstellung“ („wellenmechanisch“). Er schreibt dann:

$$\langle\, u \,|\, \Pi \,|\, v \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, \underbrace{\langle\, u \,|\, x \,\rangle}_{u^*(x)}\, \underbrace{\langle\, x \,|\, \Pi \,|\, v \,\rangle}_{\Pi^{\{x\}} v(x)} = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^*(x)\, v(-x) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, u^*(-x)\, v(x)$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\big[\Pi^{\{x\}} u(x)\big]^* v(x) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\big[\langle\, x \,|\, \Pi \,|\, u \,\rangle\big]^*\, \langle\, x \,|\, v \,\rangle$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, \langle\, u \,|\, \Pi^\dagger \,|\, x \,\rangle \langle\, x \,|\, v \,\rangle = \langle\, u \,|\, \Pi^\dagger \,|\, v \,\rangle\,, \quad \forall\, |\, u \,\rangle\,,\ |\, v \,\rangle \quad\Rightarrow$$

$$\Pi^\dagger = \Pi\,.$$

S. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 2.3.

2.3 Ich gehe von der in Aufgabe 2.2 gegebenen formalen Definition des Paritätsoperators Π aus und verwende die in Aufgabe 2.2 aus dieser Definition gefolgerten Beziehungen (2.2-1), (2.2-2):

$$\left.\begin{aligned} \Pi\,|\, x \,\rangle &= |-x\,\rangle \\ \Pi^\dagger = \Pi &= \Pi^{-1} \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \begin{aligned} \Pi X \Pi^\dagger\,|\, x \,\rangle &= \Pi X\,|-x\,\rangle = -x\,\Pi\,|-x\,\rangle \\ &= -x\,|\, x \,\rangle = -X\,|\, x \,\rangle\,, \quad \forall\,|\, x \,\rangle \quad\Rightarrow \\ \Pi X \Pi^\dagger &= -X\,. \end{aligned} \tag{2.3-1}$$

Für den Beweis der entsprechenden Beziehung für den Impulsoperator verwende ich außerdem die Vollständigkeitsbeziehung der Ortseigenzustände, die Spektraldarstellung des Impulsoperators sowie die Tatsache, dass die Impulseigenfunktionen

$$u_p(x) \equiv \langle\, x \,|\, p \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{(i/\hbar)px}$$

nur vom Produkt px abhängen.

$$\left.\begin{aligned}&\Pi\,|\,x\,\rangle = |\,-x\,\rangle\\ &\Pi^\dagger = \Pi = \Pi^{-1}\end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \Pi P \Pi^\dagger\,|\,x\,\rangle = \Pi \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx'\,|\,x'\,\rangle\langle\,x'\,|}_{\mathbb{1}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dp\,|\,p\,\rangle\, p\,\langle\,p\,|\overbrace{\Pi^\dagger\,|\,x\,\rangle}^{|\,-x\,\rangle}}_{P} \quad\Rightarrow$$

$$\Pi P \Pi^\dagger\,|\,x\,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dp\,|\,-x'\,\rangle \underbrace{\langle\,x'\,|\,p\,\rangle}_{\langle\,-x'\,|\,-p\,\rangle}\, p\, \underbrace{\langle\,p\,|\,-x\,\rangle}_{\langle\,-p\,|\,x\,\rangle}$$

$$= \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx'\,|\,-x'\,\rangle\langle\,-x'\,|}_{\mathbb{1}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dp\,|\,-p\,\rangle\, p\,\langle\,-p\,|\,x\,\rangle}_{-P} = -P\,|\,x\,\rangle\,, \quad \forall\,|\,x\,\rangle \quad\Rightarrow$$

$$\Pi P \Pi^\dagger = -P\,. \tag{2.3-2}$$

Bemerkungen

Definiert man im Zustandsraum eines Teilchens mit drei räumlichen Freiheitsgraden x_1, x_2, x_3 (kartesische Koordinaten) den Paritätsoperator durch $\Pi\,|\,\vec{r}\,\rangle = |\,-\vec{r}\,\rangle$ (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.2), so folgt

$$\Pi \vec{R} \Pi^\dagger = -\vec{R}\,, \qquad \Pi \vec{P} \Pi^\dagger = -\vec{P}\,. \tag{2.3-3}$$

Ich illustriere anhand des Beweises von (2.3-2) die Schreibweise des Mathematikers (keine Kets, keine Bras, keine nicht normierbaren „Vektoren“):

$$\begin{aligned}&(\Pi\varphi)(x) = \varphi(-x)\,, && (P\chi)(x) = -i\hbar\chi'(x)\,,\\ &\varphi \in \mathscr{H} = L^2(\mathbb{R})\,; && \chi \in \mathscr{D}_P \text{ (s. Aufgabe 1.15);}\end{aligned} \quad\Rightarrow$$

$$(\Pi \underbrace{P \overbrace{\Pi^\dagger u}^{w}}_{v})(x) = w(-x) = (Pv)(-x) = -i\hbar\,\frac{dv(\xi)}{d\xi}\Big|_{\xi=-x}$$

$$= i\hbar\frac{d}{dx}\,\underbrace{v(-x)}_{u(x)} = -(Pu)(x)\,, \quad \forall\, u \in \mathscr{D}_P\,.$$

Wenn der Physiker so rechnet, sagt er, er rechne „in der Ortsdarstellung“ („wellenmechanisch“). Er schreibt dann:

$$\langle\,x\,|\,\Pi P \Pi^\dagger\,|\,u\,\rangle = (\Pi P \Pi^\dagger)^{\{x\}} u(x) = (\Pi P)^{\{x\}} u(-x) = \Pi^{\{x\}}\Big[-i\hbar\,\frac{d}{dx}\,u(-x)\Big]$$

$$= i\hbar\,\frac{d}{dx}\,u(x) = -P^{\{x\}}u(x) = -\langle\,x\,|\,P\,|\,u\,\rangle\,, \quad \forall\,|\,x\,\rangle\,,\ \forall\,|\,u\,\rangle \quad\Rightarrow\quad \Pi P \Pi^\dagger = -P\,.$$

In den weiteren Aufgaben dieses Kapitels sowie in den restlichen Kapiteln dieses Buches werde ich die in den Quantenmechanik-Lehrbüchern übliche Schreibweise verwenden. Der Leser sollte aber öfter selbst überlegen, wie eine Rechnung oder ein Beweis ohne Kets, ohne Bras und ohne nicht normierbare „Vektoren“ anzuschreiben wäre.

2.4 Aus $\Pi P \Pi^\dagger = -P$ (s. Aufgabe 2.3) und $\Pi^\dagger = \Pi^{-1}$ (s. Aufgabe 2.2) folgt unmittelbar die Inversionsinvarianz von P^2 (und damit von $T = P^2/2m$):

$$\Pi P^2 \Pi^\dagger = \Pi P \underbrace{\Pi^\dagger \Pi}_{\mathbb{1}} P \Pi^\dagger = (-P)^2 = P^2 \qquad \text{bzw.} \qquad [\Pi, P^2] = \mathbb{0}\,. \tag{2.4-1a}$$

Das Transformationsgesetz des Operators der potentiellen Energie bei räumlicher Inversion erhält man mithilfe der Spektraldarstellung von $V(X)$:

$$\begin{aligned} \Pi V(X) \Pi^\dagger &= \Pi \int\limits_{\mathbb{R}} dx \,|\, x \,\rangle\, V(x)\, \langle\, x \,|\, \Pi^\dagger = \int\limits_{\mathbb{R}} dx \,|\, -x \,\rangle\, V(x)\, \langle\, -x \,| \\ &= \int\limits_{\mathbb{R}} dx \,|\, x \,\rangle\, V(-x)\, \langle\, x \,| = V(-X)\,. \end{aligned} \tag{2.4-1b}$$

Gilt $V(-X) = V(X)$, so ist das Potential ebenfalls inversionsinvariant, und es ist auch der Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \tag{2.4-2}$$

invariant gegen räumliche Inversion:

$$\left.\begin{aligned} H^\dagger &= H \\ \Pi^\dagger &= \Pi \\ [H, \Pi] &= \mathbb{0} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} &H \text{ und } \Pi \text{ besitzen ein vollständiges} \\ &\text{Orthogonalsystem gemeinsamer EV.} \end{aligned} \tag{2.4-3}$$

Da diskrete Eigenwerte von H nicht entartet sind, ist jeder Eigenvektor $|\, n \,\rangle$ von H zu einem diskreten Eigenwert E_n automatisch auch Eigenvektor von Π zum Eigenwert $\pi = +1$ oder $\pi = -1$:

$$\begin{aligned} H \,|\, n \,\rangle &= E_n \,|\, n \,\rangle \\ \Pi \,|\, n \,\rangle &= \pi_n \,|\, n \,\rangle \end{aligned} \qquad \text{bzw.} \qquad \begin{aligned} H^{\{x\}} u_n(x) &= E_n\, u_n(x) \\ \Pi^{\{x\}} u_n(x) &= \pi_n\, u_n(x)\,. \end{aligned} \tag{2.4-4a}$$

Die Energieeigenfunktionen $u_n(x) \equiv \langle\, x \,|\, n \,\rangle$ zu den gebundenen Zuständen eines Teilchens in einem inversionsinvarianten eindimensionalen Potential, welches keine undurchdringlichen Zwischenwände aufweist, sind also stets gerade oder ungerade Funktionen der Ortsvariablen x.

Nach dem Knotensatz gibt n die Anzahl der Nullstellen der Eigenfunktion $u_n(x)$ im Intervall $-\infty < x < +\infty$ an, wenn E_0 der niedrigste Energieeigenwert ist, und $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$ gilt. Somit: $u_0(x)$ keine Nullstelle $\Rightarrow$ gerade Funktion, $u_1(x)$ eine Nullstelle $\Rightarrow$ ungerade Funktion, usf., also allgemein $\pi_n = (-1)^n$, d. h.

$$\Pi \,|\, n \,\rangle = (-1)^n \,|\, n \,\rangle \quad \text{bzw.} \quad \Pi^{\{x\}} u_n(x) = u_n(-x) = (-1)^n\, u_n(x)\,; \quad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{2.4-4b}$$

Bemerkungen

Zu einem inversionsinvarianten eindimensionalen Potential mit undurchdringlicher Zwischenwand s. Aufgabe 2.18, Grenzfall a fest, $D \to +\infty$.

Bei mehrdimensionalen Problemen sind diskrete Energieeigenwerte i. Allg. entartet, und es gibt auch bei inversionsinvariantem Hamiltonoperator Energieeigenfunktionen, die weder gerade noch ungerade sind. Durch Bildung von geeigneten Linearkombinationen in den Entartungsräumen kann man dann jedoch stets ein vollständiges System gemeinsamer Eigenfunktionen von $H^{\{x\}}$ und $\Pi^{\{x\}}$ finden.

2.5* Ich definiere (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-1) bis (A.5-10))

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\Big(\sqrt{\mu}\,X - \frac{1}{i\sqrt{\mu}}\,P\Big)\,, \qquad a^\dagger = (a)^\dagger \quad \Rightarrow \tag{2.5-1}$$

$$\frac{1}{\hbar}\Big(\frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}X^2 - \frac{1}{2}\hbar\mathbb{1}\Big) = a^\dagger a\,; \qquad a^\dagger a\,|\,n\,\rangle = n\,|\,n\,\rangle\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,; \tag{2.5-2}$$

$$\langle\,n\,|\,n'\,\rangle = \delta_{nn'}\,, \qquad \sum_n |\,n\,\rangle\langle\,n\,| = \mathbb{1}\,; \tag{2.5-3}$$

$$\Pi = \exp\Big[\frac{i\pi}{\hbar}\Big(\frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}X^2 - \frac{1}{2}\hbar\mathbb{1}\Big)\Big] = \exp\left[i\pi\, a^\dagger a\right]. \tag{2.5-4}$$

Nun entwickle ich den Vektor $|\,x\,\rangle$ im Basissystem $\{\,|\,n\,\rangle\,,\ n \in \mathbb{N}_0\}$ und erhalte unter Verwendung von (A.5-5c) bzw. von Gl. (2.4-4b)

$$\begin{aligned}\Pi\,|\,x\,\rangle &= \sum_n \Pi\,|\,n\,\rangle\langle\,n\,|\,x\,\rangle = \sum_n e^{i\pi n}\,|\,n\,\rangle\langle\,n\,|\,x\,\rangle \\ &= \sum_n |\,n\,\rangle\underbrace{(-1)^n\langle\,n\,|\,x\,\rangle}_{\langle\,n\,|-x\,\rangle} = \sum_n |\,n\,\rangle\langle\,n\,|-x\,\rangle = |-x\,\rangle\,,\end{aligned}$$

also

$$\Pi\,|\,x\,\rangle = |-x\,\rangle\,, \qquad x \in \mathbb{R}\,. \tag{2.5-5}$$

Bemerkungen

In Aufgabe 2.2 wurde der Paritätsoperator formal definiert. Mit dem Auffinden einer Funktion der Operatoren der fundamentalen Observablen $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ der betrachteten Systemart, welche die geforderte Abbildung vermittelt, ist die Existenz eines derartigen linearen Operators bewiesen. In den Anwendungen greift man jedoch zweckmäßigerweise wieder auf die formalen Beziehungen zurück, da die explizite Anwendung des Operators von Gl. (2.5-4) die Rechnungen nur unnötig kompliziert. Ich empfehle aber dem Leser, zur Übung das Bestehen der Beziehungen (2.3-1) und (2.3-2) unter expliziter Verwendung der Operatorfunktion (2.5-4) mithilfe der Formel (1.20-1) zu zeigen.

Im Zustandsraum eines Teilchens mit drei räumlichen Freiheitsgraden $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ tritt die Operatorfunktion

$$\Pi(\vec{R}, \vec{P}) = \exp\Big[\frac{i\pi}{\hbar}\Big(\frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}\vec{R}^2 - \frac{3}{2}\hbar\mathbb{1}\Big)\Big] = \exp\Big[i\pi\sum_{k=1}^{3} a_k^\dagger a_k\Big] \tag{2.5-6}$$

an die Stelle von (2.5-4). Die Operatoren $a_k, a_k^\dagger$ sind dabei durch X_k und P_k analog wie $a, a^\dagger$ durch X und P definiert, und es gelten die Vertauschungsbeziehungen

$$[a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = \mathbb{0}\,, \qquad [a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}\,\mathbb{1}\,. \tag{2.5-7}$$

S. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 2.2 und die Bemerkungen zu Aufgabe 2.3.

2.6 **(a)*** Mit Gl. (2.4-4b), (2.2-2) und (2.3-1) folgt

$$\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle = q\,\langle\, n' \,|\, X \,|\, n \,\rangle = -q\,\langle\, n' \,|\, \Pi^\dagger X\, \Pi \,|\, n \,\rangle = -(-1)^{n'+n}\,\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle\,,$$

$$\Big[1 + (-1)^{n'+n}\Big]\,\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle = 0 \quad \Rightarrow \tag{2.6-1}$$

$$\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle = 0 \quad \text{für} \quad \Delta n \equiv n' - n \quad \text{gerade.} \tag{2.6-2}$$

Für ungerades Δn liefert Gl. (2.6-1) keine Aussage bzgl. $\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle$, da dann der Zahlenfaktor null ist. Ein bestimmtes Matrixelement $\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle$ mit vorgegebenem n', n, $n' - n$ ungerade, kann also entweder ungleich null oder gleich null sein. Wir wissen nur eines: Da D nicht der Nulloperator ist, muss es mindestens *ein* von null verschiedenes Matrixelement geben (siehe auch (b)).

Die Aussage (2.6-2), dass $\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle$ *jedenfalls* null ist, falls Δn gerade ist, formuliert man i. Allg. in der Form, dass man sagt, die Inversionsinvarianz des Potentials führe für elektrische Dipolübergänge zur

$$\textit{Auswahlregel} \quad \Delta n \equiv n' - n \quad \text{ungerade.} \tag{2.6-3}$$

(b) Harmonischer Oszillator (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-1) bis (A.5-10))

$$\left.\begin{aligned} &X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a^\dagger + a)\,, \\ &a\,|\, n \,\rangle = \sqrt{n}\,|\, n-1 \,\rangle\,, \qquad a^\dagger\,|\, n \,\rangle = \sqrt{n+1}\,|\, n+1 \,\rangle \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow$$

$$\langle\, n' \,|\, D \,|\, n \,\rangle = q\,\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle\, n' \,|\, (a^\dagger + a) \,|\, n \,\rangle$$

$$= q\,\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\Big(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',\,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',\,n-1}\Big)\,.$$

Somit ergibt sich gegenüber der allgemeinen Auswahlregel (2.6-3) die weitere Einschränkung

$$\Delta n = \pm 1\,. \tag{2.6-4}$$

2.7

(a) $T(a)\,|\, x \,\rangle = |\, x + a \,\rangle\,, \quad x \in \mathbb{R}\,, \quad a \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad T(-a)\,|\, x \,\rangle = |\, x - a \,\rangle \quad \Rightarrow$

$$T(a)\,T(-a)\,|\, x \,\rangle = T(-a)\,T(a)\,|\, x \,\rangle = |\, x \,\rangle\,, \quad \forall\,|\, x \,\rangle \quad \Rightarrow$$

$$T(-a) = T^{-1}(a) \equiv \Big[T(a)\Big]^{-1}\,; \tag{2.7-1}$$

$$\langle x\,|\,T(a)\,|\,x_0\rangle = \langle x\,|\,x_0+a\rangle = \delta(x-x_0-a) = \langle x-a\,|\,x_0\rangle = \Big[\langle x_0\,|\,x-a\rangle\Big]^*$$
$$= \Big[\langle x_0\,|\,T(-a)\,|\,x\rangle\Big]^*, \quad \forall\,|\,x\rangle\,,\ |\,x_0\rangle \quad \Rightarrow \quad \text{(s. (2.7-1))}$$
$$\Big[T(a)\Big]^\dagger \equiv T^\dagger(a) = T^{-1}(a)\,. \tag{2.7-2}$$

(b) $T(a)\,|\,x\rangle = |\,x+a\rangle\,,\ \ x\in\mathbb{R}\,,\ \ a\in\mathbb{R} \quad \Rightarrow$

$$T(a)\,T(b)\,|\,x\rangle = T(a)\,|\,x+b\rangle = |\,(x+b)+a\rangle = |\,x+(a+b)\rangle = T(a+b)\,|\,x\rangle\,,$$
$$\forall\,|\,x\rangle \ \Rightarrow$$
$$T(a)\,T(b) = T(a+b) = T(b+a) = T(b)\,T(a)\,. \tag{2.7-3}$$

Bemerkungen

Die Verallgemeinerung auf Teilchen mit drei räumlichen Freiheitsgraden erfolgt analog wie beim Paritätsoperator; s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.2.

2.8 Ich gehe von der in Aufgabe 2.7 gegebenen formalen Definition des Translationsoperators $T(a)$ aus und verwende die in Aufgabe 2.7 aus dieser Definition gefolgerten Beziehungen (2.7-1), (2.7-2):

$$\left.\begin{aligned} &T(a)\,|\,x\rangle = |\,x+a\rangle \\ &T(-a) = T^{-1}(a) = T^\dagger(a) \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} T(a)\,X\,T^\dagger(a)\,|\,x\rangle &= T(a)\,X\,T(-a)\,|\,x\rangle \\ &= T(a)\,X\,|\,x-a\rangle = (x-a)\,T(a)\,|\,x-a\rangle \\ &= (x-a)\,|\,x\rangle = (X-a\mathbb{1})\,|\,x\rangle\,,\ \ \forall\,|\,x\rangle \ \Rightarrow \end{aligned}$$
$$T(a)\,X\,T^\dagger(a) = X - a\mathbb{1}\,. \tag{2.8-1}$$

Für den Beweis der entsprechenden Beziehung für den Impulsoperator verwende ich außerdem die Vollständigkeitsbeziehung der Ortseigenzustände, die Spektraldarstellung des Impulsoperators sowie die Tatsache, dass die Impulseigenfunktionen die Form

$$u_p(x) \equiv \langle x\,|\,p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)px}$$

besitzen, sodass $\langle x'\,|\,p\rangle\langle p\,|\,x-a\rangle = \langle x'+a\,|\,p\rangle\langle p\,|\,x\rangle$ gilt.

$$\left.\begin{aligned} &T(a)\,|\,x\rangle = |\,x+a\rangle \\ &T(-a) = T^{-1}(a) = T^\dagger(a) \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} T(a)\,P\,T^\dagger(a)\,|\,x\rangle &= T(a)\,P\,T(-a)\,|\,x\rangle \\ &= T(a)\,P\,|\,x-a\rangle \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$T(a)\,P\,T^\dagger(a)\,|\,x\rangle = T(a)\underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx'\,|\,x'\rangle\langle x'|}_{\mathbb{1}}\underbrace{\int_{\mathbb{R}} dp\,|\,p\rangle\,p\,\langle p\,|\,x-a\rangle}_{P}$$

$$T(a)\,P\,T^\dagger(a)\,|\,x\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dx' \int\limits_{\mathbb{R}} dp\,|\,x'+a\,\rangle\,\underbrace{\langle\,x'\,|\,p\,\rangle\,p\,\langle\,p\,|\,x-a\,\rangle}_{\langle\,x'+a\,|\,p\,\rangle\,p\,\langle\,p\,|\,x\,\rangle}$$

$$= \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} dx'\,|\,x'+a\,\rangle\langle\,x'+a\,|}_{\mathbb{1}} \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} dp\,|\,p\,\rangle\,p\,\langle\,p\,|\,x\,\rangle}_{P} = P\,|\,x\,\rangle\,, \qquad \forall\,|\,x\,\rangle \quad \Rightarrow$$

$$T(a)\,P\,T^\dagger(a) = P\,. \tag{2.8-2}$$

2.9* Ich gehe von der in Aufgabe 2.7 gegebenen formalen Definition des Translationsoperators $T(a)$ aus. Ferner verwende ich die Vollständigkeitsbeziehung der Impulseigenzustände, die Form der Spektraldarstellung für Funktionen des Impulsoperators sowie die Tatsache, dass die Impulseigenfunktionen die Form

$$u_p(x) \equiv \langle\,x\,|\,p\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)px}$$

besitzen, sodass

$$\langle\,p\,|\,x+a\,\rangle = e^{-(i/\hbar)pa}\,\langle\,p\,|\,x\,\rangle$$

gilt.

$$T(X,P;a)\,|\,x\,\rangle = |\,x+a\,\rangle = \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} dp\,|\,p\,\rangle\langle\,p\,|}_{\mathbb{1}}\,|\,x+a\,\rangle = \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} dp\,|\,p\,\rangle\,e^{-(i/\hbar)pa}}_{e^{-(i/\hbar)Pa}}\,\langle\,p\,|\,x\,\rangle\,, \qquad \forall\,|\,x\,\rangle \quad \Rightarrow$$

$$T(a) \equiv T(X,P;a) = e^{-(i/\hbar)Pa} \quad \text{(unabhängig von } X\text{)}. \tag{2.9-1}$$

Bemerkungen

Für eine infinitesimale Translation $x' = \mathscr{T}(da)\,x = x + da$ gilt

$$T(da) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,da\,P\,. \tag{2.9-2}$$

(Der Impulsoperator „erzeugt“ eine infinitesimale Translation.) Diese Eigenschaft kann auch zur Definition der Observablen Teilchenimpuls verwendet werden.

Mit der Operatorfunktion (2.9-1) und Formel (1.20-1) kann man die Beziehungen (2.8-1) und (2.8-2) explizit beweisen. Die Beziehung (2.8-2) folgt unmittelbar aus der Vertauschbarkeit von P mit einer beliebigen Operatorfunktion von $P = P^\dagger$,

$$T(a)\,P\,T^\dagger(a) = e^{-(i/\hbar)Pa}\,P\,e^{(i/\hbar)Pa} = P\,, \tag{2.9-3}$$

und das Transformationsgesetz

$$T(a)\,X\,T^\dagger(a) = e^{-(i/\hbar)Pa}\,X\,e^{(i/\hbar)Pa} = X - a\mathbb{1} \tag{2.9-4}$$

wurde bereits in Aufgabe 1.20, Punkt (a), behandelt (s. Gl. (1.20-7)).

2.10 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem):

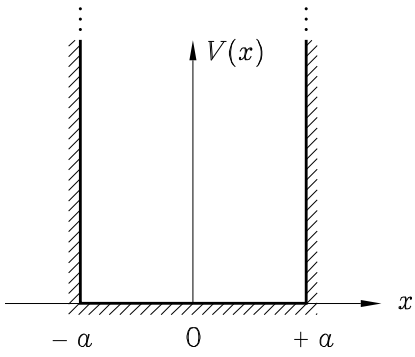


Abb. 2.10-1:
Unendlich tiefes Kastenpotential

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}u(x)=E\,u(x)$$

($V(x)$ s. Abb. 2.10-1). Das Teilchen kann nur im Intervall $[-a,+a]$ angetroffen werden. Somit:

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right\}u(x)=0\,,\quad |x|\le a\,,$$

$$k:=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\quad (E>0).$$

Wegen $V(-x)=V(x)$ müssen die Eigenfunktionen gerade oder ungerade sein (s. Aufgabe 2.4).

Damit kommen wir zum Lösungsansatz

$$u(x)=A\cos kx\qquad\text{oder}\qquad u(x)=A\sin kx\,.$$

Randbedingung für gerade Eigenfunktionen:

$$u(a)=A\cos ka=0\quad\Rightarrow\quad k_{n-1}=\frac{n\pi}{2a}\,,\quad n=1,3,5,\ldots\,;$$

Randbedingung für ungerade Eigenfunktionen:

$$u(a)=A\sin ka=0\quad\Rightarrow\quad k_{n-1}=\frac{n\pi}{2a}\,,\quad n=2,4,6,\ldots\,.$$

Somit lauten die Energieeigenwerte

$$E_{n-1}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,n^2\,,\qquad n\in\mathbb{N}\,,\tag{2.10-1}$$

und die zugehörigen im Intervall $[-a,+a]$ auf eins normierten Eigenfunktionen

$$u_{n-1}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}\,,\qquad |x|\le a\,,\quad n=1,3,5,\ldots\,;\tag{2.10-2a}$$

$$u_{n-1}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}\,,\qquad |x|\le a\,,\quad n=2,4,6,\ldots\,.\tag{2.10-2b}$$

Bemerkungen

Abweichend von der Bezeichnungsweise in Aufgabe 2.4 gibt hier $n-1$ die Anzahl der Nullstellen der Eigenfunktion im Intervall $(-a,+a)$ an. Beachte, dass es für $E<0$ und ebenso für $E=0$ keine nichttriviale Lösung der obigen Schrödingergleichung gibt, welche die Randbedingungen erfüllt.

S. auch Aufgabe 2.18.

2.11 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}u(x)=E\,u(x)\,, \tag{2.11-1a}$$

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x-x_0)+V_1(x)\,. \tag{2.11-1b}$$

Aufgrund der Annahmen bezüglich $u(x)$ und $V_1(x)$ für $x\in(x_0-\epsilon\,,\,x_0+\epsilon)$ und wegen der Form der Differentialgleichung muss $u''(x)$ an der Stelle x_0 eine δ-förmige Singularität besitzen. Der entsprechende Sprung von $u'(x)$ folgt aus

$$\int\limits_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}dx\,u''(x)\;+\;2D\int\limits_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}dx\,\delta(x-x_0)\,u(x)\;=\;\int\limits_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}dx\,\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\,[\,V_1(x)-E\,]\,u(x)}_{=:\,w(x)}\quad\Rightarrow$$

$$u'(x_0+\epsilon)-u'(x_0-\epsilon)+2D\,u(x_0)=\int\limits_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}dx\,w(x)$$

durch Bildung des Grenzwertes $\epsilon\to 0+$:

$$u'(x_0+)-u'(x_0-)+2D\,u(x_0)=0\,.$$

Bei Vorliegen eines Potentials $V(x)$ der Form (2.11-1b) lauten also die *Anschlussbedingungen für die Energieeigenfunktionen* $u(x)$ an der Stelle $x=x_0$

$$u(x_0-)=u(x_0+)=:u(x_0)\,, \tag{2.11-2a}$$

$$u'(x_0-)=u'(x_0+)+2D\,u(x_0)\,. \tag{2.11-2b}$$

S. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.12.

2.12 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem):

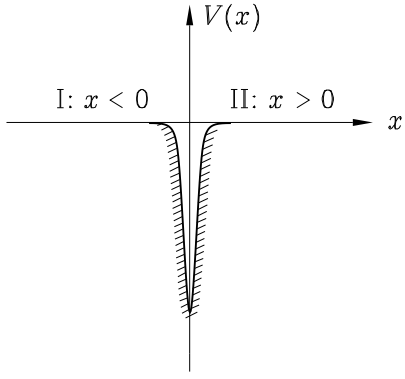


Abb. 2.12-1:
Anziehendes δ-förmiges Potential

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}u(x)=E\,u(x) \tag{2.12-1a}$$

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x)\,. \tag{2.12-1b}$$

Bereich I ($x<0$) und Bereich II ($x>0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}\;-\;\kappa^2\right\}u(x)=0\,,$$

$$\kappa:=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\quad(E<0)\,;$$

Wegen $V(-x)=V(x)$ müssen die Eigenfunktionen gerade oder ungerade sein (s. Aufgabe 2.4).

Da das Ausnützen der Inversionssymmetrie des Potentials in diesem Fall aber keine Rechenvorteile bringt, mache ich den allgemeinen Lösungsansatz

$$u(x) = \begin{cases} A_1\, e^{\kappa x} + B_1\, e^{-\kappa x} & \text{für } x < 0 \\ A_2\, e^{\kappa x} + B_2\, e^{-\kappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases} ;$$

Forderung, dass u für $x \to \pm\infty$ nicht divergiert:

$$A_2 = B_1 = 0\,.$$

Die Anschlussbedingungen für $x = 0$ (s. Aufgabe 2.11, Gl. (2.11-2a), (2.11-2b)) liefern eine Eigenwertbedingung:

$$\begin{aligned} u(0-) &= u(0+) =: u(0) \\ u'(0-) &= u'(0+) + 2D\,u(0) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A_1 &= B_2 \ (\neq 0) \\ \kappa A_1 &= -\kappa B_2 + 2DA_1 \end{aligned} \quad \Rightarrow$$

Eigenwert:

$$\kappa = D \quad \text{bzw.} \quad E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m}\,. \tag{2.12-2}$$

Zugehörige auf eins normierte Energieeigenfunktion (freier unimodularer Faktor willkürlich eins gesetzt):

$$u_E(x) = \sqrt{D}\, e^{-D|x|}\,. \tag{2.12-3}$$

Bemerkungen

Der Leser führe zum Vergleich die Rechnung unter Ausnützen der Inversionssymmetrie des Potentials durch (getrennte Lösungsansätze für gerade und ungerade Eigenfunktionen).

Die erste Ableitung der Eigenfunktion (2.12-3) ist zwar unstetig an der Stelle $x = 0$, da jedoch u_E und u_E' reellwertig sind, ist die Wahrscheinlichkeitsstromdichte identisch null und somit stetig.

Das δ-förmige Potential Gl. (2.12-1b) kann (im Sinne der Beziehungen (A.1-1), (A.1-2) von Anhang A.1) als „Grenzwert“ einer Folge von eindimensionalen Kastenpotentialen

$$V(x;\epsilon) = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{m}\, D\, \dfrac{1}{2\epsilon} & \text{für } |x| < \epsilon \\ 0 & \text{für } |x| > \epsilon \end{cases} \tag{2.12-4}$$

($D > 0$ fest) für $\epsilon \to 0+$ dargestellt werden. Für festes ϵ ist das Potential umso stärker anziehend, je größer D ist. Der Leser setze in die in Aufgabe 2.13 für das Kastenpotential gefundenen Eigenwertbedingungen (2.13-6a), (2.13-6b) und (2.13-7) für a und V_0

$$a = \epsilon\,, \qquad V_0 = \frac{\hbar^2}{m}\, D\, \frac{1}{2\epsilon} \tag{2.12-5}$$

ein und zeige, dass sich bei festgehaltenem D für $\epsilon \to 0+$ eine einzige Lösung ergibt, und für den entsprechenden Energieeigenwert und die zugehörige Energieeigenfunktion wieder (2.12-2) bzw. (2.12-3) folgt. Der Vergleich des Rechenaufwandes für Aufgabe 2.13 und die Untersuchung

der Lösung für kleine Werte von ϵ mit dem Rechenaufwand für Aufgabe 2.12 zeigt, *warum* man ein „längs einer kleinen Strecke sehr stark anziehendes (abstoßendes) Potential“ gerne als „δ-förmig“ idealisiert.

S. auch Aufgabe 3.14 sowie die Aufgaben 2.18 und 2.19.

2.13 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}u(x)=E\,u(x)$$

($V(x)$ siehe Abb. 2.13-1). Wegen $V(-x)=V(x)$ müssen die Eigenfunktionen zu etwaigen gebundenen Zuständen gerade oder ungerade sein. Und zwar muss

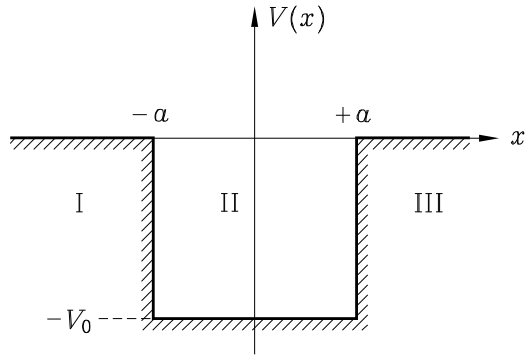


Abb. 2.13-1: Kastenpotential

$$\Pi^{\{x\}}u_n(x)=u_n(-x)=(-1)^n\,u_n(x)\,,\qquad n\in\mathbb{N}_0 \qquad (2.13\text{-}1)$$

gelten, wenn E_0 der niedrigste Energieeigenwert ist und $E_0<E_1<E_2<\ldots$ gilt (s. Aufgabe 2.4). Ich löse deshalb die Differentialgleichung allgemein für die Bereiche I, II, III und wähle von vornherein (d. h. *vor* Anschreiben der Stetigkeitsbedingungen) die Koeffizienten so, dass gerade oder ungerade Funktionen entstehen.

Differentialgleichung für den Bereich II ($|x|<a$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+K^2\right\}u(x)=0\,,\quad K:=\sqrt{\frac{2m\,(V_0-|E|\,)}{\hbar^2}}\quad(-V_0<E<0)\,; \qquad (2.13\text{-}2)$$

Differentialgleichung für die Bereiche I, III ($|x|>a$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}-\kappa^2\right\}u(x)=0\,,\qquad \kappa:=\sqrt{\frac{2m\,|E|}{\hbar^2}}\qquad(-V_0<E<0)\,. \qquad (2.13\text{-}3)$$

(Beachte, dass es für $E=0$ und für $E=-V_0$ keine nichttriviale, die Stetigkeitsbedingungen erfüllende normierbare Lösung gibt.)

Lösungsansatz:
Fall (a): *gerade Eigenfunktionen*

$$u(x)=u(-x)\quad\Rightarrow\quad u(x)=\begin{cases} B\,e^{\kappa x} & \text{für}\quad x<-a\\ C\cos Kx & \text{für}\quad -a<x<+a\\ B\,e^{-\kappa x} & \text{für}\quad x>+a\end{cases}\,; \qquad (2.13\text{-}4\text{a})$$

Fall (b): *ungerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = -u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} -B\,e^{\kappa x} & \text{für} \quad x < -a \\ C \sin Kx & \text{für} \quad -a < x < +a \\ B\,e^{-\kappa x} & \text{für} \quad x > +a \end{cases} . \tag{2.13-4b}$$

Die in den Bereichen I und III im Unendlichen divergenten Partikulärlösungen wurden weggelassen, da u für $x \to \pm\infty$ nicht divergieren darf. Die Stetigkeitsbedingungen für u reduzieren sich wegen des Lösungsansatzes (2.13-4a) bzw. (2.13-4b) von ursprünglich vier auf zwei Bedingungen:

$$\left.\begin{array}{ll} (\alpha) & u(a-) = u(a+) \\ (\beta) & u'(a-) = u'(a+) \end{array}\right\} \Rightarrow \left.\begin{array}{r} C\cos Ka = B\,e^{-\kappa a} \\ -CK\sin Ka = -B\kappa\,e^{-\kappa a} \end{array}\right\} \text{ im Fall (a)}, \tag{2.13-5a}$$

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{r} C\sin Ka = B\,e^{-\kappa a} \\ CK\cos Ka = -B\kappa\,e^{-\kappa a} \end{array}\right\} \text{ im Fall (b)}. \tag{2.13-5b}$$

Nullsetzen der Koeffizientendeterminante des Gleichungssystems für B, C liefert

bzw.

$$\kappa a = Ka\,\tan Ka \qquad \text{im Fall (a)} \tag{2.13-6a}$$

$$\kappa a = -Ka\,\cot Ka \qquad \text{im Fall (b)}. \tag{2.13-6b}$$

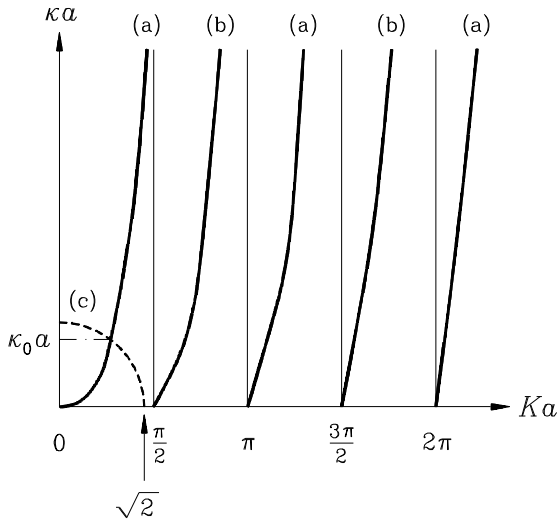


Abb. 2.13-2: Graphische Darstellung der Bedingungen für die Energieeigenwerte $E < 0$:
(a) Gl. (2.13-6a);
(b) Gl. (2.13-6b);
(c) Gl. (2.13-7) für $2mV_0a^2/\hbar^2 = 2$

Diese Beziehungen stellen zusammen mit (s. (2.13-2) und (2.13-3))

$$(Ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\,, \qquad Ka > 0\,, \quad \kappa a > 0 \tag{2.13-7}$$

die Eigenwertbedingungen dar.

Die Abbildung 2.13-2 zeigt eine graphische Darstellung der Funktionen (2.13-7) und (2.13-6a), (2.13-6b). Wie man daraus sieht, gibt es für beliebiges V_0 und a mindestens einen gebundenen Zustand, da die Kurve (c) zumindest den ersten Ast der Kurvenschar (a) schneidet. Für die Abbildung wurde $2mV_0a^2/\hbar^2 = 2$ angenommen. In diesem Fall gibt es einen gebundenen Zustand, dessen Energie durch $E_0 = -\hbar^2\kappa_0^2/2m$ gegeben ist.

Bemerkungen

Eine Bedingung für die Existenz gebundener Zustände ist im Allgemeinen das Vorliegen einer Potentialmulde, in welcher das Potential niedrigere Werte annimmt, als die Grenzwerte im Unendlichen in beliebiger Richtung betragen. Bei eindimensionalen Potentialen (räumlicher Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ des Teilchens) existiert für eine beliebig schmale und flache Potentialmulde ein gebundener Zustand. (In Aufgabe T5.6 wird dies für eine spezielle Klasse von Potentialen bewiesen.) In drei Dimensionen dagegen darf im Allgemeinen $mV_0a^2/\hbar^2$ (V_0 Maß für die Tiefe, $2a$ Maß für den Durchmesser der Potentialmulde) die Größenordnung 1 nicht unterschreiten. (Siehe die Aufgabe 2.25 und die Bemerkungen dazu sowie die Aufgabe 5.12).

Die zweimal benützten Worte „im Allgemeinen“ beziehen sich auf folgende Einschränkungen: Prinzipiell ist es möglich, dass diskrete Eigenwerte existieren, *ohne* dass eine Potentialmulde im obigen Sinne vorliegt. Man hat es dann mit einem Energiekontinuum zu tun, in das diskrete Eigenwerte eingebettet sind.[3] Ist ein Teilchen von einem Potentialwall „umgeben“ und hat es eine Energie, welche unterhalb der „Oberkante“ des Walls liegt, aber größer ist als der Grenzwert des Potentials im Unendlichen in allen oder auch nur in bestimmten Richtungen, so kann das Teilchen normalerweise durch Tunneleffekt „entweichen“. Gibt es aber diskrete im Kontinuum eingebettete Eigenwerte, so entsprechen diesen Eigenwerten echte gebundene Zustände, d. h. ein Teilchen mit einer solchen Energie kann *nicht* „hinaustunneln“. Verdacht bzgl. des Vorliegens solcher der Intuition zuwiderlaufender Phänomene muss man beim Einteilchenproblem immer dann haben, wenn das Potential räumlich oszilliert und im Unendlichen langsam auf einen konstanten Wert abfällt. Umgekehrt ist es aber auch in „unverdächtigen Fällen“ wie etwa bei der Selbstionisation des Wasserstoffatoms in einem äußeren elektrischen Feld (s. Aufgabe 9.4, insbesondere Abb. 9.4-2) nicht leicht, die Existenz diskreter Eigenwerte im Kontinuum streng auszuschließen.

Auch bei Mehrteilchenproblemen kann es diskrete Eigenwerte im Kontinuum geben. Derartige gebundene Zustände treten auf, wenn ein „Zerfall“ aufgrund von Symmetrien, etwa aus Paritätsgründen, „verboten“ ist. Ein Beispiel dazu stellt das Heliumatom dar. (Siehe [13] sowie die Bemerkungen zu Aufgabe 9.12.)

S. auch Aufgabe 2.14 und die Bemerkungen zu Aufgabe 2.12.

2.14 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung in den Bereichen I ($0 \le x < a$) und II ($x > a$) (also für alle nichtnegativen x; s. Abb. 2.14-1) vollkommen gleich wie in Aufgabe 2.13, somit Lösungsansatz

$$u(x) = A_1\, e^{iKx} + B_1\, e^{-iKx} \quad \text{für} \quad 0 \le x < a\,, \qquad u(x) = B\, e^{-\kappa x} \quad \text{für} \quad x > a\,,$$

[3] S. dazu Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

wobei K durch (2.13-2) und κ durch (2.13-3) gegeben ist ($-V_0 < E < 0$). Dabei wurde bereits die für $x \to +\infty$ divergente Partikulärlösung ausgeschieden. (Beachte, dass es für $E = 0$ und für $E = -V_0$ keine nichttriviale, die Rand- und Stetigkeitsbedingungen erfüllende normierbare Lösung gibt.)

Randbedingung für $x = 0$: $\quad u(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_1 + B_1 = 0 \quad$ bzw. mit $\quad C = 2iA_1$

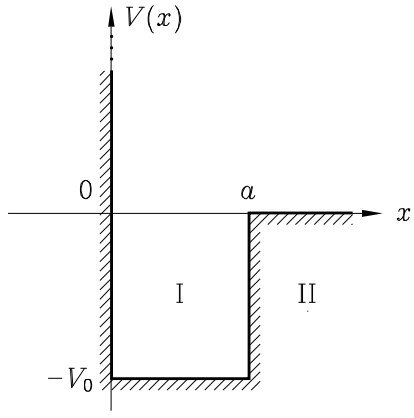


Abb. 2.14-1: Potential $V(x)$

$$u(x) = \begin{cases} C \sin Kx & \text{für} \quad 0 \le x < a \\ B\, e^{-\kappa x} & \text{für} \quad x > a \end{cases} .$$

Da diese Lösungsform mit (2.13-4b) für $x \ge 0$ identisch ist, und auch die Stetigkeitsbedingungen bei $x = a$ mit (2.13-5b) übereinstimmen, ergeben sich die Eigenwertbedingungen (2.13-6b), (2.13-7), also

$$\kappa a = -Ka \cot Ka \,,$$

$$(Ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \,,$$

$$Ka > 0 \,, \quad \kappa a > 0 \,.$$

Die Abbildung 2.13-2 zeigt die graphische Darstellung der Funktionen (2.13-6b) und (2.13-7), wobei der Viertelkreis (2.13-7) gerade für den bei der vorliegenden Aufgabe gegebenen Wert von $2mV_0a^2/\hbar^2$ gezeichnet wurde:

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = 2 = (\sqrt{2}\,)^2 \,.$$

Wie man daraus sieht, besitzt das gegebene Potential keinen gebundenen Zustand, da die Kurve (c) keinen der Äste der Kurvenschar (b) schneidet.

Bemerkungen

Bezüglich der Frage nach der Existenz gebundener Zustände s. zunächst die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13.

Nimmt man die Lösung von Aufgabe 2.13 als bekannt an, so kann man die Eigenwertbedingung und die zugehörigen Eigenfunktionen $u(x)$ unmittelbar anschreiben: Die ungeraden Lösungen von Aufgabe 2.13 sind für $x \ge 0$ Lösungen derselben Schrödingergleichung und erfüllen automatisch die Randbedingung $u(0) = 0$, während die geraden Lösungen von Aufgabe 2.13 zwar ebenfalls für $x \ge 0$ diese Differentialgleichung erfüllen, nicht jedoch die in Aufgabe 2.14 zu fordernde Randbedingung für $x = 0$, weshalb sie auszuscheiden sind. (Dementsprechend fallen dann auch die Kurvenäste (a) von Abb. 2.13-2 weg.)

S. auch die analoge Aufgabe 2.15.

2.15 Zu lösen ist die zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung

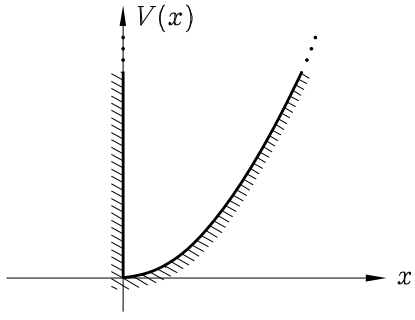


Abb. 2.15-1: Potential $V(x)$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}\,x^2\right\}u(x)=E\,u(x)$$

für $x \geq 0$ mit der Normierbarkeitsbedingung

$$\int_0^{+\infty} dx\,|u(x)|^2 < +\infty$$

und der Randbedingung $u(0) = 0$. Die ungeraden Eigenfunktionen des linearen harmonischen Oszillators erfüllen diese Bedingungen, während die geraden Eigenfunktionen auszuscheiden sind. Bezeichnen wir also die der Größe nach geordneten Eigenwerte mit $E_0, E_1, E_2, \ldots$ und normieren wir die Eigenfunktionen im Intervall $[0, +\infty)$ auf eins, so haben wir (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5b), (A.5-5c) und (A.5-7))

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^{2n}\,(2n+1)!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\!\left[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\right]H_{2n+1}(\alpha x)\,, \qquad x \in \mathbb{R}_0^+\,; \tag{2.15-1}$$

$$E_n = \left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,; \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;. \tag{2.15-2}$$

Bemerkungen

Die Orthogonalitätsbeziehungen

$$\int_0^{+\infty} dx\,u_n^*(x)\,u_{n'}(x) = \delta_{nn'} \tag{2.15-3}$$

der Eigenfunktionen (2.15-1) folgen unmittelbar aus den Orthogonalitätsbeziehungen der hermiteschen Eigenfunktionen (A.5-5b), wenn man (A.5-5c) berücksichtigt. Die Vollständigkeitsbeziehung

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n^*(x)\,u_n(x') = \delta(x-x') \tag{2.15-4}$$

der Eigenfunktionen (2.15-1) in $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}_0^+)$ kann man mithilfe der Formel (A.2-29) zeigen, wenn man[4]

$$H_{2n+1}(\xi) = (-1)^n\,\frac{2^{2n+1}\,n!}{\Gamma(n+\frac{3}{2})}\,\xi\,L_n^{1/2}(\xi^2)\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0 \tag{2.15-5}$$

und (A.1-7), (A.1-9) sowie $x > 0$, $x' > 0$ beachtet. Der Leser führe die Rechnungen im Detail selbst durch.

[4] Siehe z. B. Morse, Ph. M., und H. Feshbach: Methods of Theoretical Physics. 2 Bde., Mc Graw-Hill Book Company, New York 1953. Reprint: Feshbach Publishing, Minneapolis 2009.

2.16* Der Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2 - q\mathcal{E}X \tag{2.16-1}$$

des Systems kann zu einem vollständigen Quadrat in X ergänzt werden:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,(X - x_0\mathbb{1})^2 - \frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2\,\mathbb{1}\,, \qquad x_0 := \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}\,. \tag{2.16-2}$$

Lösung des Eigenwertproblems (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-1), (A.5-5b) und (A.5-7)):
Eigenwerte

$$E_n = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega - \frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,; \tag{2.16-3}$$

Eigenfunktionen in der Ortsdarstellung

$$u_n(x) \equiv \langle\, x \,|\, n \,\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\, n!\,\sqrt{\pi}}}\;\exp\Big[-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\Big]\,H_n\Big(\alpha(x-x_0)\Big)\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,; \quad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,. \tag{2.16-4}$$

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 4.14 und die Aufgaben 5.1 und 5.5.

2.17* **(a)** Aus

$$H = \frac{1}{2m}\Big[\vec{P} - \frac{q}{c}\,\vec{A}(\vec{R})\Big]^2 \tag{2.17-1}$$

folgt mit $\vec{A}(\vec{R}) = (\mathbb{0}, BX_1, \mathbb{0})$

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{1}{2m}(P_2 - m\omega_0 X_1)^2 + \frac{P_3^2}{2m}\,, \qquad \omega_0 := \frac{qB}{mc}\,. \tag{2.17-2}$$

(b) (b1) Mit

$$U = \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\,\frac{P_1P_2}{m\omega_0}\Big]$$

folgt unter Verwendung der Formel (1.20-1)

$$UP_jU^\dagger = P_j\,, \quad j = 1,2,3\,; \tag{2.17-3}$$

$$UX_1U^\dagger = X_1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\Big(\frac{i}{m\hbar\omega_0}\Big)^n\,[P_1P_2, X_1]_{(n)}\,,$$

$$[P_1P_2, X_1]_{(1)} = [P_1P_2, X_1] = [P_1, X_1]P_2 = -i\hbar P_2\,,$$

$$[P_1P_2, X_1]_{(n)} = \mathbb{0}\,, \quad n = 2,3,4,\ldots \quad \Rightarrow$$

$$UX_1U^\dagger = X_1 + \frac{1}{m\omega_0}\,P_2\,. \tag{2.17-4}$$

Aus (2.17-3), (2.17-4) ergibt sich

$$U(P_2 - m\omega_0 X_1)U^\dagger = -m\omega_0 X_1 \tag{2.17-5}$$

und da für einen beliebigen Operator T

$$(T^2)' \equiv UT^2U^\dagger = UT\underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}}TU^\dagger = (T')^2$$

gilt, folgt

$$H' \equiv UHU^\dagger = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}X_1^2 + \frac{P_3^2}{2m}\ . \tag{2.17-6}$$

(b2) Die selbstadjungierten Operatoren

$$H_{\text{Osz1}} := \frac{P_1^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}X_1^2\,, \quad P_2\,, \quad P_3 \tag{2.17-7}$$

bilden einen vollständigen Satz von untereinander und mit H' vertauschbaren Operatoren. Mit den gemeinsamen Eigenvektoren

$$|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = |\,n\,\rangle^{(1)}|\,p_2\,\rangle^{(2)}|\,p_3\,\rangle^{(3)} \tag{2.17-8}$$

dieser Operatoren und den entsprechenden Eigenwerten, d. h. mit

$$H_{\text{Osz1}}\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar|\omega_0|\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle\,, \tag{2.17-9a}$$

$$P_2\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = p_2\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle\,, \tag{2.17-9b}$$

$$P_3\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = p_3\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle\,; \tag{2.17-9c}$$

$$n \in \mathbb{N}_0\,, \quad p_2 \in \mathbb{R}\,, \quad p_3 \in \mathbb{R} \tag{2.17-9d}$$

folgt für die Eigenwerte und Eigenvektoren von $H' = UHU^\dagger$ bzw. von H:

$$H'\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = E_n(p_3)\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle\,, \quad H\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = E_n(p_3)\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle\,, \tag{2.17-10}$$

$$E_n(p_3) = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar|\omega_0| + \frac{p_3^2}{2m}\,, \tag{2.17-11}$$

$$|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{P_1P_2}{m\omega_0}\Big]\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle = \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,P_1 a\Big]\,|\,n\,p_2\,p_3\,\rangle\,, \qquad a := \frac{p_2}{m\omega_0}\ . \tag{2.17-12}$$

Die Eigenwerte von H hängen nicht von p_2 ab, besitzen also eine nicht abzählbare Vielfachheit. Die den Ketvektoren (2.17-12) in der Ortsdarstellung zugeordneten Eigenfunktionen kann man sofort anschreiben, wenn man beachtet, dass der Operator

$$\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,P_1 a\Big] =: T_1(a) = T_1^\dagger(-a)$$

Translationsoperator zur Translation $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{T}_1(a)\,\vec{r} = (x_1 + a,\, x_2,\, x_3)$ ist (s. Gl. (2.9-1) und Gl. (2.7-1), (2.7-2)):

$$u_{np_2p_3}(\vec{r}) \equiv \langle\, \vec{r}\,|\, u_{np_2p_3}\,\rangle = \frac{{}^{(1)}\langle\, x_1\,|\, T_1(a)\,|\, n\,\rangle^{(1)}}{{}^{(1)}\langle\, x_1 - a\,|\, n\,\rangle^{(1)}}\, {}^{(2)}\langle\, x_2\,|\, p_2\,\rangle^{(2)}\, {}^{(3)}\langle\, x_3\,|\, p_3\,\rangle^{(3)}\,.$$

Mit Gl. (A.5-5b) von Anhang A.5 folgt somit

$$\begin{aligned} u_{np_2p_3}(\vec{r}) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\, n!\,\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{\alpha^2(x_1-a)^2}{2}\Big]\, H_n\big(\alpha(x_1-a)\big) \\ &\quad \times \frac{1}{2\pi\hbar}\, \exp\Big[\frac{i}{\hbar}\,(p_2x_2 + p_3x_3)\Big]\,, \end{aligned} \tag{2.17-13a}$$

$$\alpha := \sqrt{\frac{m\,|\omega_0|}{\hbar}} = \sqrt{\frac{|q|\,B}{\hbar c}}\,, \quad a = \frac{p_2}{m\omega_0} = \frac{cp_2}{qB}\,. \tag{2.17-13b}$$

(c) (c1) Zu zeigen ist, dass die Operatoren $\mathsf{X}_j, \mathsf{P}_k$ die Vertauschungsbeziehungen

$$[\mathsf{X}_j, \mathsf{X}_k] = \mathbb{0}\,, \qquad [\mathsf{P}_j, \mathsf{P}_k] = \mathbb{0}\,, \qquad [\mathsf{X}_j, \mathsf{P}_k] = i\hbar\,\delta_{jk}\mathbb{1} \tag{2.17-14}$$

erfüllen. Ich überlasse den Beweis dieser Beziehungen, der sehr einfach ist, dem Leser.

(c2) Drückt man den Hamiltonoperator H Gl. (2.17-2) durch die neuen fundamentalen Operatoren aus, so erhält man

$$H = \frac{\mathsf{P}_1^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\,\mathsf{X}_1^2 + \frac{\mathsf{P}_3^2}{2m}\,. \tag{2.17-15}$$

Die selbstadjungierten Operatoren

$$H_{\text{Osz}} := \frac{\mathsf{P}_1^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\,\mathsf{X}_1^2\,, \quad \mathsf{P}_2 = P_2\,, \quad \mathsf{P}_3 = P_3 \tag{2.17-16}$$

bilden in $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} \otimes \mathscr{H}^{(3)} = \mathscr{H}^{(1,2)} \otimes \mathscr{H}^{(3)}$ einen vollständigen Satz von untereinander und mit H vertauschbaren Operatoren. Da H_{Osz} und $\mathsf{P}_2 = P_2$ nur in $\mathscr{H}^{(1,2)}$ eine vom Einheitsoperator verschiedene Wirkung besitzen, und der Operator $\mathsf{P}_3 = P_3$ nur in $\mathscr{H}^{(3)}$ eine vom Einheitsoperator verschiedene Wirkung besitzt, müssen die gemeinsamen Eigenvektoren von H_{Osz}, P_2 und P_3 die folgende Form haben:

$$|\, u_{np_2p_3}\,\rangle = |\, n\,p_2\,\rangle^{(1,2)}\, |\, p_3\,\rangle^{(3)}\,. \tag{2.17-17}$$

(Beachte: H_{Osz} „vermengt“ die x_1-, x_2-Freiheitsgrade, während H_{Osz1} von Punkt (b1) nur den x_1-Freiheitsgrad betraf.)

Aus den Eigenwertgleichungen

$$H_{\text{Osz}}\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar|\omega_0|\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle\,, \tag{2.17-18a}$$

$$P_2\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = p_2\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle\,, \tag{2.17-18b}$$

$$P_3\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = p_3\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle\,; \tag{2.17-18c}$$

$$n\in\mathbb{N}_0\,,\quad p_2\in\mathbb{R}\,,\quad p_3\in\mathbb{R} \tag{2.17-18d}$$

folgt für die Eigenwerte und Eigenvektoren von H

$$H\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle = E_n(p_3)\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle\,,\qquad E_n(p_3)=\Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar|\omega_0|+\frac{p_3^2}{2m}\,. \tag{2.17-19}$$

Für die Eigenwerte musste sich natürlich der gleiche Ausdruck ergeben wie bei Punkt (b2) (s. Gl. (2.17-11)). Die „normierten“ Energieeigenvektoren $|\,u_{np_2p_3}\,\rangle$ können sich aber von den bei (b2) gefundenen um einen (von n, p_2, p_3 abhängigen) unimodularen Faktor unterscheiden, da ja bei jedem Lösungsweg Phasenfaktoren in willkürlicher Weise festgelegt werden.

Im Folgenden bezeichne ich die Hilberträume zu den Freiheitsgraden $\mathsf{x}_1, \mathsf{x}_2, \mathsf{x}_3 = x_3$ mit $\mathscr{H}^{[1]}$, $\mathscr{H}^{[2]}$, $\mathscr{H}^{[3]}$. Es gilt dann

$$\mathscr{H}^{[1]}\neq\mathscr{H}^{(1)},\quad \mathscr{H}^{[2]}\neq\mathscr{H}^{(2)},\quad \mathscr{H}^{[3]}=\mathscr{H}^{(3)}, \tag{2.17-20a}$$

$$\mathscr{H}^{[1,2]}=\mathscr{H}^{[1]}\otimes\mathscr{H}^{[2]}=\mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)}=\mathscr{H}^{(1,2)}. \tag{2.17-20b}$$

Aus den Beziehungen (2.17-16) sieht man, dass die in Gl. (2.17-17) vorkommenden gemeinsamen Eigenvektoren $|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)}$ von H_{Osz}, P_2 in der Form

$$|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)} = |\,n\,p_2\,\rangle^{[1,2]} = |\,n\,\rangle^{[1]}\,|\,p_2\,\rangle^{[2]} \tag{2.17-21}$$

geschrieben werden können.

Gefragt sind die Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung ($\{\vec{r}\}$-Darstellung). Wegen (2.17-17) lässt sich die x_3-Abhängigkeit „faktorisieren“:

$$\begin{aligned} u_{np_2p_3}(\vec{r}) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,u_{np_2p_3}\,\rangle &= {}^{(1,2)}\langle\,x_1x_2\,|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)}\,{}^{(3)}\langle\,x_3\,|\,p_3\,\rangle^{(3)} \\ &= u_{np_2}(x_1,x_2)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)p_3x_3}\,. \end{aligned} \tag{2.17-22}$$

Wir brauchen noch die Funktionen $u_{np_2}(x_1,x_2)$, d. h. die zu den gemeinsamen Eigenvektoren (2.17-21) von H_{Osz}, P_2 gehörigen Eigenfunktionen in der $\{x_1x_2\}$-Darstellung („Basis“: gemeinsame Eigenvektoren von X_1, X_2). Und was kennen wir? Wir kennen die Funktionen $u_{np_2}(\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2)$, d. h. die zu diesen Eigenvektoren gehörigen Eigenfunktionen in der $\{\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\}$-Darstellung („Basis“: gemeinsame Eigenvektoren von $\mathsf{X}_1, \mathsf{X}_2$):

$$\begin{aligned} u_{np_2}(\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2) \equiv {}^{(1,2)}\langle\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)} &= {}^{[1]}\langle\,\mathsf{x}_1\,|\,n\,\rangle^{[1]}\,{}^{[2]}\langle\,\mathsf{x}_2\,|\,p_2\,\rangle^{[2]} \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{(\alpha\mathsf{x}_1)^2}{2}\Big]\,H_n(\alpha\mathsf{x}_1)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)p_2\mathsf{x}_2}\,. \end{aligned} \tag{2.17-23}$$

Damit liegt die weitere Vorgangsweise auf der Hand: Wir entwickeln die Eigenvektoren (2.17-21) in der „Basis“ $\{|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)},\ \mathsf{x}_1 \in \mathbb{R},\ \mathsf{x}_2 \in \mathbb{R}\}$.

1. Schritt: „Basis“ $\{|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)}\}$ von $\mathscr{H}^{(1,2)}$
Die gemeinsamen Eigenvektoren

$$|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)} = |\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{[1,2]} = |\,\mathsf{x}_1\,\rangle^{[1]}|\,\mathsf{x}_2\,\rangle^{[2]} \tag{2.17-24}$$

von $\mathsf{X}_1, \mathsf{X}_2$ bilden ein vollständiges „Orthonormalsystem“ in $\mathscr{H}^{(1,2)} = \mathscr{H}^{[1,2]}$:

$${}^{(1,2)}\langle\,\mathsf{x}_1'\mathsf{x}_2'\,|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)} = \delta(\mathsf{x}_1' - \mathsf{x}_1)\,\delta(\mathsf{x}_2' - \mathsf{x}_2)\,, \tag{2.17-25a}$$

$$\int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_1 \int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_2\,|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)}\,{}^{(1,2)}\langle\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,| = \mathbb{1} \quad \text{in} \quad \mathscr{H}^{(1,2)}. \tag{2.17-25b}$$

2. Schritt: Entwicklung der Vektoren $|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)}$ in der „Basis“ $\{|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)}\}$

$$|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)} = \int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_1 \int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_2\,|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)}\,{}^{(1,2)}\langle\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,|\,n\,p_2\,\rangle^{(1,2)} \quad \Rightarrow$$

$$u_{np_2}(x_1, x_2) = \int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_1 \int_{\mathbb{R}} d\mathsf{x}_2\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2)\,u_{np_2}(\mathsf{x}_1, \mathsf{x}_2)\,. \tag{2.17-26}$$

3. Schritt: Berechnung der Distributionen $u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) \equiv {}^{(1,2)}\langle\,x_1x_2\,|\,\mathsf{x}_1\mathsf{x}_2\,\rangle^{(1,2)}$
Aus der Definition der Operatoren $\mathsf{X}_1, \mathsf{X}_2$ ergibt sich für die zugehörigen wellenmechanischen Funktionaloperatoren in der $\{x_1x_2\}$-Darstellung

$$\mathsf{X}_1^{\{x_1x_2\}} = -i\hbar\,\frac{1}{m\omega_0}\,\frac{\partial}{\partial x_1}\,, \qquad \mathsf{X}_2^{\{x_1x_2\}} = x_2 - \mathsf{X}_1^{\{x_1x_2\}}. \tag{2.17-27}$$

Mit

$$\mathsf{X}_2^{\{x_1x_2\}}\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) = \mathsf{x}_2\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) = \left(x_2 - \mathsf{X}_1^{\{x_1x_2\}}\right)u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2)$$
$$= (x_2 - \mathsf{x}_1)\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2)$$

folgt zunächst

$$(\mathsf{x}_1 + \mathsf{x}_2 - x_2)\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) = \delta(\mathsf{x}_1 + \mathsf{x}_2 - x_2)\,f(x_1)\,, \tag{2.17-28}$$

wobei die Funktion f aus der Eigenwertgleichung

$$\mathsf{X}_1^{\{x_1x_2\}}\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) = \mathsf{x}_1\,u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1, x_2) \tag{2.17-29}$$

und der „Normierung“ von $u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}$ auf die δ-Funktion zu bestimmen ist. (2.17-29) liefert für f die Differentialgleichung

$$-i\hbar\,\frac{1}{m\omega_0}\,\frac{d}{dx_1}\,f(x_1) = \mathsf{x}_1\,f(x_1)$$

mit der Lösung (N Normierungskonstante)

$$f(x_1) = N \exp\Big[i\,\frac{m\omega_0}{\hbar}\,\mathsf{x}_1 x_1\Big] = N \exp\Big[i\,\mathrm{sign}\,\omega_0\,\alpha^2\,\mathsf{x}_1 x_1\Big]\,. \tag{2.17-30}$$

Wählt man die durch die „Normierungsbedingung“ (s. Gl. (2.17-25a))

$$\int\limits_{\mathbb{R}} dx_1 \int\limits_{\mathbb{R}} dx_2\, u^*_{\mathsf{x}'_1,\mathsf{x}'_2}(x_1,x_2)\, u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1,x_2) = \delta(\mathsf{x}'_1-\mathsf{x}_1)\,\delta(\mathsf{x}'_2-\mathsf{x}_2) \tag{2.17-31}$$

nur bis auf einen unimodularen Faktor bestimmte Normierungskonstante positiv reell, so ergibt sich $N = \alpha/\sqrt{2\pi}$, also

$$u_{\mathsf{x}_1,\mathsf{x}_2}(x_1,x_2) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\,\delta(\mathsf{x}_1+\mathsf{x}_2-x_2)\exp\Big[i\,\mathrm{sign}\,\omega_0\,\alpha^2\,\mathsf{x}_1 x_1\Big]\,. \tag{2.17-32}$$

4. Schritt: Berechnung der Funktionen $u_{np_2}(x_1,x_2)$ und der Funktionen $u_{np_2p_3}(\vec{r}\,)$
Einsetzen von (2.17-32) und (2.17-23) in Gl. (2.17-26) gibt nach Durchführung der x_2-Integration

$$\begin{aligned} u_{np_2}(x_1,x_2) = {} & \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{\mathbb{R}} d(\alpha\mathsf{x}_1)\exp\Big[-\frac{(\alpha\mathsf{x}_1)^2}{2}\Big]\,H_n(\alpha\mathsf{x}_1) \\ & \times \exp\Big[i\,\mathrm{sign}\,\omega_0\,\alpha x_1\,\alpha\mathsf{x}_1\Big]\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\,p_2\,(x_2-\mathsf{x}_1)\Big]\,. \end{aligned} \tag{2.17-33}$$

Geht man zur Integrationsveränderlichen $\xi = \alpha\mathsf{x}_1$ über und führt man

$$\eta := \mathrm{sign}\,\omega_0\,\alpha x_1 - \frac{p_2}{\hbar\alpha} = \mathrm{sign}\,\omega_0\,\alpha(x_1-a)\,, \qquad a \;\text{ s. Gl. (2.17-13b)} \tag{2.17-34}$$

ein, so folgt unter Beachtung von $H_n(-\eta) = (-1)^n\,H_n(\eta)$

$$\begin{aligned} u_{np_2}(x_1,x_2) &= \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)p_2x_2}\,\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\,e^{-\xi^2/2}\,H_n(\xi)\,e^{i\eta\xi}}_{i^n\,e^{-\eta^2/2}\,H_n(\eta)\;\text{ (s. Angabe)}} \\ &= (i\,\mathrm{sign}\,\omega_0)^n\sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{\alpha^2(x_1-a)^2}{2}\Big]\,H_n\Big(\alpha(x_1-a)\Big)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{(i/\hbar)p_2x_2}\,, \end{aligned} \tag{2.17-35}$$

und wir erhalten mit Gl. (2.17-22) für die Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} u_{np_2p_3}(\vec{r}\,) = {} & (i\,\mathrm{sign}\,\omega_0)^n\sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{\alpha^2(x_1-a)^2}{2}\Big]\,H_n\Big(\alpha(x_1-a)\Big) \\ & \times\frac{1}{2\pi\hbar}\,\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\,(p_2x_2+p_3x_3)\Big]\,. \end{aligned} \tag{2.17-36}$$

Wie dies der Fall sein muss, haben wir also bei den Lösungswegen der Punkte (b) und (c) bis auf einen physikalisch bedeutungslosen Phasenfaktor die gleichen Energieeigenfunktionen erhalten.

Bemerkungen

In der klassischen Mechanik ergibt sich für ein Teilchen mit der Ladung q und Masse m zufolge der Lorentzkraft $\vec{K} = q\left[\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right]$ die Überlagerung einer Kreisbewegung senkrecht zur Richtung des Magnetfeldes mit der Kreisfrequenz $|\omega_0|$ (*Zyklotron-Resonanz-Frequenz*) und einer kräftefreien Translationsbewegung in Feldrichtung. Quantenmechanisch ist die erstere Bewegung „quantisiert“, während die Bewegung in Feldrichtung „nicht quantisiert“ ist. Die Energieniveaus $E_n(p_3)$ zu festem p_3 werden als *Landauniveaus* bezeichnet.

Zur Möglichkeit der Umeichung des Vektorpotentials und der damit verknüpften Eichtransformation der Zustandsfunktion s. die Bemerkungen zu Aufgabe 3.25.

2.18 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\} u(x) = E\,u(x)$$

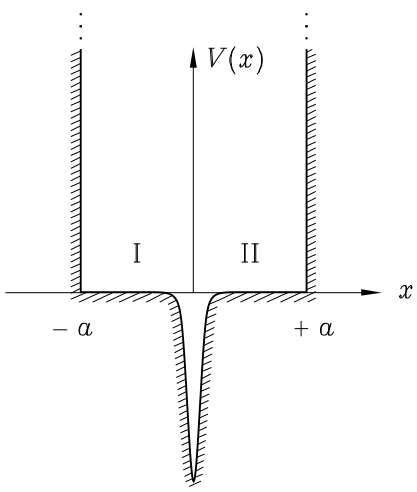


Abb. 2.18-1: Potential $V(x)$

($V(x)$ s. Abb. 2.18-1). Es gibt nur gebundene Zustände (das Teilchen kann nur im Intervall $[-a, +a]$ angetroffen werden), das Eigenwertspektrum für die Energie ist rein diskret. Wegen der Inversionsinvarianz des Potentials müssen die Energieeigenfunktionen gerade oder ungerade sein, und zwar muss

$$\Pi^{\{x\}} u_{n-1}(x) = u_{n-1}(-x) = (-1)^{n-1}\, u_{n-1}(x)\,, \qquad n \in \mathbb{N} \qquad (2.18\text{-}1)$$

gelten, wenn E_0 der niedrigste Energieeigenwert ist und $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$ gilt (siehe Aufgabe 2.4). Ich löse deshalb die Schrödingergleichung der Reihe nach für $E < 0$, $E = 0$ und $E > 0$ für die Bereiche I: $-a \le x < 0$ und II: $0 < x \le +a$

mit den Randbedingungen

$$u(\pm a) = 0 \qquad (2.18\text{-}2)$$

und den Anschlussbedingungen (s. Aufgabe 2.11, Gl. (2.11-2a), (2.11-2b))

$$u(0-) = u(0+) =: u(0)\,, \qquad (2.18\text{-}3)$$

$$u'(0-) = u'(0+) + 2D\,u(0) \qquad (2.18\text{-}4)$$

und setze dabei von vornherein gerade bzw. ungerade Lösungsfunktionen an.

(α) $E < 0$
Differentialgleichung für die Bereiche I, II ($x \neq 0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2\right\} u(x) = 0\,, \qquad \kappa := \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \;>\; 0\,; \tag{2.18-5}$$

Lösungsansatz:
Fall (a): *gerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A\cosh\kappa x + B\sinh\kappa x & \text{für } -a \le x < 0 \\ A\cosh\kappa x - B\sinh\kappa x & \text{für } 0 < x \le +a \end{cases}; \tag{2.18-6a}$$

Fall (b): *ungerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = -u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A\cosh\kappa x + B\sinh\kappa x & \text{für } -a \le x < 0 \\ -A\cosh\kappa x + B\sinh\kappa x & \text{für } 0 < x \le +a \end{cases}. \tag{2.18-6b}$$

Die Rand- und Anschlussbedingungen (2.18-2), (2.18-3) und (2.18-4) liefern ein lineares homogenes Gleichungssystem für die gesuchten Koeffizienten A, B:

$$\left.\begin{aligned} \cosh\kappa a \cdot A - \sinh\kappa a \cdot B &= 0 \\ -DA \quad + \quad \kappa B &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (a)}, \tag{2.18-7a}$$

$$\left.\begin{aligned} \cosh\kappa a \cdot A - \sinh\kappa a \cdot B &= 0 \\ A &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (b)}. \tag{2.18-7b}$$

Bedingung für die Existenz einer nichttrivialen Lösung ist, dass die Koeffizientendeterminante null ist. Dies gibt für den (in $\kappa = \kappa(E)$ enthaltenen) Eigenwertparameter E die Bedingung

$$\tanh\kappa a = \frac{\kappa a}{Da} \qquad \text{im Fall (a)} \tag{2.18-8a}$$

bzw.

$$\sinh\kappa a = 0 \qquad \text{im Fall (b)}. \tag{2.18-8b}$$

Diese Beziehungen stellen zusammen mit (s. (2.18-5))

$$\kappa a > 0 \tag{2.18-9}$$

die Eigenwertbedingungen dar.

Es ist offensichtlich, dass die Gleichungen (2.18-8b), (2.18-9) keine Lösung haben. Die Schrödingergleichung besitzt somit für $E < 0$ keine ungeraden Lösungen, gleichgültig wie groß Da ist. (Siehe dazu die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.) Da zum Eigenwert E_1 eine ungerade Eigenfunktion gehört, und $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$ gilt, ist damit auch klar, dass es im Energiebereich $E < 0$ höchstens einen Eigenwert, nämlich E_0, geben kann. Um herauszufinden, unter welcher Voraussetzung für Da die Grundzustandsenergie E_0 bei $E < 0$ liegt, und welchen Wert E_0 hat, falls diese Voraussetzung erfüllt ist, betrachte ich

die Eigenwertbedingungen (2.18-8a), (2.18-9). Die Abbildung 2.18-2 zeigt die graphische Darstellung der Funktionen

$$f(\kappa a) := \frac{\kappa a}{Da}\,, \qquad g(\kappa a) := \tanh \kappa a\,. \tag{2.18-10}$$

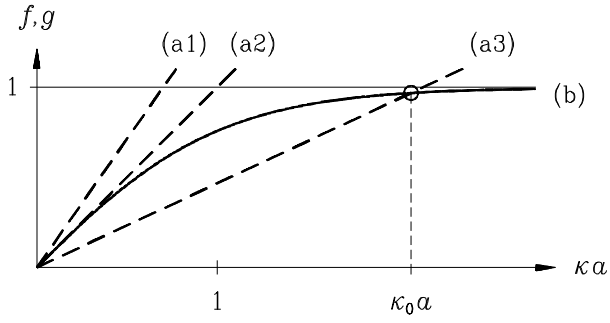


Abb. 2.18-2: Graphische Darstellung der Eigenwertbedingungen für $E < 0$ und gerade Parität:
(a1) f Gl. (2.18-10) für $Da = 0{,}7002$ (55°-Gerade);
(a2) f Gl. (2.18-10) für $Da = 1$ (45°-Gerade);
(a3) f Gl. (2.18-10) für $Da = 2{,}1445$ (25°-Gerade);
(b) g Gl. (2.18-10)

Die Graphen dieser Funktionen besitzen für $\kappa a > 0$ keinen Schnittpunkt, wofern $Da \leq 1$ ist. Im Fall $Da \leq 1$ existiert also überhaupt kein gebundener Zustand mit $E < 0$. Im Fall $Da > 1$ gibt es einen Schnittpunkt und somit einen gebundenen Zustand mit $E < 0$. Der entsprechende Energieeigenwert ist durch $E_0 = -\hbar^2\kappa_0^2/2m$ gegeben. Die zum Eigenwert E_0 gehörige Eigenfunktion u_0 ist gerade, ihre Koeffizienten A, B können aus einer der (für $\kappa = \kappa_0$ linear abhängigen) Gleichungen (2.18-7a) und dem Normierungsintegral berechnet werden. Für $Da \to 1+$ strebt E_0 gegen $0-$. Lässt man a bei festem D gegen unendlich gehen, so folgt $\kappa_0 \to D$, $B \to A$, $u_0(x) \to \sqrt{D}\,\exp\left[-D|x|\right]$ und $E_0 \to -\hbar^2 D^2/2m$. Die Wände bei $x = \pm a$ spielen mit wachsendem a für den gebundenen Zustand mit $E < 0$ eine immer geringere Rolle, Eigenfunktion und Eigenwert werden praktisch nur mehr durch das δ-förmige Potential bestimmt (s. Aufgabe 2.12, Gl. (2.12-2), (2.12-3)). Entsprechendes gilt bei festem a und wachsendem D, doch folgt dann $E_0 \to -\infty$, und u_0 wird immer „nadelförmiger“.

(β) $E = 0$

Differentialgleichung für die Bereiche I, II ($x \neq 0$):

$$u''(x) \;=\; 0\,; \tag{2.18-11}$$

Lösungsansatz:

Fall (a): *gerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A + Bx & \text{für } -a \leq x < 0 \\ A - Bx & \text{für } 0 < x \leq +a \end{cases}; \tag{2.18-12a}$$

Fall (b): *ungerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = -u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A + Bx & \text{für } -a \leq x < 0 \\ -A + Bx & \text{für } 0 < x \leq +a \end{cases}. \tag{2.18-12b}$$

Die Rand- und Anschlussbedingungen (2.18-2), (2.18-3) und (2.18-4) liefern für die Koeffizienten A, B das lineare homogene Gleichungssystem

$$\left.\begin{aligned} A - aB &= 0 \\ -DA + B &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (a),} \tag{2.18-13a}$$

$$\left.\begin{aligned} A - aB &= 0 \\ A &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (b).} \tag{2.18-13b}$$

Wegen $a \neq 0$ besitzt das Gleichungssystem (2.18-13b) nur die triviale Lösung. Zusammen mit dem Ergebnis von Punkt (α) bedeutet dies, dass E_1 für *beliebiges* Da im Energiebereich $E > 0$ liegt. (Diese Aussage hätte man auch ohne Rechnung machen können; siehe dazu die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.)

Das Gleichungssystem (2.18-13a) besitzt genau dann eine nichttriviale Lösung, wenn $Da = 1$ ist. Im Fall $Da = 1$ gilt also $E_0 = 0$, ein Ergebnis, das uns nicht überrascht, da wir schon von Punkt (α) wissen, dass E_0 für $Da \to 1+$ gegen $0-$ strebt. Die zum Eigenwert $E_0 = 0$ gehörige Eigenfunktion besitzt nach Gl. (2.18-12a), (2.18-13a) die Form $u_0(x) = A(1 - |x|/a)$, wobei A aus der Normierung zu bestimmen ist.

(γ) $E > 0$

Lösungsweg 1: Rechnung wie bei Punkt (α)
Differentialgleichung für die Bereiche I, II ($x \neq 0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right\} u(x) = 0\,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0\,; \tag{2.18-14}$$

Lösungsansatz:
Fall (a): *gerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx & \text{für } -a \le x < 0 \\ A\cos kx - B\sin kx & \text{für } 0 < x \le +a \end{cases}; \tag{2.18-15a}$$

Fall (b): *ungerade Eigenfunktionen*

$$u(x) = -u(-x) \quad \Rightarrow \quad u(x) = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx & \text{für } -a \le x < 0 \\ -A\cos kx + B\sin kx & \text{für } 0 < x \le +a \end{cases}. \tag{2.18-15b}$$

Die weitere Rechnung erfolgt völlig analog zu Punkt (α). (Der Leser ergänze die fehlenden Schritte selbständig.)

Lösungsweg 2: Schneller kommt man zum Ziel, indem man in den Gleichungen (2.18-6) bis (2.18-8)

$$\kappa \to ik \tag{2.18-16}$$

substituiert sowie $\kappa a > 0$ durch $ka > 0$ ersetzt.

Hinweis: Diese Vorgangsweise ist nur bei endlichem Grundintervall möglich. Bei unendlichem Grundintervall ist aufgrund der Forderung, dass die Eigenfunktionen im Unendlichen nicht divergieren dürfen, von exponentiellen Basislösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung in unendlichen Teilintervallen eine auszuscheiden, von „oszillatorischen“ aber nicht.

Wegen $\tanh i\xi = i\tan\xi$, $\sinh i\xi = i\sin\xi$ erhält man auf diese Weise die Eigenwertbedingungen

$$\left.\begin{aligned}\tan ka &= \frac{ka}{Da}\\ ka &> 0\end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (a),} \tag{2.18-17a}$$

$$\left.\begin{aligned}\sin ka &= 0\\ ka &> 0\end{aligned}\right\} \quad \text{im Fall (b).} \tag{2.18-17b}$$

Die Eigenwertbedingungen (2.18-17b) sind mit jenen für die Zustände ungerader Parität beim unendlich tiefen Kastenpotential der Breite $2a$ identisch (s. die Lösung von Aufgabe 2.10). Das zusätzliche δ-förmige Potential führt also zu keiner Änderung der ungeraden Energieeigenfunktionen und zugehörigen Energieeigenwerte. (Siehe dazu die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.) Es gilt

$$k_{n-1}a = n\frac{\pi}{2}\,, \qquad n = 2,4,6,\ldots\,; \tag{2.18-18}$$

$$E_{n-1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,n^2\,, \qquad n = 2,4,6,\ldots\,. \tag{2.18-19}$$

Die Lösung der Eigenwertbedingungen (2.18-17a) kann graphisch gefunden werden. Die Abbildung 2.18-3 zeigt die Funktionen

$$F(ka) := \frac{ka}{Da}\,, \qquad G(ka) := \tan ka\,. \tag{2.18-20}$$

Die Graphen dieser Funktionen besitzen für $ka > 0$ unendlich viele Schnittpunkte. Berücksichtigen wir bei der Nummerierung der zugehörigen ka-Werte, dass der Eigenwert E_0 für $Da > 1$ im Bereich $E < 0$ und für $Da = 1$ bei $E = 0$ liegt, so haben wir für die Eigenwerte im Energiebereich $E > 0$

$$(n-1)\frac{\pi}{2} < k_{n-1}a < n\frac{\pi}{2} \qquad \begin{aligned}\text{mit}\quad & n = 1,3,5,\ldots \quad \text{für} \quad Da < 1\,;\\ & n = 3,5,7,\ldots \quad \text{für} \quad Da \geq 1\,;\end{aligned} \tag{2.18-21}$$

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,(n-1)^2 < E_{n-1} < \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,n^2 \qquad \begin{aligned}\text{mit}\quad & n = 1,3,5,\ldots \quad \text{für} \quad Da < 1\,;\\ & n = 3,5,7,\ldots \quad \text{für} \quad Da \geq 1\,.\end{aligned} \tag{2.18-22}$$

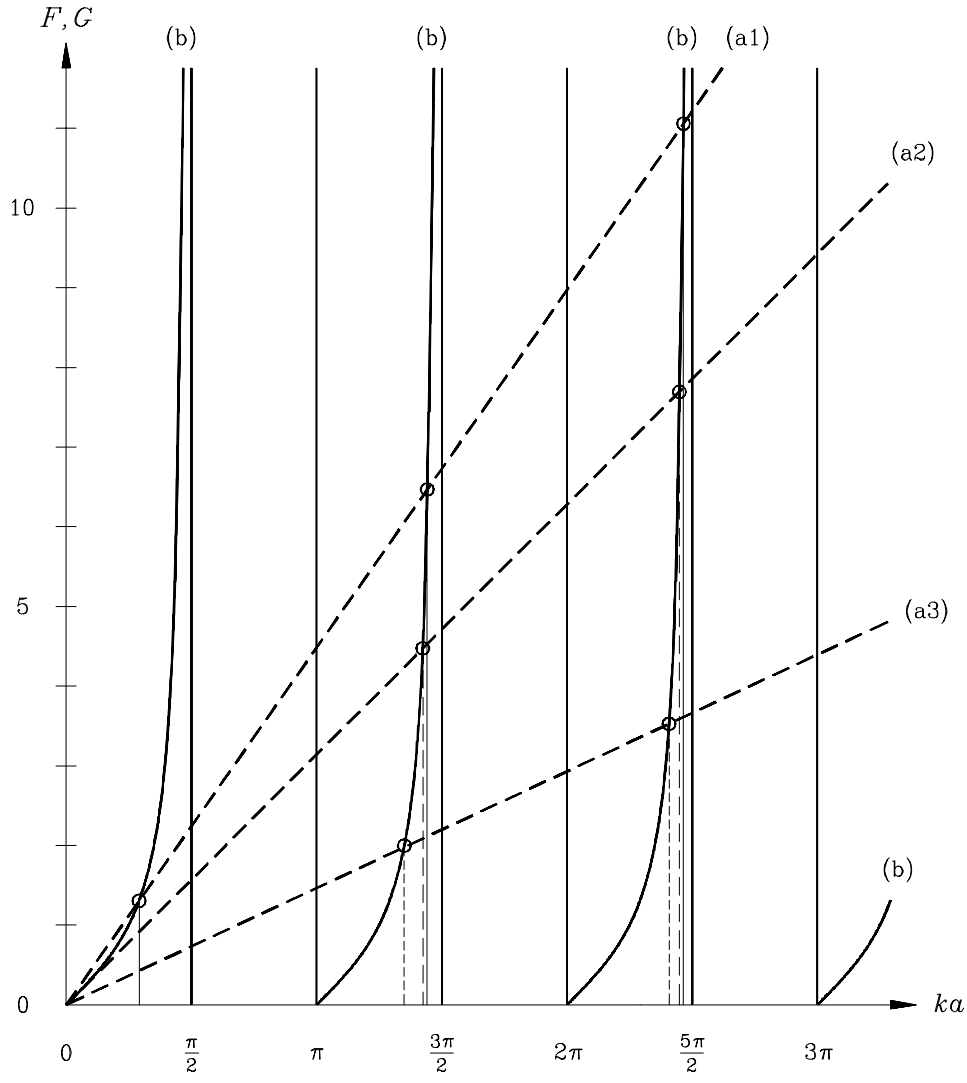


Abb. 2.18-3: Graphische Darstellung der Eigenwertbedingungen für $E > 0$ und gerade Parität:
(a1) F Gl. (2.18-20) für $Da = 0{,}7002$ (55°-Gerade);
(a2) F Gl. (2.18-20) für $Da = 1$ (45°-Gerade);
(a3) F Gl. (2.18-20) für $Da = 2{,}1445$ (25°-Gerade);
(b) G Gl. (2.18-20)

$k_{n-1}a$ liegt für festes Da umso näher bei $n\pi/2$, je größer n ist. Daraus zu schließen, dass für ungerades n auch E_{n-1} umso näher bei dem „ungestörten Eigenwert“ $(\hbar^2\pi^2/8ma^2)n^2$ liegen muss, je größer n ist, wäre aber falsch, da die Differenz $(\hbar^2\pi^2/8ma^2)n^2 - E_{n-1}$ zu $(n\pi/2 - k_{n-1}a)(n\pi/2 + k_{n-1}a)$ proportional ist, und in diesem Produkt der zweite Faktor mit wachsendem n zunimmt.

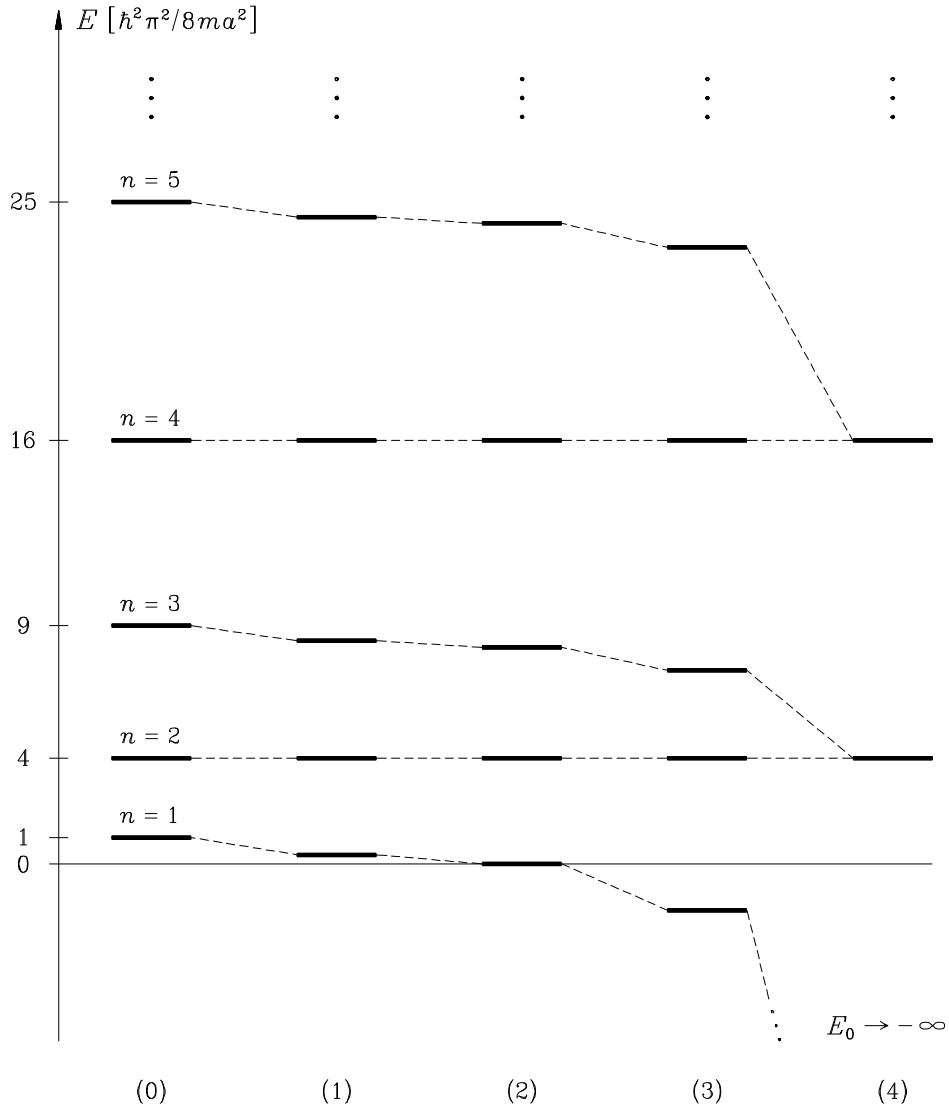


Abb. 2.18-4: Energie-Eigenwertspektrum für festes a und wachsende Werte von D:
(0) $D = 0$ bzw. $D \to 0+$ (unendlich tiefes Kastenpotential der Breite $2a$);
(1) $Da = 0{,}7002$ (Fall (a1) von Abb. 2.18-2 und Abb. 2.18-3);
(2) $Da = 1$ (Fall (a2) von Abb. 2.18-2 und Abb. 2.18-3);
(3) $Da = 2{,}1445$ (Fall (a3) von Abb. 2.18-2 und Abb. 2.18-3);
(4) Grenzfall $D \to +\infty$

Die Abbildung 2.18-4 zeigt das Energie-Eigenwertspektrum für festes a und einige Werte von D. Neben den drei Fällen, für welche die Eigenwertbedingungen in den Abbildungen 2.18-2, 2.18-3 graphisch gelöst wurden, ist noch der Fall $D = 0$ bzw. $D \to 0+$ (unendlich tiefes Kastenpotential der Breite $2a$) und der Grenzfall $D \to +\infty$ darge-

stellt. Während die zu ungeraden Eigenfunktionen gehörigen Eigenwerte $E_1, E_3, E_5, \ldots$ gegenüber dem gewöhnlichen unendlich tiefen Kastenpotential der Breite $2a$ durch das zusätzliche anziehende δ-förmige Potential nicht verschoben werden, werden die zu geraden Eigenfunktionen gehörigen Eigenwerte $E_0, E_2, E_4, \ldots$ „erniedrigt“. Die Verschiebung zu niedrigeren Energien strebt bei festem n mit $Da \to 0+$ gegen null und nimmt mit wachsendem Da monoton zu. Die Grundzustandsenergie geht für festes D und $a \to +\infty$ gegen den vom reinen anziehenden δ-förmigen Potential bekannten Wert $-\hbar^2 D^2/2m$, für festes a und $D \to +\infty$ folgt $E_0 \to -\infty$, die Absenkung kann also beliebig groß werden. Dagegen kann E_2 nicht unter den „festen“ Eigenwert E_1, E_4 nicht unter den „festen“ Eigenwert E_3 „rutschen“ usf. Es gilt $E_n \to E_{n-1}$ für $Da \to +\infty$, $n = 2, 4, 6, \ldots$. Für festes a und $D \to +\infty$ erhält man bei $E > 0$ die zweifachen Eigenwerte

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}\, n^2\,, \qquad n = 2, 4, 6, \ldots\,. \tag{2.18-23}$$

Für festes D und $a \to +\infty$ erhält man bei $E > 0$ ein „Quasikontinuum“ von zweifachen Eigenwerten.

Bemerkungen

Wir haben gesehen, dass das zusätzliche anziehende δ-förmige Potential gegenüber dem gewöhnlichen unendlich tiefen Kastenpotential der Breite $2a$ von Aufgabe 2.10 keine Änderung der ungeraden Eigenfunktionen und zugehörigen Eigenwerte bewirkt. Hätte man diese Tatsache *vor* Durchführung der Rechnung sehen können? Die Antwort lautet „ja“. Eine stetige ungerade Funktion u muss im Ursprung den Funktionswert null haben. Da der Parameter D nur über die Anschlussbedingung (2.18-4) in die Rechnung eingeht, und für ungerade Funktionen $D\,u(0) = 0$ gelten muss, ist das Eigenwertproblem hinsichtlich der ungeraden Lösungen mit dem beim unendlich tiefen Kastenpotential der Breite $2a$ mathematisch identisch. (Suchen einer ungeraden im Intervall $(-a, +a)$ stetig differenzierbaren Lösung der Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}\,u(x) = E\,u(x)\,,$$

welche die Randbedingungen $u(\pm a) = 0$ erfüllt.) Physikalisch intuitiv kann man diesen Sachverhalt folgendermaßen ausdrücken: Da die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen in einem Energieeigenzustand mit ungerader Parität am Ursprung null ist, „kann das Teilchen in einem solchen Zustand das nur dort wirksame δ-förmige Potential gar nicht bemerken“, und seine Energie muss daher dieselbe sein, wie wenn das zusätzliche δ-förmige Potential nicht vorhanden wäre.

Eine weitere offene Frage ist, wie man verstehen kann, dass sich für festes a im Grenzfall $D \to +\infty$ bei $E > 0$ die entarteten Eigenwerte von Gl. (2.18-23) ergeben. Wie in Aufgabe 2.19 gezeigt wird, strebt der Transmissionskoeffizient für ein anziehendes δ-förmiges Potential $-(\hbar^2/m)D\,\delta(x)$ für $D \to +\infty$ gegen null. Wird ein solches Potential zu einem bzgl. des Ursprungs symmetrischen unendlich tiefen Kastenpotential der Breite $2a$ „hinzugefügt“, so wirkt es im Grenzfall $D \to +\infty$ für Zustände mit $E > 0$ wie eine undurchdringliche Zwischenwand (keine Transmission vom Bereich I in den Bereich II und umgekehrt). Für Zustände mit

$E > 0$ ist deshalb das Problem im Grenzfall $D \to +\infty$ zu dem zweier getrennter unendlich tiefer Kastenpotentiale der Breite a äquivalent. Die Energieeigenwerte für ein unendlich tiefes Kastenpotential der Breite a sind aber durch

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{8m(a/2)^2}\,\nu^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,(2\nu)^2\,, \qquad \nu = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.18-24}$$

gegeben, was mit den Energieeigenwerten von Gl. (2.18-23) übereinstimmt.

2.19 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung im Bereich I ($x < 0$) bzw. im Bereich II ($x > 0$):

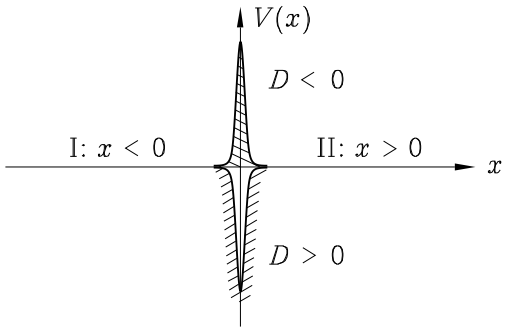


Abb. 2.19-1: δ-förmiges Potential $V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x)$

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

$$k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (E > 0)\,;$$

Lösungsansatz:

$$u(x) = \begin{cases} A_1\,e^{ikx} + B_1\,e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ A_2\,e^{ikx} + B_2\,e^{-ikx} & \text{für } x > 0 \end{cases}\,. \tag{2.19-1}$$

Da im Bereich II nur ein transmittierter Anteil vorhanden sein soll, ist $B_2 = 0$ zu setzen.

(Beachte, dass der Zeitfaktor der stationären Zustände $\exp\left[-i\,\frac{\hbar k^2}{2m}\,t\right]$ lautet.)

Anschlussbedingungen für $x = 0$ (s. Gl. (2.11-2)):

$$\begin{aligned} u(0-) &= u(0+) =: u(0) \\ u'(0-) &= u'(0+) + 2D\,u(0) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 =: A\ (\neq 0) \\ ik(A_1 - B_1) &= ikA_2 + 2DA_2 \end{aligned} \quad \Rightarrow$$

$$A_1 = \left(1 + \frac{D}{ik}\right)A\,, \qquad B_1 = -\frac{D}{ik}\,A\,. \tag{2.19-2}$$

Dabei sind für k beliebige Werte aus $\mathbb{R}^+$ möglich (kontinuierliches Spektrum) und A ist aus der Normierung der Lösungsfunktion „auf die δ-Funktion“ zu bestimmen.

Transmissionskoeffizient:

$$T = \frac{j_{\text{aus}}}{j_{\text{ein}}}\,, \qquad j_{\text{ein}} = \frac{\hbar k}{m}\,|A_1|^2\,, \quad j_{\text{aus}} = \frac{\hbar k}{m}\,|A|^2 \quad \Rightarrow$$

$$T = \left|1 + \frac{D}{ik}\right|^{-2} = \frac{k^2}{k^2 + D^2}\,. \tag{2.19-3}$$

Beachte, dass der Transmissionskoeffizient nicht vom Vorzeichen von D abhängt.

Grenzfälle:

$$|D| \gg k: \quad T \approx \frac{k^2}{D^2} \ll 1\,; \qquad |D| \ll k: \quad T \approx 1 - \frac{D^2}{k^2}\,.$$

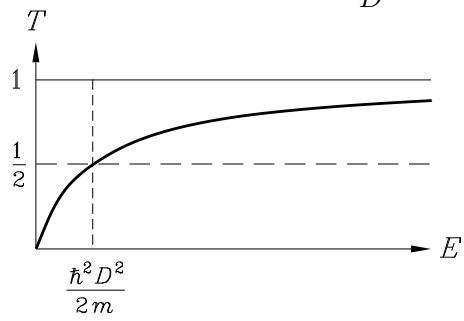


Abb. 2.19-2: Energieabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten für vorgegebene „Potentialstärke“ D

Für festes E und $|D| \to +\infty$ strebt T gegen null. Nicht nur die δ-förmige Schwelle, sondern auch das anziehende δ-förmige Potential gestattet also in diesem Grenzfall keine Transmission vom Bereich I in den Bereich II („Entkoppelung“ der beiden Bereiche).

Bemerkungen

Die erste Ableitung der erhaltenen Eigenfunktion ist zwar für $x = 0$ unstetig, die Stromdichte ist jedoch ortsunabhängig und damit für alle x stetig:

$$j(x<0) = \frac{\hbar k}{m}\left(|A_1|^2 - |B_1|^2\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = j(x>0)\,.$$

Bezüglich des gebundenen Zustandes für $D > 0$ siehe Aufgabe 2.12 und Aufgabe 3.14.

2.20 Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung (eindimensionales Problem; $V(x)$ s. Abb. 2.20-1):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\} u(x) = E\,u(x)\,, \qquad E > V_3 \geq V_1\,. \tag{2.20-1}$$

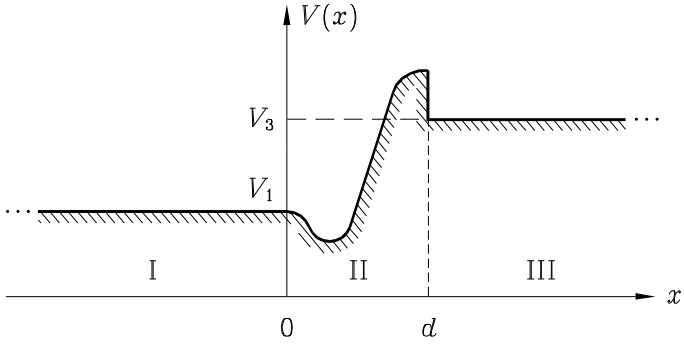


Abb. 2.20-1: Potential $V(x)$

Bereich I ($x < 0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + k_1^2\right\} u(x) = 0 \quad \text{mit} \quad k_1 = k_1(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E - V_1)}{\hbar^2}} > 0\,; \tag{2.20-2}$$

Bereich II ($0 < x < d$):

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x)\right\} u(x) = E\,u(x)\,; \tag{2.20-3}$$

Bereich III ($x > d$):

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + k_3^2\right\} u(x) = 0 \quad \text{mit} \quad k_3 = k_3(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E - V_3)}{\hbar^2}} > 0\,. \tag{2.20-4}$$

Bezeichne ich die Funktionen einer Lösungsbasis der zeitunabhängigen Schrödingergleichung im Bereich $0 < x < d$ zur vorgegebenen Energie $E > V_3 \geq V_1$ mit $v(x; E) \equiv v(x)$, $w(x; E) \equiv w(x)$, so ergibt sich als allgemeiner Lösungsansatz für die zeitunabhängige Schrödingergleichung (2.20-1)

$$u(x) = \begin{cases} A_1\,e^{ik_1x} + B_1\,e^{-ik_1x} & \text{für} \quad x < 0 \\ A_2\,v(x) + B_2\,w(x) & \text{für} \quad 0 < x < d \\ A_3\,e^{ik_3x} + B_3\,e^{-ik_3x} & \text{für} \quad x > d \end{cases}. \tag{2.20-5}$$

(a) *Fall* (α): Fallen die Teilchen in *positiver* x-Richtung laufend auf das Potential ein, so ist $B_3 = 0$ zu setzen. (Nur transmittierter Strom im Bereich III.)
Ansatz:

$$u(x) = \begin{cases} A_1\,e^{ik_1x} + B_1\,e^{-ik_1x} & \text{für} \quad x < 0 \\ A_2\,v(x) + B_2\,w(x) & \text{für} \quad 0 < x < d \\ A_3\,e^{ik_3x} & \text{für} \quad x > d \end{cases}; \tag{2.20-6}$$

Transmissionskoeffizient:

$$T = \frac{j_{\text{aus}}}{j_{\text{ein}}}\,, \quad j_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_1}{m}\,|A_1|^2\,, \quad j_{\text{aus}} = \frac{\hbar k_3}{m}\,|A_3|^2 \quad \Rightarrow \quad T = \frac{k_3}{k_1}\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2. \tag{2.20-7}$$

Mithilfe der vier Stetigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned} u(0-) &= u(0+)\,, & u(d-) &= u(d+)\,, \\ u'(0-) &= u'(0+)\,, & u'(d-) &= u'(d+) \end{aligned} \tag{2.20-8}$$

lassen sich die vier Koeffizienten A_1, B_1, A_2, B_2 durch A_3 ausdrücken. A_3 stellt dann eine Normierungskonstante dar (Normierung der Lösungsfunktion „auf die δ-Funktion“).

Aus (2.20-8) folgt mit (2.20-6) das Gleichungssystem

$$A_1 + B_1 = A_2\, v(0) + B_2\, w(0)\,, \tag{2.20-9a}$$

$$ik_1\,[A_1 - B_1] = A_2\, v'(0) + B_2\, w'(0)\,, \tag{2.20-9b}$$

$$A_2\, v(d) + B_2\, w(d) = A_3\, e^{ik_3 d}\,, \tag{2.20-9c}$$

$$A_2\, v'(d) + B_2\, w'(d) = ik_3 A_3\, e^{ik_3 d}\,. \tag{2.20-9d}$$

Drückt man mithilfe von (2.20-9c) und (2.20-9d) die Koeffizienten A_2, B_2 durch A_3 aus, so erhält man unter Beachtung von $v(d)\,w'(d) - v'(d)\,w(d) = \mathcal{W}(d) = \mathcal{W} \equiv \mathcal{W}[v,w]$ (unabhängig von d und von null verschieden)

$$A_2 = \quad A_3\,\mathcal{W}^{-1}\,e^{ik_3 d}\,[w'(d) - ik_3\,w(d)]\,, \tag{2.20-10a}$$

$$B_2 = -A_3\,\mathcal{W}^{-1}\,e^{ik_3 d}\,[v'(d) \;-\; ik_3\,v(d)]\,. \tag{2.20-10b}$$

Setzt man dies in Gl. (2.20-9a), (2.20-9b) ein, so kann man auch A_1 und B_1 durch A_3 ausdrücken. Mit der Abkürzung

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[v,w] := {}& [v'(0) + ik_1\,v(0)][w'(d) - ik_3\,w(d)] \\ & - [w'(0) + ik_1\,w(0)][v'(d) - ik_3\,v(d)]\end{aligned} \tag{2.20-11}$$

erhält man insbesondere

$$2ik_1\,A_1 = A_3\,\mathcal{W}^{-1}\,e^{ik_3 d}\,\mathcal{F}[v,w]\,, \tag{2.20-12}$$

und mit Gl. (2.20-7) folgt für den Transmissionskoeffizienten

$$T = \frac{4k_1k_3\,|\mathcal{W}[v,w]|^2}{|\mathcal{F}[v,w]|^2}\,. \tag{2.20-13}$$

(Unter der Vereinbarung, dass man v, w reellwertig wählt, könnte man diesen Ausdruck noch vereinfachen, doch wäre eine solche Vereinbarung nicht zweckmäßig.)

Fall (β): Fallen die Teilchen in *negativer* x-Richtung laufend auf das Potential ein, so ist $A_1 = 0$ zu setzen. (Nur transmittierter Strom im Bereich I.)

Ansatz:

$$u(x) = \begin{cases} B_1\, e^{-ik_1 x} & \text{für} \quad x < 0 \\ A_2\, v(x) + B_2\, w(x) & \text{für} \quad 0 < x < d \\ A_3\, e^{ik_3 x} + B_3\, e^{-ik_3 x} & \text{für} \quad x > d \end{cases}; \tag{2.20-14}$$

Transmissionskoeffizient:

$$T = \frac{|j_{\text{aus}}|}{|j_{\text{ein}}|}\,, \quad j_{\text{ein}} = -\frac{\hbar k_3}{m}\,|B_3|^2\,, \quad j_{\text{aus}} = -\frac{\hbar k_1}{m}\,|B_1|^2 \quad \Rightarrow \quad T = \frac{k_1}{k_3}\left|\frac{B_1}{B_3}\right|^2. \tag{2.20-15}$$

Mithilfe der vier Stetigkeitsbedingungen (2.20-8) lassen sich die vier Koeffizienten A_2, B_2, A_3, B_3 durch B_1 ausdrücken. B_1 stellt dann eine Normierungskonstante dar. Aus (2.20-8) folgt mit (2.20-14) das Gleichungssystem

$$B_1 = A_2\, v(0) + B_2\, w(0)\,, \tag{2.20-16a}$$

$$-ik_1\, B_1 = A_2\, v'(0) + B_2\, w'(0)\,, \tag{2.20-16b}$$

$$A_2\, v(d) + B_2\, w(d) = A_3\, e^{ik_3 d} + B_3\, e^{-ik_3 d}\,, \tag{2.20-16c}$$

$$A_2\, v'(d) + B_2\, w'(d) = ik_3\,[A_3\, e^{ik_3 d} - B_3\, e^{-ik_3 d}]\,. \tag{2.20-16d}$$

Drückt man mithilfe von (2.20-16a) und (2.20-16b) die Koeffizienten A_2, B_2 durch B_1 aus, so erhält man unter Beachtung von $v(0)\,w'(0) - v'(0)\,w(0) = \mathcal{W}(0) = \mathcal{W} \equiv \mathcal{W}[v,w]$

$$A_2 = B_1\, \mathcal{W}^{-1}\,[w'(0) + ik_1\, w(0)]\,, \tag{2.20-17a}$$

$$B_2 = -B_1\, \mathcal{W}^{-1}\,[v'(0) + ik_1\, v(0)]\,. \tag{2.20-17b}$$

Setzt man dies in Gl. (2.20-16c), (2.20-16d) ein, so kann man auch A_3 und B_3 durch B_1 ausdrücken. Mit der Abkürzung (2.20-11) erhält man insbesondere

$$2ik_3\, B_3\, e^{-ik_3 d} = B_1\, \mathcal{W}^{-1}\, \mathcal{F}[v,w]\,, \tag{2.20-18}$$

und mit Gl. (2.20-15) folgt für den Transmissionskoeffizienten wieder Gl. (2.20-13).

(b) Für die Potentialschwelle von Abb. 2.20-2 gilt

$$V_1 = V_3 = 0\,, \quad k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} =: k(E) = k > 0\,, \quad V_2(x) = V_0 > 0\,. \tag{2.20-19}$$

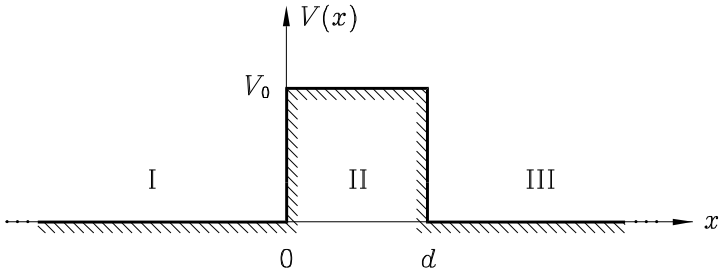


Abb. 2.20-2: Potentialschwelle

(b1) $E > V_0$

Bereich II: Mit

$$K = K(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E - V_0)}{\hbar^2}} > 0 \tag{2.20-20}$$

man als Lösungsbasis

$$v(x) = e^{iKx}\,, \qquad w(x) = e^{-iKx} \tag{2.20-21}$$

wählen. Bei dieser Wahl erhält man nach kurzer elementarer Rechnung

$$\mathcal{W}[v,w] = -2iK\,, \qquad |\mathcal{W}[v,w]|^2 = 4K^2\,; \tag{2.20-22}$$

$$\mathcal{F}[v,w] = 4kK\cos Kd - 2i(k^2+K^2)\sin Kd\,, \tag{2.20-23a}$$

$$|\mathcal{F}[v,w]|^2 = 4\Big[4k^2K^2 + (k^2-K^2)^2\sin^2 Kd\Big]\,; \tag{2.20-23b}$$

$$T = T(E) = \frac{4k^2K^2}{4k^2K^2 + (k^2-K^2)^2\sin^2 Kd}\,, \tag{2.20-24a}$$

$$E > V_0\,;\;\; k = k(E)\,,\;\; K = K(E) \quad \text{s. Gl. (2.20-19), (2.20-20).} \tag{2.20-24b}$$

Das Auftreten einer periodischen Funktion von Kd im Ausdruck für T zeigt, dass T als Funktion von E mit wachsendem $E > V_0$ eine unendliche Folge von relativen Maxima und Minima durchläuft. Dies ist ein *Interferenzphänomen*.[5] An den Maxima nimmt T den Wert eins an (vollständige Transmission, d. h. die Transmissionswahrscheinlichkeit für ein Teilchen ist eins): $T = 1$ für $Kd = n\pi$, $n \in \mathbb{N}$,[6] d. h.

$$T = 1 \quad \text{für} \quad E = V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}\,n^2 =: E_n\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,. \tag{2.20-25}$$

Man sagt, dass für die diskreten Energiewerte E_n von Gl. (2.20-25) bei der Streuung der Teilchen *Resonanz* eintritt, und man bezeichnet die Energiewerte E_n deshalb als *Resonanzenergien*. Bezüglich einer näheren Diskussion und eines Zahlenbeispiels siehe die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

(b2) $0 < E < V_0$ (Tunneleffekt)

Bereich II: Mit

$$\kappa = \kappa(E) := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}} \;> 0 \tag{2.20-26}$$

kann man als Lösungsbasis

$$v(x) = e^{\kappa x}\,, \qquad w(x) = e^{-\kappa x} \tag{2.20-27}$$

wählen. Die Rechnung ist dann vollkommen analog zu der von Punkt (b1), man hat lediglich iK formal durch κ zu ersetzen. Man erhält entsprechend die Formel für den

[5] Konstruktive bzw. destruktive Interferenz der fiktiven Teilwellen, welche nach fiktiven Mehrfachreflexionen zwischen den Sprungstellen $x = 0$ und $x = d$ des Potentials in den Bereich II transmittiert werden. – Analoges Problem aus der Elektrodynamik: Transmission einer monochromatischen ebenen Welle durch eine aus einer transparenten Substanz bestehende planparallele Platte.

[6] Einem Teilchen kann man für den Bereich II die de Broglie-Wellenlänge $\lambda = 2\pi/K$ zuschreiben. Die Bedingung für konstruktive Interferenz lautet damit $2d = n\lambda$, $n \in \mathbb{N}$.

Transmissionskoeffizienten, indem man in Gl. (2.20-24a) formal K^2 durch $-\kappa^2$ und $\sin^2 Kd$ durch $-\sinh^2 \kappa d$ ersetzt:

$$T = T(E) = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2+\kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa d} \,, \tag{2.20-28a}$$

$$0 < E < V_0 \,; \;\; k = k(E) \,, \;\; \kappa = \kappa(E) \quad \text{s. Gl. (2.20-19), (2.20-26).} \tag{2.20-28b}$$

Für $0 < E < V_0$ ist also $T = T(E)$ – wie erwartet, da es im Bereich II keine „oszillatorischen“ Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung gibt – eine streng monoton wachsende Funktion.

(c) Für das Kastenpotential von Abb. 2.20-3 gilt

$$V_1 = V_3 = 0 \,, \quad k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} =: k(E) = k > 0 \,, \quad V_2(x) = -V_0 < 0 \,. \tag{2.20-29}$$

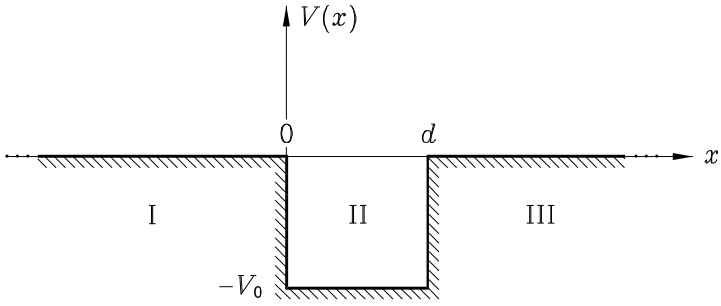


Abb. 2.20-3: Kastenpotential

Die Rechnung und die Interpretation des Ergebnisses für den Transmissionskoeffizienten ist daher vollkommen analog zum Fall (b1), es ist lediglich im Ausdruck (2.20-24a) die Größe K Gl. (2.20-20) durch

$$K = K(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E+V_0)}{\hbar^2}} \;> 0 \tag{2.20-30}$$

zu ersetzen:

$$T = T(E) = \frac{4k^2K^2}{4k^2K^2 + (K^2-k^2)^2 \sin^2 Kd} \,, \tag{2.20-31a}$$

$$E > 0 \,; \;\; k = k(E) \,, \;\; K = K(E) \quad \text{s. Gl. (2.20-29), (2.20-30).} \tag{2.20-31b}$$

Anstelle von (2.20-25) gilt daher

$$T = 1 \quad \text{für} \quad E = -V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}\, n^2 =: E_n \,, \qquad n = n_0, n_0+1, n_0+2, \ldots, \tag{2.20-32a}$$

wobei $n_0 \in \mathbb{N}$ dadurch bestimmt ist, dass

$$-V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}\,(n_0-1)^2 \le 0 \,, \quad \text{aber} \quad -V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}\, n_0^2 > 0 \tag{2.20-32b}$$

gilt. Bezüglich einer näheren Diskussion und eines Zahlenbeispiels siehe die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

(d) Für das „Doppelstufenpotential“ von Abb. 2.20-4 gilt für $E > V_3\ (= 2V_0)$

$$V_1 = 0\,, \quad V_3 = 2V_0 > 0\,, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} =: k(E) = k > 0\,,$$
$$k_3 = \sqrt{\frac{2m\,(E-2V_0)}{\hbar^2}} =: K_2(E) = K_2 > 0\,, \quad V_2(x) = V_0 > 0\,. \tag{2.20-33}$$

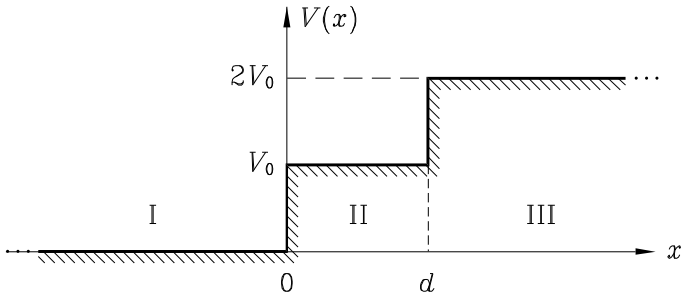


Abb. 2.20-4: „Doppelstufenpotential“

Bereich II: Mit

$$K_1 = K_1(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E-V_0)}{\hbar^2}} \; > \; 0 \tag{2.20-34}$$

kann man als Lösungsbasis

$$v(x) = e^{iK_1x}\,, \qquad w(x) = e^{-iK_1x} \tag{2.20-35}$$

wählen. Bei dieser Wahl erhält man zunächst einmal (vergleiche mit den Beziehungen (2.20-21), (2.20-22))

$$\mathcal{W}[v,w] = -2iK_1\,, \qquad |\mathcal{W}[v,w]|^2 = 4K_1^2\,, \tag{2.20-36}$$

die Größe $\mathcal{F}[v,w]$ ist aber nicht durch Gl. (2.20-23a) mit K ersetzt durch K_1 gegeben, da ja bei Punkt (b1) $k_1 = k_3$ galt, während hier $k_1 = k$, $k_3 = K_2 \neq k$ gilt. Eine kurze elementare Rechnung gibt

$$\mathcal{F}[v,w] = 2(kK_1 + K_1K_2)\cos K_1d - 2i(kK_2 + K_1^2)\sin K_1d\,, \tag{2.20-37a}$$

$$|\mathcal{F}[v,w]|^2 = 4\Big[K_1^2(k+K_2)^2 - (k^2-K_1^2)(K_1^2-K_2^2)\sin^2 K_1d\Big]\,. \tag{2.20-37b}$$

Einsetzen von $k_1 = k$, $k_3 = K_2$, $|\mathcal{W}|^2$ und $|\mathcal{F}|^2$ in die Formel (2.20-13) ergibt dann

$$T = T(E) = \frac{4kK_1^2K_2}{K_1^2(k+K_2)^2 - (k^2-K_1^2)(K_1^2-K_2^2)\sin^2 K_1d}\,, \tag{2.20-38a}$$

$$E > 2V_0\,;\ \ k = k(E)\,,\ K_1 = K_1(E)\,,\ K_2 = K_2(E) \quad \text{s. Gl. (2.20-33), (2.20-34).} \tag{2.20-38b}$$

Wie in den Fällen (b1) und (c) besitzt die Funktion $T = T(E)$ eine unendliche Folge von relativen Maxima und Minima (Interferenz). Die Bestimmungsgleichungen für die Stellen und Höhen der Maxima – für die Maxima gilt nicht $T = 1$ – sind beim „Doppelstufenpotential“ aber komplizierte transzendente Gleichungen, deren Lösungen nur numerisch gefunden werden können. Bezüglich einer näheren Diskussion und eines Zahlenbeispiels siehe die folgenden Bemerkungen.

Bemerkungen

Die unter (a)(α), (a)(β) gefundenen Funktionen $u(x) = u_E(x)$ stellen zwei linear unabhängige Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (2.20-1) zu einer vorgegebenen Energie $E > V_3$ dar. Für $E > V_3$ liegt also ein *Kontinuum zweifacher Eigenwerte* vor.

Für die quantitative Diskussion der Energieabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten in den Fällen (b), (c) und (d) führt man zweckmäßigerweise gemäß

$$\epsilon := \frac{E}{V_0}\,, \qquad \eta := \sqrt{\frac{2mV_0d^2}{\hbar^2}} > 0 \tag{2.20-39}$$

eine dimensionslose Energievariable ϵ und einen dimensionslosen Potentialparameter η ein.[7]

Potentialschwelle: Aus den Formeln von Punkt (b) erhält man nach Einsetzen der Definitionen von k, κ, K, ϵ und η für den Transmissionskoeffizienten

$$T(\epsilon) = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}} + \sqrt{\frac{1-\epsilon}{\epsilon}}\right)^2 \sinh^2\left(\eta\sqrt{1-\epsilon}\right)\right]^{-1} \quad \text{für} \quad 0 < \epsilon \leq 1\,, \tag{2.20-40a}$$

$$T(\epsilon) = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{\epsilon-1}{\epsilon}} - \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon-1}}\right)^2 \sin^2\left(\eta\sqrt{\epsilon-1}\right)\right]^{-1} \quad \text{für} \quad \epsilon \geq 1 \tag{2.20-40b}$$

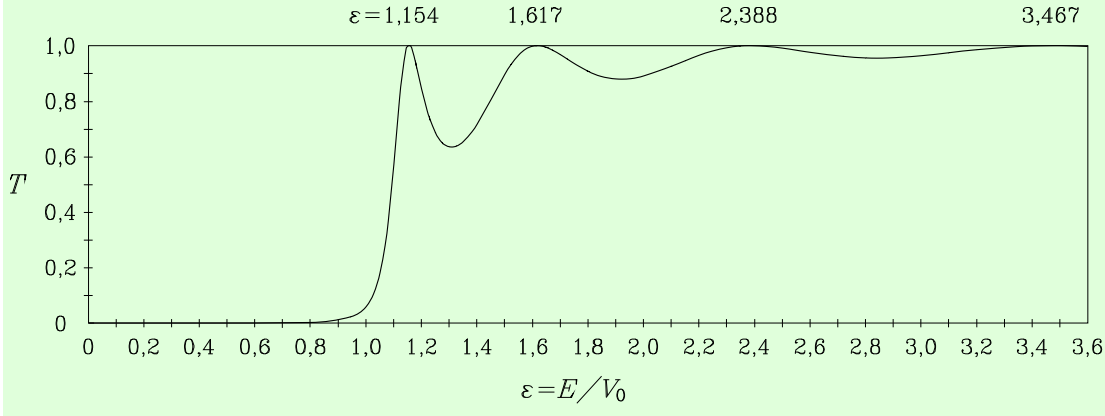


Abb. 2.20-5: Transmissionskoeffizient für eine Potentialschwelle mit $\eta = 8$ (η s. Gl. (2.20-39))

[7] Die Teilchenmasse m sehen wir als fest vorgegeben an.

und für die Resonanzenergien

$$\epsilon_n = 1 + \frac{\pi^2}{\eta^2}\, n^2\,, \quad n \in \mathbb{N}\,. \tag{2.20-41}$$

Die Abbildung 2.20-5 zeigt die Funktion $T(\epsilon)$ für $\eta = 8$. Für diesen η-Wert erreicht $T(\epsilon)$ für $\epsilon \to 1$ den Wert $\frac{1}{17} = 0{,}0588$, d. h. es tunneln maximal 5,88 % der Teilchen durch die Schwelle. Die Resonanzenergien sind durch $\epsilon_1 = 1{,}154$, $\epsilon_2 = 1{,}617$, $\epsilon_3 = 2{,}388$, $\epsilon_4 = 3{,}467, \ldots$ gegeben.

Kastenpotential: Aus den Formeln von Punkt (c) erhält man nach Einsetzen der Definitionen von k, K, ϵ und η für den Transmissionskoeffizienten

$$T(\epsilon) = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{1+\epsilon}{\epsilon}} - \sqrt{\frac{\epsilon}{1+\epsilon}}\right)^2 \sin^2\!\left(\eta\sqrt{1+\epsilon}\right)\right]^{-1}, \qquad \epsilon > 0 \tag{2.20-42}$$

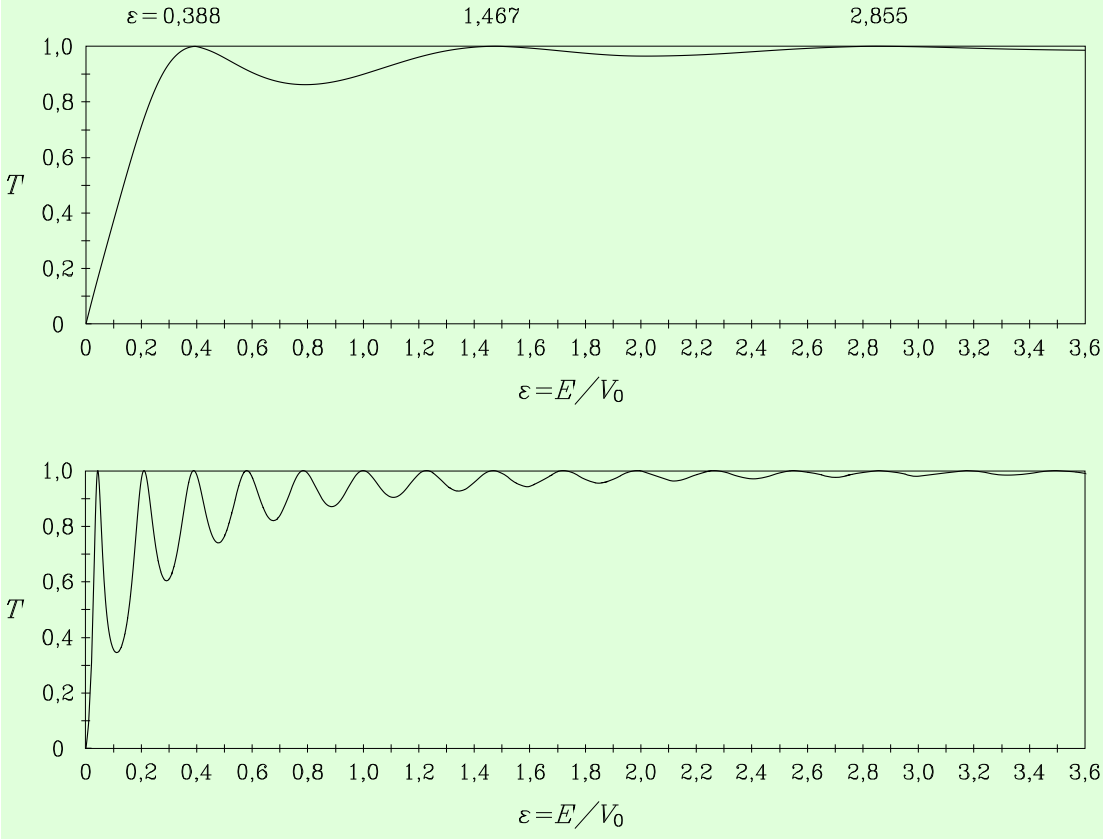


Abb. 2.20-6: Transmissionskoeffizient für ein Kastenpotential mit $\eta = 8$ (oberes Diagramm) bzw. mit $\eta = 40$ (unteres Diagramm) [η s. Gl. (2.20-39)]

und für die Resonanzenergien

$$\epsilon_{n-n_0+1} = -1 + \frac{\pi^2}{\eta^2}\, n^2\,, \quad n = n_0, n_0+1, n_0+2, \ldots, \tag{2.20-43a}$$

wobei $n_0 \in \mathbb{N}$ durch die folgenden Bedingungen bestimmt ist:

$$-1+\frac{\pi^2}{\eta^2}\,(n_0-1)^2 \le 0\,, \quad \text{aber} \quad -1+\frac{\pi^2}{\eta^2}\,n_0^2 > 0\,. \tag{2.20-43b}$$

Die Abbildung 2.20-6 zeigt die Funktion $T(\epsilon)$ für $\eta = 8$ und $\eta = 40$. Für $\eta = 8$ folgt aus (2.20-43b) $n_0 = 3$, und die Resonanzenergien sind durch $\epsilon_1 = 0{,}388$, $\epsilon_2 = 1{,}467$, $\epsilon_3 = 2{,}855, \ldots$ gegeben. – Der Vergleich der Graphen von $T(\epsilon)$ für $\eta = 8$ und $\eta = 40$ zeigt, dass die „Resonanzen“ in T umso ausgeprägter sind, je größer η, d. h. je größer $V_0 d^2$ ist. Eine qualitativ gleiche Aussage gilt auch für die Potentialschwelle und das „Doppelstufenpotential“.

„Doppelstufenpotential“: Aus den Formeln von Punkt (d) erhält man nach Einsetzen der Definitionen von k, K_1, K_2, ϵ und η für den Transmissionskoeffizienten

$$T(\epsilon) = \frac{4\sqrt{\epsilon}\,(\epsilon-1)\sqrt{\epsilon-2}}{(\epsilon-1)\big(\sqrt{\epsilon}+\sqrt{\epsilon-2}\big)^2 - \sin^2\!\big(\eta\sqrt{\epsilon-1}\big)}\,, \qquad \epsilon > 2\,. \tag{2.20-44}$$

Der Vergleich der Abbildungen 2.20-5 und 2.20-6 zeigt, dass bei gleichem Wert des Potentialparameters η die „Resonanzen“ beim Kastenpotential deutlich weniger stark ausgeprägt sind als bei der Potentialschwelle. Beim „Doppelstufenpotential“ sind die „Resonanzen“ bei gleichem η noch viel weniger stark ausgeprägt, weshalb in Abb. 2.20-7 die Funktion $T(\epsilon)$ Gl. (2.20-44) für einen größeren η-Wert, und zwar für $\eta = 20$, dargestellt wird. Wie man aus dieser Abbildung sieht, nimmt die Höhe der relativen Maxima mit wachsender Energie zu und strebt dabei gegen eins. Numerische Berechnung der Lage und Höhe der ersten vier Maxima liefert für $\eta = 20$

$$\begin{aligned} &\epsilon_1 = 2{,}081\,, \quad T_{\max,1} = 0{,}7528\,; \quad \epsilon_2 = 2{,}393\,, \quad T_{\max,2} = 0{,}9676\,; \\ &\epsilon_3 = 2{,}785\,, \quad T_{\max,3} = 0{,}9912\,; \quad \epsilon_4 = 3{,}228\,, \quad T_{\max,4} = 0{,}9968\,. \end{aligned}$$

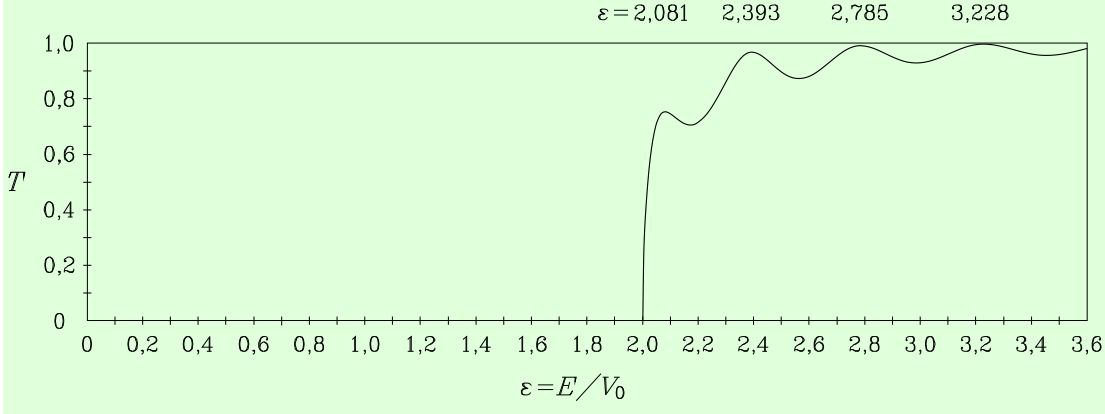


Abb. 2.20-7: Transmissionskoeffizient für ein „Doppelstufenpotential“ mit $\eta = 20$ (η s. Gl. (2.20-39))

Die für Potentialschwelle und Kastenpotential geltenden Beziehungen für die Resonanzenergien (s. Gl. (2.20-25) bzw. Gl. (2.20-32)) ermöglichen eine einfache *anschauliche Merkhilfe*

für die Lage der Resonanzenergien im Kontinuum. Nach Aufgabe 2.10, Gl. (2.10-1) sind die Energieniveaus eines unendlich tiefen Kastenpotentials der Breite d durch

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}\,n^2\,, \qquad n \in \mathbb{N}$$

gegeben. „Setzt“ man also *in Gedanken* auf das Potential von Abb. 2.20-2 bzw. von Abb. 2.20-3 im Bereich II jeweils ein derartiges unendlich tiefes Kastenpotential mit „seinen“ Energieniveaus „auf“ und „streicht“ man im Fall des Kastenpotentials die nicht im Energiebereich $E > 0$ liegenden Niveaus, so erhält man die jeweilige Lage der Resonanzenergien. Diese Merkhilfe ist in Abb. 2.20-8 dargestellt.

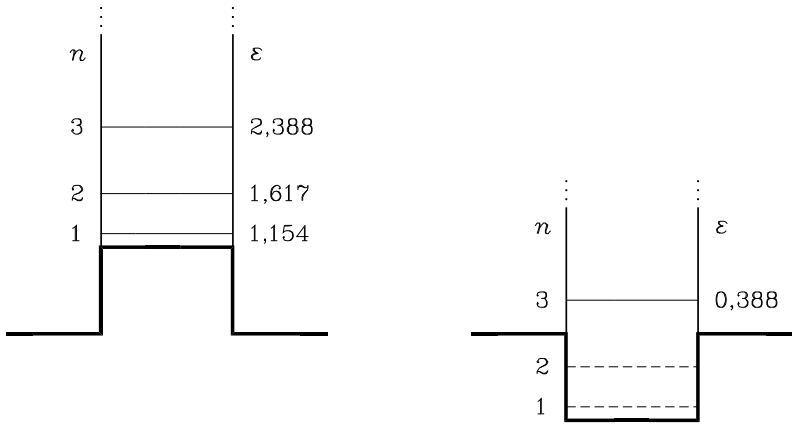


Abb. 2.20-8: Merkhilfe für die Resonanzenergien bei Potentialschwelle und Kastenpotential, dargestellt für $\eta = 8$ (η s. Gl. (2.20-39))

Für den Fall des „Doppelstufenpotentials“ gibt es keine derartige Merkhilfe für die Lage der Resonanzenergien im Kontinuum.

Man kann zeigen[8], dass ein Wellenpaket, welches energiemäßig stark um eine Resonanzenergie konzentriert ist, im Fall einer schmalen Resonanz bei der Streuung zeitlich sehr lange im Bereich II „verweilt“, bevor es transmittiert wird. Man spricht dann von einem *quasigebundenen Zustand* und bezeichnet die entsprechenden Resonanzenergien als *virtuelle Energieniveaus*. Derartige virtuelle Energieniveaus im Kontinuum kennt man experimentell von der Streuung von Elektronen an Atomen und Ionen. (Beispiel: Streuung von Elektronen an He^+-Ionen; siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 9.12.)

Stückweise konstante Potentiale – wie die in den Fällen (b), (c) und (d) betrachteten – werden häufig als mathematisch einfach zu analysierende Modelle für realistische Potentiale herangezogen. Dabei ist aber Vorsicht geboten. „Rundet“ man die „Ecken“ eines solchen Modellpotentials geringfügig „ab“, so bewirkt dies zwar – wie man zeigen kann – bei allfälligen gebundenen Zuständen nur eine geringfügige Änderung der Eigenwerte und Eigenfunktionen.

[8] Siehe z. B. Schwabl, F.: Quantenmechanik. Springer-Verlag, Berlin 2007.

Auch allfällige Resonanzenergien im Kontinuum ändern sich dadurch nur wenig, und die Energieabhängigkeit des Transmissionskoeffizienten bleibt *qualitativ* gleich. Es resultieren aber gravierende *quantitative* Änderungen hinsichtlich der Ausprägung der „Resonanzen“, welche stark abnimmt, wobei die relativen Minima stark „angehoben“ werden (siehe dazu z. B. [16]).

2.21*

(a) $D > 0$ anziehende Wirkung:

$$\text{(a1)}\;\; E > 0: \;\; k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\;; \qquad \text{(a2)}\;\; E < 0: \;\; \kappa := \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\;. \tag{2.21-1}$$

(b) $D < 0$ abstoßende Wirkung: Lösungen nur für $E > 0$ möglich; k s. Gl. (2.21-1).

Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung in den Teilintervallen

$$\mathbb{I}_l := \{\, x: \;\; la < x < (l+1)a \,\}\,, \qquad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots :$$

$$\text{(a1), (b)} \quad \left\{\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right\} u(x) = 0\,; \qquad \text{(a2)} \quad \left\{\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2\right\} u(x) = 0\,. \tag{2.21-2}$$

Allgemeine Lösung in diesen Bereichen:

$$\text{(a1), (b)} \quad u(x) = A_l\, e^{ikx} + B_l\, e^{-ikx}\,, \qquad x \in \mathbb{I}_l\,, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\,; \tag{2.21-3}$$

$$\text{(a2)} \quad u(x) = A_l\, e^{\kappa x} + B_l\, e^{-\kappa x}\,, \qquad x \in \mathbb{I}_l\,, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\,. \tag{2.21-4}$$

Im Folgenden führe ich die Rechnung nur für die Fälle (a1) und (b) durch, die entsprechenden Ergebnisse für den Fall (a2) erhält man jeweils, indem man $ik \to \kappa$ setzt.

Die nächste Aufgabe besteht darin, die Koeffizienten A_l, B_l zu bestimmen. Gesucht werden Eigenfunktionen, welche *Blochfunktionen* zu einer „Quasikreiswellenzahl“

$$K \in \left[-\frac{\pi}{a}\,, \frac{\pi}{a}\right) \tag{2.21-5}$$

sind, d. h. Funktionen, welche das *Blochtheorem*

$$u_K(x + la) = e^{iKla}\, u_K(x)\,, \qquad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{2.21-6}$$

erfüllen. Soll nun $u(x)$ Blochfunktion zu K sein, so muss mit

$$u(x) = A_0\, e^{ikx} + B_0\, e^{-ikx}\,, \qquad x \in \mathbb{I}_0 \tag{2.21-7}$$

auch

$$u(x + a) = e^{iKa}\, u(x) = e^{iKa}\left[A_0\, e^{ikx} + B_0\, e^{-ikx}\right], \quad x \in \mathbb{I}_0 \tag{2.21-8}$$

bzw. $(x \to x - a)$

$$u(x) = e^{iKa}\left[A_0\, e^{ik(x-a)} + B_0\, e^{-ik(x-a)}\right], \qquad x \in \mathbb{I}_1 \tag{2.21-9}$$

gelten. Der Vergleich von (2.21-9) mit (2.21-3) zeigt, dass aus dem Blochtheorem insbesondere

$$A_1 = e^{i(K-k)a}\, A_0\,, \qquad B_1 = e^{i(K+k)a}\, B_0 \tag{2.21-10}$$

folgt. Der Zusammenhang aller übrigen A_l, B_l mit A_0, B_0 und damit die Lösung (2.21-3), wird durch analoge Fortsetzung gewonnen. Zu bestimmen bleiben lediglich noch die Koeffizienten A_0, B_0.

Anschlussbedingungen für die Stelle $x = a$ (s. Gl. (2.11-2a), (2.11-2b)):

$$u(a-) = u(a+) =: u(a)\,, \qquad u'(a-) = u'(a+) + 2D\, u(a)\,. \tag{2.21-11}$$

Einsetzen von (2.21-7) und (2.21-9) gibt ein lineares homogenes Gleichungssystem für A_0, B_0:

$$e^{ika}\, A_0 + e^{-ika}\, B_0 \;=\; e^{iKa}\,(A_0 + B_0)\,, \tag{2.21-12a}$$

$$ik\left[e^{ika}\, A_0 - e^{-ika}\, B_0\right] = ik\, e^{iKa}\,(A_0 - B_0) + 2D\, e^{iKa}\,(A_0 + B_0)\,. \tag{2.21-12b}$$

Nullsetzen der Koeffizientendeterminante führt auf die Eigenwertbedingung

$$\cos Ka = f(E) \tag{2.21-13}$$

mit

$$\text{(a1), (b)} \quad f(E) := \cos ka - \frac{Da}{ka}\,\sin ka\,; \tag{2.21-14}$$

$$\text{(a2)} \qquad f(E) := \cosh \kappa a - \frac{Da}{\kappa a}\,\sinh \kappa a\,. \tag{2.21-15}$$

Für alle Werte von E, für welche die Eigenwertbedingung erfüllt ist, gibt es eine nichttriviale Lösung des Gleichungssystems (2.21-12), und man kann die Koeffizienten A_l, B_l, $l = \pm 1, \pm 2, \ldots$, sowie A_0 durch B_0 ausdrücken (B_0 Normierungskonstante).

Zum Auftreten von erlaubten und verbotenen Energiebereichen kommt es dadurch, dass die Funktion $f(E)$ nur für bestimmte Energiebereiche die Eigenschaft

$$|f(E)| \le 1 \tag{2.21-16}$$

besitzt, denn wegen $|\cos Ka| \le 1$ und $K \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ ist (2.21-16) notwendig und hinreichend für die Existenz von Lösungen der Eigenwertbedingung (2.21-13).

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen[9]

Die Teile 1 und 2 von Abb. 2.21-1 zeigen die Funktion $f(E)$ für die speziellen Fälle

$$Da = -2\pi < 0 \quad \text{bzw.} \quad Da = \pi > 0\,. \tag{2.21-17}$$

[9] Bezüglich einer Diskussion der zugehörigen Energieeigenfunktionen siehe z. B. Smith, R. A.: Wave Mechanics of Crystalline Solids. Chapman & Hall, London 1969.

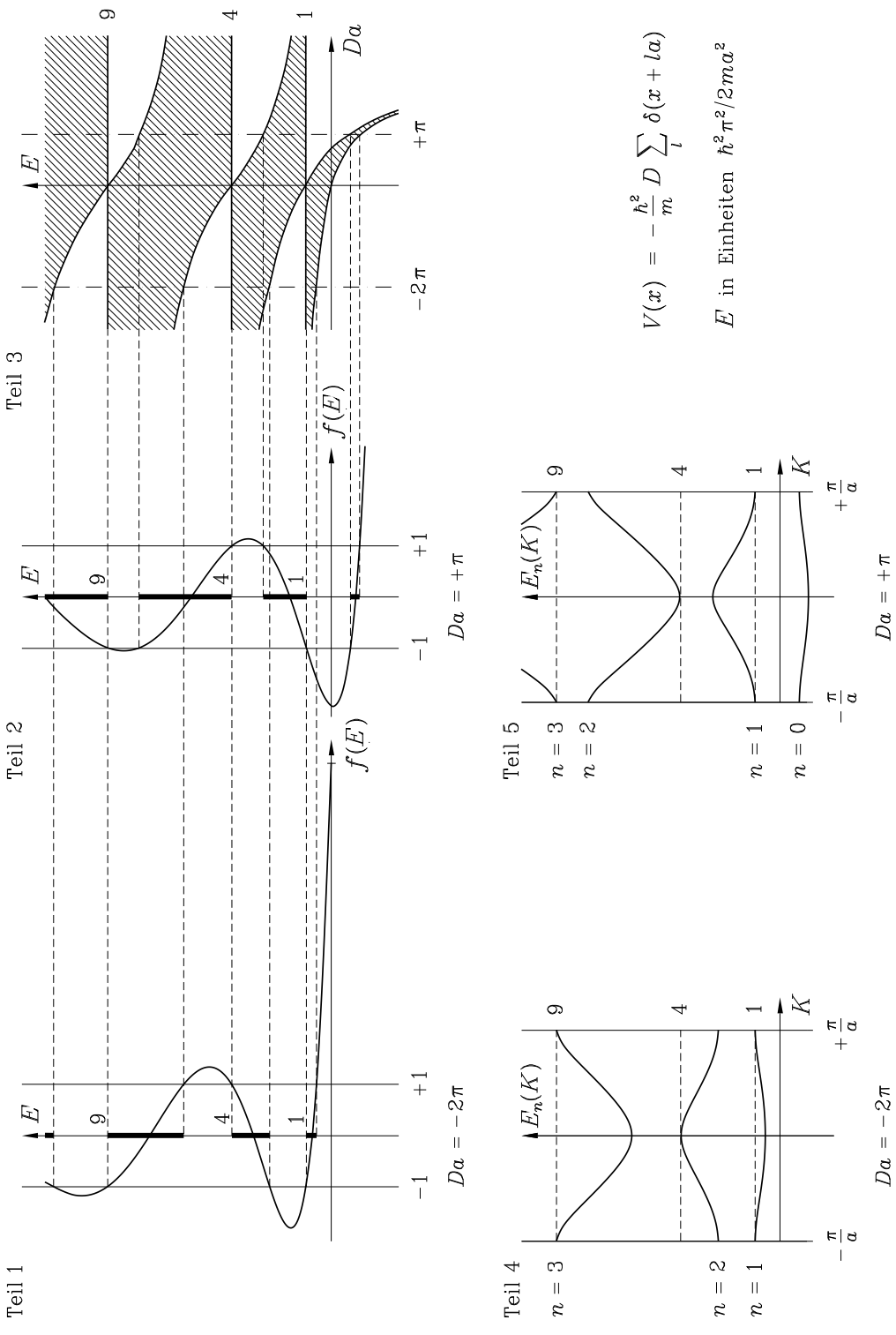


Abb. 2.21-1: Eigenwertbedingung und Energiebänder für das periodische δ-förmige Potential

Die stark ausgezogenen Intervalle der E-Achse stellen die erlaubten Energiebereiche dar, welche durch die Forderung (2.21-16) bestimmt sind.

Teil 3 von Abb. 2.21-1 zeigt Lage und Breite der erlaubten Energiebereiche in Abhängigkeit von der Stärke D der δ-förmigen Potentiale. Im Grenzfall $D \to 0\pm$ („Leergitter“) geht das Spektrum in ein Kontinuum bei $E > 0$ über.

Die Teile 4 und 5 von Abb. 2.21-1 stellen das Energiebandschema für die speziellen Fälle $Da = -2\pi$ bzw. $Da = \pi$ dar (*reduziertes Bandschema*). Die zu vorgegebenem $K \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ gehörigen diskreten Eigenwerte $E_n(K)$ erhält man, indem man in den zugehörigen Diagrammen, den Teilen 1 und 2 von Abb. 2.21-1, jene E-Werte abliest, für die $f(E) = \cos Ka$ ist.

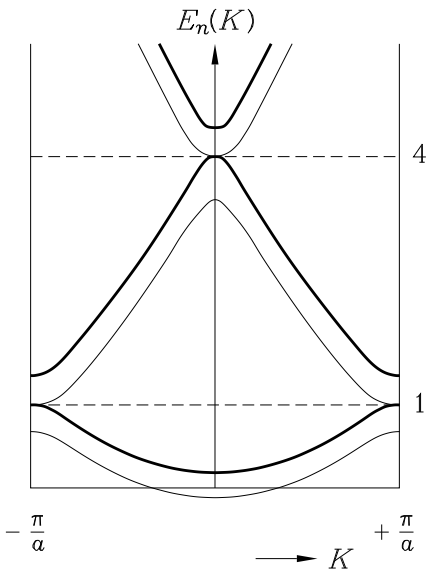


Abb. 2.21-2: Energiebänder im Grenzfall $|Da| \ll 1$ für $D < 0$ (dicke Kurven) bzw. für $D > 0$ (dünne Kurven); E in Einheiten $\hbar^2\pi^2/2ma^2$

Für *abstoßende Wirkung* ($D < 0$) kann es erlaubte Energien nur bei $E > 0$ geben. Das für $D = 0-$ vorliegende Kontinuum $E > 0$ spaltet mit wachsendem Betrag von D in Bereiche auf, welche durch immer breiter werdende verbotene Bereiche getrennt sind. Für festes D werden die erlaubten Bereiche mit wachsendem E breiter. Die obere Bereichsgrenze (Bandgrenze) ist dabei unabhängig von der Stärke D des Potentials durch

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\, n^2\,, \qquad n \in \mathbb{N} \tag{2.21-18}$$

gegeben ($\sin k_n a = 0$). Im Grenzfall $D \to -\infty$ entarten die Energiebänder zu diskreten Energieniveaus (2.21-18), entsprechend der Tatsache, dass der „Dirac-Kamm“ in diesem Grenzfall zu einer periodischen Anordnung „entkoppelter“ unendlich tiefer Kastenpotentiale der Breite a wird (s. Aufgabe 2.10 bzw. Gl. (2.18-24)). Die periodische Anordnung dieser Kastenpotentiale bedingt die Entartung der diskreten Eigenwerte (2.21-18). Im Grenzfall $D \to 0-$ (und ebenso im Grenzfall $D \to 0+$) geht das Bandschema immer mehr in die („reduziert“ gezeichnete) Energieparabel des kräftefreien Teilchens über (s. Abb. 2.21-2). Die Tangenten an den Stellen $K = 0, \pm\pi/a$ bleiben allerdings für $D \to 0\pm$ horizontal (Unterschied zwischen Teilchen im „Leergitter“ und kräftefreiem Teilchen).

Für *anziehende Wirkung* ($D > 0$) gibt es unendlich viele Energiebänder bei $E > 0$, deren untere Bandgrenzen für alle D durch die Werte (2.21-18) gegeben sind. Im Grenzfall $D \to +\infty$ ergibt sich für $E > 0$ dieselbe Bandstruktur wie für $D \to -\infty$. Der Grund dafür ist, dass der Transmissionskoeffizient für ein Teilchen mit $E > 0$ bei einem anziehenden δ-förmigen Potential für $D \to +\infty$ null wird (s. Aufgabe 2.19), und die Bereiche zwischen den δ-Potentialen somit für $D \to +\infty$ „entkoppelt“ sind. Daneben gibt es für $D > 0$ ein Energieband, das für hinreichend großes D ganz bei negativen Energien liegt und sich mit wachsender Stärke des Potentials

immer mehr auf den Eigenwert

$$E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m} \tag{2.21-19}$$

des gebundenen Zustandes eines einzelnen anziehenden δ-förmigen Potentials (siehe Aufgabe 2.12, Gl. (2.12-1b), (2.12-2)) zusammenzieht.

2.22 Nach Anhang A.4 gilt für $\omega_1 = \omega_2 =: \omega,\ \omega_3 = 2\omega$

$$H\,|\,n_1 n_2 n_3\,\rangle = E_{n_1+n_2+2n_3}\,|\,n_1 n_2 n_3\,\rangle\,, \qquad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}_0\,;$$
$$E_N = (N+2)\,\hbar\omega\,, \quad N \in \mathbb{N}_0\,; \quad \langle\, n_1 n_2 n_3\,|\,n_1' n_2' n_3'\,\rangle = \delta_{n_1 n_1'}\,\delta_{n_2 n_2'}\,\delta_{n_3 n_3'}\,.$$

Die Vielfachheit g_N von E_N ist durch die Zahl der linear unabhängigen Eigenvektoren von H zum Eigenwert E_N gegeben und ist somit durch die Anzahl der verschiedenen Wertetripel n_1, n_2, n_3 bestimmt, welche sich gemäß $N = n_1 + n_2 + 2n_3$ zum gegebenen Wert von N aufsummieren.

Fall 1: $N = 2M,\ M \in \mathbb{N}_0$

mögliche Werte von n_3	M	$M-1$	$\ldots$	0
zugehörige Werte von $n_1 + n_2$	0	2	$\ldots$	$2M$
Anzahl der linear unabhängigen EV	1	3	$\ldots$	$2M+1$

Vielfachheit von E_N für $N = 2M$:

$$g_N = \frac{(M+1)(2M+2)}{2} = (M+1)^2\,;$$

Fall 2: $N = 2M+1,\ M \in \mathbb{N}_0$

mögliche Werte von n_3	M	$M-1$	$\ldots$	0
zugehörige Werte von $n_1 + n_2$	1	3	$\ldots$	$2M+1$
Anzahl der linear unabhängigen EV	2	4	$\ldots$	$2M+2$

Vielfachheit von E_N für $N = 2M+1$:

$$g_N = \frac{(M+1)(2M+4)}{2} = (M+1)(M+2)\,.$$

Somit:

$$g_N = \begin{cases} \dfrac{(N+2)^2}{4} & \text{für} \quad N = 0, 2, 4, \ldots \\[2ex] \dfrac{(N+1)(N+3)}{4} & \text{für} \quad N = 1, 3, 5, \ldots \end{cases}\,. \tag{2.22-1}$$

2.23 **(a)** Nach Anhang A.4, Gl. (A.4-19), (A.4-22) gilt für $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 =: \omega$

$$H\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle = E_{n_1+n_2+n_3}\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle\,, \qquad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}_0\,;$$

$$E_N = \Big(N + \frac{3}{2}\Big)\hbar\omega\,, \quad N \in \mathbb{N}_0\,; \quad \langle\, n_1n_2n_3\,|\,n_1'n_2'n_3'\,\rangle = \delta_{n_1n_1'}\,\delta_{n_2n_2'}\,\delta_{n_3n_3'}\,.$$

Die Vielfachheit g_N von E_N ist durch die Zahl der linear unabhängigen Eigenvektoren von H zum Eigenwert E_N gegeben und ist somit durch die Anzahl der verschiedenen Wertetripel n_1, n_2, n_3 bestimmt, welche sich gemäß $N = n_1 + n_2 + n_3$ zum gegebenen Wert von N aufsummieren:

mögliche Werte von n_3	N	$N-1$	$\ldots$	0
zugehörige Werte von $n_1 + n_2$	0	1	$\ldots$	N
Anzahl der linear unabhängigen EV	1	2	$\ldots$	$N+1$

Vielfachheit von E_N:

$$g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2} = \binom{N+2}{2}\,. \tag{2.23-1}$$

(b) Nach Anhang A.4, Gl. (A.4-24) bis (A.4-26) und (A.4-28) gilt

$$H\,|\,nlm\,\rangle = E_n\,|\,nlm\,\rangle\,,$$
$$n \in \mathbb{N}_0\,; \quad l = n, n-2, \ldots, 1 \;\text{ oder }\; 0\,; \quad m = l, l-1, \ldots, -l\,;$$
$$E_n = \Big(n + \frac{3}{2}\Big)\hbar\omega\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,; \qquad \langle\, nlm\,|\,n'l'm'\,\rangle = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,.$$

Die Vielfachheit g_n von E_n ist durch die Zahl der linear unabhängigen Eigenvektoren von H zum Eigenwert E_n gegeben und ist somit durch $\sum(2l+1)$ bestimmt, wobei die l-Summation über $l = n, n-2, \ldots, 1$ oder 0 läuft.

Fall 1: $n = 2M,\ M \in \mathbb{N}_0$

mögliche l-Werte	$2M$	$2M-2$	$\ldots$	0
Anzahl der linear unabhängigen EV	$4M+1$	$4M-3$	$\ldots$	1

Vielfachheit von E_n für $n = 2M$:

$$g_n = \frac{(M+1)(4M+2)}{2} = (M+1)(2M+1)\,;$$

Fall 2: $n = 2M+1,\ M \in \mathbb{N}_0$

mögliche l-Werte	$2M+1$	$2M-1$	$\ldots$	1
Anzahl der linear unabhängigen EV	$4M+3$	$4M-1$	$\ldots$	3

Vielfachheit von E_n für $n = 2M + 1$:

$$g_n = \frac{(M+1)(4M+6)}{2} = (M+1)(2M+3)\,.$$

Somit folgt in Übereinstimmung mit (2.23-1) ($n \equiv N$)

$$g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2} = \binom{n+2}{2}\,.$$

2.24 **(a)** Lösung des Eigenwertproblems von H_0 (Freiheitsgrade ϑ, φ):

$$H_0 = \frac{\vec{L}^2}{2I}\,; \qquad H_0\,|\,lm\,\rangle = E_l^0\,|\,lm\,\rangle\,, \tag{2.24-1}$$

$$E_l^0 = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\,, \quad \langle\,\vartheta\varphi\,|\,lm\,\rangle = Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\,; \tag{2.24-2}$$

$$l \in \mathbb{N}_0\,; \;\; m = l, l-1, \ldots, -l\,.$$

Die Vielfachheit von E_l^0 ist $g_l^0 = 2l + 1$.

(b)* Wechselwirkungsoperator (Θ, Φ Operatoren):

$$W = -\vec{D}\cdot\vec{\mathcal{E}} = -d\,\mathcal{E}\cos\Theta = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,d\,\mathcal{E}\,Y_{10}(\Theta,\Phi)\,. \tag{2.24-3}$$

Die Energiekorrekturen zu E_l^0 ergeben sich als Eigenwerte der Matrix von W im Eigenraum zu E_l^0, welcher von den Vektoren $\{\,|\,lm\,\rangle,\ m = l, l-1, \ldots, -l\,\}$ aufgespannt wird (s. Anhang A.6, Gl. (A.6-13)). Diese Matrix ist aber die $(2l+1)$-dimensionale Nullmatrix, denn W ist ein ungerader Operator bzgl. der Inversion $\mathscr{P}$: $\vartheta \to \pi - \vartheta$, $\varphi \to \varphi + \pi$,

$$\Pi\, W\, \Pi^\dagger = -W\,, \tag{2.24-4}$$

und die Vektoren $|\,lm\,\rangle$, $m = l, l-1, \ldots, -l$, besitzen alle dieselbe Parität:

$$\Pi\,|\,lm\,\rangle = (-1)^l\,|\,lm\,\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\,lm\,|\,W\,|\,lm'\,\rangle = 0\,, \quad \forall\, m, m'\,. \tag{2.24-5}$$

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 2.2 und die Bemerkungen dazu.

2.25 **(a)** Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(r)\right\} u(\vec{r}) = E\,u(\vec{r}) \tag{2.25-1}$$

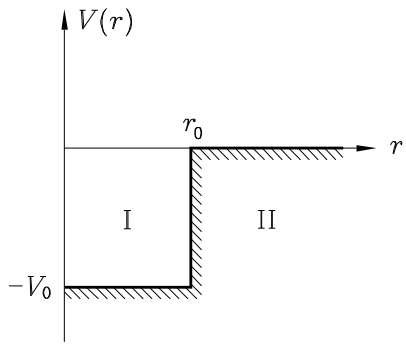


Abb. 2.25-1: Topfpotential

(Potential $V(r)$ s. Abb. 2.25-1). Separationsansatz (Potential sphärisch symmetrisch $\Rightarrow$ H, $\vec{L}^2$ und L_z bilden einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren):

$$u_{lm_l}(\vec{r}) = R_l(r)\, Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)\,; \tag{2.25-2}$$

Radialgleichung:

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\Big[E - V(r)\Big]\right\} R_l(r) = 0\,; \tag{2.25-3}$$

Bereich I ($r < r_0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + K^2\right\} R_l(r) = 0\,, \tag{2.25-4}$$

$$K := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \quad (-V_0 < E < 0)\,; \tag{2.25-5}$$

Bereich II ($r > r_0$):

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \kappa^2\right\} R_l(r) = 0\,, \tag{2.25-6}$$

$$\kappa := \sqrt{\frac{2m\,|E|}{\hbar^2}} \quad (-V_0 < E < 0)\,; \tag{2.25-7}$$

Lösungsansatz:

$$R_l(r) = \begin{cases} A_l\, j_l(Kr) & \text{für } r < r_0 \\ B_l\, h_l^{(+)}(i\kappa r) & \text{für } r > r_0 \end{cases}\,. \tag{2.25-8}$$

Dabei wurde bereits berücksichtigt, dass für $r < r_0$ die für $r = 0$ singuläre Basislösung $n_l(Kr)$ und für $r > r_0$ die für $r \to +\infty$ divergente Basislösung $h_l^{(-)}(i\kappa r)$ auszuschließen ist (s. dazu Anhang A.2, Gl. (A.2-34) bis (A.2-37); bzgl. des Ausschließens der für $r = 0$ zwar singulären, aber über eine Umgebung des Ursprungs absolut quadratisch integrierbaren Lösung der Schrödingergleichung mit dem Radialteil $n_0(Kr)$ s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.)

Stetigkeitsbedingungen für $R_l(r)$ an der Stelle $r = r_0$:

$$\begin{aligned} R_l(r_0-) &= R_l(r_0+) \\ R_l'(r_0-) &= R_l'(r_0+) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A_l\, j_l(Kr_0) &= B_l\, h_l^{(+)}(i\kappa r_0) \\ A_l \left[\frac{d}{dr}\, j_l(Kr)\right]_{r=r_0} &= B_l \left[\frac{d}{dr}\, h_l^{(+)}(i\kappa r)\right]_{r=r_0} \end{aligned}\,; \tag{2.25-9}$$

Nullsetzen der Koeffizientendeterminante liefert

$$\frac{1}{j_l(Kr_0)}\left[\frac{d}{dr}\,j_l(Kr)\right]_{r=r_0} = \frac{1}{h_l^{(+)}(i\kappa r_0)}\left[\frac{d}{dr}\,h_l^{(+)}(i\kappa r)\right]_{r=r_0} . \tag{2.25-10}$$

Diese Beziehungen stellen zusammen mit (s. (2.25-5) und (2.25-7))

$$(Kr_0)^2 + (\kappa r_0)^2 = \frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} , \qquad Kr_0 > 0 , \quad \kappa r_0 > 0 \tag{2.25-11}$$

die *Eigenwertbedingungen* dar. Besitzen (2.25-10), (2.25-11) zu gegebenem l Lösungen für den Eigenwertparameter E, so sind diese durch l und eine weitere („radiale“) Quantenzahl $n \in \mathbb{N}$ gekennzeichnet: Eigenwerte E_{nl}. Zu jedem Eigenwert E_{nl} gehört dann gemäß Gl. (2.25-5), (2.25-7) ein K_{nl} und κ_{nl} und gemäß Gl. (2.25-9) ein bestimmtes von n und l abhängiges Verhältnis A_l/B_l. Zusammen mit der Normierung gibt dies dann Koeffizienten A_{nl}, B_{nl} und die Lösung (2.25-2), (2.25-8) nimmt die in der Angabe angeschriebene Gestalt an.

(b) Nach Anhang A.2, Gl. (A.2-39) gilt

$$j_0(Kr) = \frac{\sin Kr}{Kr} , \qquad h_0^{(+)}(i\kappa r) = \frac{\exp(-\kappa r)}{i\kappa r} ,$$

und somit lauten die Eigenwertbedingungen (2.25-10), (2.25-11) für $l = 0$

$$\kappa r_0 = -Kr_0 \cot Kr_0 , \tag{2.25-12}$$

$$(Kr_0)^2 + (\kappa r_0)^2 = \frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} , \qquad Kr_0 > 0 , \quad \kappa r_0 > 0 . \tag{2.25-13}$$

Diese Eigenwertbedingungen sind identisch mit den Eigenwertbedingungen von Aufgabe 2.14 bzw. mit den Eigenwertbedingungen für die ungeraden Zustände von Aufgabe 2.13 ($r_0 \leftrightarrow a$). Sie sind in Abb. 2.13-2 graphisch dargestellt (Gl. (2.25-12) $\leftrightarrow$ Kurvenäste (b), Gl. (2.25-13) $\leftrightarrow$ Kurve (c)). Man sieht daraus, dass es *keine Lösung der Eigenwertbedingungen* für $l = 0$ gibt, *falls*

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} \le \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \tag{2.25-14}$$

gilt. Bedingung dafür, dass es $N \ge 1$ Lösungen der Eigenwertbedingungen (2.25-12), (2.25-13) gibt, ist

$$(2N-1)^2\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 < \frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2} \le (2N+1)^2\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 . \tag{2.25-15}$$

Bemerkungen

Die bei $r = 0$ singulären Lösungen der Radialgleichung werden meist durch die Forderung ausgeschlossen, dass „eine Wellenfunktion überall endlich sein muss“. Eine solche Forderung kann aber nicht physikalisch begründet werden. *Physikalische* Forderungen wie die der Endlichkeit der Antreffwahrscheinlichkeit für beliebige endliche Raumgebiete schließen schwache Singularitäten

wie die der Funktion $n_0(Kr)$ nicht aus. Wie wird man also $n_0(Kr)$ „los“? Der Definitionsbereich $\mathscr{D}_H$ des Hamiltonoperators muss so festgelegt werden, dass H in $\mathscr{D}_H$ selbstadjungiert ist. Wie man zeigen kann (s. z. B. [10]) ist im vorliegenden Fall eine notwendige Bedingung dafür $\lim_{r\to 0}(\sqrt{r}\,R_l(r)) = 0$. Damit werden die Funktionen $n_l(Kr)$ für *alle* l, auch für $l = 0$, ausgeschlossen.

Es liegt nahe zu vermuten, dass ein Zentralpotential $V(r)$, welches so „seicht“ ist, dass es keinen gebundenen s-Zustand zulässt, überhaupt keine gebundenen Zustände besitzen kann. Die Richtigkeit dieser Vermutung kann man durch Anwendung des Variationsprinzips auf das Eigenwertproblem

$$\underbrace{\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\Big)+V(r)}_{=:\,H_{r,0}^{\{\vec{r}\}}}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\Big\}R_l(r) = E\,R_l(r) \tag{2.25-16}$$

beweisen.

Angenommen, es gibt gebundene Zustände zu l und $l+1$, und $E_l^{\min}$ bzw. $E_{l+1}^{\min}$ sei der jeweils kleinste der diskreten Eigenwerte E_{nl} bzw. $E_{n,l+1}$. Bezeichne ich die entsprechenden auf eins normierten Eigenfunktionen mit $R_l^{\min}(r)$ bzw. $R_{l+1}^{\min}(r)$, so gilt

$$\begin{aligned} E_{l+1}^{\min} &= \int_0^{+\infty} dr\, r^2 R_{l+1}^{\min}(r)\Big\{H_{r,0}^{\{\vec{r}\}}+\frac{(l+1)(l+2)\hbar^2}{2mr^2}\Big\}R_{l+1}^{\min}(r) \\ &= \int_0^{+\infty} dr\, r^2 R_{l+1}^{\min}(r)\Big\{H_{r,0}^{\{\vec{r}\}}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\Big\}R_{l+1}^{\min}(r) + \overbrace{\frac{(l+1)\hbar^2}{m}\int_0^{+\infty} dr\,\big[R_{l+1}^{\min}(r)\big]^2}^{=:\,C_{l+1}>0}. \end{aligned}$$

Nach dem Variationsprinzip muss jedoch

$$\begin{aligned} E_l^{\min} &= \int_0^{+\infty} dr\, r^2 R_l^{\min}(r)\Big\{H_{r,0}^{\{\vec{r}\}}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\Big\}R_l^{\min}(r) \\ &< \int_0^{+\infty} dr\, r^2 R_{l+1}^{\min}(r)\Big\{H_{r,0}^{\{\vec{r}\}}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\Big\}R_{l+1}^{\min}(r) = E_{l+1}^{\min} - C_{l+1} \end{aligned}$$

gelten, woraus

$$E_l^{\min} < E_{l+1}^{\min} \tag{2.25-17}$$

folgt.[10] Da bei stetiger Verringerung der „Tiefe“ der Potentialmulde die Energieniveaus schließlich „nach oben hinauswandern“, folgt daraus, dass es *keinen gebundenen Zustand* zu den Quantenzahlen $l = 1, 2, 3, \ldots$ geben kann, wenn es keinen gebundenen Zustand zu $l = 0$ gibt.

Für das *Topfpotential* ergibt sich somit speziell die Aussage, dass es *überhaupt keinen gebundenen Zustand* besitzt, *falls* (2.25-14) gilt.

[10] Bezüglich oberer Schranken für die Zahl der diskreten Energieniveaus zu festem l siehe Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics, Bd. IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

Allgemein kann man zeigen[11], dass ein anziehendes Zentralpotential, das für $r > r_0$ exakt null ist oder im Unendlichen stärker als $-\frac{1}{r^2}$ verschwindet, und für das $\int_0^{+\infty} dr\, r\, |V(r)|$ existiert, *sicher* keinen gebundenen Zustand besitzt, wenn

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dr\, r\, |V(r)| < 1 \tag{2.25-18}$$

ist (*Bargmannkriterium*).

Siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13.

2.26 **(a)** Zeitunabhängige wellenmechanische Schrödingergleichung:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r}) \tag{2.26-1}$$

(Potential $V(r)$ s. Abb. 2.26-1 bzw. Abb. 2.25-1).

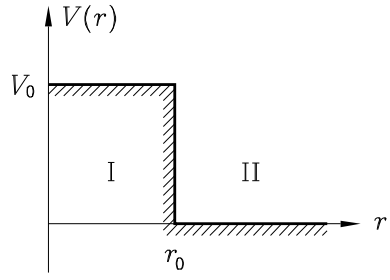


Abb. 2.26-1: Potential für den Fall (β). Bezüglich (α) siehe die Abb. 2.25-1.

Separationsansatz (Potential sphärisch symmetrisch $\Rightarrow$ H, $\vec{L}^2$ und L_z bilden einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren):

$$u_{lm_l}(\vec{r}) = R_l(r)\, Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)\,; \tag{2.26-2}$$

Radialgleichung:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] \right\} R_l(r) = 0\,; \tag{2.26-3}$$

Bereich I ($r < r_0$):

$$(\alpha) \qquad \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + K^2 \right\} R_l(r) = 0\,, \tag{2.26-4}$$

$$K := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad (E > 0)\,; \tag{2.26-5}$$

[11] Siehe das in der Fußnote von Seite 131 zitierte Buch.

$$(\beta) \qquad \left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\,\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\kappa^2\right\}R_l(r)=0\,, \tag{2.26-6}$$

$$\kappa:=\sqrt{\frac{2m\,(V_0-E)}{\hbar^2}} \quad (0<E<V_0)\,; \tag{2.26-7}$$

Bereich II ($r>r_0$):

$$(\alpha),\,(\beta) \quad \left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\,\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}+k^2\right\}R_l(r)=0\,, \tag{2.26-8}$$

$$k:=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (E>0)\,; \tag{2.26-9}$$

Lösungsansatz:

$$R_l(r)=\begin{cases} (\alpha) & A_l\,j_l(Kr) & \text{für} \quad r<r_0 \\ (\beta) & A_l\,j_l(i\kappa r) & \text{für} \quad r<r_0 \\ (\alpha),(\beta) & B_l\left[\cos\delta_l\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,n_l(kr)\right] & \text{für} \quad r>r_0 \end{cases}\,. \tag{2.26-10}$$

Dabei wurde bereits berücksichtigt, dass für $r<r_0$ die für $r=0$ singuläre Basislösung $n_l(Kr)$ bzw. $n_l(i\kappa r)$ auszuschließen ist. (Bzgl. des Ausschließens von $n_0(Kr)$ bzw. $n_0(i\kappa r)$ s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.25.) Die Koeffizienten der Linearkombination der Basislösungen für $r>r_0$ kann man ohne Einschränkung der Allgemeinheit als $B_l\cos\delta_l$ bzw. $B_l\sin\delta_l$ schreiben. (Diese Schreibweise ist im Hinblick auf das Streuproblem zweckmäßig; s. Anhang A.9, Gl. (A.9-7) bis (A.9-13).)

Stetigkeitsbedingungen für $R_l(r)$ an der Stelle $r=r_0$:

$$\begin{aligned} R_l(r_0-)&=R_l(r_0+) \\ R_l'(r_0-)&=R_l'(r_0+) \end{aligned} \quad\Rightarrow$$

$$(\alpha) \qquad \begin{aligned} A_l\,j_l(Kr_0)&=B_l\left[\cos\delta_l\,j_l(kr_0)+\sin\delta_l\,n_l(kr_0)\right] \\ A_l\left[\frac{d}{dr}\,j_l(Kr)\right]_{r=r_0}&=B_l\left[\cos\delta_l\,\frac{d}{dr}\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,\frac{d}{dr}\,n_l(kr)\right]_{r=r_0} \end{aligned}\,. \tag{2.26-11}$$

Die entsprechenden Formeln für den Fall (β) erhält man, indem man in (2.26-11) K durch $i\kappa$ ersetzt.

Nullsetzen der Koeffizientendeterminante liefert

$$(\alpha) \qquad \left[\frac{\frac{d}{dr}\,j_l(Kr)}{j_l(Kr)}\right]_{r=r_0}=\left[\frac{\cos\delta_l\,\frac{d}{dr}\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,\frac{d}{dr}\,n_l(kr)}{\cos\delta_l\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,n_l(kr)}\right]_{r=r_0} \tag{2.26-12}$$

bzw.

$$(\beta) \qquad \left[\frac{\frac{d}{dr}\,j_l(i\kappa r)}{j_l(i\kappa r)}\right]_{r=r_0}=\left[\frac{\cos\delta_l\,\frac{d}{dr}\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,\frac{d}{dr}\,n_l(kr)}{\cos\delta_l\,j_l(kr)+\sin\delta_l\,n_l(kr)}\right]_{r=r_0}\,. \tag{2.26-13}$$

Zusammen mit der Beziehung (s. (2.26-5), (2.26-7) und (2.26-9))

$$(\alpha) \qquad K = K(k) = \sqrt{\frac{2m\,(V_0 + E(k))}{\hbar^2}}\,, \quad 0 < k < +\infty \tag{2.26-14}$$

bzw.

$$(\beta) \qquad \kappa = \kappa(k) = \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - E(k))}{\hbar^2}}\,, \quad 0 < k < \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \tag{2.26-15}$$

stellt dies eine Bestimmungsgleichung für die in der Streutheorie *Phasenverschiebung* genannte Größe $\delta_l = \delta_l(k)$ dar (Energiekontinuum bei $E > 0$, daher *keine* Eigenwertbedingung). Setzt man die erhaltene Phasenverschiebung in die Gleichung (2.26-11) bzw. in die analoge Gleichung für den Fall (β) ein, so erhält man ein bestimmtes von k und l abhängiges Verhältnis A_l/B_l. Zusammen mit der Normierung (auf die δ-Funktion $\delta(E - E')$) gibt dies dann Koeffizienten $A_l(k), B_l(k)$, und die Lösung (2.26-2), (2.26-10) nimmt die in der Angabe angeschriebene Gestalt an.

(b) Nach Anhang A.2, Gl. (A.2-39) gilt

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}\,, \qquad n_0(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho}$$

und wegen

$$\cos\delta_0\, j_0(\rho) + \sin\delta_0\, n_0(\rho) \;=\; \frac{\sin\,(\rho + \delta_0)}{\rho}$$

folgt aus (2.26-12), (2.26-13) für $l = 0$ speziell

$$(\alpha) \qquad K\cot Kr_0 = k\cot\,(kr_0 + \delta_0) \tag{2.26-16}$$

bzw.

$$(\beta) \qquad \kappa\coth\kappa r_0 = k\cot\,(kr_0 + \delta_0)\,. \tag{2.26-17}$$

Somit ist δ_0 modulo π durch

$$(\alpha) \qquad \delta_0 = \delta_0(k) = -kr_0 + \arctan\left[\frac{k}{K}\tan Kr_0\right] \tag{2.26-18}$$

bzw.

$$(\beta) \qquad \delta_0 = \delta_0(k) = -kr_0 + \arctan\left[\frac{k}{\kappa}\tanh\kappa r_0\right] \tag{2.26-19}$$

gegeben.

Bemerkungen

Die Phasenverschiebungen $\delta_l(k)$ sind ganz allgemein nur bis auf ein ganzzahliges Vielfaches von π bestimmt. Hinzufügen von $\nu\pi$ führt lediglich zu einem physikalisch bedeutungslosen zusätzlichen Phasenfaktor $(-1)^\nu$ in der Radialfunktion R_l. Beispielsweise geht in den differentiellen Streuwirkungsquerschnitt nur $\sin\delta_l \sin\delta_{l'} \cos\,(\delta_l - \delta_{l'})$ und in den totalen Streuwirkungsquerschnitt nur $\sin^2\delta_l$ ein (s. Gl. (A.9-9), (A.9-10) von Anhang A.9).

In den Formeln (2.26-18), (2.26-19) wurde ν willkürlich null gesetzt. Manche Autoren ziehen es vor, den Wert von ν so zu wählen, dass $\delta_l(k)$ für $k \to +\infty$ gegen null strebt. Bei dieser Festlegung ist dann $\delta_l(0)$ für anziehende Potentiale im Allgemeinen von null verschieden, da der Wert der Größe $\delta_l(0) - \delta_l(+\infty)$ nach dem *levinsonschen Theorem*[12] durch die Anzahl N_l der gebundenen Zustände des betreffenden Potentials mit Bahndrehimpulsquantenzahl l gegeben ist. Im Normalfall gilt

$$\delta_l(0) - \delta_l(+\infty) = N_l\,\pi\,, \tag{2.26-20}$$

für $l = 0$ gibt es allerdings einen hier nicht näher erläuterten Sonderfall, für den die rechte Gleichungsseite in (2.26-20) durch $(N_0 + \frac{1}{2})\pi$ zu ersetzen ist.

Siehe Aufgabe 8.1.

[12] Siehe z. B. Taylor, J. R.: Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions. Krieger Publishing Company, Malabar 1983. Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2006.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 2.1 bis 2.26 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 2.1 bis 2.26 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T2.1 Im Zustandsraum eines Teilchens mit dem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ sei ein Operator $S(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$, durch

$$S(\lambda) := \exp\Big\{\lambda \frac{1}{2}[a^2 - (a^\dagger)^2]\Big\}\,, \qquad a := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(X - \frac{1}{i\hbar}\,P\Big)$$

(X, P Orts- bzw. Impulsoperator des Teilchens) gegeben.

(a) Zeige, dass der Operator $S(\lambda)$ unitär ist.

(b) Berechne mithilfe der bekannten Vertauschungsbeziehung von a und $a^\dagger$ die Operatoren

$$X' := S(\lambda)\,X\,S^\dagger(\lambda)\,, \qquad P' := S(\lambda)\,P\,S^\dagger(\lambda)$$

sowie den Kommutator von X' und P'.

(c) Berechne die Vektoren $S(\lambda)\,|\,x\,\rangle$, $x \in \mathbb{R}$.

(d) Interpretiere die zugehörige Transformation anschaulich.

(Die Verallgemeinerung auf Teilchen mit drei räumlichen Freiheitsgraden erfolgt analog wie beim Paritätsoperator und beim Translationsoperator; s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.2.)

T2.2 Untersuche, ob

$$u(x) = \frac{N}{\cosh \kappa x}\,, \qquad x \in \mathbb{R}$$

($\kappa \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben, N Normierungskonstante) Eigenfunktion eines Hamiltonoperators

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

mit $V(x \to \pm\infty) \to 0$ zu einem diskreten Eigenwert E ist. Falls ja, berechne $V(x)$ und E und trage E in eine Skizze von $V(x)$ ein.

T2.3 Ein Teilchen der Masse m befinde sich im Potential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad -a \le x < 0 \\ -V_0 & \text{für} \quad 0 < x \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases}\,, \qquad V_0 > 0\,.$$

Verifiziere mithilfe der exakten Eigenwertbedingungen, dass die Energieeigenwerte des Systems im Falle

$$k_0 a \ll 1\,, \qquad k_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

(d. h. wenn die Potentialabsenkung im Bereich $0 < x \leq a$ geringfügig ist) unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung $(k_0 a)^4$ durch

$$E_{n-1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}\, n^2 - \frac{V_0}{2}\,, \quad n \in \mathbb{N}$$

gegeben sind. Auf welchem Weg lässt sich dieses Ergebnis viel einfacher erhalten?

(Wer letztere Frage nicht spontan beantworten kann, findet die Antwort in Aufgabe T5.1.)

T2.4 Ein Teilchen der Masse m befinde sich im Potential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \frac{a}{2} < |x| \leq a \\ -V_0 & \text{für} \quad |x| < \frac{a}{2} \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases}, \quad V_0 > 0\,.$$

(a) Welche Bedingung muss $V_0 a^2$ erfüllen, damit die Grundzustandsenergie E_0 bei $E < 0$ und das erste Anregungsniveau E_1 bei $E = 0$ liegt?

(b) Wie lautet die auf eins normierte Eigenfunktion u_1 zu E_1, wenn diese Bedingung erfüllt ist? Skizziere den Verlauf der Funktion u_1.

(c) Berechne den wahrscheinlichsten Wert für den Abstand des Teilchens vom Ursprung im Zustand u_1 sowie die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Zustand u_1 bei einer Ortsmessung im Intervall $(-a/2, +a/2)$ anzutreffen.

(Anleitung: Benütze, dass die niedrigste Lösung der transzendenten Gleichung $\tan\xi = -\xi$ für $\xi > 0$ durch $\xi_0 = 2{,}028758$ gegeben ist, womit $\cos^2\xi_0 = 0{,}19547$ folgt.)

Ergebnis zu (a): $\quad V_0 a^2 = 2\xi_0^2 \,\frac{\hbar^2}{m} = 8{,}2317\,\frac{\hbar^2}{m}\,;$

Ergebnisse zu (c): $\quad d_{\mathrm{w}} = \frac{\pi}{4\xi_0}\, a = 0{,}38\, a, \quad W = \frac{3(1+\cos^2\xi_0)}{5+\cos^2\xi_0} = 0{,}6903.$

T2.5 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem inversionssymmetrischen eindimensionalen Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\, D\,\delta(x+l) - \frac{\hbar^2}{m}\, D\,\delta(x-l)\,, \qquad D > 0\,,\ \ l > 0\,.$$

(a) Stelle für $E < 0$ die Eigenwertbedingungen für die Existenz gerader bzw. ungerader Energieeigenfunktionen auf und zeige, dass sich diese Eigenwertbedingungen mit

$$\kappa := \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

auf die Form

$$\left.\begin{aligned} e^{-2\kappa l} &= \frac{\kappa l}{Dl} - 1 \\ \kappa l &> 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{(gerade Lösungen)},$$

$$\left.\begin{aligned} e^{-2\kappa l} &= -\frac{\kappa l}{Dl} + 1 \\ \kappa l &> 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{(ungerade Lösungen)}$$

bringen lassen.

(b) Zeige durch graphisches Lösen der Eigenwertbedingungen, dass das gegebene Potential einen oder zwei gebundene Zustände besitzt, je nachdem, ob $Dl \leq \frac{1}{2}$ oder $Dl > \frac{1}{2}$ ist.

(c) Skizziere den Verlauf der Energieeigenfunktion $u_0(x)$. (Die Normierungskonstante muss nicht bestimmt werden.)

(d) Was ergibt sich für die Grundzustandsenergie E_0 im Grenzfall $l \to 0+$? Kommentiere das Ergebnis.

T2.6 Ein Strom von Teilchen der Masse m und Energie $E > V_0$ falle in positiver x-Richtung laufend auf das Potential

$$V(x) = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{m}\, D\, \delta(x) & \text{für} \quad x < a \\ V_0 & \text{für} \quad x > a \end{cases}, \qquad D > 0\,,\ V_0 > 0\,,\ a > 0$$

ein (eindimensionales Problem). Berechne den Transmissionskoeffizienten.

Ergebnis:

$$T = T(E) = 4kK\Big[(k+K)^2 + \frac{2D^2}{k^2}\,(k^2+K^2) + \frac{2D}{k}\,(k^2-K^2)\Big(\sin 2ka + \frac{D}{k}\cos 2ka\Big)\Big]^{-1}$$

mit

$$k = k(E) := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,, \qquad K = K(E) := \sqrt{\frac{2m\,(E-V_0)}{\hbar^2}}\,.$$

T2.7 Ein Strom von Teilchen der Masse m und Energie $E = \frac{3}{2}\,V_0 > 0$ falle in positiver x-Richtung laufend auf die Potentialschwelle

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad x < 0 \\ 2V_0 & \text{für} \quad 0 < x < d \\ V_0 & \text{für} \quad x > d \end{cases}$$

ein (eindimensionales Problem), wobei $V_0 d^2 = \hbar^2/m$ sei. Berechne den Transmissionskoeffizienten, und zwar nicht durch Spezialisierung des Ergebnisses von Aufgabe 2.20,

sondern durch eine Ab-initio-Rechnung.

Ergebnis:

$$T = \frac{2\sqrt{3}}{e^2 + \sqrt{3} + e^{-2}} = 0{,}3742 \text{ (ausgeprägter Tunneleffekt).}$$

T2.8* Ein Strom von Teilchen der Masse m und Energie $E > 0$ falle in positiver x-Richtung laufend auf das Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} D_1 \, \delta(x) - \frac{\hbar^2}{m} D_2 \, \delta(x - a) \,, \qquad D_1 > 0 \,, \quad D_2 \in \mathbb{R} \,, \quad a > 0$$

ein (eindimensionales Problem).

(a) Berechne den Transmissionskoeffizienten T als Funktion von E und untersuche, unter welcher Voraussetzung für D_1, D_2 Resonanz, d. h. totale Transmission, möglich ist (notwendige Bedingung für die Möglichkeit von Resonanz).

(b) Bestimme für den Fall, dass diese Voraussetzung für D_1, D_2 erfüllt ist (wenn nicht anders möglich auf graphischem Weg) die Resonanzenergien (virtuellen Niveaus).

(Hinweis: Für die Ableitung der für die Möglichkeit von Resonanz notwendigen Bedingung für D_1, D_2 ist es zweckmäßig, anstelle der Forderung $T = 1$ die äquivalente Forderung $R = 0$ zu benützen.)

Ergebnis zu (a): Als notwendige Bedingung für D_1, D_2 ergibt sich $D_2 = \pm D_1$. War das von vornherein zu erwarten?

T2.9 Der Hamiltonoperator eines starren Hantelmoleküls, welches in der xy-Ebene um den Koordinatenursprung rotiert („Rotator“ mit einem Freiheitsgrad, dem Polarwinkel φ), ist durch

$$H_0 = \frac{L^2}{2I}$$

gegeben. Dabei ist L der Operator des Bahndrehimpulses und I das Trägheitsmoment des Rotators.

(a) Schreibe die zeitunabhängige Schrödingergleichung des betrachteten Rotators in der $\{\varphi\}$-Darstellung an und bestimme die Energieeigenwerte E^0 und die zugehörigen auf eins normierten Energieeigenfunktionen. Sind die Eigenwerte von H_0 entartet?

(b) Der Rotator besitze ein magnetisches Moment, dessen Operator durch $M = \gamma L$ gegeben ist (γ gyromagnetisches Verhältnis), und befinde sich in einem Magnetfeld B senkrecht zur Rotationsebene. Welcher Wechselwirkungsterm W kommt zu H_0 hinzu?

(c) Wie lauten die exakten Eigenwerte E und die zugehörigen Eigenvektoren des Hamiltonoperators $H = H_0 + W$? Sind die Eigenwerte von H entartet?

(Bemerkung: Da es sich um ein System mit mit einem einzigen Freiheitsgrad, dem Polarwinkel φ, handelt, habe ich absichtlich L und nicht L_z geschrieben. Der wellenmechanische Zustandsraum ist $\mathscr{H} = L^2([0, 2\pi))$, und es gilt $L^{\{\varphi\}} = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$. Siehe dazu Punkt (b) von Fall (IV) in den Bemerkungen zu Aufgabe 1.14.)

T2.10 Der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators

$$H = \frac{1}{2m}\,(P_1^2 + P_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}\,(X_1^2 + X_2^2)$$

lässt sich bei Einführung von Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren von Oszillatorquanten bzgl. der räumlichen Freiheitsgrade $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$

$$a_j := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\alpha X_j - \frac{1}{i\hbar\alpha}\,P_j\Big)\,, \qquad a_j^\dagger := (a_j)^\dagger\,; \qquad j = 1, 2\,; \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

(wie bekannt) mit den selbstadjungierten Oszillator-Quantenzahloperatoren

$$N_j = a_j^\dagger a_j\,, \quad j = 1, 2$$

in der Form

$$H = \Big(N_1 + N_2 + \mathbb{1}\Big)\hbar\omega$$

schreiben.

(a) Zeige, dass die durch

$$a_{\mathrm{L}} := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1 + ia_2\Big)\,, \qquad a_{\mathrm{L}}{}^\dagger := (a_{\mathrm{L}})^\dagger$$

$$a_{\mathrm{R}} := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1 - ia_2\Big)\,, \qquad a_{\mathrm{R}}{}^\dagger := (a_{\mathrm{R}})^\dagger$$

definierten Operatoren die für Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren typischen Vertauschungsbeziehungen erfüllen. Wie werden diese Operatoren zu interpretieren sein?

(b) Der Hamiltonoperator des zweidimensionalen isotropischen harmonischen Oszillators vertauscht offensichtlich mit dem Bahndrehimpulsoperator

$$L = X_1P_2 - X_2P_1$$

(Drehinvarianz bzgl. Drehungen in der xy-Ebene um den Ursprung). Drücke die Operatoren H und L durch die Operatoren a_{L}, $a_{\mathrm{L}}{}^\dagger$, a_{R}, $a_{\mathrm{R}}{}^\dagger$ von (a) aus und schreibe die entsprechenden gemeinsamen auf eins normierten Eigenvektoren von H und L sowie die zugehörigen Eigenwerte von H und L an.

(Bemerkung: Da es sich um ein System mit den zwei Freiheitsgraden x_1, x_2 handelt [wellenmechanischer Zustandsraum $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^2)$] habe ich absichtlich L und nicht L_3 geschrieben.)

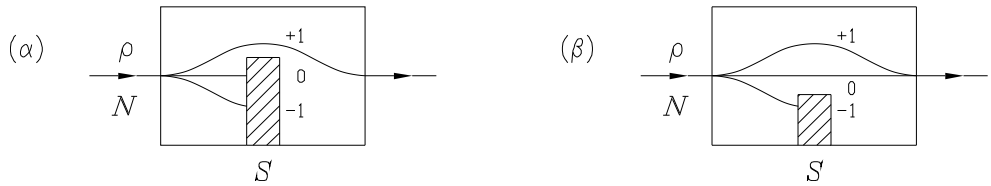
(Die Berechnung der zu den Eigenvektoren von (b) in der $\{r, \varphi\}$-Darstellung gehörigen Eigenfunktionen wurde nicht verlangt, weil sie sehr aufwendig ist.)

3. Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte. Darstellungen

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. Kapitel 4 und die Kapitel 6–9.

Angaben

3.1 Ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen, deren Spinzustand durch den (Spin-) Dichteoperator $\rho = \frac{1}{3}\mathbb{1}$ gegeben sei (unpolarisierter Strahl), falle auf den modifizierten Stern-Gerlach-Apparat



ein.

(a) Wie lautet im Fall (α) bzw. (β) der Dichteoperator für die Gesamtheit der Teilchen, die den betreffenden Stern-Gerlach-Apparat „durchlaufen“ haben? Verifiziere für alle angeschriebenen Dichteoperatoren ρ, dass $\mathrm{Sp}\,\rho = 1$ und $\mathrm{Sp}\,\rho^2 \leq 1$ ist. Wodurch unterscheidet sich die Situation mit $\mathrm{Sp}\,\rho^2 = 1$ grundsätzlich von der mit $\mathrm{Sp}\,\rho^2 < 1$?

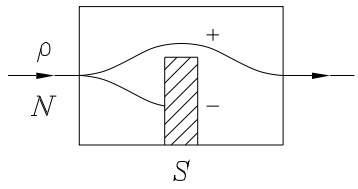
(b) Wie groß ist im Fall (α) bzw. (β) die Intensität des Strahls, welcher den S-Apparat verlässt, wenn die Intensität des einfallenden Strahls N (Teilchen pro Zeiteinheit) beträgt?

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.2 Ein Strahl von neutralen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen, deren Spinzustand durch den Dichteoperator

$$\rho = |+S\rangle\,\frac{1}{4}\,\langle +S| + |-S\rangle\,\frac{3}{4}\,\langle -S|$$

($|\pm S\rangle \equiv |\pm\tfrac{1}{2}, S\rangle$) gegeben sei, falle auf den folgenden modifizierten Stern-Gerlach-Apparat ein:

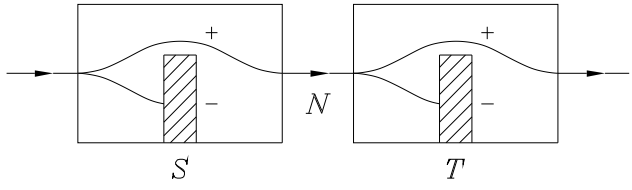


(a) Wie lautet der Dichteoperator für die Gesamtheit der Teilchen, die den S-Apparat „durchlaufen“ haben? Liegt nach der Umpräparation eine reine Gesamtheit vor?

(b) Wie groß ist die Intensität des Strahls, welcher den S-Apparat verlässt, wenn die Intensität des einfallenden Strahls N (Teilchen pro Zeiteinheit) beträgt?

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.3 Ein Strahl von neutralen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen falle auf die folgende Anordnung von modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten ein (S, T verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung senkrechten Ebene):



N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei die Intensität des Strahls, welcher den S-Apparat verlässt. Wie groß ist dann die Intensität des Strahls, welcher den T-Apparat verlässt?

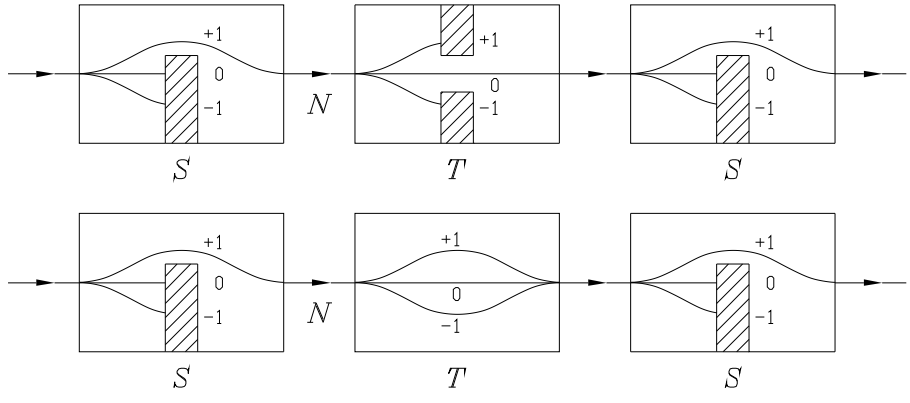
(Drücke die gesuchte Intensität durch N und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle mS|m'T\rangle$, $m, m' = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, aus.)

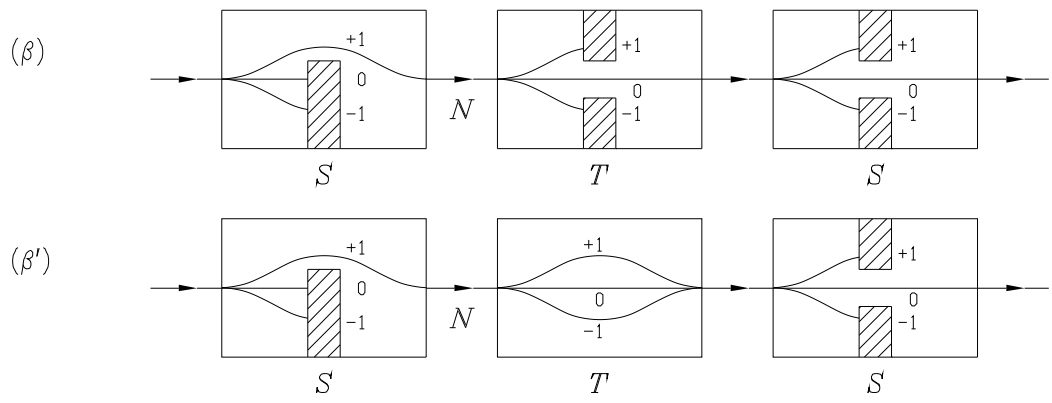
(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.4 Auf die folgenden Anordnungen von modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten (S, T verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung senkrechten Ebene) falle jeweils ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen ein:

(α)

(α')





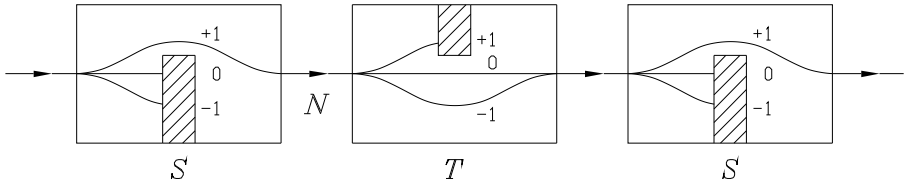
N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei jeweils die Intensität des Strahls, welcher den ersten S-Apparat verlässt. Wie groß ist in den Fällen (α), (α'), (β), (β') die Intensität des Strahls, welcher den zweiten S-Apparat verlässt?

(Drücke die gesuchte Intensität durch N und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle mS|m'T\rangle$, $m, m' = +1, 0, -1$, aus.)

Die Fälle (α'), (β') gehen aus (α) bzw. (β) durch Herausnehmen aller Masken aus dem T-Apparat hervor. Wird die Intensität des Strahls, welcher den zweiten S-Apparat verlässt, durch Entfernen dieser Masken größer?

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.5 Auf die folgende Anordnung von modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten (S, T verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung senkrechten Ebene) falle ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen ein:



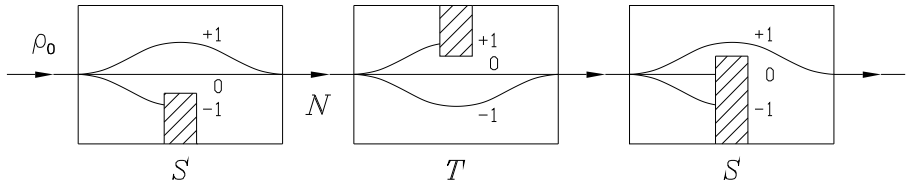
N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei die Intensität des Strahls, welcher den ersten S-Apparat verlässt. Wie groß ist die Intensität des Strahls, welcher den zweiten S-Apparat verlässt? Berechne die gesuchte Intensität einmal mithilfe des Konzepts des Zustandsvektors und einmal mithilfe des Konzepts des Dichteoperators.

(Drücke die gesuchte Intensität durch N und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle mS|m'T\rangle$, $m, m' = +1, 0, -1$, aus.)

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.6* Betrachte die folgende Anordnung von drei modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten (S, T verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung senk-

rechten Ebene):

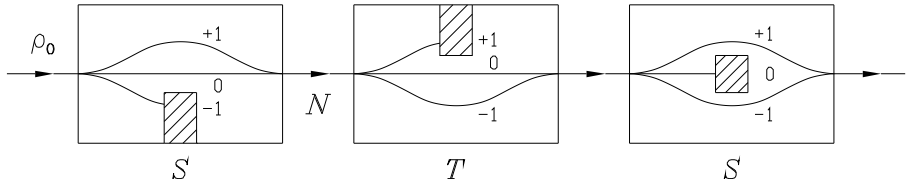


Ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen, deren Spinzustand durch den Dichteoperator $\rho_0 = \frac{1}{3}\mathbb{1}$ gegeben sei (unpolarisierter Strahl), falle auf die Anordnung ein, und N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei die Intensität des Strahls, welcher den ersten S-Apparat verlässt. Wie groß ist die Intensität des Strahls, welcher den zweiten S-Apparat verlässt?

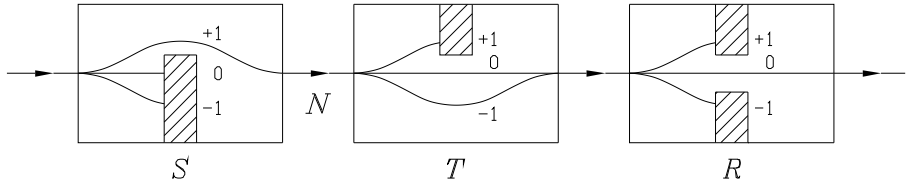
(Drücke die gesuchte Intensität durch N und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle mS|m'T\rangle$, $m, m' = +1, 0, -1$, aus.)

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.7* Behandle dieselbe Aufgabenstellung wie in Aufgabe 3.6 für die Anordnung



3.8 Ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen falle auf die folgende Anordnung von modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten ein (S, T, R verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung senkrechten Ebene):



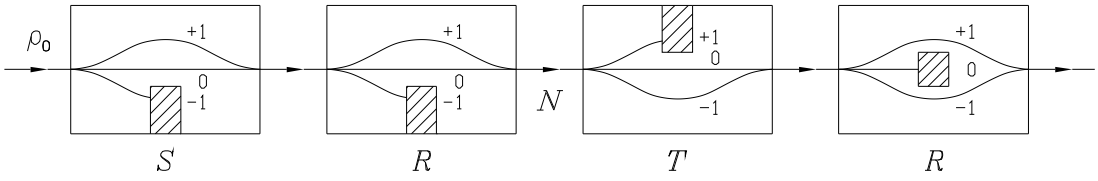
N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei die Intensität des Strahls, welcher den S-Apparat verlässt. Wie groß ist die Intensität des Strahls, welcher den R-Apparat verlässt?

(Drücke die gesuchte Intensität durch N und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle mS|m'T\rangle$, $\langle m'T|m''R\rangle$, $m, m', m'' = +1, 0, -1$, aus.)

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.9* Betrachte die folgende Anordnung von vier modifizierten Stern-Gerlach-Apparaten (S, T, R verschiedene Richtungen des Feldgradienten in der zur Strahlrichtung

senkrechten Ebene, wobei die Feldgradientenrichtungen von S, R auch nicht entgegengesetzt gleich sein sollen):



Ein Strahl von neutralen Spin-1-Teilchen, deren Spinzustand durch den Dichteoperator $\rho_0 = \frac{1}{3}\mathbb{1}$ gegeben sei (unpolarisierter Strahl), falle auf die Anordnung ein. Der S-Apparat und der erste R-Apparat sollen noch zur Präpariereinrichtung gehören, und N (Teilchen pro Zeiteinheit) sei die Intensität des durch die gesamte Präpariereinrichtung hergestellten Strahls.

(a) Wie lauten die Gemischzustände $|\,\chi_j\,\rangle$ der so präparierten gemischten Gesamtheit und deren statistische Gewichte p_j? Sind die Gemischzustände orthogonal?

(b) Wie groß ist die Intensität des Strahls, welcher den zweiten R-Apparat verlässt?

(Drücke die gesuchte Intensität durch die statistischen Gewichte p_j und die inneren Produkte der Vektoren $|\,mT\,\rangle$, $|\,mR\,\rangle$ und $|\,\chi_j\,\rangle$ aus.)

(Anleitung: s. Anhang A.10.)

3.10 Ein Teilchen der Masse m besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Zustandsfunktion (eindimensionales Problem; N Normierungskonstante)

$$\psi(x) = \begin{cases} N x\, e^{-ax} & \text{für} \quad x \geq 0 \\ 0 & \text{für} \quad x < 0 \end{cases} , \qquad a > 0\,.$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bei einer Messung des Impulses zum betreffenden Zeitpunkt ein Wert zwischen $-\hbar a$ und $+\hbar a$ gemessen wird?

(Anleitung: Verwende die Formeln

$$\int \frac{d\xi}{(\xi^2+\alpha^2)^2} = \frac{\xi}{2\alpha^2(\xi^2+\alpha^2)} + \frac{1}{2\alpha^3}\arctan\frac{\xi}{\alpha} + C\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+;$$

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^n e^{-\xi} = n!\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,.)$$

3.11 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| \leq a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} .$$

Zu einem bestimmten Zeitpunkt sei seine Zustandsfunktion durch

$$\psi(x) = N(a^2 - x^2)\,, \qquad |x| \le a$$

gegeben (N Normierungskonstante).

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie des Teilchens zum betreffenden Zeitpunkt den Messwert

$$E_{n-1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,n^2\,, \qquad n \in \mathbb{N}$$

zu finden.

(b) Zeige, dass Erwartungswert und Unschärfe der Energie zu diesem Zeitpunkt durch

$$\langle\, H \,\rangle = \frac{5\hbar^2}{4ma^2}\,, \qquad \Delta E = \frac{\sqrt{5}\,\hbar^2}{4ma^2}$$

gegeben sind.

(Anleitung: Verwende die in Aufgabe 2.10 berechneten Energieeigenfunktionen $u_{n-1}(x)$ für das unendlich tiefe Kastenpotential [s. Gl. (2.10-2a), (2.10-2b)] und benütze die Formeln

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{(2\nu+1)^2} = \frac{\pi^2}{8}\,, \qquad \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{(2\nu+1)^4} = \frac{\pi^4}{96}\,;$$

$$\int d\xi\,\xi^2 \cos\alpha\xi = \frac{2\xi}{\alpha^2}\cos\alpha\xi + \frac{\alpha^2\xi^2 - 2}{\alpha^3}\sin\alpha\xi + C\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+.)$$

3.12 Die Zustandsfunktion eines Teilchens mit dem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ besitze die Form

$$\psi(x,t) = \varphi(x,t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\,\beta(t)\,x + i\gamma(t)\right].$$

Dabei seien β, γ und φ reellwertig, φ besitze eine stetige Ableitung nach x und erfülle ferner

$$\int_{\mathbb{R}} dx\,[\varphi(x,t)]^2 = 1\,, \qquad \int_{\mathbb{R}} dx \left[\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial x}\right]^2 < +\infty\,.$$

Welche physikalische Bedeutung besitzt dann $\beta(t)$?

3.13 Zeige: Ist die Zustandsfunktion eines Teilchens in der Ortsdarstellung reellwertig, so gilt:

(a) Die Wahrscheinlichkeitsdichte bezüglich des Impulses ist im Impulsraum inversionssymmetrisch in Bezug auf den Ursprung.

(b) Der Erwartungswert des Teilchenimpulses ist null.

3.14*

(a) Schreibe die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m in dem anziehenden δ-förmigen Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\, D\, \delta(x)\,, \qquad D > 0$$

in der Impulsdarstellung an.

(b) Löse diese Gleichung für $E < 0$ und zeige, dass es nur dann eine nichttriviale Lösung gibt, wenn

$$E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m}$$

gilt. Wie lautet in der Impulsdarstellung die normierte Eigenfunktion $\widetilde{u}(p) \equiv \langle\, p \,|\, u \,\rangle$ für diesen gebundenen Zustand?

(c) Berechne aus $\widetilde{u}(p)$ die zugehörige Eigenfunktion $u(x) \equiv \langle\, x \,|\, u \,\rangle$ in der Ortsdarstellung.

(Anleitung: Verwende

$$\int\limits_{\mathbb{R}} \frac{d\xi}{(\xi^2+\alpha^2)^2} = \frac{\pi}{2\alpha^3}\,, \qquad \int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\, \frac{e^{i\beta\xi}}{\xi^2+\alpha^2} = \frac{\pi}{\alpha}\, e^{-\alpha|\beta|}\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+,\quad \beta \in \mathbb{R}\,.)$$

3.15 Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung des linearen harmonischen Oszillators in der Impulsdarstellung? Wie sehen die zugehörigen Eigenwerte E_n und Eigenfunktionen $\widetilde{u}_n(p) \equiv \langle\, p \,|\, n \,\rangle$ aus?

(Die Lösung des Problems des linearen harmonischen Oszillators in der Ortsdarstellung kann als bekannt angenommen werden; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5b), (A.5-7).)

3.16* Schreibe die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein spinloses Teilchen der Masse m in einem Coulombpotential in der Impulsdarstellung an.

(Anleitung: Ersetze zunächst das Coulombpotential $V(r) = C/r$ durch ein abgeschirmtes Coulombpotential

$$V(r) = \frac{C}{r}\, e^{-\mu r}\,, \qquad \mu \in \mathbb{R}^+$$

und lasse nach Durchführung der Integration über die Ortskoordinaten μ gegen 0+ streben.)

3.17 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem Potential $V(\vec{r})$, welches gebundene Zustände besitzt. Zeige, dass der Erwartungswert des Impulses des Teilchens in einem gebundenen Energieeigenzustand $|\, u \,\rangle$ null ist.

(Anleitung: Beweise zunächst, dass für ein Teilchen der Masse m im Potential V

$$P_j = \frac{im}{\hbar}\,[H, X_j]\,, \quad j = 1,2,3$$

gilt, und benütze diese Beziehungen für die weitere Rechnung.)

3.18* Ein Strahl von Neutronen der Energie 10 meV werde durch eine kreisförmige Blende mit dem Durchmesser d_0 kollimiert und in der Entfernung $s = 5\,\mathrm{m}$ von der Blende auf einem Schirm aufgefangen. Begründe qualitativ, warum der Durchmesser d des Trefferbildes auf dem Schirm durch Verkleinerung der Blendenöffnung d_0 nicht beliebig klein gemacht werden kann, und schätze mithilfe der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung die Größe der optimalen Blendenöffnung und des zugehörigen kleinstmöglichen Trefferbildes ab.

3.19* Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} .$$

Gib mithilfe der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung eine untere Schranke für die Grundzustandsenergie an.

(Anleitung: Verwende die Aussage von Aufgabe 3.17.)

3.20* Beweise mithilfe der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung, dass für die Grundzustandsenergie des linearen harmonischen Oszillators $E_0 \ge \frac{\hbar\omega}{2}$ gelten muss.

(Anleitung: Beachte, dass für einen Energieeigenzustand des linearen harmonischen Oszillators $\langle X \rangle = 0$, $\langle P \rangle = 0$ gelten muss.)

3.21 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} .$$

Berechne für die Energieeigenzustände des Systems die Erwartungswerte der zu den Operatoren X, X^2, P, P^2 gehörigen Observablen, die Unschärfen Δx, Δp sowie das Unschärfenprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$.

(Anleitung: Verwende die in Aufgabe 2.10 berechneten Energieeigenfunktionen für das unendlich tiefe Kastenpotential [s. Gl. (2.10-2a), (2.10-2b)] und benütze die Formel

$$\int d\xi\, \xi^2 \cos\alpha\xi \;=\; \frac{2\xi}{\alpha^2}\cos\alpha\xi + \frac{\alpha^2\xi^2 - 2}{\alpha^3}\sin\alpha\xi + C\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+.)$$

3.22

(a) Berechne für die Energieeigenzustände des linearen harmonischen Oszillators die Erwartungswerte der zu den Operatoren $X, X^2, X^3, X^4, P, P^2, P^3, P^4$ gehörigen Observablen, die Unschärfen Δx, Δp sowie das Unschärfenprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$.

(b) Verifiziere, dass für die Energieeigenzustände des linearen harmonischen Oszillators $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ gilt (T Operator der kinetischen Energie, V Operator der potentiellen Energie).

(Anleitung: Drücke die Potenzen von X und P durch den Erzeugungsoperator $a^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator a der Oszillatorquanten aus; s. Anhang A.5.)

3.23 Der Zustandsvektor eines linearen harmonischen Oszillators sei zu einem bestimmten Zeitpunkt durch die folgende Linearkombination seiner Energieeigenzustände $|\,0\,\rangle$, $|\,1\,\rangle$ gegeben:

$$|\,\psi\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,0\,\rangle - i\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,\rangle\,.$$

Berechne für diesen Zeitpunkt das Unschärfenprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$.

(Anleitung: Verwende den Oszillatorquanten-Erzeugungsoperator $a^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator a; s. Anhang A.5.)

3.24 $a^\dagger$ sei der Erzeugungsoperator und a der Vernichtungsoperator eines Oszillatorquants. Berechne die Matrix, welche dem linearen Operator

$$T := e^{a^\dagger} a^\dagger a\, e^{-a^\dagger}$$

in der Energiedarstellung des linearen harmonischen Oszillators zugeordnet ist.

3.25

(a) Stellen die kartesischen Komponenten der Geschwindigkeit eines Teilchens der Masse m und elektrischen Ladung q in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$, $B > 0$, paarweise verträgliche Observablen dar?

(b) Falls dies nicht der Fall ist, wie sehen dann die zugehörigen Unbestimmtheitsbeziehungen aus?

(Anleitung: Eine mögliche Form des Vektorpotentials $\vec{A}(\vec{r})$ eines homogenen Magnetfeldes ist $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$ [*Fock-Schwinger-Eichung*].)

3.26 Betrachtet wird das Wasserstoffatom, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen. Der Zustandsvektor sei zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 durch

$$|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{6}\Big\{4\,|\,1\,0\,0\,\rangle + 2\,|\,2\,0\,0\,\rangle - i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle + (1-2i)\,|\,3\,2,-1\,\rangle\Big\}$$

gegeben ($\{|\,nlm_l\,\rangle,\ n \in \mathbb{N};\ l = n-1, n-2, \ldots, 0;\ m_l = l, l-1, \ldots, -l\}$ Energieeigenvektoren des Wasserstoffatoms). Berechne für diesen Zeitpunkt

(a) die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie den Messwert

$$E_n = -E_\mathrm{H}\,\frac{1}{n^2}\,, \quad n \in \mathbb{N}\,; \qquad E_\mathrm{H} := \frac{\hbar^2}{2ma_\mathrm{H}^2}\,,$$

zu finden;

(b) die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie E_1 *oder* E_2 zu finden;

(c) den Erwartungswert der Energie;

(d) die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Bahndrehimpulsquadrats den Messwert

$$b_l = l(l+1)\hbar^2\,, \qquad l \in \mathbb{N}_0$$

zu finden;

(e) die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Bahndrehimpulsquadrats b_0 *oder* b_2 zu finden;

(f) den Erwartungswert des Bahndrehimpulsquadrats;

(g) die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses den Messwert $-\hbar$ zu finden;

(h) den Erwartungswert der z-Komponente des Bahndrehimpulses;

(i)* die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Messgrößenpaares {Energie, Bahndrehimpulsquadrat} das Messwertpaar $\{E_2, b_1\}$ zu finden, und zwar

- (i1) unter der Annahme, dass Energie und Bahndrehimpulsquadrat *gleichzeitig* gemessen werden;
- (i2) unter der Annahme, dass *zuerst* die Energie und *unmittelbar darauf* das Bahndrehimpulsquadrat gemessen wird;
- (i3) unter der Annahme, dass *zuerst* das Bahndrehimpulsquadrat und *unmittelbar darauf* die Energie gemessen wird.

Was zeigen diese Ergebnisse?

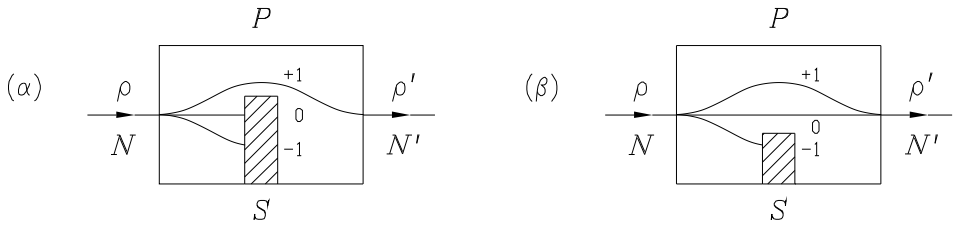
Was erhält man für die unter (a) bis (i) gefragten Größen, wenn als Messzeitpunkt nicht t_0, sondern $t > t_0$ gewählt wird?

(Diese Aufgabe wurde deshalb nicht in Kapitel 9 aufgenommen, da sie auch bei großzügiger Auslegung kaum als *Anwendungsbeispiel* aus der Atomphysik angesehen werden kann.[1] Es handelt sich um eine so genannte „akademische“ Fragestellung, bei der didaktische Gesichtspunkte im Vordergrund stehen: Wie berechnet man Wahrscheinlichkeiten bezüglich *einer* Observablen und bezüglich eines *Satzes* verträglicher Observablen? Wann *addiert* man Wahrscheinlichkeiten, wann *multipliziert* man Wahrscheinlichkeiten? Wie kann man mehrere verträgliche Observablen in der „Praxis“ *zugleich* messen?)

[1] Es lässt sich keine Präparationsvorschrift angeben, welche eine Gesamtheit von Wasserstoffatomen mit dem gegebenen Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ herstellen würde.

Lösungen

3.1



(a) Vor der Umpräparation durch den S-Apparat liege voraussetzungsgemäß eine gemischte Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho = \frac{1}{3}\mathbb{1} \tag{3.1-1}$$

vor. (Führt man an einer solchen Gesamtheit eine Messung der Spinprojektion bzgl. einer *beliebigen* Raumrichtung durch, so erhält man die Messwerte $m\hbar$, $m = +1,\, 0, -1$, mit gleichen relativen Häufigkeiten.)

Zufolge der Umpräparation („Zustandsreduktion“) durch den S-Apparat erhält man eine neue Gesamtheit mit dem Dichteoperator (s. Anhang A.10, Abb. A.10-3)

$$\rho' = \frac{P\rho P}{\mathrm{Sp}\,(\rho P)}\ , \tag{3.1-2}$$

wobei P der dem betreffenden S-Apparat zugeordnete Projektionsoperator ist:

$$(\alpha) \qquad P = |{+1}, S\rangle\langle{+1}, S|\,; \tag{3.1-3a}$$

$$(\beta) \qquad P = |{+1}, S\rangle\langle{+1}, S| + |0, S\rangle\langle 0, S| = \mathbb{1} - |{-1}, S\rangle\langle{-1}, S|\,. \tag{3.1-3b}$$

Mit (3.1-1) und $P^2 = P$ folgt aus (3.1-2)

$$\rho' = \frac{P}{\mathrm{Sp}\,P}\ , \tag{3.1-4}$$

also

$$(\alpha) \qquad \rho' = |{+1}, S\rangle\langle{+1}, S|\,; \tag{3.1-5a}$$

$$(\beta) \qquad \rho' = |{+1}, S\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle{+1}, S| + |0, S\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle 0, S|\,. \tag{3.1-5b}$$

Es gilt

$$\mathrm{Sp}\,\rho = \frac{1}{3}\,\mathrm{Sp}\,\mathbb{1} = 1\,, \qquad \mathrm{Sp}\,\rho' = \frac{\mathrm{Sp}\,P}{\mathrm{Sp}\,P} = 1\,; \tag{3.1-6}$$

$$\mathrm{Sp}\,\rho^2 = \frac{1}{9}\,\mathrm{Sp}\,\mathbb{1} = \frac{1}{3} < 1\,, \tag{3.1-7}$$

$$\mathrm{Sp}\,\rho'^2 = \frac{\mathrm{Sp}\,P}{(\mathrm{Sp}\,P)^2} = \frac{1}{\mathrm{Sp}\,P} = \begin{cases} (\alpha) & 1 \\ (\beta) & \frac{1}{2} < 1 \end{cases}\ . \tag{3.1-8}$$

Die Ergebnisse (3.1-7), (3.1-8) bedeuten, dass vor der Umpräparation und im Fall (β) auch nach der Umpräparation eine gemischte Gesamtheit vorliegt. Im Fall (α) hingegen liegt nach der Umpräparation eine reine Gesamtheit vor, die durch einen Zustandsvektor, nämlich $|\,\chi'\rangle = |{+1}, S\,\rangle$, beschrieben werden kann.

Die Ergebnisse (3.1-5a), (3.1-5b) hätte man natürlich auch ohne Rechnung sofort anschreiben können.

(b) Nach Abb. A.10-3 ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen den S-Apparat „passiert“, für eine Gesamtheit mit dem Dichteoperator (3.1-1) durch

$$W = \mathrm{Sp}\,(\rho P) = \frac{1}{3}\,\mathrm{Sp}\,P \tag{3.1-9}$$

gegeben. Somit folgt für die gesuchte Intensität $N' = N\,W$

$$(\alpha)\quad N' = \frac{N}{3}\,; \qquad (\beta)\quad N' = \frac{2N}{3}\,. \tag{3.1-10}$$

Auch diese Ergebnisse hätte man unmittelbar anschreiben können.

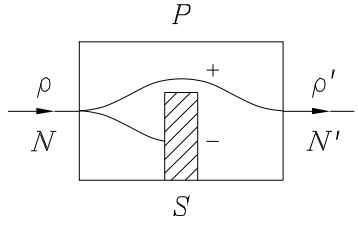
Bemerkungen

Je nachdem, ob unmittelbar hinter dem S-Apparat ein Zähler aufgestellt wird, welcher N' registriert, oder ob zwischen S-Apparat und Zähler noch weitere Apparate „dazwischengeschaltet“ werden, sprechen wir von einer Messung (im engeren Sinne) oder von einer Umpräparation.

Die Zahl N muss hinreichend groß sein (theoretisch $N \to \infty$), damit die relativen Häufigkeiten den Wahrscheinlichkeiten gleich gesetzt werden können. Durch Wahl einer geeigneten (hinreichend großen) Zeiteinheit kann dies auch für einen schwachen Strahl erreicht werden. Die Zahl N wird in einem „Vorversuch“ mit einem Zähler gemessen.

S. auch die Aufgaben 3.4 bis 3.9.

3.2



(a) Zufolge der Umpräparation („Zustandsreduktion“) durch den S-Apparat erhält man eine neue Gesamtheit mit dem Dichteoperator ρ' Gl. (3.1-2) (s. Anhang A.10, Abb. A.10-3), wobei $P = |{+S}\,\rangle\langle{+S}\,|$ der dem S-Apparat zugeordnete Projektionsoperator ist. Mit

$$\rho = |{+S}\,\rangle\,\frac{1}{4}\,\langle{+S}\,| + |{-S}\,\rangle\,\frac{3}{4}\,\langle{-S}\,| \tag{3.2-1}$$

ergibt sich

$$\rho' = P = |{+S}\,\rangle\langle{+S}\,|\,. \tag{3.2-2}$$

Durch die Umpräparation erhält man eine reine Gesamtheit mit dem Zustandsvektor $|\,\chi'\rangle = |+S\rangle$.

(b) Nach Abb. A.10-3 gilt

$$W = \langle\, P\,\rangle = \mathrm{Sp}\,(\rho P) = \frac{1}{4}\,, \quad \text{also} \quad N' = \frac{N}{4}\,. \tag{3.2-3}$$

Bemerkungen

Der Dichteoperator-Formalismus stellt eine mathematische Formalisierung der in Tab. A.10-1 angegebenen einfachen Gesetze (1) bis (5) für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden dar. Für den Gemischzustand $|+S\rangle$ ergibt sich nach Gesetz (1) die Wahrscheinlichkeit

$$W_+ = |\langle +S\,|+S\rangle|^2 = 1\,, \tag{3.2-4}$$

für den Gemischzustand $|-S\rangle$ ergibt sich analog

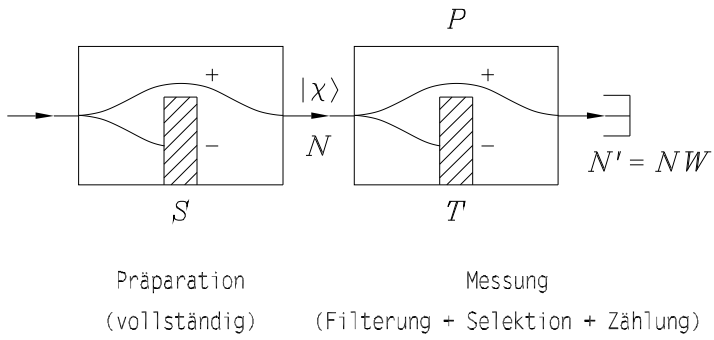
$$W_- = |\langle +S\,|-S\rangle|^2 = 0\,. \tag{3.2-5}$$

Diese Wahrscheinlichkeiten sind nach Gesetz (5) mit den statistischen Gewichten der Gemischzustände zu mitteln, womit man wieder das Ergebnis (3.2-3) erhält:

$$W = \frac{1}{4}\,W_+ + \frac{3}{4}\,W_- = \frac{1}{4}\,. \tag{3.2-6}$$

S. die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1 und s. Aufgabe 6.16.

3.3



Nach Anhang A.10, Abb. A.10-3 gilt $W = \langle\, P\,\rangle$, wobei P der dem T-Apparat zugeordnete Projektionsoperator ist, und der Erwartungswert bzgl. des Zustandes *vor* der Messung zu bilden ist:

$$W = \langle\, P\,\rangle = \langle\, \chi\,|\,P\,|\,\chi\,\rangle \quad \text{mit} \quad |\,\chi\,\rangle = |+S\,\rangle\,, \quad P = |+T\,\rangle\langle +T\,| \;\Rightarrow \tag{3.3-1}$$

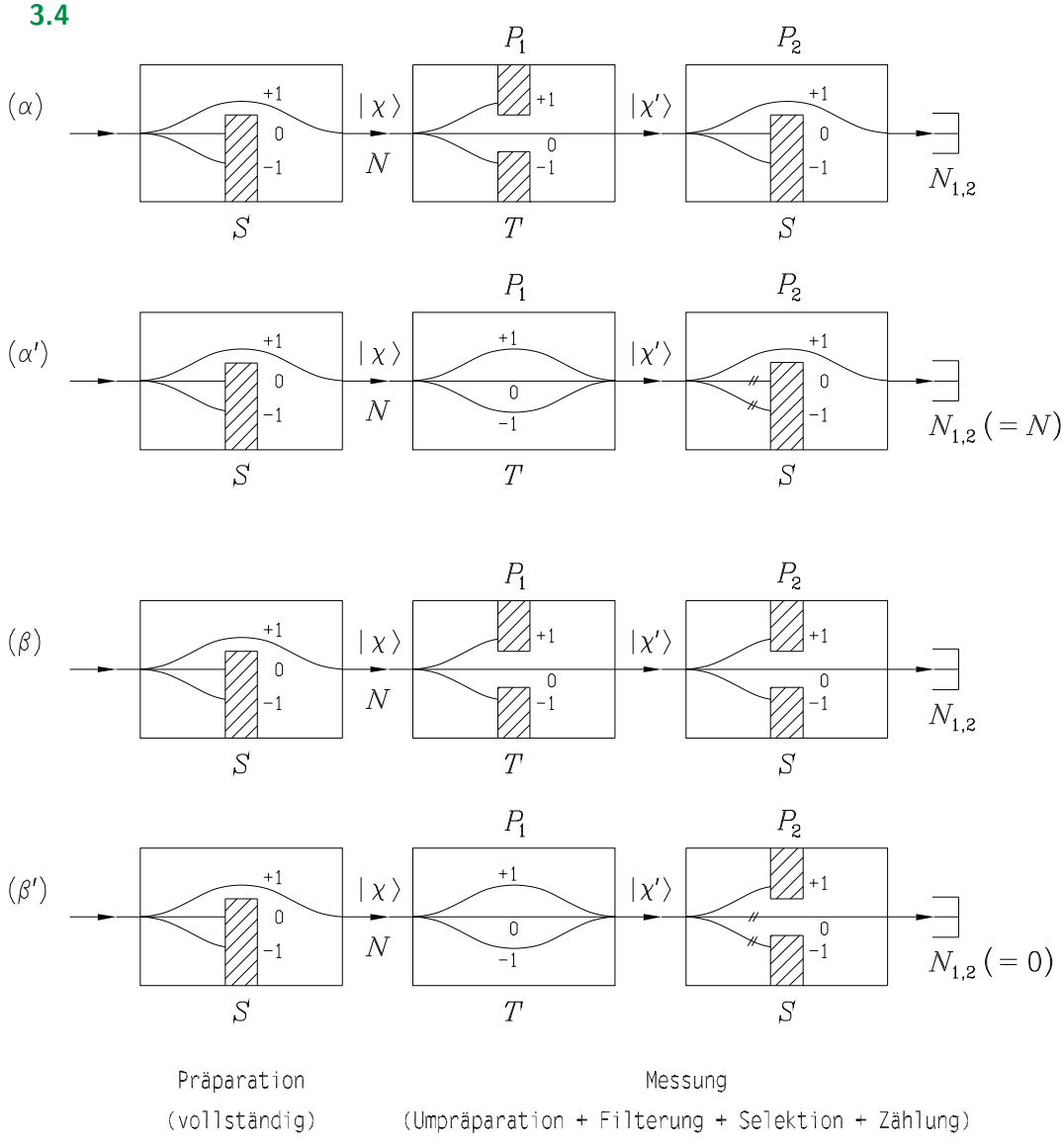
$$W = |\langle +T\,|+S\,\rangle|^2\,, \qquad N' = NW = N\,|\langle +T\,|+S\,\rangle|^2\,. \tag{3.3-2}$$

Bemerkungen

Die Wahrscheinlichkeit W kann aufgrund des Gesetzes (1) von Tabelle A.10-1 sofort angeschrieben werden: Wegen $|+S\rangle = |+T\rangle\langle+T|+S\rangle + |-T\rangle\langle-T|+S\rangle$ ist $\langle+T|+S\rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das System im (End-)Zustand $|+T\rangle$ anzutreffen, wenn der präparierte Zustand $|\chi\rangle = |+S\rangle$ war.

Bezüglich N s. die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.23.

3.4



Nach Anhang A.10, Abb. A.10-3 ändert sich der Zustandsvektor der von der Präpa-

riereinrichtung hergestellten reinen Gesamtheit durch die Umpräparation („Zustandsreduktion“) gemäß

$$|\,\chi'\rangle = \frac{P_1\,|\,\chi\rangle}{\sqrt{\langle\,\chi\,|\,P_1\,|\,\chi\,\rangle}}\;, \tag{3.4-1}$$

und die Wahrscheinlichkeiten für das „Passieren“ der Apparate sind:

Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen, das in den zweiten bzw. in den dritten Apparat „eintritt“, aus dem betreffenden Apparat auch wieder „austritt“:

$$W_1 = \langle\,\chi\,|\,P_1\,|\,\chi\,\rangle \quad \text{bzw.} \quad W_2 = \langle\,\chi'\,|\,P_2\,|\,\chi'\,\rangle = \frac{\langle\,\chi\,|\,P_1P_2P_1\,|\,\chi\,\rangle}{\langle\,\chi\,|\,P_1\,|\,\chi\,\rangle}\;; \tag{3.4-2}$$

Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen, das in den zweiten Apparat „eintritt“, diesen und auch den dritten Apparat „passiert“:

$$W_{1,2} = W_1\,W_2 = \langle\,\chi\,|\,P_1P_2P_1\,|\,\chi\,\rangle\,. \tag{3.4-3}$$

Die gesuchte Intensität ist somit durch

$$N_{1,2} = N\,W_{1,2} = N\,\langle\,\chi\,|\,P_1P_2P_1\,|\,\chi\,\rangle \tag{3.4-4}$$

gegeben. In den vorliegenden Versuchen (α), (α'), (β), (β') ist $|\,\chi\,\rangle = |{+1}, S\,\rangle$ und es folgt

$$\begin{aligned}
(\alpha)\qquad & P_1 = |\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,, \qquad P_2 = |{+1},S\,\rangle\langle{+1},S\,|\,;\\
& N_{1,2} = N\underbrace{\langle{+1},S\,|}_{\langle\,\chi\,|}\underbrace{|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|}_{P_1}\underbrace{|{+1},S\,\rangle\langle{+1},S\,|}_{P_2}\underbrace{|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|}_{P_1}\underbrace{|{+1},S\,\rangle}_{|\,\chi\,\rangle}\,,\\
& N_{1,2} = N\,|\langle{+1},S\,|\,0,T\,\rangle|^4\,;
\end{aligned} \tag{3.4-5}$$

$$\begin{aligned}
(\alpha')\qquad & P_1 = \mathbb{1} \quad \text{(keine echte Umpräparation: } |\,\chi'\,\rangle = |\,\chi\,\rangle),\\
& P_2 = |{+1},S\,\rangle\langle{+1},S\,|\,;\\
& N_{1,2} = N\underbrace{\langle{+1},S\,|}_{\langle\,\chi\,|}\,\mathbb{1}\,\underbrace{|{+1},S\,\rangle\langle{+1},S\,|}_{P_2}\,\mathbb{1}\,\underbrace{|{+1},S\,\rangle}_{|\,\chi\,\rangle}\,,\\
& N_{1,2} = N\,.
\end{aligned} \tag{3.4-6}$$

Da nach der schwarzschen Ungleichung für nichtparallele Einheitsvektoren $|\,\varphi\,\rangle$, $|\,\chi\,\rangle$ die Beziehung $|\langle\,\varphi\,|\,\chi\,\rangle| < 1$ gelten muss, ist $N_{1,2}$ im Fall (α') größer als im Fall (α). Die Herausnahme der Masken im zweiten Apparat führt somit zu einer *Erhöhung* der Intensität $N_{1,2}$.

Das Ergebnis von Gl. (3.4-6) bedeutet natürlich, dass es im zweiten S-Apparat im Fall (α') überhaupt keine Aufspaltung des „Strahls“ in „virtuelle Teilstrahlen“ mehr gibt. (In der Abbildung wurden die betreffenden „virtuellen Wege“ deshalb durchgestrichen.)

Analog erhalten wir

$$(\beta) \qquad P_1 = |\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,, \qquad P_2 = |\,0,S\,\rangle\langle\,0,S\,|\,;$$
$$N_{1,2} = N\,|\langle\,0,S\,|\,0,T\,\rangle|^2\,|\langle\,0,T\,|{+1},S\,\rangle|^2\,; \tag{3.4-7}$$

$$(\beta') \qquad P_1 = \mathbb{1} \quad \text{(keine echte Umpräparation: } |\,\chi'\,\rangle = |\,\chi\,\rangle\text{)},$$
$$P_2 = |\,0,S\,\rangle\langle\,0,S\,|\,;$$
$$N_{1,2} = 0\,. \tag{3.4-8}$$

Da der Ausdruck (3.4-7) i. Allg. von null verschieden ist (s. unten), ist $N_{1,2}$ im Fall (β') i. Allg. *kleiner* als im Fall (β). Die Entfernung der Masken im zweiten Apparat von (β) führt somit i. Allg. zu einer *Verminderung*, jedenfalls aber zu keiner Erhöhung der Intensität. Da im Fall (β') $|\,\chi'\,\rangle = |{+1},S\,\rangle$ ist, gibt es im zweiten S-Apparat keine Aufspaltung mehr, alle Teilchen werden in der Maske bei $+1$ absorbiert.

Bemerkungen

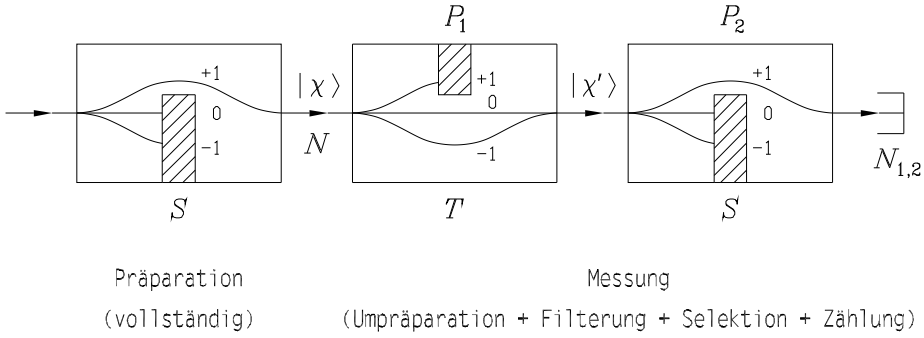
Wie man mithilfe der Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ von Anhang A.2, Gl. (A.2-54) zeigen kann, ist der Ausdruck (3.4-7) nur dann null, falls die (als verschieden vorausgesetzten) Feldgradientenrichtungen von S, T entgegengesetzt gleich oder orthogonal sind. (S. dazu die Vorgangsweise bei den Aufgaben 6.23 bis 6.25.)

Die Aufgabe illustriert den Effekt der Interferenz der Wahrscheinlichkeitsamplituden für die gedachten („virtuellen") alternativen „Wege". Die Situation ist vollkommen analog wie beim Doppelspaltversuch: Bei Öffnen des zweiten Spaltes tritt Interferenz der „virtuellen Wege" auf, und es kommt zu einem Interferenzbild auf dem Schirm. Gegenüber der Intensitätsverteilung bei einem einzigen offenen Spalt gibt es dann zwar Stellen, an denen die Intensität größer ist, aber auch Stellen, an denen sie kleiner ist. Öffnen des zweiten Spaltes führt also zur *Intensitätsverminderung* an diesen Stellen.

Die Aufgabe kann auch mithilfe der Gesetze für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden von Tabelle A.10-1 gelöst werden. Führe diese Rechnung durch und zeige, dass sich wieder (3.4-5) bis (3.4-8) ergibt.

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.24.

3.5



Nach Gl. (3.4-2) bis (3.4-4) gilt für eine reine Gesamtheit

$$N_{1,2} = N \langle P_1 P_2 P_1 \rangle \,. \tag{3.5-1}$$

Den Erwartungswert kann man entweder mithilfe des Zustandsvektors $|\chi\rangle$ oder mithilfe des entsprechenden Dichteoperators $\rho = |\chi\rangle\langle\chi|$ anschreiben:

$$N_{1,2} = N \langle \chi | P_1 P_2 P_1 | \chi \rangle \quad \text{bzw.} \quad N_{1,2} = N \,\mathrm{Sp}\,(\rho P_1 P_2 P_1) \,. \tag{3.5-2}$$

Im gegebenen Beispiel ist

$$|\chi\rangle = |{+1}, S\rangle \,,$$

$$P_1 = |0,T\rangle\langle 0,T| + |{-1},T\rangle\langle {-1},T| \,, \quad P_2 = |{+1},S\rangle\langle {+1},S|$$

und es folgt mit (3.5-2)

$$\begin{aligned} N_{1,2} &= N \langle {+1},S | P_1 P_2 P_1 | {+1},S \rangle = N \Big[\langle {+1},S | P_1 | {+1},S \rangle\Big]^2 \\ &= N \Big[\langle {+1},S | 0,T\rangle\langle 0,T | {+1},S\rangle + \langle {+1},S | {-1},T\rangle\langle {-1},T | {+1},S\rangle\Big]^2 , \\ N_{1,2} &= N \Big[\, |\langle 0,T | {+1},S\rangle|^2 + |\langle {-1},T | {+1},S\rangle|^2\Big]^2 . \end{aligned} \tag{3.5-3}$$

Geht man von der Formel mit dem Dichteoperator aus, so ist es zweckmäßig, für die Spurbildung die Basis $\{|mS\rangle,\ m = +1,\ 0, -1\}$ oder die Basis $\{|mT\rangle,\ m = +1,\ 0, -1\}$ zu benützen. Bei Verwendung der ersteren Basis ergibt sich sofort wieder die Ausgangsgleichung zu (3.5-3):

$$\begin{aligned} N_{1,2} &= N \Big[\underbrace{\langle {+1},S|\rho}_{\langle {+1},S|} P_1 P_2 P_1 | {+1},S\rangle + \underbrace{\langle 0,S|\rho}_{\emptyset} P_1 P_2 P_1 | 0,S\rangle + \underbrace{\langle {-1},S|\rho}_{\emptyset} P_1 P_2 P_1 | {-1},S\rangle\Big] \\ &= N \langle {+1},S | P_1 P_2 P_1 | {+1},S \rangle \,. \end{aligned}$$

Verwendet man die Basis $\{|mT\rangle,\ m = +1,\ 0, -1\}$, so erhält man

$$\begin{aligned} N_{1,2} &= N \Big[\langle {+1},T|\rho P_1 P_2 \underbrace{P_1 | {+1},T\rangle}_{\emptyset} + \langle 0,T|\rho P_1 P_2 \underbrace{P_1 | 0,T\rangle}_{|0,T\rangle} + \langle {-1},T|\rho P_1 P_2 \underbrace{P_1 | {-1},T\rangle}_{|{-1},T\rangle}\Big] \\ &= N \Big[\langle 0,T | {+1},S\rangle\langle {+1},S | P_1 | {+1},S\rangle\langle {+1},S | 0,T\rangle \\ &\qquad + \langle {-1},T | {+1},S\rangle\langle {+1},S | P_1 | {+1},S\rangle\langle {+1},S | {-1},T\rangle\Big] \\ &= N \langle {+1},S | P_1 | {+1},S\rangle \Big[\, |\langle 0,T | {+1},S\rangle|^2 + |\langle {-1},T | {+1},S\rangle|^2\Big] . \end{aligned}$$

Mit

$$\langle {+1},S | P_1 | {+1},S\rangle = |\langle 0,T | {+1},S\rangle|^2 + |\langle {-1},T | {+1},S\rangle|^2$$

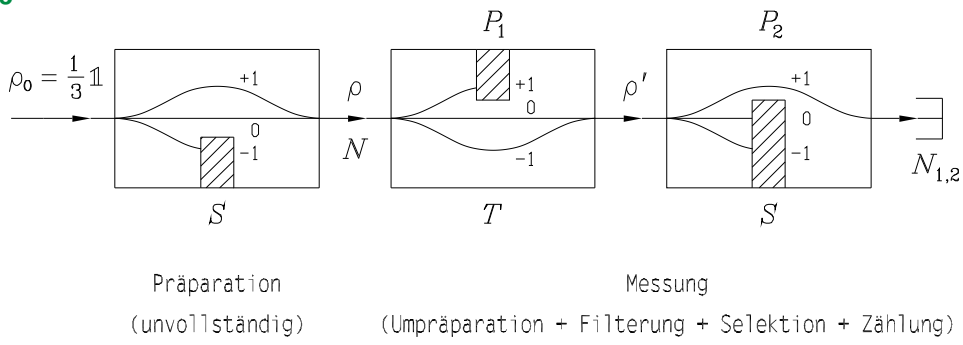
folgt dann wieder (3.5-3).

Bemerkungen

Die Aufgabe kann auch mithilfe der Gesetze für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden von Anhang A.10, Tabelle A.10-1 gelöst werden. Führe die Berechnung von $N_{1,2}$ mithilfe der Gesetze (1) bis (5) von Tabelle A.10-1 durch und zeige, dass sich wieder (3.5-3) ergibt.

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.24.

3.6*



Die Formel (3.5-1) bzw. (3.5-2) (mit ρ), welche zunächst nur für reine Zustände abgeleitet wurde (s. Aufgabe 3.4 und Aufgabe 3.5), ist auch für echte statistische Gemische ($\mathrm{Sp}\,\rho^2 < 1$) gültig, denn nach Anhang A.10, Abb. A.10-3 gilt für den Dichteoperator der durch die Umpräparation hergestellten neuen Gesamtheit

$$\rho' = \frac{P_1 \rho P_1}{\mathrm{Sp}\,(\rho P_1)} \tag{3.6-1}$$

und es folgt für die oberhalb von Gl. (3.4-2), (3.4-3) definierten Wahrscheinlichkeiten mit $\mathrm{Sp}\,(AB) = \mathrm{Sp}\,(BA)$

$$W_1 = \mathrm{Sp}\,(\rho P_1)\,, \qquad W_2 = \mathrm{Sp}\,(\rho' P_2) = \frac{\mathrm{Sp}\,(\rho P_1 P_2 P_1)}{\mathrm{Sp}\,(\rho P_1)}\,, \tag{3.6-2}$$

$$W_{1,2} = W_1 W_2 = \mathrm{Sp}\,(\rho P_1 P_2 P_1) = \langle\, P_1 P_2 P_1 \,\rangle\,. \tag{3.6-3}$$

Beim vorliegenden Versuch ist (s. die Lösung (3.1-5b) von Aufgabe 3.1 (β))

$$\rho = |{+1}, S\rangle\, \frac{1}{2}\, \langle {+1}, S| + |0, S\rangle\, \frac{1}{2}\, \langle 0, S|\,, \tag{3.6-4}$$

$$P_1 = |0, T\rangle\langle 0, T| + |{-1}, T\rangle\langle {-1}, T|\,, \qquad P_2 = |{+1}, S\rangle\langle {+1}, S|\,. \tag{3.6-5}$$

Führt man in (3.6-3) die Spurbildung in der Basis $\{\,|\,mS\,\rangle,\ m = +1,\ 0, -1\,\}$ durch, so

folgt wegen

$$\langle +1, S \,|\, \rho = \frac{1}{2} \langle +1, S \,|\,, \qquad \langle 0, S \,|\, \rho = \frac{1}{2} \langle 0, S \,|\,, \qquad \langle -1, S \,|\, \rho = \emptyset \tag{3.6-6}$$

$$N_{1,2} = N \left[\frac{1}{2} \langle +1, S \,|\, P_1 P_2 P_1 \,|\, +1, S \rangle + \frac{1}{2} \langle 0, S \,|\, P_1 P_2 P_1 \,|\, 0, S \rangle \right]. \tag{3.6-7}$$

Mit $\langle mS \,|\, P_1 P_2 P_1 \,|\, mS \rangle = |\langle +1, S \,|\, P_1 \,|\, mS \rangle|^2$ ergibt sich daraus

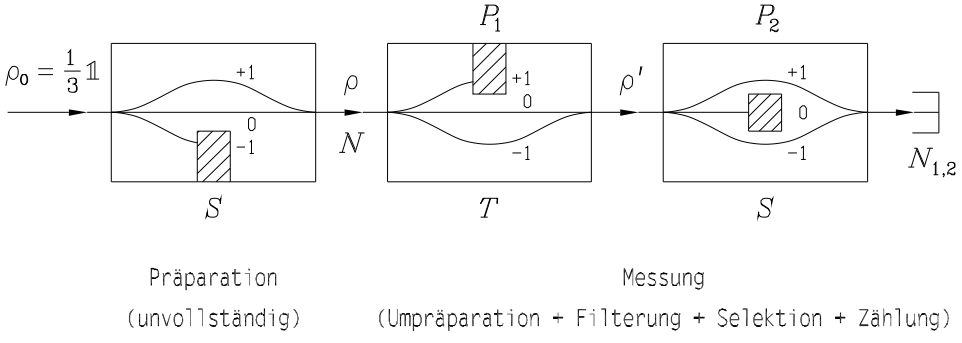
$$\begin{aligned} N_{1,2} = N \Bigg[& \frac{1}{2} \Big(|\langle 0, T \,|\, +1, S \rangle|^2 + |\langle -1, T \,|\, +1, S \rangle|^2 \Big)^2 \\ & + \frac{1}{2} \Big| \langle +1, S \,|\, 0, T \rangle \langle 0, T \,|\, 0, S \rangle + \langle +1, S \,|\, -1, T \rangle \langle -1, T \,|\, 0, S \rangle \Big|^2 \Bigg]. \end{aligned} \tag{3.6-8}$$

Bemerkungen

Die Aufgabe kann auch mithilfe der Gesetze für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden von Tabelle A.10-1 gelöst werden. Zunächst berechnet man $N_{1,2}$ unter der Annahme eines reinen Zustandes $|\,\chi\rangle = |+1, S\rangle$, hierauf führt man die analoge Rechnung für den reinen Zustand $|\,\chi\rangle = |\,0, S\rangle$ durch. Schließlich mittelt man gemäß Gesetz (5) mit den statistischen Gewichten $p_{+1,S} = \frac{1}{2}$, $p_{0,S} = \frac{1}{2}$, wodurch man (3.6-8) erhält.

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.24.

3.7*



Die Aufgabe ist vollkommen analog zu Aufgabe 3.6, es ist lediglich in Formel (3.6-7) anstelle von P_2 Gl. (3.6-5) der Projektionsoperator

$$P_2 = |+1, S\rangle\langle +1, S| + |-1, S\rangle\langle -1, S| \tag{3.7-1}$$

einzusetzen. Mit P_1 Gl. (3.6-5) und (3.7-1) gibt Gl. (3.6-7) insgesamt $8 + 8 = 16$ Terme, welche sich in der folgenden Form zusammenfassen lassen:

$$N_{1,2} = N\Big\{\frac{1}{2}\Big[\Big(|\langle 0,T\,|{+1},S\rangle|^2 + |\langle -1,T\,|{+1},S\rangle|^2\Big)^2 + \Big|\langle -1,S\,|\,0,T\rangle\langle 0,T\,|{+1},S\rangle + \langle -1,S\,|{-1},T\rangle\langle -1,T\,|{+1},S\rangle\Big|^2\Big] + \frac{1}{2}\Big[\Big|\langle +1,S\,|\,0,T\rangle\langle 0,T\,|\,0,S\rangle + \langle +1,S\,|{-1},T\rangle\langle -1,T\,|\,0,S\rangle\Big|^2 + \Big|\langle -1,S\,|\,0,T\rangle\langle 0,T\,|\,0,S\rangle + \langle -1,S\,|{-1},T\rangle\langle -1,T\,|\,0,S\rangle\Big|^2\Big]\Big\}. \tag{3.7-2}$$

Bemerkungen

Dies ist das einfachste Gedankenexperiment mit Stern-Gerlach-Apparaten, bei dem *alle Arten der Kombination quantenmechanischer Wahrscheinlichkeitsamplituden* auftreten:

(1) Messung an gemischter Gesamtheit $\leftrightarrow$ Mittelung von Wahrscheinlichkeiten mit statistischen Gewichten;

(2) Interferenz von „virtuellen Wegen“ bei gegebenem „Anfangs-“ und „Endzustand“ $\leftrightarrow$ Addition von Wahrscheinlichkeitsamplituden;

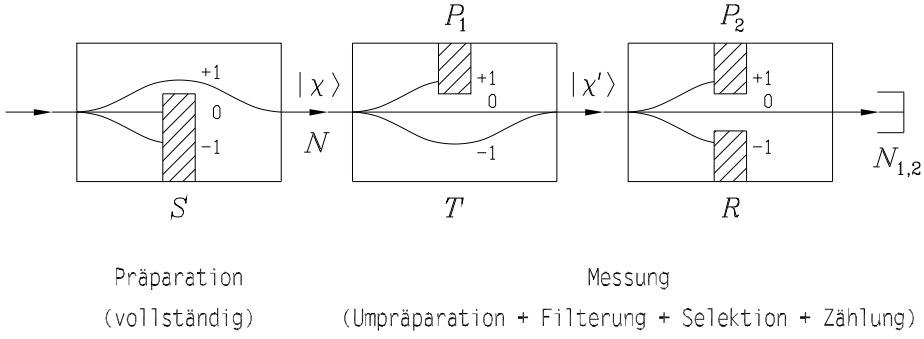
(3) Zusammensetzung der „virtuellen Wege“ aus „Wegteilen“ $\leftrightarrow$ Multiplikation von Wahrscheinlichkeitsamplituden;

(4) Mehrere „Endzustände“ zu einem „Ereignis“ zusammengefasst $\leftrightarrow$ Addition von Wahrscheinlichkeiten.

Leite das Ergebnis von Gl. (3.7-2) auch auf diesem Wege, d. h. unter Verwendung der Gesetze (1) bis (5) von Tabelle A.10-1, ab.

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.24.

3.8



Mit Formel (3.4-4) und

$$|\chi\rangle = |{+1},S\rangle\,,$$

$$P_1 = |\,0,T\rangle\langle 0,T\,| + |{-1},T\rangle\langle -1,T\,|\,, \quad P_2 = |\,0,R\rangle\langle 0,R\,|$$

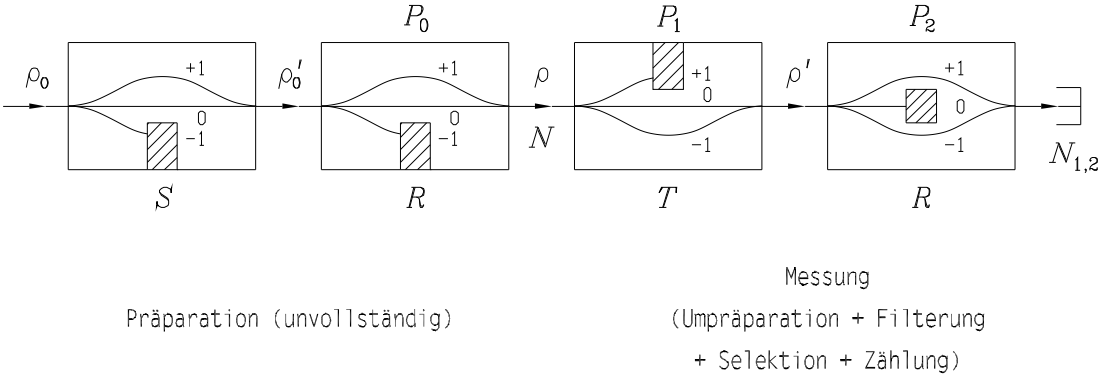
ergibt sich nach Ausmultiplizieren und Zusammenfassen

$$N_{1,2} = N\Big|\langle 0,R\,|\,0,T\rangle\langle 0,T\,|{+1},S\rangle + \langle 0,R\,|{-1},T\rangle\langle -1,T\,|{+1},S\rangle\Big|^2. \tag{3.8-1}$$

Bemerkungen

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1. Siehe auch Aufgabe 6.25.

3.9*



(a) Nach Aufgabe 3.1(β) ist (s. Gl. (3.1-5b))

$$\rho_0' = |{+1,S}\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle{+1,S}| + |{0,S}\rangle\,\frac{1}{2}\,\langle{0,S}|\,. \tag{3.9-1}$$

Mit dem Projektionsoperator

$$P_0 = |{+1,R}\rangle\langle{+1,R}| + |{0,R}\rangle\langle{0,R}| \tag{3.9-2}$$

erhält man daraus durch nochmalige „Zustandsreduktion“ gemäß Abb. A.10-3 von Anhang A.10 den Dichteoperator

$$\rho = \frac{P_0\rho_0'P_0}{\mathrm{Sp}\,(\rho_0'P_0)} = |\,\chi_1\rangle\,p_1\,\langle\,\chi_1| + |\,\chi_2\rangle\,p_2\,\langle\,\chi_2| \tag{3.9-3}$$

mit den auf eins normierten Gemischzuständen

$$|\,\chi_1\rangle = \frac{P_0\,|{+1,S}\rangle}{\sqrt{\langle{+1,S}|\,P_0\,|{+1,S}\rangle}}\,, \qquad |\,\chi_2\rangle = \frac{P_0\,|{0,S}\rangle}{\sqrt{\langle{0,S}|\,P_0\,|{0,S}\rangle}} \tag{3.9-4a}$$

und den zugehörigen statistischen Gewichten

$$p_1 = \frac{\frac{1}{2}\langle{+1,S}|\,P_0\,|{+1,S}\rangle}{\mathrm{Sp}\,(\rho_0'P_0)} = \frac{\langle{+1,S}|\,P_0\,|{+1,S}\rangle}{\langle{+1,S}|\,P_0\,|{+1,S}\rangle + \langle{0,S}|\,P_0\,|{0,S}\rangle}\,, \tag{3.9-4b}$$

$$p_2 = \frac{\langle{0,S}|\,P_0\,|{0,S}\rangle}{\langle{+1,S}|\,P_0\,|{+1,S}\rangle + \langle{0,S}|\,P_0\,|{0,S}\rangle}\,. \tag{3.9-4c}$$

Das Einsetzen von P_0 in die Gleichungen (3.9-4) überlasse ich dem Leser.

Da unter den in der Angabe getroffenen Annahmen $\langle{+1,S}|\,P_0\,|{0,S}\rangle \neq 0$ gilt, sind die Gemischzustände *nicht orthogonal* (s. unten).

(b) Nach Gl. (3.6-2), (3.6-3) erhält man für die gesuchte Intensität unter Verwendung der Aussage von Aufgabe 1.8

$$\begin{aligned} N_{1,2} &= N\,\mathrm{Sp}\,(\rho P_1 P_2 P_1) \\ &= N\Big\{\mathrm{Sp}\Big[\,|\,\chi_1\rangle\, p_1\,\langle\,\chi_1\,|\,P_1P_2P_1\Big] + \mathrm{Sp}\Big[\,|\,\chi_2\rangle\, p_2\,\langle\,\chi_2\,|\,P_1P_2P_1\Big]\Big\} \\ &= N\Big\{p_1\langle\,\chi_1\,|\,P_1P_2P_1\,|\,\chi_1\rangle + p_2\langle\,\chi_2\,|\,P_1P_2P_1\,|\,\chi_2\rangle\Big\} \end{aligned} \tag{3.9-5}$$

mit

$$P_1 = |\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,| + |-1,T\,\rangle\langle -1,T\,|\,, \tag{3.9-6a}$$

$$P_2 = |+1,R\,\rangle\langle +1,R\,| + |-1,R\,\rangle\langle -1,R\,|\,. \tag{3.9-6b}$$

Nach einer analogen Rechnung wie in Aufgabe 3.6 folgt daraus

$$\begin{aligned} N_{1,2} = N\Big\{ & p_1\Big[\Big|\langle +1,R\,|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,\chi_1\rangle + \langle +1,R\,|-1,T\,\rangle\langle -1,T\,|\,\chi_1\rangle\Big|^2 \\ & + \Big|\langle -1,R\,|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,\chi_1\rangle + \langle -1,R\,|-1,T\,\rangle\langle -1,T\,|\,\chi_1\rangle\Big|^2\Big] \\ & + p_2\Big[\Big|\langle +1,R\,|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,\chi_2\rangle + \langle +1,R\,|-1,T\,\rangle\langle -1,T\,|\,\chi_2\rangle\Big|^2 \\ & + \Big|\langle -1,R\,|\,0,T\,\rangle\langle\,0,T\,|\,\chi_2\rangle + \langle -1,R\,|-1,T\,\rangle\langle -1,T\,|\,\chi_2\rangle\Big|^2\Big]\Big\}\,. \end{aligned} \tag{3.9-7}$$

Bemerkungen

Dass die Gemischzustände $|\,\chi_1\rangle$, $|\,\chi_2\rangle$ unter den in der Angabe getroffenen Annahmen nicht orthogonal sein können, lässt sich mithilfe der Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ von Anhang A.2, Gl. (A.2-54) zeigen. (S. dazu die Vorgangsweise bei den Aufgaben 6.23 bis 6.25.) In Aufgabe 6.25 werden $|\,\chi_1\rangle$, $|\,\chi_2\rangle$, p_1, p_2 und $N_{1,2}$ für konkrete Feldgradientenrichtungen berechnet.

Bezüglich N siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 3.1.

3.10 Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Teilchenimpulses einen Messwert aus dem Intervall $(-\hbar a, +\hbar a)$ zu finden:

$$W = \int_{-\hbar a}^{+\hbar a} dp\,|\langle\,p\,|\,\psi\,\rangle|^2 = \int_{-\hbar a}^{+\hbar a} dp\,|\widetilde{\psi}(p)|^2\,. \tag{3.10-1}$$

Voraussetzung für die Gültigkeit dieser Formel ist, dass die Zustandsfunktion auf eins normiert ist:

$$\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\,|\psi(x)|^2 = |N|^2 \int_0^{+\infty} dx\,x^2 e^{-2ax} = |N|^2\,\frac{2!}{(2a)^3} = 1 \quad \Rightarrow$$

$$|N| = 2a^{3/2} = N \quad (N \text{ positiv reell gewählt}). \tag{3.10-2}$$

Fouriertransformation der auf eins normierten Zustandsfunktion in der Ortsdarstellung liefert die für (3.10-1) benötigte Zustandsfunktion in der Impulsdarstellung:

$$\widetilde{\psi}(p) \equiv \langle\, p \,|\, \psi \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\, \langle\, p \,|\, x \,\rangle \langle\, x \,|\, \psi \,\rangle = \frac{2a^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{0}^{+\infty} dx\, x \exp\Big[-\Big(\frac{i}{\hbar}\, p + a\Big)x\Big]\,,$$

$$\widetilde{\psi}(p) = \frac{2a^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \frac{\hbar^2}{[ip + \hbar a]^2}\,, \qquad |\widetilde{\psi}(p)|^2 = \frac{2(\hbar a)^3}{\pi}\, \frac{1}{[p^2 + (\hbar a)^2]^2}\,. \tag{3.10-3}$$

Unter Verwendung des in der Angabe angeschriebenen unbestimmten Integrals folgt damit

$$W = \frac{2(\hbar a)^3}{\pi} \int\limits_{-\hbar a}^{+\hbar a} \frac{dp}{[p^2 + (\hbar a)^2]^2} = \frac{1}{\pi} + \frac{1}{2} = 0{,}818\,. \tag{3.10-4}$$

3.11

(a) Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie des Teilchens den Messwert E_{n-1} zu erhalten:

$$W_{n-1} = |\langle\, n-1 \,|\, \psi \,\rangle|^2\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,. \tag{3.11-1}$$

Voraussetzung für die Gültigkeit dieser Formel ist, dass sowohl der Zustandsvektor als auch die Energieeigenvektoren auf eins normiert sind. Für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle\, n-1 \,|\, \psi \,\rangle$ gilt dann mit den Energieeigenfunktionen u_{n-1} von Gl. (2.10-2)

$$c_{n-1} := \langle\, n-1 \,|\, \psi \,\rangle = \int\limits_{-a}^{+a} dx\, u^*_{n-1}(x)\, \psi(x)\,. \tag{3.11-2}$$

Normierung von ψ:

$$\langle\, \psi \,|\, \psi \,\rangle = \int\limits_{-a}^{+a} dx\, |\psi(x)|^2 = |N|^2 \int\limits_{-a}^{+a} dx\, (a^2 - x^2)^2 = |N|^2\, \frac{16a^5}{15} = 1 \quad \Rightarrow$$

$$|N| = \frac{\sqrt{15}}{4}\, a^{-5/2} = N \quad (N \text{ positiv reell gewählt}). \tag{3.11-3}$$

Da ψ eine gerade Funktion ist, und u_{n-1} für ungerade n gerade, für gerade n ungerade ist, folgt mit Gl. (2.10-2)

$$c_{n-1} = 2\, \frac{\sqrt{15}}{4a^3} \int\limits_{0}^{a} dx\, (a^2 - x^2) \cos\frac{n\pi x}{2a}\,, \quad n = 1, 3, 5, \ldots\,; \tag{3.11-4}$$

$$c_{n-1} = 0\,, \qquad n = 2, 4, 6, \ldots\,. \tag{3.11-5}$$

Aus (3.11-4) erhalten wir unter Verwendung des angegebenen unbestimmten Integrals

$$c_{n-1} = (-1)^{(n-1)/2}\, \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3}\,, \qquad n = 1, 3, 5, \ldots\,, \tag{3.11-6}$$

und somit folgt aus (3.11-1) für die gesuchte Wahrscheinlichkeit $W_{n-1} = |c_{n-1}|^2$

$$W_{n-1} = \begin{cases} \dfrac{960}{(n\pi)^6} & \text{für} \quad n = 1, 3, 5, \ldots \\ 0 & \text{für} \quad n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases} . \tag{3.11-7}$$

(b) Mit (3.11-7) folgt aus der Definition des Erwartungswertes

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_{n-1} W_{n-1} = \frac{120\hbar^2}{ma^2\pi^4} \underbrace{\sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^4}}_{\pi^4/96} = \frac{5\hbar^2}{4ma^2} = \frac{10}{\pi^2} E_0 \; ; \tag{3.11-8}$$

$$\langle H^2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_{n-1}^2 W_{n-1} = \frac{15\hbar^4}{m^2a^4\pi^2} \underbrace{\sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^2}}_{\pi^2/8} = \frac{15\hbar^4}{8m^2a^4} = \frac{120}{\pi^4} E_0^2 \; ; \tag{3.11-9}$$

$$\Delta E = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{2\sqrt{5}}{\pi^2} E_0 = \frac{1}{\sqrt{5}} \langle H \rangle . \tag{3.11-10}$$

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Nach Gl. (3.11-7) ist

$$W_0 = |\langle 0 \,|\, \psi \rangle|^2 = \frac{960}{\pi^6} = 0{,}9986 \tag{3.11-11}$$

und dies bedeutet, dass die Funktion ψ „alles in allem gesehen“ der exakten Eigenfunktion u_0 in ihrem Verlauf sehr nahe kommt. Im Sinne der Hilbertraum-Metrik wird der „Abstand“ (Unterschied) von ψ und u_0 durch die Norm

$$\|\psi - u_0\| = \Big[\int_{-a}^{+a} dx \, |\psi(x) - u_0(x)|^2 \Big]^{1/2} = \sqrt{2 - 2c_0} = 0{,}038 \tag{3.11-12}$$

quantifiziert. Der Leser zeichne die Graphen der Funktionen ψ und u_0.

Der Erwartungswert der Energie im Zustand $|\,\psi\,\rangle$ liegt entsprechend sehr nahe bei der exakten Grundzustandsenergie. Nach Gl. (3.11-8) gilt $\langle H \rangle = 1{,}013\, E_0$. (Nach dem Variationsprinzip muss $\langle H \rangle \geq E_0$ sein; s. auch Aufgabe 5.9.) Die zugehörige Energieunschärfe ist jedoch relativ groß: Nach Gl. (3.11-10) ist $\Delta E = 0{,}453\, E_0$. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Eigenfunktionen u_{n-1}, $n > 1$, die in ψ nur sehr schwach „vertreten“ sind $(1 - W_0 = 0{,}0014)$, wegen $E_{n-1}^2 \propto n^4$ einen relativ großen Beitrag zu $\langle H^2 \rangle$ liefern.

Unter (b) wurden die Erwartungswerte der Observablen „Energie“ und „Quadrat der Energie“ ausgehend von der *Definition des Erwartungswertes* berechnet. Man kann diese Erwartungswerte auch unter Verwendung der wellenmechanischen Differentialoperatoren

$$H^{\{x\}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \, , \qquad \big(H^{\{x\}}\big)^2 = \big(H^2\big)^{\{x\}} = \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{d^4}{dx^4} \tag{3.11-13}$$

und der Zustandsfunktion

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{15}}{4a^{5/2}}\,(a^2 - x^2)\,, \qquad |x| \le a \tag{3.11-14}$$

berechnen. Für den Erwartungswert der Energie erhält man gemäß

$$\begin{aligned} \langle\, H \,\rangle = \langle\, \psi \,|\, H \,|\, \psi \,\rangle &= \int_{-a}^{+a} dx\, \psi^*(x) \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\, \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \Big] \\ &= \frac{15\hbar^2}{16ma^5} \int_{-a}^{+a} dx\, (a^2 - x^2) \;=\; \frac{5\hbar^2}{4ma^2}\,, \end{aligned} \tag{3.11-15}$$

in Übereinstimmung mit Gl. (3.11-8). Analoge Vorgangsweise für $\langle\, H^2 \,\rangle$ führt aber zum „Schiffbruch“:

$$\langle\, H^2 \,\rangle = \langle\, \psi \,|\, H^2 \,|\, \psi \,\rangle = \int_{-a}^{+a} dx\, \psi^*(x) \Big[\frac{\hbar^4}{4m^2}\, \frac{d^4\psi(x)}{dx^4} \Big] = 0\,. \tag{3.11-16}$$

Das Ergebnis null steht nicht nur im Widerspruch zu (3.11-9), es ist *offensichtlich* falsch, da ja die möglichen Messwerte zu H^2 jeder für sich schon größer als null sind. Um zu analysieren, was „passiert“ ist, gehen wir zur Schreibweise des Mathematikers über. (Siehe dazu auch die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14.)

Ist A in $\mathscr{D}_A \subset \mathscr{H}$ ein nicht beschränkter selbstadjungierter Operator mit rein diskretem Spektrum $\{a_1, a_2, \ldots\}$, so existiert eine Spektraldarstellung, welche formal durch Gl. (1.16-11), (1.16-12) gegeben ist:

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_n\,, \tag{3.11-17a}$$

$$P_n^{\dagger} = P_n\,, \qquad P_n P_{n'} = \delta_{nn'} P_n\,, \qquad \sum_{n=1}^{\infty} P_n = \mathbb{1}\,. \tag{3.11-17b}$$

(3.11-17a) steht symbolisch für

$$(f, Ag) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, (f, P_n g)\,, \quad g \in \mathscr{D}_A\,, \quad f \in \mathscr{H} \tag{3.11-18}$$

bzw. für

$$\|Ag\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2\, \|P_n g\|^2\,, \quad g \in \mathscr{D}_A\,. \tag{3.11-19}$$

Ist $\psi \in \mathscr{H}$,

$$(\psi, \psi) = 1, \tag{3.11-20}$$

Zustandsvektor eines quantenmechanischen Systems, so stellt

$$W_n = \|P_n \psi\|^2 = (\psi, P_n \psi) \tag{3.11-21}$$

die Wahrscheinlichkeit dar, im betreffenden Zustand für die Observable $\mathcal{A}$ den Messwert a_n zu finden. (Beachte, dass $\mathscr{D}_{P_n} = \mathscr{H}$ gilt.) Ist $\psi \in \mathscr{D}_A$ erfüllt (meist trifft dies in Anwendungsbeispielen zu), so gilt nach (3.11-18)

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n W_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n (\psi, P_n \psi) = (\psi, A\psi) \tag{3.11-22}$$

und nach (3.11-19)

$$\langle A^2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 W_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \, \|P_n \psi\|^2 = (A\psi, A\psi) \,. \tag{3.11-23}$$

Im Fall $\psi \notin \mathscr{D}_A$ dagegen können $\langle A \rangle$, $\langle A^2 \rangle$ *nicht* aus $(\psi, A\psi)$ bzw. aus $(A\psi, A\psi)$ berechnet werden, auch dann nicht, wenn diese Ausdrücke formal gebildet werden können und etwas Endliches ergeben. Gilt sogar $\psi \in \mathscr{D}_{A^2}$ (was ebenfalls in Anwendungsbeispielen meist zutrifft), so kann man wegen $A^\dagger = A$ in $\mathscr{D}_{A^\dagger} = \mathscr{D}_A$ (Selbstadjungiertheit von A in $\mathscr{D}_A$) außerdem

$$\langle A^2 \rangle = (A\psi, A\psi) = (\psi, A^2\psi) = (A^2\psi, \psi) \tag{3.11-24}$$

schreiben.

Nun zur obigen Aufgabe. In diesem Fall hat man $\mathscr{H} = L^2([-a, +a])$ (s. Aufgabe 1.14), und die nicht beschränkten Operatoren H in $\mathscr{D}_H \subset \mathscr{H}$, H^2 in $\mathscr{D}_{H^2}$ sind gemäß

$$\begin{aligned} &(Hf)(x) := -\frac{\hbar^2}{2m} f''(x) \,, \\ &\mathscr{D}_H = \{ f \in \mathscr{H} \,|\, f \text{ zweimal stetig differenzierbar in } [-a, +a]; \\ &\qquad\qquad f(-a) = f(+a) = 0 \} \,; \end{aligned} \tag{3.11-25}$$

$$\begin{aligned} &(H^2 f)(x) := \frac{\hbar^4}{4m^2} f^{\mathrm{IV}}(x) \,, \\ &\mathscr{D}_{H^2} = \{ f \in \mathscr{H} \,|\, f \text{ viermal stetig differenzierbar in } [-a, +a]; \\ &\qquad\qquad f(-a) = f''(-a) = f(+a) = f''(+a) = 0 \} \end{aligned} \tag{3.11-26}$$

zu definieren. H in $\mathscr{D}_H$ ist (wie man analog zu Aufgabe 1.14 leicht zeigen kann) hermitesch. Die Eigenfunktionen u_{n-1} von H in $\mathscr{D}_H$ (s. Gl. (2.10-2)) sind beliebig oft stetig differenzierbar, und es gilt

$$u_{n-1}^{(2k)}(\pm a) = 0 \,, \qquad k \in \mathbb{N}_0 \,, \;\; n \in \mathbb{N} \,. \tag{3.11-27}$$

Sie bilden außerdem ein vollständiges Orthonormalsystem in $\mathscr{H}$, H in $\mathscr{D}_H$ ist also auch selbstadjungiert[2] und beschreibt eine Observable. H^2 in $\mathscr{D}_{H^2}$ ergibt sich einfach aus der Definition des Quadrats eines Operators und ist ebenfalls selbstadjungiert. Die Eigenfunktionen

[2] Genau genommen „fehlt“ H in $\mathscr{D}_H$ „noch ein bisschen“ auf einen selbstadjungierten Operator. Wie in Abschnitt V.2.2 von Hellwig, G.: Differentialoperatoren der mathematischen Physik, Springer-Verlag, Berlin 1964, gezeigt wird, ist H in $\mathscr{D}_H$ noch nicht selbstadjungiert, sondern nur *wesentlich selbstadjungiert*, d. h. es gilt $H^{\dagger\dagger} = H^\dagger$. Erst durch so genanntes „Abschließen“ von H in $\mathscr{D}_H$ gelangt man zu einem selbstadjungierten Operator $\bar{H}$ in $\mathscr{D}_{\bar{H}}$. Das Besondere des so erhaltenen selbstadjungierten Operators $\bar{H}$ in $\mathscr{D}_{\bar{H}}$ ist, dass alle seine Eigenvektoren bereits in $\mathscr{D}_H$ liegen.

u_{n-1} von H in $\mathscr{D}_H$ sind auch Eigenfunktionen von H^2 in $\mathscr{D}_{H^2}$, und zwar zu den Eigenwerten E_{n-1}^2. (Beachte: $u_{n-1} \in \mathscr{D}_{H^2} \subset \mathscr{D}_H \subset \mathscr{H}$.)

Wenden wir nun die allgemeinen Beziehungen (3.11-20) bis (3.11-24) auf das Beispiel an: Die gegebene Zustandsfunktion ψ von Gl. (3.11-14) ist auf eins normiert. Sie ist Element von $\mathscr{D}_H$, *nicht* aber von $\mathscr{D}_{H^2}$. Es können somit die Erwartungswerte $\langle H \rangle$, $\langle H^2 \rangle$ gemäß

$$\langle H \rangle = (\psi, H\psi) = (H\psi, \psi)\,, \qquad \langle H^2 \rangle = (H\psi, H\psi) \tag{3.11-28}$$

berechnet werden, dagegen kann $\langle H^2 \rangle$ *nicht* gemäß $(\psi, H^2\psi)$ oder $(H^2\psi, \psi)$ berechnet werden. In der Tat geben

$$(\psi, H\psi) = \int_{-a}^{+a} dx\, \psi^*(x)(H\psi)(x) = \frac{5\hbar^2}{4ma^2} \tag{3.11-29}$$

(s. (3.11-15)) und

$$\begin{aligned}(H\psi, H\psi) &= \int_{-a}^{+a} dx\, |(H\psi)(x)|^2 = \int_{-a}^{+a} dx \left| -\frac{\hbar^2}{2m}\, \psi''(x) \right|^2 \\ &= \int_{-a}^{+a} dx \left| \frac{\hbar^2}{m}\, \frac{\sqrt{15}}{4a^{5/2}} \right|^2 = \frac{15\hbar^4}{8m^2a^4}\end{aligned} \tag{3.11-30}$$

mit (3.11-8), (3.11-9) übereinstimmende Ergebnisse.

Beachte, dass im Diracformalismus *per Definition*

$$\langle u \,|\, AB \,|\, v \rangle = \langle u \,|\, [AB \,|\, v\rangle] = [\langle u \,|\, A][B \,|\, v\rangle] = [\langle u \,|\, AB] \,|\, v\rangle$$

gilt. Ein „Sanierungsversuch“ auf dem Boden des Diracformalismus durch „Interpretation“ von $\langle \psi \,|\, H^2 \,|\, \psi \rangle$ als $[\langle \psi \,|\, H][H \,|\, \psi\rangle] = [\langle \psi \,|\, H^\dagger][H \,|\, \psi\rangle]$ unter Ausschließen von $\langle \psi \,|\, [H^2 \,|\, \psi\rangle]$ und $[\langle \psi \,|\, H^2] \,|\, \psi\rangle$ würde daher einen reinen Willkürakt darstellen. Der Diracformalismus gestattet für nicht beschränkte Operatoren C weder eine adäquate Definition des Begriffes des zu C adjungierten Operators $C^\dagger$ noch das erforderliche Eingehen auf Definitionsbereichsfragen, da er für *zwei* Ausdrücke, welche unter *verschiedenen* Voraussetzungen sinnvoll sind, nämlich für (f, Cg) [sinnvoll für $f \in \mathscr{H}$, $g \in \mathscr{D}_C$] und für $(C^\dagger f, g)$ [sinnvoll für $f \in \mathscr{D}_{C^\dagger}$, $g \in \mathscr{H}$], von vornherein nur *ein* Symbol, nämlich $\langle f \,|\, C \,|\, g \rangle$, hat. – Siehe dazu auch den Anhang A.3.2.

Im konkreten Beispiel waren „unphysikalische“ (überidealisierte) Randbedingungen im Endlichen für das Versagen des Diracformalismus verantwortlich. Man kann aber auch Beispiele angeben, bei denen der Diracformalismus versagt, obwohl es keine „unphysikalischen“ Randbedingungen gibt. Der Leser versuche selbst den folgenden scheinbaren Widerspruch zu analysieren: Sind L_z, Φ die Operatoren zur z-Komponente des Bahndrehimpulses bzw. zum Polarwinkel in der xy-Ebene, so gilt

$$L_z = L_z^\dagger\,, \qquad \Phi = \Phi^\dagger\,, \qquad [\Phi, L_z] = i\hbar\mathbb{1}\,.$$

Ist der Ket $|nlm\rangle$, $\langle nlm \,|\, nlm\rangle = 1$, Zustandsvektor eines spinlosen Teilchens in einem sphärisch symmetrischen Potential (gebundener Energieeigenzustand), so folgt damit

$$\langle nlm \,|\, [\Phi, L_z] \,|\, nlm\rangle = \langle nlm \,|\, i\hbar\mathbb{1} \,|\, nlm\rangle\,,$$

$$\langle nlm\,|\,\Phi\underbrace{L_z|\,nlm\,\rangle}_{m\hbar\,|\,nlm\,\rangle} - \underbrace{\langle\,nlm\,|\overbrace{L_z}^{L_z^\dagger}\Phi}_{m\hbar\,\langle\,nlm\,|}\,|\,nlm\,\rangle = i\hbar\,,$$

$$\underbrace{(m\hbar - m\hbar)}_{0}\underbrace{\langle\,nlm\,|\,\Phi\,|\,nlm\,\rangle}_{\pi} \stackrel{?}{=} i\hbar\,.$$

Hilfe zum Lösen dieser „Denksportaufgabe“ findet der Leser in den Aufgaben 1.14 und 1.31.

3.12 „Vermutung“: $\beta(t)$ ist der Erwartungswert des Teilchenimpulses zur Zeit t:

$$\langle\,P\,\rangle_t = \langle\,\psi(t)\,|\,P\,|\,\psi(t)\,\rangle = \beta(t)\,. \tag{3.12-1}$$

Mit

$$P^{\{x\}}\psi = -i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial x} = \Big[\beta\varphi - i\hbar\,\frac{\partial\varphi}{\partial x}\Big]\exp\Big[\,\frac{i}{\hbar}\,\beta x + i\gamma\Big]$$

folgt

$$\begin{aligned}\langle\,P\,\rangle_t &= \int\limits_{\mathbb{R}} dx\;\psi^*(x,t)\Big(P^{\{x\}}\psi(x,t)\Big) = \beta(t)\int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\Big[\varphi(x,t)\Big]^2 - i\hbar\int\limits_{\mathbb{R}} dx\;\varphi(x,t)\,\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial x}\\ &= \beta(t) - \frac{i\hbar}{2}\Big[\varphi(x,t)\Big]^2\Big|_{-\infty}^{+\infty}\,.\end{aligned} \tag{3.12-2}$$

Aufgrund der Voraussetzungen bzgl. $\varphi(x,t)$ existiert $\lim_{x\to\pm\infty}\varphi(x,t)$ und ist null (Beweis: s. die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14). Damit ist (3.12-1) gezeigt.

Bemerkungen

Insbesondere folgt aus obiger Rechnung, dass der Erwartungswert des Impulses null ist, wenn die Zustandsfunktion in der Ortsdarstellung reellwertig ist. Siehe dazu auch die folgende Aufgabe.

Beispiele für Zustandsfunktionen des oben behandelten Typs werden in den Aufgaben 4.9 und 4.13 näher diskutiert.

3.13

(a) Fouriertransformation:

$$\widetilde{\psi}(\vec{p}) \equiv \langle\,\vec{p}\,|\,\psi\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,\langle\,\vec{p}\,|\,\vec{r}\,\rangle\langle\,\vec{r}\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}\cdot\vec{r}\Big]\psi(\vec{r})\;,$$

$$\widetilde{\psi}^*(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,\exp\Big[\,\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}\cdot\vec{r}\Big]\underbrace{\psi^*(\vec{r})}_{\psi(\vec{r})} = \widetilde{\psi}(-\vec{p}) \quad\Rightarrow \tag{3.13-1}$$

$$|\widetilde{\psi}(\vec{p})|^2 = \widetilde{\psi}^*(\vec{p})\,\widetilde{\psi}(\vec{p}) = \widetilde{\psi}(-\vec{p})\,\widetilde{\psi}^*(-\vec{p}) = |\widetilde{\psi}(-\vec{p})|^2\,. \tag{3.13-2}$$

(b) *Lösungsweg 1:* Verwendung der Ortsdarstellung

$$\langle\,\psi\,|\,\vec{P}\,|\,\psi\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \underbrace{\langle\,\psi\,|\,\vec{r}\,\rangle}_{\psi^*(\vec{r})} \underbrace{\langle\,\vec{r}\,|\,\vec{P}\,|\,\psi\,\rangle}_{\left[-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r})\right]}$$

$$= -i\hbar \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,\psi^*(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r})}_{\text{reell, da } \psi \text{ reell}} = \text{reell, da } \vec{P} \text{ selbstadjungiert} \quad \Rightarrow$$

$$\langle\,\psi\,|\,\vec{P}\,|\,\psi\,\rangle = \vec{0}\,. \tag{3.13-3}$$

Lösungsweg 2: Verwendung der Impulsdarstellung bzw. der Spektraldarstellung von $\vec{P}$ und des Ergebnisses von (a)

$$\langle\,\psi\,|\,\vec{P}\,|\,\psi\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\,\langle\,\psi\,|\,\vec{p}\,\rangle\,\vec{p}\,\langle\,\vec{p}\,|\,\psi\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\,\vec{p}\,\underbrace{|\widetilde{\psi}(\vec{p})|^2}_{|\widetilde{\psi}(-\vec{p})|^2} = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\,(-\vec{p})\,|\widetilde{\psi}(\vec{p})|^2$$

$$= -\langle\,\psi\,|\,\vec{P}\,|\,\psi\,\rangle = \vec{0}\,.$$

Bemerkungen

Für den Punkt (b) muss natürlich $\psi \in \mathscr{D}_{P_j}$, $j = 1, 2, 3$, vorausgesetzt werden.

3.14*

(a) Zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m in einem Potential V (eindimensionale Bewegung):

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V(X)\right)|\,u\,\rangle = E\,|\,u\,\rangle\,. \tag{3.14-1}$$

Impulsdarstellung: Wegen $\langle\,p\,|\,P^2 = p^2\langle\,p\,|$ gilt

$$\frac{p^2}{2m}\,\langle\,p\,|\,u\,\rangle + \langle\,p\,|\,V(X)\,|\,u\,\rangle = E\,\langle\,p\,|\,u\,\rangle\,.$$

Durch Einschieben der Vollständigkeitsbeziehung der Impulseigenzustände und der Spektraldarstellung von $V(X)$,

$$\mathbb{1} = \int\limits_{\mathbb{R}} dp'\,|\,p'\,\rangle\langle\,p'\,|\,, \qquad V(X) = \int\limits_{\mathbb{R}} dx\,|\,x\,\rangle\,V(x)\,\langle\,x\,|$$

in $\langle\,p\,|\,V(X)\,|\,u\,\rangle$ erhält man

$$\langle\,p\,|\,V(X)\,|\,u\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dx \int\limits_{\mathbb{R}} dp'\,\langle\,p\,|\,x\,\rangle\,V(x)\,\langle\,x\,|\,p'\,\rangle\langle\,p'\,|\,u\,\rangle\,.$$

Für die Eigenfunktionen $\widetilde{u}(p) \equiv \langle\, p \,|\, u \,\rangle$ in der Impulsdarstellung ergibt sich die formale Integralgleichung

$$\frac{p^2}{2m}\,\widetilde{u}(p) + \int\limits_{\mathbb{R}} dp'\, K(p-p')\,\widetilde{u}(p') \;=\; E\,\widetilde{u}(p) \tag{3.14-2a}$$

mit der Kernfunktion

$$K(p-p') := \frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{\mathbb{R}} dx\, V(x)\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,(p-p')x\Big]\,, \tag{3.14-2b}$$

vorausgesetzt, dass das Integral in (3.14-2b) (zumindest im Sinne einer verallgemeinerten Funktion) existiert.

Eine besonders einfache Form nimmt diese Gleichung für das δ-förmige Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\,D\,\delta(x)\,, \qquad D>0 \tag{3.14-3}$$

an (konstanter Integralkern):

$$\Big(\frac{p^2}{2m} - E\Big)\widetilde{u}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\,\frac{\hbar^2}{m}\,D\int\limits_{\mathbb{R}} dp'\,\widetilde{u}(p')\,. \tag{3.14-4}$$

(b) $E<0$: $\quad \kappa := \sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$;

$$[p^2 + (\hbar\kappa)^2]\,\widetilde{u}(p) = N \quad \text{mit} \quad N = \hbar D\pi\int\limits_{\mathbb{R}} dp\,\widetilde{u}(p) \quad \Rightarrow \tag{3.14-5}$$

$$\widetilde{u}(p) = \frac{N}{p^2+(\hbar\kappa)^2}\,. \tag{3.14-6}$$

Einsetzen von (3.14-6) im Integral von (3.14-5) liefert die Eigenwertbedingung für den Eigenwertparameter κ ($N\neq 0$, sonst triviale Lösung):

$$1 = \frac{\hbar D}{\pi}\int\limits_{\mathbb{R}}\frac{dp}{p^2+(\hbar\kappa)^2} \quad \text{bzw.} \quad 1 = \frac{\hbar D}{\pi}\,\frac{\pi}{\hbar\kappa} \quad \Rightarrow \quad \kappa = D\,. \tag{3.14-7}$$

Es gibt also nur einen einzigen gebundenen Zustand und für den zugehörigen Energieeigenwert gilt wegen $E=-\hbar^2\kappa^2/2m$ und (3.14-7)

$$E = -\frac{\hbar^2 D^2}{2m}\,. \tag{3.14-8}$$

N aus Normierung bestimmt:

$$\langle\, u \,|\, u \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dp\,|\widetilde{u}(p)|^2 = |N|^2\int\limits_{\mathbb{R}}\frac{dp}{[p^2+(\hbar D)^2]^2} = |N|^2\,\frac{\pi}{2(\hbar D)^3} = 1 \quad \Rightarrow$$

$$|N| = \sqrt{\frac{2\hbar D}{\pi}}\,\hbar D = N \quad (N \text{ positiv reell gewählt}).$$

Die auf eins normierte Energieeigenfunktion des gebundenen Zustandes lautet somit in der Impulsdarstellung

$$\widetilde{u}(p) = \sqrt{\frac{2\hbar D}{\pi}}\,\frac{\hbar D}{p^2 + (\hbar D)^2}\ . \tag{3.14-9}$$

(c)

$$u(x) \equiv \langle\, x \,|\, u \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}} dp\, \langle\, x \,|\, p \,\rangle \langle\, p \,|\, u \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{\mathbb{R}} dp\, e^{(i/\hbar)px}\, \widetilde{u}(p)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2\hbar D}{\pi}}\,\hbar D \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} dp\, \frac{e^{(i/\hbar)px}}{p^2 + (\hbar D)^2}}_{\frac{\pi}{\hbar D}\,\exp\left[-\hbar D\left|\frac{x}{\hbar}\right|\right]} = \sqrt{D}\, e^{-D|x|}\ . \tag{3.14-10}$$

Bemerkungen

S. auch die Aufgabe 2.12, in welcher das Eigenwertproblem in der Ortsdarstellung behandelt wird. Die oben auf formalem Weg abgeleitete Gl. (3.14-4) kann natürlich auch durch Fouriertransformation von Gl. (2.12-1) erhalten werden. Der Leser führe diese Rechnung selbständig durch.

3.15 Der wellenmechanische Repräsentant $H^{\{p\}}$ des Hamiltonoperators

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2 \tag{3.15-1}$$

des linearen harmonischen Oszillators in der Impulsdarstellung ist durch

$$H^{\{p\}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(-\hbar^2\,\frac{d^2}{dp^2}\right) \tag{3.15-2}$$

gegeben. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Impulsdarstellung lautet somit

$$\left\{-\frac{m\hbar^2\omega^2}{2}\,\frac{d^2}{dp^2} + \frac{1}{2m}\,p^2\right\}\widetilde{u}(p) = E\,\widetilde{u}(p) \tag{3.15-3}$$

bzw.

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\,\frac{d^2}{dp^2} + \frac{M\omega^2}{2}\,p^2\right\}\widetilde{u}(p) = E\,\widetilde{u}(p) \tag{3.15-4}$$

mit

$$M := \frac{1}{m\omega^2}\ . \tag{3.15-5}$$

Diese Differentialgleichung ist von vollkommen analoger Bauart wie die Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung. Auch die Normierbarkeitsbedingung ist für $\widetilde{u}(p)$ analog zu jener für $u(x)$, sodass für die Lösung (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-7), (A.5-5b))

$$E_n = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega\,, \tag{3.15-6a}$$

$$\widetilde{u}_n(p) \;\equiv\; \langle\, p \,|\, n \,\rangle \;=\; e^{i\gamma_n}\,\sqrt{\frac{\widetilde{\alpha}}{2^n\, n!\,\sqrt{\pi}}}\;\exp\Big[-\frac{(\widetilde{\alpha}p)^2}{2}\Big]\,H_n(\widetilde{\alpha}p)\;, \tag{3.15-6b}$$

$$\widetilde{\alpha} := \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \tag{3.15-6c}$$

folgt.

Bemerkungen

Damit $\widetilde{u}_n(p)$ Gl. (3.15-6b), (3.15-6c) die Fouriertransformierte von $u_n(x)$ Gl. (A.5-5b) darstellt, muss $\gamma_n = -\frac{n\pi}{2}$ gewählt werden. Dies lässt sich mithilfe der folgenden Formel zeigen:

$$\int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{i\eta\xi}\, e^{-\xi^2/2}\, H_n(\xi) \;=\; i^n\sqrt{2\pi}\; e^{-\eta^2/2}\, H_n(\eta)\,. \tag{3.15-7}$$

Beim Anschreiben von $H^{\{p\}}$ habe ich

$$H^{\{p\}} = H(X^{\{p\}}, P^{\{p\}}) = H(i\hbar\,\frac{d}{dp}\,, p)$$

benützt. Diese Vorgangsweise ist immer dann möglich und zweckmäßig, wenn $V(x)$ ein Polynom in x ist. Die Kernfunktion Gl. (3.14-2b) wird dann proportional zu $\delta(p-p')$ und die formale Integralgleichung (3.14-2a) wird zu einer Differentialgleichung. Im gegebenen Beispiel:

$$K(p-p') = -\frac{m\hbar^2\omega^2}{2}\,\frac{\partial^2}{\partial p^2}\,\delta(p-p')\,, \tag{3.15-8a}$$

$$\int\limits_{\mathbb{R}} dp'\, K(p-p')\,\widetilde{u}(p') = -\frac{m\hbar^2\omega^2}{2}\,\frac{d^2}{dp^2}\,\widetilde{u}(p)\,. \tag{3.15-8b}$$

3.16* Vollkommen analog wie im eindimensionalen Fall (s. die Lösung von Aufgabe 3.14, insbesondere Gl. (3.14-2)) erhält man

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\,\widetilde{u}(\vec{p}) + \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p'\, K(\vec{p}-\vec{p}\,')\,\widetilde{u}(\vec{p}\,') = E\,\widetilde{u}(\vec{p}) \tag{3.16-1a}$$

mit der Kernfunktion

$$K(\vec{p}-\vec{p}\,') := \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, V(\vec{r})\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,(\vec{p}-\vec{p}\,')\cdot\vec{r}\,\Big]\,. \tag{3.16-1b}$$

Für ein sphärisch symmetrisches Potential folgt daraus nach Integration über die Polarwinkel (Richtung von $\vec{p}-\vec{p}\,'$ für die Integration als Polarachse gewählt)

$$K(\vec{p}-\vec{p}\,') = \frac{1}{2\pi^2\hbar^2\,|\vec{p}-\vec{p}\,'|}\int_0^{+\infty} dr\, r\, V(r)\, \sin\frac{|\vec{p}-\vec{p}\,'|\,r}{\hbar}\ . \tag{3.16-2}$$

Setzt man hier $V(r) = C/r$ ein, so erhält man ein nicht existierendes Integral. Streng genommen kann man in der Impulsdarstellung für das Coulombpotential gar keine Schrödingergleichung anschreiben.

Dagegen existiert $K(\vec{p}-\vec{p}\,')$ für ein *abgeschirmtes Coulombpotential* (Yukawapotential)

$$V(r) = \frac{C}{r}\, e^{-\mu r}\,, \qquad \mu \in \mathbb{R}^+, \tag{3.16-3}$$

wie schwach auch immer die Abschirmung ist. Man erhält aus (3.16-2)

$$K(\vec{p}-\vec{p}\,') = \frac{C}{2\pi^2\hbar}\,\frac{1}{(\hbar\mu)^2+|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2}\ , \qquad \mu \in \mathbb{R}^+ \tag{3.16-4}$$

und im Grenzfall „verschwindend schwacher“ Abschirmung $\mu \to 0+$

$$K(\vec{p}-\vec{p}\,') \longrightarrow \frac{C}{2\pi^2\hbar}\,\frac{1}{|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2}\ . \tag{3.16-5}$$

Setzt man die Kernfunktion (3.16-5) in (3.16-1a) ein, so erhält man die Integralgleichung

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\,\tilde{u}(\vec{p}) + \frac{C}{2\pi^2\hbar}\int_{\mathbb{R}^3} d^3p'\,\frac{\tilde{u}(\vec{p}\,')}{|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2} = E\,\tilde{u}(\vec{p})\ . \tag{3.16-6}$$

Bemerkungen

Diese Vorgangsweise ist durch die Erwartung bestimmt, dass Eigenwerte und Eigenfunktionen für ein abgeschirmtes Coulombpotential im Grenzfall $\mu \to 0+$ gegen die entsprechenden Größen beim nichtabgeschirmten Coulombpotential streben. Löst man die Integralgleichung (3.16-6), so findet man diese Erwartung bestätigt. Das Lösen von Gl. (3.16-6) ist allerdings mathematisch wesentlich schwieriger und verwickelter als das Lösen der Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung und allfälliges Fouriertransformieren der Eigenfunktionen (s. [32] und die dort zitierten Originalarbeiten).

S. auch die Berechnung der Streuamplitude für das schwach abgeschirmte Coulombpotential in Aufgabe 8.5.

3.17 Mit

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \tag{3.17-1}$$

folgt (s. Gl. (1.18-10))

$$\frac{1}{i\hbar}\,[X_j, H] = \frac{1}{i\hbar}\,[X_j, \frac{\vec{P}^2}{2m}] = \frac{1}{2m}\,\frac{\partial}{\partial P_j}\,\vec{P}^2 = \frac{P_j}{m}\ . \tag{3.17-2}$$

Für einen gebundenen Energieeigenzustand $|\,u\,\rangle$ (Energieeigenzustand zu einem diskreten Eigenwert E_n) gilt

$$H\,|\,u\,\rangle = E_n\,|\,u\,\rangle\,, \qquad \langle\,u\,|\,H = \langle\,u\,|\,E_n\,, \qquad \langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1 \tag{3.17-3}$$

und somit

$$\langle\,P_j\,\rangle = \langle\,u\,|\,P_j\,|\,u\,\rangle = \frac{im}{\hbar}\,\langle\,u\,|\,(HX_j - X_jH)\,|\,u\,\rangle = \frac{im}{\hbar}\,\langle\,u\,|\,\underbrace{(E_nX_j - X_jE_n)}_{\mathbb{0}}\,|\,u\,\rangle = 0\,,$$

also

$$\langle\,\vec{P}\,\rangle = \vec{0}\,. \tag{3.17-4}$$

Bemerkungen

Voraussetzung für die Schlüssigkeit dieses formalen Beweises ist $u \in \mathscr{D}_{X_j}$ sowie $X_j u \in \mathscr{D}_H$, $j = 1, 2, 3$. Der Leser überzeuge sich davon, dass bei der Anwendung des Satzes in den Aufgaben 3.19, 3.20 die entsprechenden Voraussetzungen erfüllt sind.

3.18* Die Kollimierung durch die Blende stellt eine Präparation bzgl. der Komponenten des Teilchenortes in der zx-Ebene dar (s. Abb. 3.18-1). Wegen der Zylindersymmetrie des Problems genügt es, eine einzige Richtung in dieser Ebene, die x-Richtung, zu betrachten.

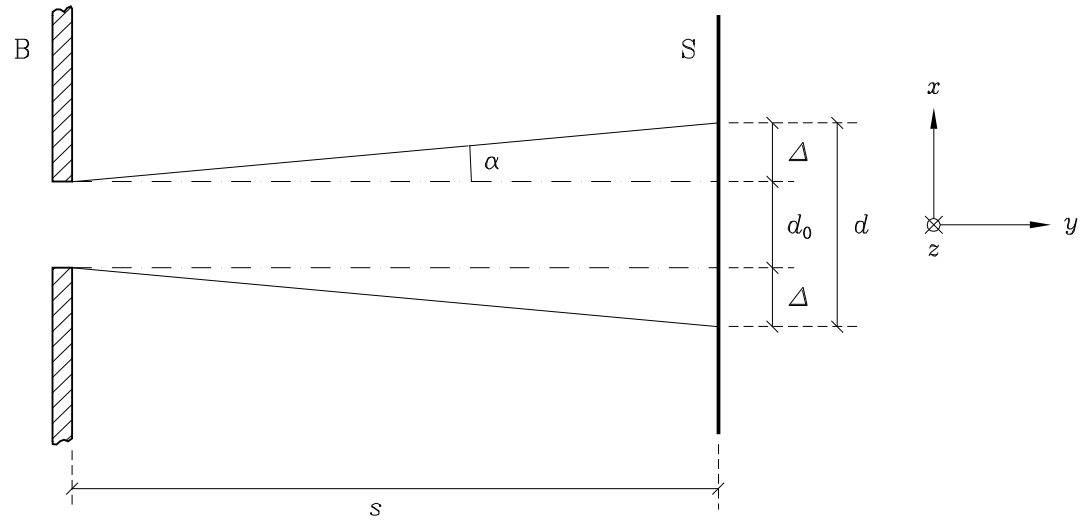


Abb. 3.18-1: Kollimierung eines monoenergetischen Teilchenstrahls

Der Blendenradius ist ein Maß für die Ortsunschärfe $(\Delta x)_0$ der so präparierten Gesamtheit:

$$(\Delta x)_0 \sim \frac{d_0}{2}\,. \tag{3.18-1}$$

Für die Impulsunschärfe in dieser Gesamtheit gilt aufgrund der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung

$$(\Delta p_x)_0 \geq \frac{\hbar}{2(\Delta x)_0} \sim \frac{\hbar}{d_0} \,. \tag{3.18-2}$$

Da die x-Komponente des Teilchenortes und die y-Komponente des Teilchenimpulses verträgliche Observablen sind, ändert die Kollimierung die y-Komponente des Impulses

$$p_y = \sqrt{2mE} \,=\, 2{,}32 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{g\,cm\,s^{-1}} \tag{3.18-3}$$

nicht. (Der einfallende Teilchenstrahl kann natürlich nur annähernd „monoenergetisch“ sein.) Für den Öffnungswinkel 2α des kollimierten Strahls gilt daher („Beugung“)

$$\tan\alpha \sim \frac{(\Delta p_x)_0}{p_y} \gtrsim \frac{\hbar}{d_0 p_y} \,. \tag{3.18-4}$$

Daraus folgt für den Durchmesser des Trefferbildes (s. Abb. 3.18-1)

$$d = d_0 + 2\Delta = d_0 + 2s\tan\alpha \gtrsim d_0 + \frac{2s\hbar}{d_0 p_y} \tag{3.18-5}$$

bzw.

$$d \gtrsim f(d_0) := d_0 + \frac{4{,}6 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{cm}^2}{d_0} \quad (d, d_0 \text{ in cm}). \tag{3.18-6}$$

Wie erwartet gilt $d \to +\infty$ für $d_0 \to +\infty$ und $d \to +\infty$ für $d_0 \to 0$ (zunehmend starke Beugung). Zwischen diesen beiden „Randmaxima“ liegt ein Minimum von $f(d_0)$:

$$f'(d_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad (d_0)_{\mathrm{opt}} \approx 2 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{cm} \,. \tag{3.18-7}$$

Zum Vergleich: Die de Broglie-Wellenlänge der „einfallenden“ Neutronen beträgt

$$\lambda = \frac{h}{p_y} \approx 3 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{cm} \,. \tag{3.18-8}$$

Mit (3.18-7) folgt

$$d \geq d_{\mathrm{min}} \approx f\Big((d_0)_{\mathrm{opt}}\Big) = 2\,(d_0)_{\mathrm{opt}} \approx 4 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{cm} \,. \tag{3.18-9}$$

Für den zu $(d_0)_{\mathrm{opt}}$ und d_{min} gehörigen Winkel α erhält man $\alpha \sim 2 \cdot 10^{-6}$ rad.

3.19* Nach Aufgabe 3.17 ist der Erwartungswert des Impulses in einem gebundenen Energieeigenzustand null. Für den Grundzustand beim unendlich tiefen Kastenpotential gilt somit $\langle P^2 \rangle = (\Delta p)^2$ und

$$E_0 = \langle H \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \,. \tag{3.19-1}$$

Aufgrund der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ ergibt sich damit

$$E_0 \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} \,. \tag{3.19-2}$$

Von der (als unbekannt angesehenen) Grundzustands-Eigenfunktion weiß man, dass sie eine gerade Funktion ohne Nullstellen in $(-a, +a)$ sein muss, deren Maximum bei $x = 0$ liegt, und die an den Intervallenden auf null abfällt. Die exakte Ortsunschärfe im Grundzustand muss deshalb kleiner sein als für die konstante Funktion $u(x) = 1/\sqrt{2a}$, für welche sie den Wert $a/\sqrt{3} = 0{,}58\,a$ besitzt. Mit $\Delta x < a/\sqrt{3}$ folgt aber

$$E_0 > 3\,\frac{\hbar^2}{8ma^2}\ . \tag{3.19-3}$$

Bemerkungen

Für die exakte Ortsunschärfe im Grundzustand und die exakte Grundzustandsenergie gilt (s. Gl. (3.21-3) und Gl. (2.10-1))

$$\Delta x = \sqrt{\frac{1}{3}\left(1 - \frac{6}{\pi^2}\right)}\ a\ = 0{,}36\,a \tag{3.19-4}$$

und

$$E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\ = 9{,}87\,\frac{\hbar^2}{8ma^2}\ . \tag{3.19-5}$$

Setzt man in die aus der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung folgende Ungleichung (3.19-2) die Beziehung (3.19-4) ein, so erhält man die Ungleichung

$$E_0 \geq \frac{3\pi^2}{\pi^2 - 6}\,\frac{\hbar^2}{8ma^2}\ = 7{,}65\,\frac{\hbar^2}{8ma^2}\ , \tag{3.19-6}$$

also eine Verbesserung der unteren Schranke von $0{,}30\,E_0$ auf $0{,}78\,E_0$. (Natürlich kann man sich diese verbesserte Schranke erst verschaffen, wenn man u_0 kennt, und dann kennt man ohnehin auch E_0.) Da für den Grundzustand $\Delta x \cdot \Delta p > (\Delta x \cdot \Delta p)_{\min} = \hbar/2$ gilt (siehe Gl. (3.21-6)), wird das Gleichheitszeichen in (3.19-6) nicht angenommen.

S. auch Aufgabe 3.20 und Aufgabe 3.21.

3.20* In Aufgabe 3.17 wurde unter Benützung der Proportionalität von P und $[H, X]$ bewiesen, dass in einem gebundenen Energieeigenzustand $\langle P \rangle = 0$ gilt. Für den harmonischen Oszillator ist außerdem X proportional zu $[H, P]$ und es folgt auf analoge Weise für einen gebundenen Energieeigenzustand $\langle X \rangle = 0$. Die Beziehungen $\langle X \rangle = 0$, $\langle P \rangle = 0$ kann man aber auch auf anderem Wege beweisen: Wegen der Inversionsinvarianz von H müssen die gebundenen Energieeigenzustände Eigenzustände des Paritätsoperators sein (s. Aufgabe 2.4), und da X und P ungerade Operatoren sind (s. Aufgabe 2.3), folgt $\langle X \rangle = 0$, $\langle P \rangle = 0$ (s. Aufgabe 2.2 (c)). Für den Grundzustand des Oszillators gilt somit

$$E_0 = \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \tag{3.20-1}$$

mit

$$\langle T \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m}\ , \qquad \langle V \rangle = \frac{m\omega^2}{2}\,\langle X^2 \rangle = \frac{m\omega^2}{2}\,(\Delta x)^2\ . \tag{3.20-2}$$

Lösungsweg 1: Benützung der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung

Aufgrund der Unbestimmtheitsbeziehung $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ muss

$$\langle T \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} \tag{3.20-3}$$

und somit

$$E_0 \geq g\Big((\Delta x)^2\Big) := \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \tag{3.20-4}$$

gelten. Die Funktion $g(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^+$, strebt für $\xi \to 0+$ und $\xi \to +\infty$ gegen unendlich und besitzt dazwischen ein Minimum:

$$g'(\xi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}\,, \quad g(\xi_0) = \frac{\hbar\omega}{2}\,. \tag{3.20-5}$$

Damit folgt

$$E_0 \geq \frac{\hbar\omega}{2}\,. \tag{3.20-6}$$

Lösungsweg 2: Benützung der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung und des quantenmechanischen Virialtheorems $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ (s. die Aufgaben 4.6 und 5.13)

Aufgrund des Virialtheorems gilt für den Grundzustand des Oszillators

$$E_0 = 2\langle V \rangle = m\omega^2(\Delta x)^2 \tag{3.20-7}$$

sowie

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta p = m\omega\Delta x\,. \tag{3.20-8}$$

Mit $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ erhält man weiter

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2m\omega\Delta x} \quad \Rightarrow \quad (\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar}{2m\omega} \;\; (= \xi_0) \tag{3.20-9}$$

und somit

$$E_0 = m\omega^2(\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar\omega}{2}\,. \tag{3.20-10}$$

Bemerkungen

Beim harmonischen Oszillator liefert die heisenbergsche Unbestimmtheitsbeziehung die exakte Grundzustandsenergie E_0 als untere Schranke für E_0, da die Grundzustands-Eigenfunktion (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5b))

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\Big]\,, \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{3.20-11}$$

vom Typ der *Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion* (s. z. B. [7])

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\Delta x}}\,\exp\Big[-\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i}{\hbar}\langle P \rangle\, x + i\gamma\Big]\,, \tag{3.20-12a}$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x} \tag{3.20-12b}$$

ist. Oft bezeichnet man (3.20-12a) auch als „Minimum-Wellenpaket“ oder als „gaußartige“ Zustandsfunktion. Letztere Bezeichnung ist aber missverständlich, denn es ist zwar für (3.20-12a) die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte

$$W(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta x}\,\exp\Big[-\frac{(x-\langle X\rangle)^2}{2(\Delta x)^2}\Big] \tag{3.20-12c}$$

eine Gaußverteilung, doch kann umgekehrt für eine Zustandsfunktion das Absolutquadrat eine Gaußverteilung sein, ohne dass deshalb die Zustandsfunktion selbst vom Typ (3.20-12a) sein muss. (S. dazu die Lösung von Aufgabe 4.9, insbesondere die Gleichungen (4.9-7), (4.9-9) und (4.9-18) einerseits, sowie die Gleichungen (4.9-20), (4.9-22a) und (4.9-25) andrerseits.)

Vergleich von (3.20-11) mit (3.20-12a) zeigt unmittelbar, dass für den Grundzustand des linearen harmonischen Oszillators $(\Delta x)^2 = 1/2\alpha^2 = \hbar/2m\omega$ gilt. (Siehe dazu auch die Aufgabe 3.22.)

S. auch Aufgabe 3.19.

3.21 Da die Energieeigenfunktionen u_{n-1}, $n \in \mathbb{N}$, Eigenfunktionen des Paritätsoperators sind, und X, P ungerade Operatoren darstellen, gilt (s. dazu die Aufgaben 2.2(c), 2.3 und 2.4)

$$\langle X\rangle = 0\,, \qquad \langle P\rangle = 0 \tag{3.21-1}$$

und es folgt

$$\Delta x = \sqrt{\langle X^2\rangle}\,, \qquad \Delta p = \sqrt{\langle P^2\rangle}\,. \tag{3.21-2}$$

Berechnung von $\langle X^2\rangle$ (s. Gl. (2.10-2)):

$$\langle X^2\rangle = \frac{1}{a}\int_{-a}^{+a} dx\,x^2 \begin{Bmatrix} \cos^2\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für} & n = 1,3,5,\ldots \\ \sin^2\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für} & n = 2,4,6,\ldots \end{Bmatrix} = \frac{1}{a}\int_0^{+a} dx\,x^2\Big(1 \pm \cos\frac{n\pi x}{a}\Big)$$

(oberes Vorzeichen für ungerade n, unteres Vorzeichen für gerade n). Mit dem angegebenen unbestimmten Integral erhält man

$$\langle X^2\rangle = \frac{1}{a}\Big[\frac{a^3}{3} \pm \frac{2a^3}{n^2\pi^2}\cos n\pi\Big] = \frac{1}{a}\Big[\frac{a^3}{3} - \frac{2a^3}{n^2\pi^2}\Big]\,,$$

also

$$(\Delta x)^2 = \langle X^2\rangle = \frac{a^2}{3}\Big[1 - \frac{6}{n^2\pi^2}\Big]\,. \tag{3.21-3}$$

$\langle P^2\rangle$ kann man auf analoge Weise berechnen, einfacher ist es jedoch, die bereits bekannten Eigenwerte von H zu verwenden (s. Gl. (2.10-1)):

$$(\Delta p)^2 = \langle P^2\rangle = 2m\langle H\rangle = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{4a^2}\,. \tag{3.21-4}$$

Für das Unschärfenprodukt folgt

$$\Delta x\cdot\Delta p = \sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3} - 2}\;\frac{\hbar}{2}\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,. \tag{3.21-5}$$

Das Unschärfenprodukt ist für den Grundzustand am kleinsten, und zwar gilt

$$\big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{n=1} = 1{,}136\,\frac{\hbar}{2}\,. \tag{3.21-6}$$

Bemerkungen

Die Aufgabe „krankt“ daran, dass auf dem Intervall $[-a,+a]$ kein selbstadjungierter Operator P in $\mathscr{D}_P$ existiert, für welchen $H = P^2/2m$ den Hamiltonoperator H in $\mathscr{D}_H$ des Problems darstellt. Siehe dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 1.14 und die Bemerkungen zu Aufgabe 3.11.

3.22

(a) Da die Energieeigenzustände $|\,n\,\rangle$, $n \in \mathbb{N}_0$, Eigenzustände des Paritätsoperators sind, und X, X^3, P, P^3 ungerade Operatoren bezüglich Inversion am Ursprung darstellen, gilt (s. dazu die Aufgaben 2.2 (c), 2.3 und 2.4)

$$\langle\, X\,\rangle = \langle\, P\,\rangle = \langle\, X^3\,\rangle = \langle\, P^3\,\rangle = 0 \tag{3.22-1}$$

und es folgen insbesondere wieder die Beziehungen (3.21-2). Mit Gl. (A.5-3), (A.5-4) und (A.5-8) von Anhang A.5 erhalten wir

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\Big[(a^\dagger)^2 + 2N + \mathbb{1} + a^2\Big]\,, \tag{3.22-2}$$

$$P^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}\Big[(a^\dagger)^2 - (2N+\mathbb{1}) + a^2\Big]\,, \tag{3.22-3}$$

$$\begin{aligned} X^4 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \Big[&(a^\dagger)^4 + (a^\dagger)^2(2N+\mathbb{1}) + (a^\dagger)^2 a^2 + (2N+\mathbb{1})(a^\dagger)^2 \\ &+ (2N+\mathbb{1})^2 + (2N+\mathbb{1})\,a^2 + a^2(a^\dagger)^2 + a^2(2N+\mathbb{1}) + a^4\Big]\,, \end{aligned} \tag{3.22-4}$$

$$\begin{aligned} P^4 = \left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^2 \Big[&(a^\dagger)^4 - (a^\dagger)^2(2N+\mathbb{1}) + (a^\dagger)^2 a^2 - (2N+\mathbb{1})(a^\dagger)^2 \\ &+ (2N+\mathbb{1})^2 - (2N+\mathbb{1})\,a^2 + a^2(a^\dagger)^2 - a^2(2N+\mathbb{1}) + a^4\Big]\,. \end{aligned} \tag{3.22-5}$$

Wegen (A.5-5a) und (A.5-9) können die Diagonalelemente eines Produktes von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in der Energiedarstellung des Oszillators nur dann von null verschieden sein, wenn die Anzahl der $a^\dagger$ und a gleich ist. Somit gilt

$$\langle\, X^2\,\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\,\langle\, 2N+\mathbb{1}\,\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\,(2n+1)\,, \tag{3.22-6}$$

$$\langle\, P^2\,\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}\,(2n+1)\,, \tag{3.22-7}$$

$$\begin{aligned} \langle\, X^4\,\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \Big[\langle\,(a^\dagger)^2 a^2\,\rangle + \langle\,(2N+\mathbb{1})^2\,\rangle + \langle\, a^2(a^\dagger)^2\,\rangle\Big] \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \Big[n(n-1) + (2n+1)^2 + (n+1)(n+2)\Big]\,, \end{aligned}$$

$$\langle X^4 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (6n^2 + 6n + 3)\,, \tag{3.22-8}$$

$$\langle P^4 \rangle = \left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^2 (6n^2 + 6n + 3)\,. \tag{3.22-9}$$

Aus (3.22-6), (3.22-7) folgt wegen (3.21-2)

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}\,(2n+1)}\,, \qquad \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}\,(2n+1)} \tag{3.22-10}$$

und

$$\Delta x \cdot \Delta p = (2n+1)\,\frac{\hbar}{2}\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{3.22-11}$$

Im Grundzustand nimmt also das Unschärfenprodukt seinen kleinsten Wert an, und dieser stimmt mit dem allgemein aufgrund der heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung kleinstmöglichen Wert überein:

$$\big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{n=0} = \big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{\min} = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{3.22-12}$$

(b) Nach Gl. (3.22-6), (3.22-7) gilt

$$\langle T \rangle = \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\frac{\hbar\omega}{2}\,, \qquad \langle V \rangle = \left\langle \frac{m\omega^2}{2}\,X^2 \right\rangle = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\frac{\hbar\omega}{2} \quad \Rightarrow$$

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle\,. \tag{3.22-13}$$

Bemerkungen

Zu (a): s. die Bemerkungen zu Aufgabe 3.20.

Zu (b): Die Beziehung $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ stellt einen Spezialfall des quantenmechanischen Virialtheorems dar. Siehe dazu die Aufgaben 4.6 und 5.13.

3.23 Für die gesuchten Unschärfen

$$\Delta x = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}\,, \qquad \Delta p = \sqrt{\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2} \tag{3.23-1}$$

benötigen wir die Erwartungswerte zu X, P Anhang A.5, Gl. (A.5-3), X^2 Gl. (3.22-2) und P^2 Gl. (3.22-3) im Zustand $|\,\psi\,\rangle$. Da der Vektor $|\,\psi\,\rangle$ auf eins normiert ist, gilt für den Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{A}$ in diesem Zustand $\langle A \rangle = \langle \psi\,|\,A\,|\,\psi \rangle$ und es folgt mit

$$|\,\psi\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,0\,\rangle - i\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,\rangle\,, \qquad \langle\,\psi\,| = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\langle\,0\,| + i\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,\langle\,1\,| \tag{3.23-2}$$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{2}{3}\,\langle 0\,|\,A\,|\,0\,\rangle - i\,\frac{\sqrt{2}}{3}\,\langle 0\,|\,A\,|\,1\,\rangle + i\,\frac{\sqrt{2}}{3}\,\langle 1\,|\,A\,|\,0\,\rangle + \frac{1}{3}\,\langle 1\,|\,A\,|\,1\,\rangle \\ &= \frac{2}{3}\,\langle 0\,|\,A\,|\,0\,\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{3}\,\mathrm{Im}\big[\langle 0\,|\,A\,|\,1\,\rangle\big] + \frac{1}{3}\,\langle 1\,|\,A\,|\,1\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.23-3}$$

Die Erwartungswerte zu $A = X, X^2, P, P^2$ in den Energieeigenzuständen $|\,n\,\rangle$ wurden bereits in Aufgabe 3.22 berechnet. Nach Gl. (3.22-1), (3.22-6) und (3.22-7) gilt

$$\langle\,0\,|\,X\,|\,0\,\rangle = \langle\,1\,|\,X\,|\,1\,\rangle = \langle\,0\,|\,P\,|\,0\,\rangle = \langle\,1\,|\,P\,|\,1\,\rangle = 0\,, \tag{3.23-4}$$

$$\langle\,0\,|\,X^2\,|\,0\,\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\,, \qquad \langle\,1\,|\,X^2\,|\,1\,\rangle = 3\,\frac{\hbar}{2m\omega}\,, \tag{3.23-5}$$

$$\langle\,0\,|\,P^2\,|\,0\,\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}\,, \qquad \langle\,1\,|\,P^2\,|\,1\,\rangle = 3\,\frac{m\hbar\omega}{2}\,. \tag{3.23-6}$$

Für die noch fehlenden Matrixelemente $\langle\,0\,|\,A\,|\,1\,\rangle$, $A = X, X^2, P, P^2$, folgt mit Anhang A.5, Gl. (A.5-5a), (A.5-9) und den Ausdrücken (A.5-3), (3.22-2), (3.22-3)

$$\langle\,0\,|\,X\,|\,1\,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,, \qquad \langle\,0\,|\,P\,|\,1\,\rangle = -i\,\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,, \tag{3.23-7}$$

$$\langle\,0\,|\,X^2\,|\,1\,\rangle = 0\,, \qquad \langle\,0\,|\,P^2\,|\,1\,\rangle = 0\,. \tag{3.23-8}$$

Einsetzen in Gl. (3.23-3) liefert schließlich

$$\langle\,X\,\rangle = 0\,, \qquad \langle\,P\,\rangle = -\frac{2\sqrt{2}}{3}\,\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,, \tag{3.23-9}$$

$$\langle\,X^2\,\rangle = \frac{5}{3}\,\frac{\hbar}{2m\omega}\,, \qquad \langle\,P^2\,\rangle = \frac{5}{3}\,\frac{m\hbar\omega}{2}\,, \tag{3.23-10}$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{5}{3}\,\frac{\hbar}{2m\omega}\,, \qquad (\Delta p)^2 = \frac{7}{9}\,\frac{m\hbar\omega}{2}\,, \tag{3.23-11}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\frac{35}{27}}\,\frac{\hbar}{2} = 1{,}13855\,\frac{\hbar}{2}\,. \tag{3.23-12}$$

Bemerkungen

Beachte, dass die Zustandsfunktion $\psi(x) = \langle\,x\,|\,\psi\,\rangle$ weder gerade noch ungerade ist. Dagegen ist die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte

$$W(x) \;=\; |\psi(x)|^2 = \frac{2}{3}\,[u_0(x)]^2 + \frac{1}{3}\,[u_1(x)]^2 \tag{3.23-13}$$

eine gerade Funktion. Man hätte deshalb $\langle\,X\,\rangle = 0$ sofort anschreiben können.

3.24 Der Operator

$$T := e^{a^\dagger} a^\dagger a\, e^{-a^\dagger} = e^{a^\dagger} N e^{-a^\dagger} \tag{3.24-1}$$

wird in der Energiedarstellung des linearen harmonischen Oszillators (d. h. in der Basis $\{\,|\,n\,\rangle,\ n \in \mathbb{N}_0\}$; $|\,n\,\rangle$ Eigenvektoren von $N = a^\dagger a$) durch die Matrix $\widehat{T}$ mit den Elementen

$$T_{nn'} = \langle\,n\,|\,T\,|\,n'\,\rangle\,, \quad n, n' \in \mathbb{N}_0 \tag{3.24-2}$$

repräsentiert.

Lösungsweg 1: Anwendung der Formel (1.20-1) und Benützung der Vertauschungsbeziehung Anhang A.5, Gl. (A.5-8) gibt

$$T = e^{a^\dagger} N e^{-a^\dagger} = N + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} [a^\dagger, N]_{(k)} \tag{3.24-3a}$$

mit

$$[a^\dagger, N]_{(1)} = [a^\dagger, N] = a^\dagger N - \underbrace{N a^\dagger}_{a^\dagger (N + \mathbb{1})} = -a^\dagger , \tag{3.24-3b}$$

$$[a^\dagger, N]_{(k)} = \mathbb{0} , \quad k \geq 2 \tag{3.24-3c}$$

und somit

$$T = N - a^\dagger . \tag{3.24-4}$$

Mit Anhang A.5, Gl. (A.5-5a) und (A.5-9) folgt damit unmittelbar

$$T_{nn'} = n \, \delta_{nn'} - \sqrt{n} \, \delta_{n,n'+1} \tag{3.24-5}$$

bzw.

$$\widehat{T} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} . \tag{3.24-6}$$

Lösungsweg 2: Um den Leser zu motivieren, sich die in vielen Fällen nützliche Formel (1.20-1) zu merken, berechne ich die Matrixelemente des Operators T Gl. (3.24-1) nun „zu Fuß“. Ausgehend von

$$e^{a^\dagger} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (a^\dagger)^j , \qquad e^{-a^\dagger} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (a^\dagger)^k \tag{3.24-7}$$

erhalte ich dann zunächst

$$T_{nn'} = \sum_{j,k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{j!\,k!} \langle \, n \, | \, (a^\dagger)^j N \, (a^\dagger)^k \, | \, n' \, \rangle . \tag{3.24-8}$$

Mit Anhang A.5, Gl. (A.5-9) folgt weiter

$$a^j \, | \, n \, \rangle = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{n!}}{\sqrt{(n-j)!}} \, | \, n - j \, \rangle & \text{für} \quad j \leq n \\ 0 & \text{für} \quad j > n \end{cases} , \tag{3.24-9}$$

$$(a^\dagger)^k \, | \, n' \, \rangle = \frac{\sqrt{(n'+k)!}}{\sqrt{n'!}} \, | \, n' + k \, \rangle \tag{3.24-10}$$

und

$$T_{nn'} = \frac{\sqrt{n!}}{\sqrt{n'!}} \sum_{j=0}^{n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{j!\,k!} (n'+k)\, \delta_{n-j,n'+k} \,. \tag{3.24-11}$$

Für $n' > n$ sind hier alle Summanden null, es gilt also

$$T_{nn'} = 0 \quad \text{für} \quad n' > n \,. \tag{3.24-12}$$

Für $n' = n$ liefert nur der Summand mit $j = k = 0$ einen von null verschiedenen Beitrag, und es folgt

$$T_{nn} = n \,. \tag{3.24-13}$$

Für $n' < n$ setze ich vorübergehend $n = n' + l,\ l \geq 1$, und erhalte

$$\begin{aligned} T_{n'+l,n'} &= \frac{\sqrt{(n'+l)!}}{\sqrt{n'!}} \sum_{j=0}^{n'+l} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{j!\,k!} (n'+k)\, \delta_{j,l-k} \\ &= \frac{\sqrt{(n'+l)!}}{\sqrt{n'!}} \sum_{k=0}^{l} \frac{(-1)^k}{k!\,(l-k)!} (n'+k) \\ &= \frac{\sqrt{(n'+l)!}}{\sqrt{n'!}} \left[n' \sum_{k=0}^{l} \frac{(-1)^k}{k!\,(l-k)!} + \sum_{k=1}^{l} \frac{(-1)^k}{(k-1)!\,(l-k)!} \right]. \end{aligned} \tag{3.24-14}$$

Nun gilt

$$\sum_{k=0}^{l} \frac{(-1)^k}{k!\,(l-k)!} = \frac{1}{l!} \sum_{k=0}^{l} (-1)^k \binom{l}{k} = 0 \quad \text{für} \quad l \geq 1 \,,$$

$$\sum_{k=1}^{l} \frac{(-1)^k}{(k-1)!\,(l-k)!} = -\frac{1}{(l-1)!} \sum_{m=0}^{l-1} (-1)^m \binom{l-1}{m} = \begin{cases} -1 & \text{für} \quad l = 1 \\ 0 & \text{für} \quad l \geq 2 \end{cases},$$

womit

$$T_{n'+1,n'} = -\sqrt{n'+1} \,, \qquad T_{n'+l,n'} = 0 \quad \text{für} \quad l \geq 2 \tag{3.24-15}$$

folgt. Diese Gleichungen lassen sich mit (3.24-12), (3.24-13) wieder zu (3.24-5) zusammenfassen.

Indirekt wurde damit auch wieder die Operatorgleichung (3.24-4) bewiesen.

Bemerkungen

Ist $f(a, a^\dagger)$ eine beliebige Operatorfunktion von $a, a^\dagger$, welche durch eine Operator-Potenzreihe definiert ist (eine solche Reihe lässt sich unter Benützung der Vertauschungsbeziehung von $a, a^\dagger$ stets in der „normalgeordneten Form“

$$f(a, a^\dagger) = \sum_{r,s=0}^{\infty} f_{rs}^{(\mathrm{n})} (a^\dagger)^r a^s \tag{3.24-16}$$

schreiben), so kann man die folgenden allgemeinen Beziehungen beweisen[3]

$$e^{\lambda a} f(a, a^\dagger)\, e^{-\lambda a} = f(a, a^\dagger + \lambda \mathbb{1})\,, \tag{3.24-17a}$$

$$e^{\lambda a^\dagger} f(a, a^\dagger)\, e^{-\lambda a^\dagger} = f(a - \lambda \mathbb{1}, a^\dagger)\,, \qquad \lambda \in \mathbb{C}\,. \tag{3.24-17b}$$

$$e^{\lambda a^\dagger a} f(a, a^\dagger)\, e^{-\lambda a^\dagger a} = f(e^{-\lambda} a, e^{\lambda} a^\dagger)\,, \tag{3.24-17c}$$

Diese Beziehungen spielen in der Quantentheorie der elektromagnetischen Strahlung eine Rolle.

Setzt man in Gl. (3.24-17b) $\lambda = 1$ und $f(a, a^\dagger) = a^\dagger a$ ein, so erhält man für den Operator T Gl. (3.24-1) sofort den Ausdruck (3.24-4).

3.25

(a) Ist $\vec{P}$ der Operator des kanonischen Impulses, $\vec{\Pi}$ der Operator des mechanischen Impulses, $\vec{A}(\vec{R})$ der Operator des Vektorpotentials, m die Masse und q die Ladung des Teilchens, so gilt für den Operator der Teilchengeschwindigkeit

$$\vec{V} = \frac{\vec{\Pi}}{m} \quad \text{mit} \quad \vec{\Pi} = \vec{P} - \frac{q}{c}\,\vec{A}(\vec{R})\,. \tag{3.25-1}$$

Für ein homogenes Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B),\ B > 0$, stellt

$$\vec{A}(\vec{R}) = \tfrac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{R}) = (-\tfrac{1}{2} B X_2, \tfrac{1}{2} B X_1, \mathbb{0}) \tag{3.25-2}$$

einen möglichen Ausdruck für den Operator des Vektorpotentials dar, und es folgt mit den fundamentalen Vertauschungsbeziehungen

$$[X_j, X_k] = [P_j, P_k] = \mathbb{0}\,, \qquad [X_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}\mathbb{1}\,, \qquad j, k = 1, 2, 3$$

für die Komponenten des Operators der Teilchengeschwindigkeit

$$[V_1, V_2] = \frac{1}{m^2}\,[P_1 + \frac{q}{2c}\,BX_2, P_2 - \frac{q}{2c}\,BX_1] = \frac{qB}{2m^2c}\,\Big\{[X_2, P_2] - [P_1, X_1]\Big\}\,,$$

$$[V_1, V_2] = i\hbar\,\frac{qB}{m^2c}\,\mathbb{1}\,, \tag{3.25-3a}$$

$$[V_2, V_3] = \frac{1}{m^2}\,[P_2 - \frac{q}{2c}\,BX_1, P_3] = \mathbb{0}\,, \tag{3.25-3b}$$

$$[V_3, V_1] = \frac{1}{m^2}\,[P_3, P_1 + \frac{q}{2c}\,BX_2] = \mathbb{0}\,. \tag{3.25-3c}$$

(b) Die durch die Operatoren V_2 und V_3 einerseits sowie V_3 und V_1 andrerseits repräsentierten Observablen sind jeweils miteinander verträglich, dagegen sind die durch die Operatoren V_1 und V_2 repräsentierten Observablen *nicht miteinander verträglich.*

[3] Siehe Louisell, W. H.: Quantum Statistical Properties of Radiation. John Wiley & Sons, New York 1990.

Aus der *allgemeinen heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung* (s. z. B. [3])

$$\left.\begin{aligned} &[F,G] = iC\,, \quad F^\dagger = F\,, \quad G^\dagger = G \\ &\Delta f := \sqrt{\langle F^2\rangle - \langle F\rangle^2}\,, \quad \Delta g := \sqrt{\langle G^2\rangle - \langle G\rangle^2} \end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; \Delta f\cdot\Delta g \geq \frac{|\langle C\rangle|}{2} \tag{3.25-4}$$

folgt

$$\Delta v_1 \cdot \Delta v_2 \;\geq\; \frac{|q|B}{m^2 c}\,\frac{\hbar}{2}\,. \tag{3.25-5}$$

Bemerkungen

Wie aus der klassischen Elektrodynamik bekannt ist, sind die elektromagnetischen Potentiale (Vektorpotential $\vec{A}$ und skalares Potential φ) nur bis auf *Eichtransformationen*

$$\vec{A},\,\varphi \quad\to\quad \vec{A} + \operatorname{grad} f =: \vec{A}', \quad \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} =: \varphi'$$

bestimmt. Entsprechend kann im vorliegenden Beispiel eines zeitlich konstanten homogenen Magnetfeldes $\vec{B} = (0,0,B)$ der Operator des Vektorpotentials statt durch Gl. (3.25-2) auch durch $\vec{A}'(\vec{R}) = (-BX_2, \mathbb{0}, \mathbb{0})$ oder $(\mathbb{0}, BX_1, \mathbb{0})$ (s. Aufgabe 2.17) etc. definiert werden. – Welchen physikalischen Sinn hat dann die Beziehung (3.25-5), wenn man die durch Gl. (3.25-1) gegebenen Operatoren V_1, V_2 auf verschiedene Weise definieren kann?

Die Forderung, dass alle physikalischen Aussagen, d. h. alle quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte (etwa $\langle \vec{V}\rangle$), von der Willkür in der Wahl der elektromagnetischen Potentiale nicht berührt werden dürfen, führt dazu, dass bei „Umeichung“ der Potentiale der Zustandsvektor $|\,\psi(t)\,\rangle$ geeignet mittransformiert werden muss. Wellenmechanisch geschrieben lauten die quantentheoretischen Eichtransformationen für Einteilchensysteme

$$\vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \operatorname{grad} f(\vec{r},t)\,, \tag{3.25-6a}$$

$$\varphi'(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\vec{r},t)}{\partial t}\,, \tag{3.25-6b}$$

$$\psi'(\vec{r},t) = \psi(\vec{r},t)\,\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\,f(\vec{r},t)\Big]\,. \tag{3.25-6c}$$

Im Zusammenhang mit dem obigen Beispiel interessieren uns insbesondere die Aussagen bezüglich der Teilchengeschwindigkeit. Mithilfe der Formel (s. Gl. (1.18-10))

$$[P_j, F(\vec{R},t)] = -i\hbar\,\frac{\partial F(\vec{R},t)}{\partial X_j}$$

kann man leicht zeigen, dass die Vertauschungsbeziehungen (3.25-3) gegenüber Eichtransformationen invariant sind. Da die Eichtransformationen auch die Erwartungswerte und Unschärfen nicht ändern, stellt die Unbestimmtheitsbeziehung (3.25-5) eine *eichinvariante Aussage* dar.

3.26 Der Zustandsvektor

$$|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{6}\Big\{4\,|\,1\,0\,0\,\rangle + 2\,|\,2\,0\,0\,\rangle - i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle + (1-2i)\,|\,3\,2,-1\,\rangle\Big\} \tag{3.26-1a}$$

ist auf eins normiert,

$$\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{36}(16+4+1+10+5) = 1\,, \tag{3.26-1b}$$

es sind daher die Formeln von Anhang A.10, Abb. A.10-3 anwendbar.

(a) In diesem Fall ist der Projektionsoperator für die Berechnung der gesuchten Wahrscheinlichkeit nach der Formel $W = \langle\,P\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,P\,|\,\psi\,\rangle$ durch

$$P_n = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m_l=-l}^{+l} P_{nlm_l} = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m_l=-l}^{+l} |\,nlm_l\,\rangle\langle\,nlm_l\,| \tag{3.26-2a}$$

gegeben, und für die Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_n \equiv W_n[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_n\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m_l=-l}^{+l} |\langle\,nlm_l\,|\,\psi\,\rangle|^2\,. \tag{3.26-2b}$$

Der Grund dafür, warum ich bei dieser Aufgabe beim Symbol für die Wahrscheinlichkeiten den „Zustand“ explizit anmerke, wird beim Punkt (i) klar werden.

Die Beziehung (3.26-2b) zeigt, dass sich die Wahrscheinlichkeit W_n für $n > 1$ als Summe von $g_n = n^2$ *Teilwahrscheinlichkeiten* darstellen lässt, wobei

$$W_{nlm_l} \equiv W_{nlm_l}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{nlm_l}\,|\,\psi\,\rangle = |\langle\,nlm_l\,|\,\psi\,\rangle|^2 \tag{3.26-3}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass man bei einer Messung des vollständigen Satzes verträglicher Observablen $\{\mathcal{H}, \vec{\mathcal{L}}^2, \mathcal{L}_z\}$ das Messwerttripel $\{E_n, b_l, m_l\hbar\}$ findet. Das bedeutet: Misst man den genannten Observablensatz von *drei* Observablen an N Wasserstoffatomen der Gesamtheit (N hinreichend groß) und zählt man alle Fälle zusammen, in denen man für die Energie den Messwert E_n erhalten hat, so erhält man dieselbe Zählrate N_n, wie wenn man an N Wasserstoffatomen der Gesamtheit *nur* die Energie misst und die Fälle zählt, in denen man den Messwert E_n erhalten hat.

Wir berechnen nun die Wahrscheinlichkeit (3.26-2b). Wenn wir in die Formel konkrete n-Werte einsetzen, verwenden wir für W_n die Schreibweise

$$W_{E_n} \equiv W_{E_n}[\psi]\,, \tag{3.26-4}$$

um Verwechslungen mit den Wahrscheinlichkeiten von Punkt (d) zu vermeiden. Es gilt:

$$W_{E_1}[\psi] = |\langle\,1\,0\,0\,|\,\psi\,\rangle|^2 = \frac{16}{36} = 0{,}\dot{4}\,; \tag{3.26-5a}$$

$$\begin{aligned} W_{E_2}[\psi] &= |\langle\,2\,0\,0\,|\,\psi\,\rangle|^2 + |\langle\,2\,1,-1\,|\,\psi\,\rangle|^2 + |\langle\,2\,1\,0\,|\,\psi\,\rangle|^2 + |\langle\,2\,1\,1\,|\,\psi\,\rangle|^2 \\ &= \frac{4}{36} + \frac{10}{36} + \frac{1}{36} + 0 = \frac{15}{36} = 0{,}41\dot{6}\,; \end{aligned} \tag{3.26-5b}$$

$$W_{E_3}[\psi] = \sum_{l=0}^{2}\sum_{m_l=-l}^{+l} |\langle\,3\,l m_l\,|\,\psi\,\rangle|^2 = \frac{5}{36} = 0{,}13\dot{8}\,; \tag{3.26-5c}$$

$$W_{E_n}[\psi] = 0 \quad \text{für} \quad n \geq 4\,. \tag{3.26-5d}$$

(Der Hamiltonoperator besitzt zusätzlich ein kontinuierliches Spektrum. Wegen Gl. (3.26-1a) gilt $W(E) \equiv W(E)[\psi] = 0$ für $0 < E < +\infty$.)

(b) Da der Projektionsoperator zur Eigenschaft „E_1 oder E_2“ (mathematisch $E_1 \vee E_2$ geschrieben) durch

$$P_{E_1 \vee E_2} = P_{E_1} + P_{E_2} \tag{3.26-6a}$$

gegeben ist, gilt für die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$W_{E_1 \vee E_2}[\psi] = W_{E_1}[\psi] + W_{E_2}[\psi] = \frac{31}{36} = 0{,}86\dot{1}\,. \tag{3.26-6b}$$

(c) *Lösungsweg 1:* Berechnung des Erwartungswertes ausgehend von seiner Definition

$$\langle\, H \,\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n W_n + \int_0^{+\infty} E\, W(E)\, dE\,. \tag{3.26-7}$$

Mit den Ergebnissen von Punkt (a) (und mit $W(E) = 0$) erhält man unter Benützung von $E_n = -E_\mathrm{H}/n^2$

$$\begin{aligned} \langle\, H \,\rangle \equiv \langle\, H \,\rangle_\psi &= E_1 W_{E_1} + E_2 W_{E_2} + E_3 W_{E_3} = -E_\mathrm{H}\left(1 \cdot \frac{16}{36} + \frac{1}{4} \cdot \frac{15}{36} + \frac{1}{9} \cdot \frac{5}{36}\right) \\ &= -E_\mathrm{H}\,\frac{731}{1296} = -0{,}5640 \cdot E_\mathrm{H}\,. \end{aligned} \tag{3.26-8}$$

Lösungsweg 2: Benützung der Formel[4] $\langle\, H \,\rangle = \langle\, \psi \,|\, H \,|\, \psi \,\rangle$

Mit Gl. (3.26-1a) folgt

$$\begin{aligned} H\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{6}\Big\{ &4\,E_1\,|\,1\,0\,0\,\rangle + 2\,E_2\,|\,2\,0\,0\,\rangle - i\,E_2\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,E_2\,|\,2\,1,-1\,\rangle \\ &+ (1-2i)\,E_3\,|\,3\,2,-1\,\rangle\Big\} \end{aligned} \tag{3.26-9}$$

und

$$\langle\, \psi \,| = \frac{1}{6}\Big\{4\,\langle\, 1\,0\,0 \,| + 2\,\langle\, 2\,0\,0 \,| + i\,\langle\, 2\,1\,0 \,| + \sqrt{10}\,\langle\, 2\,1,-1 \,| + (1+2i)\,\langle\, 3\,2,-1 \,|\Big\}, \tag{3.26-10}$$

und mit $E_n = -E_\mathrm{H}/n^2$ liefert das „Ausmultiplizieren“ nach kurzer elementarer Rechnung wieder (3.26-8).

(d) Der Projektionsoperator zur gefragten Eigenschaft ist durch

$$P_l = \sum_{m_l=-l}^{+l} \sum_{n=l+1}^{\infty} P_{nlm_l} + \sum_{m_l=-l}^{+l} \int_0^{+\infty} dP_{lm_l}(E) \tag{3.26-11a}$$

[4] Die Voraussetzung $\psi \in \mathscr{D}_H$ für die Anwendbarkeit dieser Formel ist erfüllt.

gegeben, und für die gesuchte Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_l \equiv W_l[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_l\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{m_l=-l}^{+l}\sum_{n=l+1}^{\infty}|\langle\,nlm_l\,|\,\psi\,\rangle|^2 + \sum_{m_l=-l}^{+l}\int_0^{+\infty} dE\,|\langle\,Elm_l\,|\,\psi\,\rangle|^2\,. \tag{3.26-11b}$$

Zur Interpretation dieser Formel kann man analoge Überlegungen anstellen wie zur Formel (3.26-2b).

Wir berechnen nun die Wahrscheinlichkeit (3.26-11b). Wenn wir konkrete l-Werte einsetzen verwenden wir für W_l die Schreibweise

$$W_{b_l} \equiv W_{b_l}[\psi]\,, \tag{3.26-12}$$

um Verwechslungen mit den Wahrscheinlichkeiten von Punkt (a) zu vermeiden. Es gilt (s. Gl. (3.26-1a)):

$$W_{b_0}[\psi] = \frac{16}{36} + \frac{4}{36} = \frac{20}{36} = 0{,}\dot{5}\,; \qquad W_{b_1}[\psi] = \frac{1}{36} + \frac{10}{36} = \frac{11}{36} = 0{,}30\dot{5}\,; \tag{3.26-13a}$$

$$W_{b_2}[\psi] = \frac{5}{36} = 0{,}13\dot{8}\,; \qquad W_{b_l}[\psi] = 0 \quad \text{für} \quad l \geq 3\,. \tag{3.26-13b}$$

(e) Da der Projektionsoperator zur Eigenschaft „b_0 oder b_2“ durch

$$P_{b_0 \vee b_2} = P_{b_0} + P_{b_2} \tag{3.26-14a}$$

gegeben ist, gilt für die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$W_{b_0 \vee b_2}[\psi] = W_{b_0}[\psi] + W_{b_2}[\psi] = \frac{25}{36} = 0{,}69\dot{4}\,. \tag{3.26-14b}$$

(f) *Lösungsweg 1:* Berechnung des Erwartungswertes ausgehend von seiner Definition

$$\langle\,\vec{L}^2\,\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} b_l W_l\,. \tag{3.26-15}$$

Mit den Ergebnissen von Punkt (d) erhält man

$$\begin{aligned}\langle\,\vec{L}^2\,\rangle \equiv \langle\,\vec{L}^2\,\rangle_\psi &= b_0 W_{b_0} + b_1 W_{b_1} + b_2 W_{b_2} = \left(0 + 2\cdot\frac{11}{36} + 6\cdot\frac{5}{36}\right)\hbar^2 \\ &= \frac{52}{36}\,\hbar^2 = 1{,}\dot{4}\,\hbar^2\,.\end{aligned} \tag{3.26-16}$$

Lösungsweg 2: Benützung der Formel[5] $\langle\,\vec{L}^2\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,\vec{L}^2\,|\,\psi\,\rangle$

Mit Gl. (3.26-1a) folgt

$$\vec{L}^2\,|\,\psi\,\rangle = \frac{\hbar^2}{6}\Big\{-2i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + 2\sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle + 6(1-2i)\,|\,3\,2,-1\,\rangle\Big\}\,, \tag{3.26-17}$$

und „Ausmultiplizieren“ mit (3.26-10) liefert

[5] Die Voraussetzung $\psi \in \mathscr{D}_{\vec{L}^2}$ für die Anwendbarkeit dieser Formel ist erfüllt.

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{36}\,(2+20+30) = \frac{52}{36}\,\hbar^2 = 1{,}\dot{4}\,\hbar^2 . \tag{3.26-18}$$

(g) Der Projektionsoperator zur gefragten Eigenschaft ist durch

$$P_{-\hbar} = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{n=l+1}^{\infty} P_{nl,-1} + \sum_{l=1}^{\infty}\int_0^{+\infty} dP_{l,-1}(E) \tag{3.26-19a}$$

gegeben, und für die gesuchte Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_{-\hbar} \equiv W_{-\hbar}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{-\hbar}\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{n=l+1}^{\infty} |\langle\,nl,-1\,|\,\psi\,\rangle|^2 + \sum_{l=1}^{\infty}\int_0^{+\infty} dE\,|\langle\,El,-1\,|\,\psi\,\rangle|^2 . \tag{3.26-19b}$$

Zur Interpretation dieser Formel kann man analoge Überlegungen anstellen wie zur Formel (3.26-2b). – Mit Gl. (3.26-1a) erhält man

$$W_{-\hbar} = \frac{10}{36} + \frac{5}{36} = \frac{15}{36} = 0{,}41\dot{6}\,. \tag{3.26-20}$$

(h) *Lösungsweg 1:* Berechnung des Erwartungswertes ausgehend von seiner Definition

$$\langle\,L_z\,\rangle = \sum_{m_l=-\infty}^{+\infty} m_l\hbar\,W_{m_l\hbar}\,. \tag{3.26-21}$$

Wir haben zwar im Punkt (g) nur die Wahrscheinlichkeit $W_{-\hbar}$ berechnet, die Wahrscheinlichkeit $W_{0\hbar}$ benötigen wir aber nicht, da sie mit dem Eigenwert null multipliziert wird, und alle anderen Wahrscheinlichkeiten $W_{m_l\hbar}$ sind wegen Gl. (3.26-1a) *offensichtlich* Null. Somit:

$$\langle\,L_z\,\rangle = -\frac{15}{36}\,\hbar = -0{,}41\dot{6}\,\hbar\,. \tag{3.26-22}$$

Lösungsweg 2: Benützung der Formel[6] $\langle\,L_z\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,L_z\,|\,\psi\,\rangle$

Mit Gl. (3.26-1a) folgt

$$L_z\,|\,\psi\,\rangle = -\frac{\hbar}{6}\Big\{\sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle + (1-2i)\,|\,3\,2,-1\,\rangle\Big\}, \tag{3.26-23}$$

und „Ausmultiplizieren“ mit (3.26-10) liefert

$$\langle\,L_z\,\rangle = -\frac{\hbar}{36}\,(10+5) = -\frac{15}{36}\,\hbar = -0{,}41\dot{6}\,\hbar\,. \tag{3.26-24}$$

(i)* (i1) *Gleichzeitige Messung von $\mathcal{H}$ und $\vec{\mathcal{L}}^2$*

In diesem Fall ist der Projektionsoperator zur gefragten Eigenschaft durch

$$P_{\{E_2,b_1\}} = \sum_{m_l=-1}^{+1} P_{2\,1\,m_l} = \sum_{m_l=-1}^{+1} |\,2\,1\,m_l\,\rangle\langle\,2\,1\,m_l\,| \tag{3.26-25a}$$

[6] Die Voraussetzung $\psi \in \mathscr{D}_{L_z}$ für die Anwendbarkeit dieser Formel ist erfüllt.

gegeben, und für die Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_{\{E_2,b_1\}} \equiv W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{\{E_2,b_1\}}\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{m_l=-1}^{+1} |\langle\,2\,1\,m_l\,|\,\psi\,\rangle|^2\,. \qquad (3.26\text{-}25b)$$

Die Beziehung (3.26-25b) zeigt, dass sich die Wahrscheinlichkeit $W_{\{E_2,b_1\}}$ als Summe von drei *Teilwahrscheinlichkeiten* darstellen lässt, wobei

$$W_{\{E_2,b_1,m_l\hbar\}} \equiv W_{\{E_2,b_1,m_l\hbar\}}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{\{E_2,b_1,m_l\hbar\}}\,|\,\psi\,\rangle = |\langle\,2\,1\,m_l\,|\,\psi\,\rangle|^2 \qquad (3.26\text{-}26)$$

(mit $m_l = -1, 0$ oder $+1$) die Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass man bei einer Messung des vollständigen Satzes verträglicher Observablen $\{\mathcal{H}, \vec{\mathcal{L}}^2, \mathcal{L}_z\}$ das Messwerttripel $\{E_2, b_1, m_l\hbar\}$ findet. Das bedeutet: Misst man den genannten Observablensatz von *drei* Observablen an N Wasserstoffatomen der Gesamtheit (N hinreichend groß) und zählt man alle Fälle zusammen, in denen man für die Energie den Messwert E_2 und für das Bahndrehimpulsquadrat den Messwert b_1 erhalten hat, so erhält man dieselbe Zählrate $N_{\{E_2,b_1\}}$, wie wenn man an N Wasserstoffatomen der Gesamtheit nur das Observablen*paar* $\{\mathcal{H}, \vec{\mathcal{L}}^2\}$ misst und die Fälle zählt, in denen man das Messwertpaar $\{E_2, b_1\}$ erhalten hat.

Mit Gl. (3.26-1a) erhält man

$$W_{\{E_2,b_1\}} = \frac{1}{36} + \frac{10}{36} = \frac{11}{36} = 0{,}30\dot{5}\,. \qquad (3.26\text{-}27)$$

Frage: Hätten wir die Wahrscheinlichkeit $W_{\{E_2,b_1\}}$ nicht auch als *Produkt* der Wahrscheinlichkeiten W_{E_2} und W_{b_1} berechnen können? Antwort: „Ja“ und „Nein“.

„Nein“ (s. die Gleichungen (3.26-27), (3.26-5b) und (3.26-13a)):

$$W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] \neq W_{E_2}[\psi]\,W_{b_1}[\psi]\,; \quad \text{in Zahlen:} \quad \frac{11}{36} \neq \frac{15}{36}\cdot\frac{11}{36}\,. \qquad (3.26\text{-}28a)$$

„Ja“ (Behauptung; Beweis s. Punkt (i2)):

$$W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] = W_{E_2}[\psi]\,W_{b_1}[\psi'] \quad \text{mit} \quad |\,\psi'\,\rangle = \frac{P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle\|}\,. \qquad (3.26\text{-}28b)$$

Dabei ist $W_{b_1}[\psi']$ die *bedingte Wahrscheinlichkeit* dafür, dass die Messung der Observablen $\vec{\mathcal{L}}^2$ den Messwert b_1 *ergibt*, *unter der Hypothese*, dass eine unmittelbar davor durchgeführte Messung der Observablen $\mathcal{H}$ im „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$ den Messwert E_2 *ergeben hat*. Jene Wasserstoffatome, bei denen die Messung von $\mathcal{H}$ den Messwert E_2 ergeben hat, bilden eine neue Gesamtheit mit dem Zustandsvektor $|\,\psi'\,\rangle$ („Zustandsreduktion“).

Damit ist nun klar, warum ich bei dieser Aufgabe von Anfang an bei den Symbolen für die Wahrscheinlichkeiten den „Zustand“ explizit angemerkt habe.

(i2) *Zuerst Messung von $\mathcal{H}$, unmittelbar darauf Messung von $\vec{\mathcal{L}}^2$*

Bezeichne ich die hier gesuchte Wahrscheinlichkeit mit $W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}:\, E_2;\, \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2:\, b_1\}}$, so muss nach den Gesetzen von Anhang A.10, Abb. A.10-3 gelten:

$$W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}:\, E_2;\, \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2:\, b_1\}}[\psi] = W_{E_2}[\psi]\, W_{b_1}[\psi'] \qquad \text{mit} \qquad |\,\psi'\,\rangle = \frac{P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle\|}\,. \tag{3.26-29}$$

$W_{E_2}[\psi]$ ist dabei die in Punkt (a) berechnete Wahrscheinlichkeit (3.26-5b), die Bedeutung der bedingten Wahrscheinlichkeit $W_{b_1}[\psi']$ und des „neuen“ Zustandsvektors $|\,\psi'\,\rangle$ wurden bereits unterhalb von Gl. (3.26-28b) erklärt. Für die Wahrscheinlichkeit $W_{b_1}[\psi']$ muss dabei analog zu den Wahrscheinlichkeiten von Punkt (d)

$$W_{b_1}[\psi'] = \langle\,\psi'\,|\,P_{b_1}\,|\,\psi'\,\rangle \tag{3.26-30}$$

gelten. Im konkreten Beispiel ist der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ durch Gl. (3.26-1a) gegeben, und es folgt mit dem Projektionsoperator P_{E_2} (Gl. (3.26-2a) mit $n = 2$)

$$P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{6}\Big\{2\,|\,2\,0\,0\,\rangle - i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle\Big\}\,, \tag{3.26-31a}$$

$$|\,\psi'\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}\Big\{2\,|\,2\,0\,0\,\rangle - i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle\Big\}\,. \tag{3.26-31b}$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit (3.26-30) (vgl. mit $W_{b_1}[\psi]$ Gl. (3.26-13a))

$$W_{b_1}[\psi'] = \frac{1}{15} + \frac{10}{15} = \frac{11}{15} = 0{,}7\dot{3}\,. \tag{3.26-32}$$

Setzt man (3.26-5b) und (3.26-32) in Gl. (3.26-29) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}:\, E_2;\, \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2:\, b_1\}}[\psi] &= W_{E_2}[\psi]\, W_{b_1}[\psi'] = \frac{15}{36}\cdot\frac{11}{15} = \frac{11}{36} \\ &= W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] \quad \text{(s. Gl. (3.26-27))}, \end{aligned} \tag{3.26-33}$$

womit gezeigt ist, dass die Behauptung (3.26-28b) für das *gegebene* $|\,\psi\,\rangle$ richtig ist. Man kann aber darüberhinaus zeigen, dass

$$W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}:\, E_2;\, \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2:\, b_1\}}[\psi] = W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] \tag{3.26-34}$$

für *beliebige* „Zustände“ $|\,\psi\,\rangle$ gilt: Mit $W_{E_2}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle$, der Beziehung (3.26-29) und unter Beachtung, dass P_{E_2} Projektionsoperator ist, folgt zunächst

$$\begin{aligned} &W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}:\, E_2;\, \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2:\, b_1\}}[\psi] = W_{E_2}[\psi]\, W_{b_1}[\psi'] \\ &\quad = \langle\,\psi\,|\,P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle\,\frac{\langle\,\psi\,|\,P_{E_2}P_{b_1}P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle\|^2} = \langle\,\psi\,|\,P_{E_2}P_{b_1}P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.26-35}$$

Ferner zeigt man mithilfe der Formeln (3.26-2a) und (3.26-11a)

$$P_{E_n} P_{b_l} = P_{b_l} P_{E_n} = P_{\{E_n, b_l\}}\,, \quad \forall n, l\,. \tag{3.26-36}$$

(Dies ist – zusammen mit den analogen Beziehungen, die sich auf das kontinuierliche Spektrum von H beziehen, – die *mathematisch exakte Formulierung der Verträglichkeit von* $\mathcal{H}$ *und* $\vec{\mathcal{L}}^2$. Beachte, dass alle Projektionsoperatoren ganz $\mathscr{H}$ zum Definitionsbereich haben, während dies für die Operatoren H und $\vec{L}^2$ *nicht* zutrifft.)

Damit folgt

$$\langle\,\psi\,|\,P_{E_2} P_{b_1} P_{E_2}\,|\,\psi\,\rangle = \langle\,\psi\,|\,P_{\{E_2,b_1\}}\,|\,\psi\,\rangle = W_{\{E_2,b_1\}}[\psi]\,, \tag{3.26-37}$$

und Einsetzen dieser Beziehung in (3.26-35) gibt (3.26-34).

(i3) *Zuerst Messung von* $\vec{\mathcal{L}}^2$, *unmittelbar darauf Messung von* $\mathcal{H}$

Da alle Überlegungen vollkommen analog zu Punkt (i2) sind, genügt es, die allgemeinen Formeln anzugeben und für den speziellen „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$ auszuwerten.

Für einen *beliebigen* „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$ gilt

$$W_{\{\text{zuerst } \vec{\mathcal{L}}^2\colon b_1;\ \text{dann } \mathcal{H}\colon E_2\}}[\psi] = W_{b_1}[\psi]\, W_{E_2}[\psi''] \quad \text{mit} \quad |\,\psi''\,\rangle = \frac{P_{b_1}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{b_1}\,|\,\psi\,\rangle\|} \tag{3.26-38}$$

und

$$W_{\{\text{zuerst } \vec{\mathcal{L}}^2\colon b_1;\ \text{dann } \mathcal{H}\colon E_2\}}[\psi] = W_{\{E_2,b_1\}}[\psi]\,. \tag{3.26-39}$$

Im konkreten Beispiel ist der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ durch Gl. (3.26-1a) gegeben, und es folgt mit dem Projektionsoperator P_{b_1} (Gl. (3.26-11a) mit $l = 1$)

$$P_{b_1}\,|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{6}\Big\{-i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle\Big\}\,, \tag{3.26-40a}$$

$$|\,\psi''\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{11}}\Big\{-i\,|\,2\,1\,0\,\rangle + \sqrt{10}\,|\,2\,1,-1\,\rangle\Big\}\,. \tag{3.26-40b}$$

Da $|\,\psi''\,\rangle$ Eigenvektor von H zum Eigenwert E_2 ist, folgt (vgl. mit $W_{E_2}[\psi]$ Gl. (3.26-5b))

$$W_{E_2}[\psi''] = 1\,, \tag{3.26-41}$$

und Einsetzen von (3.26-13a), (3.26-41) in Gl. (3.26-38) gibt

$$\begin{aligned} W_{\{\text{zuerst } \vec{\mathcal{L}}^2\colon b_1;\ \text{dann } \mathcal{H}\colon E_2\}}[\psi] &= W_{b_1}[\psi]\, W_{E_2}[\psi''] = \frac{11}{36}\cdot 1 = \frac{11}{36} \\ &= W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] \quad \text{(s. Gl. (3.26-27))}. \end{aligned} \tag{3.26-42}$$

Die Ergebnisse der Punkte (i1) bis (i3) zeigen, dass für einen *beliebigen* „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$

$$W_{\{\text{zuerst } \mathcal{H}\colon E_2;\ \text{dann } \vec{\mathcal{L}}^2\colon b_1\}}[\psi] = W_{\{\text{zuerst } \vec{\mathcal{L}}^2\colon b_1;\ \text{dann } \mathcal{H}\colon E_2\}}[\psi] = W_{\{E_2,b_1\}}[\psi] \tag{3.26-43}$$

gilt.

Was erhält man für die unter (a) bis (i) gefragten Größen, wenn als Messzeitpunkt nicht t_0, sondern $t > t_0$ gewählt wird? – Da die Observablen $\mathcal{H}$, $\vec{\mathcal{L}}^2$ und $\mathcal{L}_z$ *Erhaltungsgrößen* des Systems sind (die Operatoren H, $\vec{L}^2$, L_z vertauschen mit H), sind alle zugehörigen Wahrscheinlichkeiten (und damit auch alle zugehörigen Erwartungswerte) *zeitunabhängig*.

Bemerkungen

Was unter Punkt (i) bezüglich des Observablenpaares $\{\mathcal{H}, \vec{\mathcal{L}}^2\}$ und des zugehörigen Messwertpaares $\{E_2, b_1\}$ ausgesagt wurde, gilt sinngemäß für *beliebige* mögliche Messwertpaare $\{a_n, b_m\}$ *beliebiger* Paare $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$ verträglicher Observablen bei *beliebigen* Systemen. Ob ein Messapparat „intern“ wirklich $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ *gleichzeitig* oder in der einen oder anderen Reihenfolge unmittelbar *nacheinander* misst, ist für das Ergebnis ohne Belang (Oberbegriff: Messung von $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ *zugleich*):

$$W_{\{\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}:\,\{a_n,b_m\}\}}[\psi] = W_{\{\text{zuerst } \mathcal{A}:\,a_n;\ \text{dann } \mathcal{B}:\,b_m\}}[\psi] = W_{\{\text{zuerst } \mathcal{B}:\,b_m;\ \text{dann } \mathcal{A}:\,a_n\}}[\psi]\,. \tag{3.26-44}$$

Damit ergeben sich die Beziehungen

$$W_{\{\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}:\,\{a_n,b_m\}\}}[\psi] \equiv W_{\{a_n,b_m\}}[\psi] = W_{a_n}[\psi]\, W_{b_m}[\psi'] \qquad \text{mit} \qquad |\,\psi'\,\rangle = \frac{P_{a_n}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{a_n}\,|\,\psi\,\rangle\|}\ ; \tag{3.26-45a}$$

$$W_{\{\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}:\,\{a_n,b_m\}\}}[\psi] \equiv W_{\{a_n,b_m\}}[\psi] = W_{b_m}[\psi]\, W_{a_n}[\psi''] \qquad \text{mit} \qquad |\,\psi''\,\rangle = \frac{P_{b_m}\,|\,\psi\,\rangle}{\|P_{b_m}\,|\,\psi\,\rangle\|}\ . \tag{3.26-45b}$$

Angenommen es ist nur die *bedingte Wahrscheinlichkeit* $W_{b_m}[\psi']$ gefragt, d. h. die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Messung der Observablen $\mathcal{B}$ den Messwert b_m ergibt, unter der Hypothese, dass eine unmittelbar davor durchgeführte Messung der Observablen $\mathcal{A}$ im „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$ den Messwert a_n ergeben hat. Man kann dann entweder zuerst gemäß (3.26-45a) den „neuen“ Zustandsvektor $|\,\psi'\,\rangle$ berechnen, d. h. die „Zustandsreduktion“ durchführen, und hierauf die gesuchte Wahrscheinlichkeit nach der Formel

$$W_{b_m}[\psi'] = \langle\,\psi'\,|\,P_{b_m}\,|\,\psi'\,\rangle \tag{3.26-46}$$

berechnen oder man kann stattdessen

$$W_{b_m}[\psi'] = \frac{W_{\{a_n,b_m\}}[\psi]}{W_{a_n}[\psi]} = \frac{\langle\,\psi\,|\,P_{\{a_n,b_m\}}\,|\,\psi\,\rangle}{\langle\,\psi\,|\,P_{a_n}\,|\,\psi\,\rangle} \tag{3.26-47}$$

benützen. Bezüglich eines Anwendungsbeispieles siehe die Aufgabe 6.17.

Analog kann man die bedingte Wahrscheinlichkeit $W_{a_n}[\psi'']$ auf zwei Arten berechnen.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 3.1 bis 3.26 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 3.1 bis 3.26 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T3.1 Sind die folgenden Aussagen richtig oder falsch? Im Falle einer falschen Aussage gib ein Gegenbeispiel an.

(a) Sind zwei Observablen $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ verträglich und ist eine Gesamtheit gleich präparierter Systeme streuungsfrei bezüglich $\mathcal{A}$, so ist sie es auch bezüglich $\mathcal{B}$.

(b) Sind zwei Observablen $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ nicht verträglich und ist eine Gesamtheit gleich präparierter Systeme streuungsfrei bezüglich $\mathcal{A}$, so kann sie es nicht auch bezüglich $\mathcal{B}$ sein.

T3.2 Der Zustandsraum $\mathscr{H}$ eines quantenmechanischen Systems sei zweidimensional. In der orthonormierten Basis $\{|\,a_1\,\rangle, |\,a_2\,\rangle\}$ von $\mathscr{H}$ sei der Operator einer Observablen $\mathcal{T}$ gegeben durch

$$T \xrightarrow{\{a\}} \widehat{T}^{\{a\}} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1-i}{2} \\ \frac{1+i}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

Berechne den Erwartungswert der Observablen $\mathcal{T}$ für

(a) eine reine Gesamtheit mit dem Zustandsvektor

$$|\,\psi\,\rangle = \frac{1}{2}\,|\,a_1\,\rangle + i\,\frac{\sqrt{3}}{2}\,|\,a_2\,\rangle\,;$$

(b) eine gemischte Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho = |\,a_1\,\rangle\,\frac{1}{4}\,\langle\,a_1\,| + |\,a_2\,\rangle\,\frac{3}{4}\,\langle\,a_2\,|\,.$$

Ergebnisse: (a) $\langle\,T\,\rangle = \dfrac{\sqrt{3}-\sqrt{2}}{4}$, (b) $\langle\,T\,\rangle = -\dfrac{\sqrt{2}}{4}$.

T3.3 Ein Zwei-Zustand-System mit den Energieeigenwerten E_1, E_2 ($E_2 > E_1$) befinde sich zu einem Zeitpunkt t_0 in einem Zustand, für den der Erwartungswert der Energie durch $\langle\,H\,\rangle_0 = \frac{1}{3}E_1 + \frac{2}{3}E_2$ gegeben ist. Wie groß ist dann die Unschärfe der Energie des Systems für diesen Zeitpunkt, und welche Werte haben Erwartungswert und Unschärfe der Energie für Zeiten $t > t_0$?

T3.4 Ein Teilchen der Masse m besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Zustandsfunktion (eindimensionales Problem, N Normierungskonstante)

$$\psi(x) = \begin{cases} 2N\left(1 - \dfrac{|x|}{2a}\right) & \text{für} \quad |x| < a \\ N \exp\left(1 - \dfrac{|x|}{a}\right) & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} .$$

Berechne für diesen Zeitpunkt das Unschärfenprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int d\xi\, \xi^2\, e^{-\beta\xi} = -\Big[\frac{\xi^2}{\beta} + \frac{2\xi}{\beta^2} + \frac{2}{\beta^3}\Big]\, e^{-\beta\xi} + C\,.$$

Beachte ferner, dass

$$\frac{d^2|x|}{dx^2} = 2\,\delta(x)$$

gilt.)

Ergebnis: $$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\frac{1926}{1445}}\ \frac{\hbar}{2} = 1{,}1545\ \frac{\hbar}{2}\ .$$

T3.5 Die Zustandsfunktion eines Teilchens mit dem räumlichen Freiheitsgrad $x \in \mathbb{R}$ besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt in der Ortsdarstellung die Form

$$\psi(x) \;=\; N\, e^{-\alpha|x-x_0|+(i/\hbar)p_0 x}$$

($\alpha \in \mathbb{R}^+$, $x_0 \in \mathbb{R}^+$, $p_0 \in \mathbb{R}$ vorgegeben, N Normierungskonstante).

Berechne für diesen Zeitpunkt:

(a) die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $W(x)$;

(b) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man das Teilchen bei einer Ortsmessung im Intervall $(x_0, +\infty)$ antrifft;

(c) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man das Teilchen bei einer Ortsmessung im Intervall $(-\infty, 0)$ antrifft;

(d) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man das Teilchen bei einer Ortsmessung im Intervall $(0, x_0)$ antrifft;

(e) den Erwartungswert und die Unschärfe des Teilchenortes;

(f) die Zustandsfunktion in der Impulsdarstellung;

(g) die Wahrscheinlichkeitdichte $W(p)$ für den Teilchenimpuls;

(h) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Teilchenimpulses einen positiven Messwert findet;

(i) den Erwartungswert und die Unschärfe des Teilchenimpulses;

(j) das Unschärfenprodukt $\Delta x \cdot \Delta p$.

(Verwende die Formeln

$$\int \frac{d\xi}{(\xi^2+\beta^2)^2} = \frac{\xi}{2\beta^2(\xi^2+\beta^2)} + \frac{1}{2\beta^3}\arctan\frac{\xi}{\beta} + C\,, \qquad \beta \in \mathbb{R}^+;$$

$$\int\limits_{\mathbb{R}} \frac{d\xi}{(\xi^2+\beta^2)^2} = \frac{\pi}{2\beta^3}\,, \qquad \int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\, \frac{\xi^2}{(\xi^2+\beta^2)^2} = \frac{\pi}{2\beta}\,,$$

$$\int\limits_0^{+\infty} d\xi\, e^{-\gamma\xi}\cos\delta\xi = \frac{\gamma}{\gamma^2+\delta^2}\,, \qquad \gamma \in \mathbb{R}^+, \quad \delta \in \mathbb{R}\,.)$$

T3.6 Ein linearer harmonischer Oszillator befinde sich im Grundzustand.

(a) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen außerhalb der zur betreffenden Energie gehörigen klassischen Umkehrpunkte $\pm a$ anzutreffen?

(b) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Teilchenimpulses einen Messwert $p > 0$ findet?

(Die Grundzustandsenergie E_0 und die Grundzustands-Eigenfunktion u_0 des linearen harmonischen Oszillators können dabei als bekannt angesehen werden; u_0 siehe Gl. (3.20-11)).

(Anleitung zu (a): Verwende, dass die Fehlerfunktion

$$\phi(\eta) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int\limits_0^{\eta} e^{-\xi^2} d\xi$$

für $\eta = 1$ bzw. für $\eta \to +\infty$ die Werte $\phi(1) = 0,84270\,,\ \phi(+\infty) = 1$ annimmt.)

T3.7 Der Zustandsvektor eines linearen harmonischen Oszillators sei zu einem bestimmten Zeitpunkt durch die folgende Linearkombination seiner Energieeigenzustände $|\,0\,\rangle$, $|\,2\,\rangle$ gegeben:

$$|\,\psi\,\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}\,|\,0\,\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,2\,\rangle\,.$$

Berechne für diesen Zeitpunkt

(a) den Erwartungswert und die Unbestimmtheit der Gesamtenergie des Oszillators;

(b) den Erwartungswert und die Unbestimmtheit der kinetischen Energie des Oszillators.

(Die Lösung des Energieeigenwertproblems des linearen harmonischen Oszillators kann dabei als bekannt angesehen werden.)

(Anleitung zu (b): Verwende den Oszillatorquanten-Erzeugungsoperator $a^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator a; s. Anhang A.5.)

Ergebnis zu (b): $\langle T \rangle = \frac{11}{12}\,\hbar\omega\,, \quad \Delta E_{\text{kin}} = \frac{\sqrt{122}}{12}\,\hbar\omega\,.$

T 3.8

(a) Schreibe die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m in einem homogenen Kraftfeld mit dem Potential

$$V(x) = -fx\,, \qquad f \in \mathbb{R}^+$$

in der Impulsdarstellung an (eindimensionales Problem).

(b) Löse diese Gleichung und zeige, dass es ein Energiekontinuum $-\infty < E < +\infty$ gibt. Normiere die Energieeigenfunktionen $\widetilde{u}_E(p) = \langle\, p \,|\, E \,\rangle$ gemäß $\langle\, E \,|\, E' \,\rangle = \delta(E - E')$.

(c) Berechne aus den Energieeigenfunktionen $\widetilde{u}_E(p)$ der Impulsdarstellung die zugehörigen Energieeigenfunktionen $u_E(x) = \langle\, x \,|\, E \,\rangle$ der Ortsdarstellung und zeige insbesondere, dass die Eigenfunktionen $u_E(x)$ mithilfe der Airyfunktion $\mathrm{Ai}(\tau)$, deren Integraldarstellung durch

$$\mathrm{Ai}(\tau) = \frac{1}{\pi}\int_0^{+\infty} d\eta\, \cos\Big(\frac{\eta^3}{3} + \tau\eta\Big)$$

gegeben ist, und mit den Abkürzungen

$$\sigma := \frac{(2m\hbar f)^{1/3}}{\hbar}\,, \qquad \xi := \sigma\Big(x + \frac{E}{f}\Big)$$

in der Form

$$u_E(x) = \frac{\sigma}{\sqrt{f}}\,\mathrm{Ai}(-\xi)$$

geschrieben werden können.

Ergebnis zu (b):

$$\widetilde{u}_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar f}}\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar f}\Big(\frac{p^3}{6m} - Ep\Big)\Big]\,.$$

T 3.9 Ein Teilchen der Masse m mit den drei räumlichen Freiheitsgraden r, ϑ, φ besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Zustandsfunktion ($\beta \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben, N Normierungskonstante)

$$\psi(\vec{r}\,) = N\,e^{-\beta r}\,.$$

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses des Teilchens zum betreffenden Zeitpunkt den Messwert $+\hbar$ zu erhalten.

(b) Berechne den Erwartungswert der kinetischen Energie des Teilchens für den betreffenden Zeitpunkt.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho\, \rho^\nu\, e^{-\alpha\rho} = \frac{\nu!}{\alpha^{\nu+1}}\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}_0\,, \quad \alpha \in \mathbb{R}^+.)$$

T3.10 Ein Teilchen der Masse m mit den drei räumlichen Freiheitsgraden r, ϑ, φ besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Zustandsfunktion ($r_0 \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben)

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{2}{\pi r_0^2}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right).$$

(a) Zeige, dass dann für den wahrscheinlichsten Wert des Abstandes des Teilchens vom Ursprung $r_\mathrm{w} = r_0/\sqrt{2}$ gilt.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Abstandes des Teilchens vom Ursprung einen Messwert $r > r_\mathrm{w}$ erhält.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^{2n}\, e^{-\xi^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1}\, n!}\,\sqrt{\pi}\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Verwende ferner, dass die Fehlerfunktion

$$\phi(\eta) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\xi^2} d\xi$$

für $\eta = 1$ bzw. für $\eta \to +\infty$ die Werte $\phi(1) = 0,84270\,,\ \phi(+\infty) = 1$ annimmt.)

Ergebnis zu (b): $W = 0{,}5724$.

4. Bewegungsgleichungen. Bilder

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. Kapitel 6.

Angaben

4.1 Betrachtet wird ein System, dessen Hamiltonoperator nicht explizit von der Zeit abhängt. A sei der Operator zu einer Observablen $\mathcal{A}$ des Systems im Schrödingerbild, und A_{H} der entsprechende Operator im Heisenbergbild. Zeige: Ist der Anfangszustand $|\,\psi(0)\,\rangle$ Eigenzustand von A, so ist $|\,\psi(t)\,\rangle$ für $t > 0$ Eigenvektor von $A_{\mathrm{H}}(-t)$ zum selben Eigenwert.

(Schrödingerbild und Heisenbergbild sollen zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ zusammenfallen.)

4.2 Eindimensionale kräftefreie Bewegung eines Teilchens der Masse m:

(a) Löse die Bewegungsgleichungen für die Operatoren $X_{\mathrm{H}}(t)$, $P_{\mathrm{H}}(t)$ der Orts- bzw. Impulsvariablen im Heisenbergbild (*kanonische Bewegungsgleichungen*).

(b) Schreibe die wellenmechanischen Operatoren $X_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t)$, $P_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t)$ an, welche die abstrakten Operatoren $X_{\mathrm{H}}(t)$, $P_{\mathrm{H}}(t)$ in der Ortsdarstellung repräsentieren.

(c) Drücke die Erwartungswerte der Orts- und Impulsvariablen zum Zeitpunkt t durch ihre Anfangswerte zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ und die Zeit t aus.

(d) Berechne die Kommutatoren

$$\Big[X_{\mathrm{H}}(t_2), X_{\mathrm{H}}(t_1)\Big]\,, \qquad \Big[P_{\mathrm{H}}(t_2), P_{\mathrm{H}}(t_1)\Big] \qquad \text{und} \qquad \Big[X_{\mathrm{H}}(t_2), P_{\mathrm{H}}(t_1)\Big]\,.$$

(Schrödingerbild und Heisenbergbild sollen zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ zusammenfallen.)

(Anleitung: Verwende die Formeln (1.18-7).)

4.3 Behandle für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ dieselben Punkte wie in Aufgabe 4.2.

4.4 A, B seien die Operatoren zu den Observablen $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ eines quantenmechanischen Systems im Schrödingerbild, $A_{\mathrm{H}}(t)$ sei der Operator zu $\mathcal{A}$ im Heisenbergbild und $|\,u\,\rangle$, $\langle\,u\,|\,u\,\rangle = 1$, sei ein Eigenzustand des (nicht explizit zeitabhängigen) Hamiltonoperators H des Systems zu einem diskreten Eigenwert. Zeige, dass die Funktion

$$\varphi(t) := \frac{1}{i}\,\langle\,u\,|\Big[A_{\mathrm{H}}(t), B\Big]|\,u\,\rangle$$

dem Betrage nach für alle Zeiten $t > 0$ nach oben beschränkt ist, wenn die Unschärfen von $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ im Zustand $|\,u\,\rangle$ endlich sind.

(Schrödingerbild und Heisenbergbild sollen zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ zusammenfallen.)

(Anleitung: Verwende die allgemeine heisenbergsche Unbestimmtheitsbeziehung.)

4.5 Zeige:

(a) In einem Energieeigenzustand $|\,u\,\rangle$ zu einem diskreten Eigenwert ist der Erwartungswert der zum Operator $\frac{1}{i}[A, H]$ gehörigen Observablen null (A Operator zu einer Observablen $\mathcal{A}$, H Hamiltonoperator).

(b) In einem gebundenen stationären Zustand ist der Erwartungswert einer nicht explizit von der Zeit abhängigen Observablen $\mathcal{A}$ zeitunabhängig.

(Hinweis zu (a): Beachte, dass der Operator $\frac{1}{i}[A, H]$ selbstadjungiert ist.)

4.6 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem Potential V, welches eine homogene Funktion vom Grade n in den Koordinaten ist. Ferner besitze der Hamiltonoperator

$$H = T + V = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

ein zumindest teilweise diskretes Spektrum.

(a) Beweise durch Anwendung der Aussage von Aufgabe 4.5(a) auf die spezielle Observable $\mathcal{A}$, deren Operator durch

$$A := \frac{1}{2}(\vec{R}\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot\vec{R})$$

gegeben ist, dass für einen Energieeigenzustand zu einem diskreten Eigenwert das *quantenmechanische Virialtheorem* $2\langle\, T\,\rangle = n\langle\, V\,\rangle$ gilt.

(b) Was ergibt sich speziell

(b1) für ein Coulombpotential?

(b2) für ein isotropes harmonisches Oszillatorpotential?

(Eine Funktion $f(\vec{r})$ heißt *homogen vom Grade* n, wenn sie die Eigenschaft besitzt, dass $f(\lambda\vec{r}) = \lambda^n f(\vec{r})\,,\ \lambda \in \mathbb{R}^+$, gilt. Ist sie differenzierbar, so erfüllt sie die eulersche Differentialgleichung $\vec{r}\cdot\operatorname{grad} f = nf$.)

(Anleitung: Verwende die Formeln (1.18-10).)

4.7 Die Lösung des Eigenwertproblems des Hamiltonoperators H eines quantenmechanischen Systems sei bekannt. Bei einer Präparation bzgl. einer mit der Energie nicht verträglichen Observablen $\mathcal{A}$ zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ werden durch Filterung und Selektion Systeme mit dem nicht entarteten Eigenwert a_1 des zur Observablen $\mathcal{A}$ gehörigen selbstadjungierten Operators A „hergestellt“. Wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung von $\mathcal{A}$ zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert a_1 zu finden?

(Um die Schreibweise einfach zu halten, werde dabei angenommen, dass der Hamiltonoperator ein rein diskretes Spektrum besitzt, und die Vielfachheiten der Energieeigenwerte abzählbar sind.)

4.8* Der Hamiltonoperator H eines Zwei-Zustand-Systems sei in der Basis $\{|\,a_1\,\rangle, |\,a_2\,\rangle\}$ der Eigenzustände zu einer Observablen $\mathcal{A}$ des Systems durch

$$H \xrightarrow{\{a\}} \widehat{H}^{\{a\}} \equiv \widehat{H} = \hbar\omega_0 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \omega_0 \in \mathbb{R}^+$$

gegeben. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung von $\mathcal{A}$ zu einem Zeitpunkt $t \geq 0$ den Messwert a_1 zu finden, wenn zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ ein statistisches Gemisch mit dem Dichteoperator

$$\rho(0) \xrightarrow{\{a\}} \widehat{\rho(0)}^{\{a\}} \equiv \widehat{\rho(0)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$

vorlag?

4.9* Die Zustandsfunktion eines Teilchens der Masse m besitze zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ die Form (eindimensionales Problem)

$$\psi(x,0) \equiv \langle\, x \,|\, \psi(0) \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}} \exp\!\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} + \frac{i}{\hbar}\,p_0 x\right]$$

(x_0, $p_0 \in \mathbb{R}$, $\delta_0 \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben). Berechne die Zustandsfunktion $\psi(x,t)$ für $t > 0$ unter der Annahme, dass es sich um ein kräftefreies Teilchen handelt.

(a) Zeige insbesondere, dass $|\psi(x,t)|^2$ für $t \geq 0$ die Form einer normierten Gaußverteilung besitzt,

(a1) deren Mittelwert durch $\langle\, X \,\rangle_t = x_0 + (p_0/m)\,t$ gegeben ist;

(a2) deren mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert $\delta_t^{\,2}$ nach dem Gesetz

$$\delta_t^{\,2} = \delta_0^{\,2}\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\delta_0^{\,4}}\right)$$

zeitlich anwächst („Zerfließen“ des Wellenpaketes).

(b) Berechne den Erwartungswert sowie die Unschärfe des Impulses und das Unschärfenprodukt $(\Delta x)_t \cdot (\Delta p)_t$ für $t \geq 0$.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi \, e^{-c(\xi-d)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \,, \qquad c, d \in \mathbb{C}\,; \;\; \mathrm{Re}\, c > 0\,; \;\; \sqrt{c} := \sqrt{|c|}\, e^{i \arg c/2} \,.)$$

4.10 Ein kräftefreies Teilchen der Masse $m \approx 10^{-3}$ g sei anfangs auf einen Bereich von den Lineardimensionen $2\delta_0 \approx 10^{-1}$ cm „lokalisiert". Nach welcher Zeit τ ist der „Durchmesser" des zugehörigen Wellenpaketes auf das Doppelte angewachsen? Löse dieselbe Aufgabe für ein Elektron und $2\delta_0 \approx 10^{-8}$ cm.

(Anleitung: Führe die Abschätzung mithilfe der Formel (4.9-22b) für das Zerfließen eines gaußartigen Wellenpaketes durch.)

4.11 In einem Laboratoriumsexperiment legen die Teilchen eines Strahls von 1 keV-Elektronen zwischen Beschleuniger und Zähler kräftefrei einen Weg von 10 m zurück. Wie groß ist der Wellenpaket-„Durchmesser" beim Zähler, wenn die ursprünglichen Lineardimensionen des Wellenpaketes $2\delta_0 \approx 10^{-2}$ cm betrugen? (1 eV $\approx 10^{-12}$ erg)

(Anleitung: Führe die Abschätzung mithilfe der Formel (4.9-22b) für das Zerfließen eines gaußartigen Wellenpaketes durch.)

4.12 Der Zustandsvektor eines linearen harmonischen Oszillators sei zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ durch jene Linearkombination der Energieeigenzustände $|\,0\,\rangle$, $|\,1\,\rangle$ gegeben, für welche die Antreffwahrscheinlichkeit im Bereich $x > 0$ am größten ist. Zwischen welchen Werten schwankt dann die Antreffwahrscheinlichkeit im Bereich $x > 0$ für Zeiten $t > 0$?

(Die Eigenfunktionen u_0, u_1 zu den Eigenwerten $E_0 = \hbar\omega/2$, $E_1 = 3\hbar\omega/2$ können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5) und Anhang A.2, Gl. (A.2-23).)

4.13* Die Zustandsfunktion eines Teilchens der Masse m besitze zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ die Form (eindimensionales Problem)

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{\alpha^2 (x-a)^2}{2}\right], \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \,, \qquad a \in \mathbb{R}\,.$$

Berechne die Zustandsfunktion $\psi(x,t)$ für $t > 0$ unter der Annahme, dass sich das Teilchen für $t > 0$ im Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ befindet.

(a) Zeige insbesondere, dass $|\psi(x,t)|^2$ für $t \geq 0$ die Form einer normierten Gaußverteilung besitzt,

(a1) deren Mittelwert sich gemäß $\langle\, X \,\rangle_t = a \cos \omega t$ periodisch ändert;

(a2) deren mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert nicht von der Zeit abhängt und durch $\delta_t^2 = \delta_0^2 = 1/2\alpha^2$ gegeben ist (*kein* „Zerfließen“ des Wellenpaketes).

(b) Berechne den Erwartungswert sowie die Unschärfe des Impulses und das Unschärfenprodukt $(\Delta x)_t \cdot (\Delta p)_t$ für $t \geq 0$.

(c) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Energie des Teilchens zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ findet?

(Die stationären Zustände für ein Teilchen im Oszillatorpotential können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5b) bis (A.5-7).)

(Anleitung: Verwende die Integralformel

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{-(\xi-\gamma)^2} H_n(\xi) = \sqrt{\pi}\,(2\gamma)^n\,, \qquad \gamma \in \mathbb{R}\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0$$

und die erzeugende Funktion der Hermitepolynome (A.2-18).)

4.14* Die Zustandsfunktion eines Teilchens der Ladung q und Masse m besitze zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ die Form (eindimensionales Problem)

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\Big]\,, \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,.$$

Für $t > 0$ befinde sich das Teilchen im Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ und zusätzlich in einem homogenen zeitlich konstanten elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\vec{e}_x$, $\mathcal{E} > 0$.

(a) Zeige, dass die Zustandsfunktion $\psi(x,t)$ für $t > 0$ die Form

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{\alpha^2(x - x_0 + x_0\cos\omega t)^2}{2}\Big]$$
$$\times \exp\Big[-i\Big(\frac{\omega t}{2} - \frac{m\omega^2 x_0^2}{2\hbar}\, t - \alpha^2 x_0(x - x_0)\sin\omega t - \frac{(\alpha x_0)^2}{4}\,\sin 2\omega t\Big)\Big],$$
$$x_0 := \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$$

besitzt.

(b) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System zu einem Zeitpunkt $t > 0$ in seinem n-ten Energieeigenzustand anzutreffen?

(Die stationären Zustände des Problems können dabei als bekannt angesehen werden; siehe Gl. (2.16-3), (2.16-4).)

(Anleitung: S. die Anleitung zu Aufgabe 4.13.)

Lösungen

4.1

$$\left.\begin{array}{lll} A\,|\,\psi(0)\,\rangle = a\,|\,\psi(0)\,\rangle & & U(t) \equiv U(t,0) = e^{-(i/\hbar)Ht} \\ |\,\psi(t)\,\rangle = U(t)\,|\,\psi(0)\,\rangle & \text{mit} & U^\dagger(-t) = U^{-1}(-t) = U(t) \\ A_{\mathrm{H}}(t) = U^\dagger(t)\,A\,U(t) & & U(t_2)\,U(t_1) = U(t_1+t_2) \end{array}\right\} \quad \Rightarrow$$

$$A_{\mathrm{H}}(-t)\,|\,\psi(t)\,\rangle = \underbrace{U^\dagger(-t)}_{U(t)}\,A\,\underbrace{U(-t)\,U(t)}_{\mathbb{1}}\,|\,\psi(0)\,\rangle = U(t)\,a\,|\,\psi(0)\,\rangle = a\,U(t)\,|\,\psi(0)\,\rangle\,,$$

$$A_{\mathrm{H}}(-t)\,|\,\psi(t)\,\rangle = a\,|\,\psi(t)\,\rangle\,.$$

4.2

(a) Kanonische Bewegungsgleichungen (heisenbergsche Bewegungsgleichungen für die fundamentalen Observablen Teilchenort und Teilchenimpuls):

$$\frac{dX_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\,[X_{\mathrm{H}}(t), H_{\mathrm{H}}(t)] = \frac{1}{i\hbar}\,[X,H]_{\mathrm{H}}(t)\,, \tag{4.2-1}$$

$$\frac{dP_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\,[P_{\mathrm{H}}(t), H_{\mathrm{H}}(t)] = \frac{1}{i\hbar}\,[P,H]_{\mathrm{H}}(t)\,. \tag{4.2-2}$$

Besitzt der Hamiltonoperator die Form

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

so folgt daraus mit den Formeln (1.18-7)

$$\frac{dX_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \frac{P_{\mathrm{H}}(t)}{m}\,, \qquad \frac{dP_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = -\left[\frac{dV(X)}{dX}\right]_{\mathrm{H}}(t)\,. \tag{4.2-3}$$

Für ein kräftefreies Teilchen ergeben sich speziell die Gleichungen

$$\frac{dX_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \frac{P_{\mathrm{H}}(t)}{m}\,, \qquad \frac{dP_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \mathbb{0}\,. \tag{4.2-4}$$

Integration dieses Operator-Differentialgleichungssystems mit den Anfangsbedingungen

$$X_{\mathrm{H}}(0) = X\,, \qquad P_{\mathrm{H}}(0) = P \tag{4.2-5}$$

liefert die Lösung

$$X_{\mathrm{H}}(t) = X + \frac{P}{m}\,t\,, \qquad P_{\mathrm{H}}(t) = P\,. \tag{4.2-6}$$

Die Lösung (4.2-6) kann auch mithilfe der Formeln

$$X_{\mathrm{H}}(t) = U^\dagger(t)\,X\,U(t)\,, \qquad P_{\mathrm{H}}(t) = U^\dagger(t)\,P\,U(t) \tag{4.2-7}$$

erhalten werden, wobei $U(t)$ der Operator der zeitlichen Entwicklung ist:

$$U(t) \equiv U(t,0) = e^{-(i/\hbar)Ht}\,, \qquad H = \frac{P^2}{2m}\,. \tag{4.2-8}$$

Dieser Lösungsweg wurde für X_{H} bereits in Aufgabe 1.20 (b) behandelt (s. insbesondere Gl. (1.20-8)), für P_{H} folgt sofort wieder Gl. (4.2-6).

(b) Ist $F(X,P,t)$ ein Polynom in X und P, so ist der zugehörige wellenmechanische Operator in der Ortsdarstellung durch

$$F^{\{x\}} = F(X^{\{x\}}, P^{\{x\}}, t) \quad \text{mit} \quad X^{\{x\}} = x\,, \quad P^{\{x\}} = -i\hbar\,\frac{d}{dx} \tag{4.2-9}$$

gegeben. Es gilt daher

$$X_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t) = x - \frac{i\hbar t}{m}\,\frac{d}{dx}\,, \qquad P_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t) = -i\hbar\,\frac{d}{dx}\,. \tag{4.2-10}$$

(c) Mit

$$|\,\psi_{\mathrm{H}}\,\rangle = |\,\psi(0)\,\rangle\,, \tag{4.2-11}$$

$$\langle\,A\,\rangle_t = \langle\,\psi(t)\,|\,A\,|\,\psi(t)\,\rangle = \langle\,\psi_{\mathrm{H}}\,|\,A_{\mathrm{H}}(t)\,|\,\psi_{\mathrm{H}}\,\rangle\,, \tag{4.2-12}$$

$$\langle\,A\,\rangle_0 = \langle\,\psi(0)\,|\,A\,|\,\psi(0)\,\rangle = \langle\,\psi_{\mathrm{H}}\,|\,A_{\mathrm{H}}(0)\,|\,\psi_{\mathrm{H}}\,\rangle \tag{4.2-13}$$

erhalten wir aus Gl. (4.2-6)

$$\langle\,X\,\rangle_t = \langle\,X\,\rangle_0 + \frac{\langle\,P\,\rangle_0}{m}\,t\,, \qquad \langle\,P\,\rangle_t = \langle\,P\,\rangle_0\,. \tag{4.2-14}$$

Die Gleichungen (4.2-12), (4.2-13) zeigen, dass es besser wäre, den Erwartungswert der Observablen $\mathcal{A}$ zum Zeitpunkt t mit $\langle\,\mathcal{A}\,\rangle_t$ zu bezeichnen, doch wird diese Bezeichnungsweise nur in [4] benützt.

(d) Mit Gl. (4.2-6) und $[X,P] = i\hbar\mathbb{1}$ folgt

$$[X_{\mathrm{H}}(t_2), X_{\mathrm{H}}(t_1)] = [X + \frac{P}{m}\,t_2,\; X + \frac{P}{m}\,t_1] = \frac{t_2}{m}\,[P,X] + \frac{t_1}{m}\,[X,P]\,,$$

$$[X_{\mathrm{H}}(t_2), X_{\mathrm{H}}(t_1)] = i\hbar\,\frac{t_1 - t_2}{m}\,\mathbb{1}\,. \tag{4.2-15a}$$

Analog:

$$[P_{\mathrm{H}}(t_2), P_{\mathrm{H}}(t_1)] = \mathbb{0}\,, \qquad [X_{\mathrm{H}}(t_2), P_{\mathrm{H}}(t_1)] = i\hbar\mathbb{1}\,. \tag{4.2-15b}$$

Bemerkungen

Nach Gl. (4.2-14) gelten für die quantenmechanischen Erwartungswerte der Orts- und Impulsvariablen eines kräftefreien Teilchens dieselben Beziehungen wie für die klassischen Variablen

$x(t)$, $p(t)$. Eine analoge Aussage gilt in allen Fällen, in denen das Potential $V(X)$ ein Polynom vom Grade $0 \leq n \leq 2$ in X ist: Wegen

$$\Big\langle \frac{dV(X)}{dX} \Big\rangle = \frac{dV(\langle X \rangle)}{d\langle X \rangle} \tag{4.2-16}$$

besitzen dann die Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte von $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ dieselbe Form wie die klassischen hamiltonschen Gleichungen für die Variablen $x(t)$, $p(t)$, d. h. es gilt

$$\frac{d\langle X \rangle_t}{dt} = \frac{\langle P \rangle_t}{m}\,, \qquad \frac{d\langle P \rangle_t}{dt} = -\Big[\frac{dV(\xi)}{d\xi}\Big]_{\xi=\langle X\rangle_t}\,. \tag{4.2-17}$$

S. auch Aufgabe 4.3 sowie Aufgabe 4.9.

4.3

(a) *Lösungsweg 1:* Für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential (d. h. für einen linearen harmonischen Oszillator) gilt

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad \text{mit} \quad V(X) = \frac{m\omega^2}{2}\,X^2, \tag{4.3-1}$$

also

$$\frac{dV(X)}{dX} = m\omega^2 X\,. \tag{4.3-2}$$

Damit nehmen die kanonischen Bewegungsgleichungen (4.2-3) die Form

$$\frac{dX_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = \frac{P_{\mathrm{H}}(t)}{m}\,, \qquad \frac{dP_{\mathrm{H}}(t)}{dt} = -m\omega^2 X_{\mathrm{H}}(t) \tag{4.3-3}$$

an. Entkoppeln wir diese Operator-Differentialgleichungen, so erhalten wir

$$\frac{d^2X_{\mathrm{H}}(t)}{dt^2} + \omega^2 X_{\mathrm{H}}(t) = \mathbb{0}\,, \qquad \frac{d^2P_{\mathrm{H}}(t)}{dt^2} + \omega^2 P_{\mathrm{H}}(t) = \mathbb{0}\,. \tag{4.3-4}$$

Jene Lösungen von (4.3-4), welche die Anfangsbedingungen (4.2-5) erfüllen und gemäß (4.3-3) gekoppelt sind, lauten

$$X_{\mathrm{H}}(t) = X\cos\omega t + \frac{P}{m\omega}\sin\omega t\,, \tag{4.3-5}$$

$$P_{\mathrm{H}}(t) = P\cos\omega t - m\omega X\sin\omega t\,. \tag{4.3-6}$$

Lösungsweg 2: Die Beziehungen (4.3-5), (4.3-6) kann man auch mithilfe von (4.2-7), der Beziehung für $U(t)$ Gl. (4.2-8) und dem Hamiltonoperator (4.3-1) erhalten. Mit Formel (1.20-1) bzw. (1.20-6) und

$$\lambda := \frac{it}{\hbar}\,, \qquad B := H\,, \qquad A := X$$

ergibt sich (s. die Formeln von Aufgabe 1.5)

$$[B,A] = [H,X] = \frac{1}{2m}\,[P^2,X] = \frac{\hbar}{im}\,P\,,$$

$$[B,A]_{(2)} = [B,[B,A]] = \frac{\hbar}{im}\,[H,P] = \frac{\hbar\omega^2}{2i}\,[X^2,P] = (\hbar\omega)^2 X \quad \Rightarrow$$

$$[B,A]_{(2\nu)} = (\hbar\omega)^{2\nu} X\,, \qquad [B,A]_{(2\nu+1)} = \frac{\hbar}{im}\,(\hbar\omega)^{2\nu} P\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}_0\,;$$

$$\begin{aligned} X_{\mathrm{H}}(t) &= X \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(it/\hbar)^{2\nu}}{(2\nu)!}\,(\hbar\omega)^{2\nu} + P \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(it/\hbar)^{2\nu+1}}{(2\nu+1)!}\,\frac{\hbar}{im}\,(\hbar\omega)^{2\nu} \\ &= X \underbrace{\sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^{\nu}\,\frac{(\omega t)^{2\nu}}{(2\nu)!}}_{\cos\omega t} + \frac{P}{m\omega} \underbrace{\sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^{\nu}\,\frac{(\omega t)^{2\nu+1}}{(2\nu+1)!}}_{\sin\omega t}\,, \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit Gl. (4.3-5). Analog kann man auch die Beziehung (4.3-6) ableiten.

(b) Mit Gl. (4.2-9) und den Ergebnissen (4.3-5), (4.3-6) folgt

$$X_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t) = \cos\omega t\; x - \frac{i\hbar}{m\omega}\,\sin\omega t\;\frac{d}{dx}\,, \tag{4.3-7}$$

$$P_{\mathrm{H}}^{\{x\}}(t) = -i\hbar\cos\omega t\;\frac{d}{dx} - m\omega\sin\omega t\; x\,. \tag{4.3-8}$$

(c) Mit den Formeln (4.2-12), (4.2-13) und den Operatoren (4.3-5), (4.3-6) ergibt sich

$$\langle X\rangle_t = \langle X\rangle_0\cos\omega t + \frac{\langle P\rangle_0}{m\omega}\,\sin\omega t\,, \tag{4.3-9}$$

$$\langle P\rangle_t = \langle P\rangle_0\cos\omega t - m\omega\,\langle X\rangle_0\sin\omega t\,. \tag{4.3-10}$$

(d) Mit Gl. (4.3-5) und $[X,P] = i\hbar\mathbb{1}$ folgt

$$[X_{\mathrm{H}}(t_2),X_{\mathrm{H}}(t_1)] = \frac{1}{m\omega}\,\cos\omega t_2\,\sin\omega t_1\,[X,P] + \frac{1}{m\omega}\,\sin\omega t_2\,\cos\omega t_1\,[P,X]\,,$$

$$[X_{\mathrm{H}}(t_2),X_{\mathrm{H}}(t_1)] = i\hbar\,\frac{\sin[\omega(t_1-t_2)]}{m\omega}\,\mathbb{1}\,. \tag{4.3-11a}$$

Analog:

$$[P_{\mathrm{H}}(t_2),P_{\mathrm{H}}(t_1)] = i\hbar m\omega\,\sin[\omega(t_1-t_2)]\,\mathbb{1}\,, \tag{4.3-11b}$$

$$[X_{\mathrm{H}}(t_2),P_{\mathrm{H}}(t_1)] = i\hbar\,\cos[\omega(t_1-t_2)]\,\mathbb{1}\,. \tag{4.3-11c}$$

Bemerkungen

Im Zusammenhang mit den Ergebnissen (4.3-9), (4.3-10) gelten analoge Feststellungen wie sie in den Bemerkungen zu Aufgabe 4.2 formuliert wurden.

S. auch Aufgabe 4.13.

4.4 Anwendung der allgemeinen heisenbergschen Unbestimmtheitsbeziehung (siehe (3.25-4)) auf die Operatoren

$$F := A_{\mathrm{H}}(t) = e^{(i/\hbar)Ht} A\, e^{-(i/\hbar)Ht} = \left[A_{\mathrm{H}}(t)\right]^{\dagger}, \qquad G := B = B^{\dagger}$$

gibt

$$(\Delta a)_t \cdot \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle\, \frac{1}{i} [A_{\mathrm{H}}(t), B] \,\rangle \right| \tag{4.4-1}$$

mit

$$(\Delta a)_t = \left[\langle\, A_{\mathrm{H}}^2(t) \,\rangle - \langle\, A_{\mathrm{H}}(t) \,\rangle^2 \right]^{1/2}, \qquad \Delta b = \left[\langle\, B^2 \,\rangle - \langle\, B \,\rangle^2 \right]^{1/2}.$$

Nun gilt aber in einem Eigenzustand $|\, u \,\rangle$, $\langle\, u \,|\, u \,\rangle = 1$, von H

$$\begin{aligned} \langle\, A_{\mathrm{H}}(t) \,\rangle &= \langle\, u \,|\, e^{(i/\hbar)Ht} A\, e^{-(i/\hbar)Ht} \,|\, u \,\rangle = \langle\, u \,|\, A \,|\, u \,\rangle = \langle\, A \,\rangle\,, \\ \langle\, A_{\mathrm{H}}^2(t) \,\rangle &= \langle\, u \,|\, e^{(i/\hbar)Ht} A\, e^{-(i/\hbar)Ht}\, e^{(i/\hbar)Ht} A\, e^{-(i/\hbar)Ht} \,|\, u \,\rangle \\ &= \langle\, u \,|\, A^2 \,|\, u \,\rangle = \langle\, A^2 \,\rangle \end{aligned}$$

und es folgt aus (4.4-1)

$$|\varphi(t)| \leq 2\, \Delta a \cdot \Delta b\,, \tag{4.4-2}$$

wobei $\Delta a, \Delta b$ die Unschärfen der Observablen $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ im Zustand $|\, u \,\rangle$ sind. Existieren die Größen $\Delta a = (\Delta a)_{t=0}$ und Δb, so ist also der Betrag der Funktion $\varphi(t)$ für $t > 0$ beschränkt.

4.5

(a) Für einen gebundenen Energieeigenzustand $|\, u \,\rangle$ gilt (3.17-3). Damit folgt

$$\left\langle \frac{1}{i} [A, H] \right\rangle = \frac{1}{i} \langle\, u \,|\, (AH - HA) \,|\, u \,\rangle = \frac{1}{i} \langle\, u \,|\, \underbrace{(AE_n - E_n A)}_{\mathbb{0}} \,|\, u \,\rangle = 0\,. \tag{4.5-1}$$

(b) Die Bewegungsgleichung für den Erwartungswert einer nicht explizit zeitabhängigen Observablen $\mathcal{A}$ lautet

$$\frac{d}{dt} \langle\, A \,\rangle_t = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [A, H] \right\rangle_t. \tag{4.5-2}$$

Für einen gebundenen stationären Zustand gilt

$$|\, \psi(t) \,\rangle = |\, u \,\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n t \right] \tag{4.5-3}$$

mit (3.17-3) und es folgt wegen (4.5-1)

$$\left\langle \frac{1}{i}[A,H] \right\rangle_t = \frac{1}{i}\langle\,\psi(t)\,|\,(AH-HA)\,|\,\psi(t)\,\rangle = \frac{1}{i}\langle\,u\,|\,(AH-HA)\,|\,u\,\rangle = 0\,,$$

also

$$\frac{d}{dt}\langle\,A\,\rangle_t = 0\,. \tag{4.5-4}$$

Bemerkungen

Voraussetzung für die Schlüssigkeit der obigen formalen Ableitung ist neben $u \in \mathscr{D}_A$ noch $Au \in \mathscr{D}_H$.

4.6

(a) Nach Gl. (4.5-1) gilt für einen Energieeigenzustand zu einem diskreten Eigenwert $\langle\,\frac{1}{i}[A,H]\,\rangle = 0$. Mit dem Hamiltonoperator

$$H = T + V\,, \qquad T = \frac{\vec{P}^2}{2m}\,, \qquad V = V(\vec{R}) \tag{4.6-1}$$

und dem selbstadjungierten Operator

$$A := \frac{1}{2}(\vec{R}\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot\vec{R}) = \vec{R}\cdot\vec{P} - \frac{3}{2}\,i\hbar\mathbb{1} \tag{4.6-2}$$

erhält man unter Verwendung der Formeln (1.18-10)

$$[A,H] = [\vec{R}\cdot\vec{P},T] + [\vec{R}\cdot\vec{P},V]\,, \tag{4.6-3a}$$

$$[\vec{R}\cdot\vec{P},T] = \sum_j [X_j,T]\,P_j = \frac{i\hbar}{m}\sum_j P_jP_j = i\hbar\,2T\,, \tag{4.6-3b}$$

$$[\vec{R}\cdot\vec{P},V] = \sum_j X_j\,[P_j,V] = -i\hbar\sum_j X_j\,\frac{\partial V}{\partial X_j}\,. \tag{4.6-3c}$$

Ist V eine differenzierbare homogene Funktion vom Grade n in X_1, X_2, X_3, so erfüllt V die eulersche (Operator-)Differentialgleichung

$$\sum_{j=1}^{3} X_j\,\frac{\partial V}{\partial X_j} = nV\,. \tag{4.6-4}$$

(Beachte, dass $[X_j,X_k] = \mathbb{0}$, $\forall\, j,k$, gilt.) Damit folgt aber

$$[\vec{R}\cdot\vec{P},V] = -i\hbar\,nV\,. \tag{4.6-5}$$

Einsetzen von (4.6-3a), (4.6-3b) und (4.6-5) in $\langle\,\frac{1}{i}[A,H]\,\rangle = 0$ liefert dann das

$$\text{quantenmechanische Virialtheorem} \quad 2\,\langle\,T\,\rangle = n\,\langle\,V\,\rangle\,. \tag{4.6-6}$$

(b) *Spezialfälle:*

$$\text{(b1)}\quad V(\vec{R}) = \frac{q_1 q_2}{R}\,; \qquad V(\lambda\vec{R}) = \lambda^{-1}\,V(\vec{R}) \quad\Rightarrow\quad 2\,\langle\, T\,\rangle = -\langle\, V\,\rangle\,. \tag{4.6-7}$$

(S. auch Aufgabe 9.1.)

$$\text{(b2)}\quad V(\vec{R}) = \frac{m\omega^2}{2}\,\vec{R}^{\,2}\,; \quad V(\lambda\vec{R}) = \lambda^2\,V(\vec{R}) \quad\Rightarrow\quad \langle\, T\,\rangle = \langle\, V\,\rangle\,. \tag{4.6-8}$$

Bemerkungen

Voraussetzung für die Schlüssigkeit des oben gegebenen Beweises von (4.6-6) ist, dass der Eigenvektor u, $(u,u)=1$, von H, mit dem die Erwartungswerte von T und V gebildet werden, die Bedingungen $u \in \mathscr{D}_A$, $Au \in \mathscr{D}_H$ erfüllt. Man gewinnt deshalb auf diesem Wege nur für eine *Teilmenge* der gebundenen Zustände von H eine streng gültige Aussage. Man kann aber auf anderen Wegen zeigen, dass (4.6-6) für *alle* gebundenen Zustände von H gilt. Einer dieser Wege wird in Aufgabe 5.13 besprochen.[1]

Wie leicht zu sehen ist, lässt sich das quantenmechanische Virialtheorem vollkommen analog für Systeme mit f räumlichen Freiheitsgraden $q_1, q_2, \ldots, q_f$ (kartesische Ortskoordinaten) formulieren.

Die Bezeichnung Virialtheorem stammt aus der klassischen Mechanik, in der man die Größe $\vec{r}\cdot\operatorname{grad} V = -\vec{K}\cdot\vec{r}$ als *Virial* bezeichnet. Zwischen dem *Zeitmittelwert* des Virials und dem Zeitmittelwert der kinetischen Energie besteht dann für Bewegungen, die ganz in einem endlichen Raumgebiet verlaufen, die Beziehung

$$2\,\overline{T} = \overline{\vec{r}\cdot\operatorname{grad} V}$$

(klassisches Virialtheorem).[2] Für ein Potential V, welches eine homogene Funktion vom Grade n in den Koordinaten ist, führt dies speziell auf $2\,\overline{T} = n\,\overline{V}$.

4.7

$$\left.\begin{aligned} &H\,|\,u_{n\nu}\,\rangle = E_n\,|\,u_{n\nu}\,\rangle\,, && A\,|\,a_1\,\rangle = a_1\,|\,a_1\,\rangle \\ &\langle\, u_{n\nu}\,|\,u_{n'\nu'}\,\rangle = \delta_{nn'}\,\delta_{\nu\nu'}\,, && \langle\, a_1\,|\,a_1\,\rangle = 1 \\ &W_{a_1}(t) = |\langle\, a_1\,|\,\psi(t)\,\rangle|^2 = |\langle\, a_1\,|\,U(t)\,|\,a_1\,\rangle|^2 \\ &U(t) \equiv U(t,0) = e^{-(i/\hbar)Ht} = \sum_{n\nu} |\,u_{n\nu}\,\rangle\, e^{-(i/\hbar)E_n t}\,\langle\, u_{n\nu}\,| \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow \tag{4.7-1}$$

$$W_{a_1}(t) = \left|\sum_{n\nu} |\langle\, a_1\,|\,u_{n\nu}\,\rangle|^2\, e^{-(i/\hbar)E_n t}\right|^2. \tag{4.7-2}$$

[1] Bezüglich anderer Möglichkeiten s. Zhu Dongpei: Am. J. Phys. 54, 267 (1986) und die dort zitierte Literatur.

[2] Siehe z. B. Landau, L. D., und E. M. Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik. Bd. I: Mechanik. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main 2004.

4.8* Bei dieser Aufgabe gibt es mehrere in Bezug auf den Rechenaufwand gleichwertige Lösungswege. Ich gehe hier von der Zeitabhängigkeit des Dichteoperators im Schrödingerbild aus. Ein anderer Lösungsweg wird in Aufgabe 6.16 behandelt.

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist bei Verwendung des Schrödingerbildes durch

$$W_1(t) = \mathrm{Sp}\big(\rho(t) P_1\big)\,, \qquad P_1 = |\,a_1\,\rangle\langle\,a_1\,| \tag{4.8-1}$$

gegeben. Spurbildung im Basissystem $\{|\,a_1\,\rangle, |\,a_2\,\rangle\}$ gibt

$$W_1(t) = \langle\,a_1\,|\,\rho(t)\,|\,a_1\,\rangle =: \rho_{11}(t)\,. \tag{4.8-2}$$

Der Dichteoperator $\rho(t)$ bzw. sein Matrixelement $\rho_{11}(t)$ ist aus

$$\left.\begin{aligned} \frac{d\rho(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\,[H, \rho(t)] \\ \text{AB: } &\rho(0) \end{aligned}\right\} \iff \rho(t) = e^{-(i/\hbar)Ht}\,\rho(0)\,e^{(i/\hbar)Ht} \tag{4.8-3}$$

zu berechnen. Mit

$$H \xrightarrow{\{a\}} \widehat{H}^{\{a\}} \equiv \widehat{H} = \hbar\omega_0 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} =: \hbar\omega_0\,\widehat{\tau}_1 \tag{4.8-4}$$

folgt

$$\widehat{\rho(t)} = \exp\left[-i\omega_0 t\,\widehat{\tau}_1\right] \widehat{\rho(0)} \exp\left[i\omega_0 t\,\widehat{\tau}_1\right]. \tag{4.8-5}$$

Für die weitere Rechnung ist es zweckmäßig, neben $\widehat{\tau}_1$ die Matrizen

$$\widehat{\tau}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{\tau}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{4.8-6}$$

einzuführen. Wir können dann nämlich die von den paulischen Spinmatrizen bekannte Algebra (Clifford-Algebra) benützen (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-10b), (A.7-9)). Mit Formel (1.20-1) und mit

$$\lambda := -i\omega_0 t\,, \qquad \widehat{A} := \widehat{\rho(0)} = \frac{1}{2}\,\widehat{\mathbb{1}} - \frac{1}{4}\,\widehat{\tau}_3\,, \qquad \widehat{B} := \widehat{\tau}_1$$

ergibt sich

$$[\widehat{B}, \widehat{A}]_{(2\nu)} = -2^{2\nu-2}\,\widehat{\tau}_3\,, \quad \nu \in \mathbb{N}\,; \qquad [\widehat{B}, \widehat{A}]_{(2\nu+1)} = 2^{2\nu-1}\,i\,\widehat{\tau}_2\,, \quad \nu \in \mathbb{N}_0\,;$$

$$\widehat{\rho(t)} = \frac{1}{2}\,\widehat{\mathbb{1}} - \frac{1}{4}\,\widehat{\tau}_3 - \widehat{\tau}_3 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-i\omega_0 t)^{2\nu}}{(2\nu)!}\,2^{2\nu-2} + \widehat{\tau}_2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-i\omega_0 t)^{2\nu+1}}{(2\nu+1)!}\,2^{2\nu-1}\,i\,,$$

$$\widehat{\rho(t)} = \frac{1}{2}\,\widehat{\mathbb{1}} + \frac{1}{4}\sin 2\omega_0 t\,\widehat{\tau}_2 - \frac{1}{4}\cos 2\omega_0 t\,\widehat{\tau}_3\,. \tag{4.8-7}$$

Somit folgt für die gesuchte Wahrscheinlichkeit (4.8-2)

$$W_1(t) = \frac{1}{4}\,(2 - \cos 2\omega_0 t)\,. \tag{4.8-8}$$

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 6.16.

4.9* Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen wellenmechanischen Schrödingergleichung für ein kräftefreies Teilchen der Masse m in einer Raumdimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\psi(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \tag{4.9-1}$$

kann als Überlagerung der zugehörigen stationären Zustände geschrieben werden:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{\mathbb{R}} dp\, c(p)\,\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\Big(px - \frac{p^2}{2m}\,t\Big)\Big]\,. \tag{4.9-2}$$

Eine solche Überlagerung von ebenen Wellen bezeichnet man als *Wellenpaket* des kräftefreien Teilchens. Statt über das Impulsspektrum kann man ebenso gut über das Energiespektrum integrieren. Man muss dabei aber beachten, dass jeder Energieeigenwert zweifach ist: $E = p^2/2m$, $p \in \mathbb{R}$.

Die Amplitudenfunktion $c(p)$ ist aus der Anfangsbedingung für ψ unter Benützung der „Orthogonalitätsbeziehungen“ der Impulseigenfunktionen zu bestimmen:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{\mathbb{R}} dp\, c(p)\, e^{(i/\hbar)px} \quad\Rightarrow\quad c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{\mathbb{R}} dx'\,\psi(x',0)\, e^{-(i/\hbar)px'} \tag{4.9-3}$$

(Umkehrung der Fouriertransformation). Als Fouriertransformierte von $\psi(x,0)$ hat $c(p)$ die Bedeutung der Zustandsfunktion in der Impulsdarstellung für $t_0 = 0$:

$$\widetilde{\psi}(p,0) = c(p)\,. \tag{4.9-4}$$

Die Zustandsfunktion in der Impulsdarstellung für $t > 0$ ergibt sich auf analoge Weise als Fouriertransformierte von $\psi(x,t)$, und nach Gl. (4.9-2) gilt somit

$$\widetilde{\psi}(p,t) = c(p)\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{p^2}{2m}\,t\Big]\,, \tag{4.9-5}$$

$$|\widetilde{\psi}(p,t)|^2 = |\widetilde{\psi}(p,0)|^2 = |c(p)|^2\,. \tag{4.9-6}$$

Alle bisher angeschriebenen Beziehungen kann man auch rein formal durch Einschieben der „Vollständigkeitsbeziehungen“ der „Basissysteme“ $\{|\,p\,\rangle,\ p \in \mathbb{R}\}$ und $\{|\,x'\,\rangle,\ x' \in \mathbb{R}\}$ bzw. der Spektraldarstellung des Operators der zeitlichen Entwicklung erhalten:

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) \equiv \langle\, x\,|\,\psi(t)\,\rangle &= \langle\, x\,|\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{P^2}{2m}\,t\Big]\,|\,\psi(0)\,\rangle \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}} dp\,\langle\, x\,|\,p\,\rangle\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{p^2}{2m}\,t\Big]\langle\, p\,|\,\psi(0)\,\rangle\,, \\
\widetilde{\psi}(p,0) \equiv \langle\, p\,|\,\psi(0)\,\rangle &= \int\limits_{\mathbb{R}} dx'\,\langle\, p\,|\,x'\,\rangle\langle\, x'\,|\,\psi(0)\,\rangle\,,
\end{aligned}$$

$$\widetilde{\psi}(p,t) \equiv \langle\, p \,|\, \psi(t) \,\rangle = \langle\, p \,|\, \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{P^2}{2m}\,t\Big] \,|\, \psi(0) \,\rangle = \langle\, p \,|\, \psi(0) \,\rangle\, \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\frac{p^2}{2m}\,t\Big]\,.$$

Die spezielle für den Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ gegebene Zustandsfunktion (Anfangsbedingung für die zeitabhängige Schrödingergleichung)

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}}\,\exp\Big[-\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} + \frac{i}{\hbar}\,p_0 x\Big] \tag{4.9-7}$$

ist von der Form wie sie allgemein in Aufgabe 3.12 diskutiert wurde. Nach Gl. (3.12-1) gilt somit

$$\langle\, P \,\rangle_0 = \langle\, \psi(0) \,|\, P \,|\, \psi(0) \,\rangle = p_0\,. \tag{4.9-8}$$

Weiter ist die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x,0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}\,\exp\Big[-\frac{(x-x_0)^2}{2\delta_0^2}\Big] \tag{4.9-9}$$

eine normierte Gaußverteilung mit dem Mittelwert

$$\langle\, X \,\rangle_0 = \langle\, \psi(0) \,|\, X \,|\, \psi(0) \,\rangle = x_0 \tag{4.9-10}$$

und der mittleren quadratischen Abweichung vom Mittelwert $(\Delta x)_0^2 = \delta_0^2$ bzw. mit der Unschärfe

$$(\Delta x)_0 = \Big[\langle\, X^2 \,\rangle_0 - \langle\, X \,\rangle_0^2\Big]^{1/2} = \delta_0\,. \tag{4.9-11}$$

Nun berechne ich aus Gl. (4.9-3) die spezielle Amplitudenfunktion $c(p)$, welche zur Anfangsbedingung (4.9-7) gehört:

$$c(p) = \widetilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}}\int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\exp\Big[-\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} - \frac{i}{\hbar}\,(p-p_0)x\Big]\,. \tag{4.9-12}$$

Um die in der Angabe angeführte Integralformel benützen zu können, ergänze ich den Exponenten des Integranden zu einem vollständigen Quadrat in der Integrationsvariablen:

$$\begin{aligned} -\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} - \frac{i}{\hbar}\,(p-p_0)x &= -\frac{1}{4\delta_0^2}\Big\{x^2 - 2\underbrace{\Big[x_0 - \frac{i}{\hbar}\,(p-p_0)\,2\delta_0^2\Big]}_{=:\,d(p)}x + x_0^2\Big\} \\ &= -\frac{1}{4\delta_0^2}\,\{(x-d)^2 + x_0^2 - d^2\}\,. \end{aligned} \tag{4.9-13}$$

Durchführung der Integration gibt dann

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}}\,\exp\Big[-\frac{x_0^2 - \big(d(p)\big)^2}{4\delta_0^2}\Big]\,\sqrt{\pi}\,2\delta_0$$

und nach Einsetzen von $d(p)$

$$c(p) = \widetilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,(\hbar/2\delta_0)}}\,\exp\Big[-\frac{(p-p_0)^2}{4(\hbar/2\delta_0)^2} - \frac{i}{\hbar}(p-p_0)x_0\Big]\,. \tag{4.9-14}$$

Aus Gl. (4.9-6) folgt

$$|\widetilde{\psi}(p,t)|^2 = |\widetilde{\psi}(p,0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,(\hbar/2\delta_0)}\,\exp\Big[-\frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/2\delta_0)^2}\Big]\,. \tag{4.9-15}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\widetilde{\psi}(p,t)|^2$ ist also ebenfalls eine normierte Gaußverteilung, und es gilt

$$\langle\, P\,\rangle_t = \langle\, \psi(t)\,|\,P\,|\,\psi(t)\,\rangle = \langle\, P\,\rangle_0 = p_0\,, \tag{4.9-16}$$

$$(\Delta p)_t = \Big[\langle\, P^2\,\rangle_t - \langle\, P\,\rangle_t^2\Big]^{1/2} = (\Delta p)_0 = \frac{\hbar}{2\delta_0}\ (= \Delta p \text{ bezeichnet}). \tag{4.9-17}$$

Aus Gl. (4.9-11), (4.9-17) ergibt sich für $t_0 = 0$ das minimale Unschärfenprodukt

$$(\Delta x)_0 \cdot (\Delta p)_0 = \big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{\min} = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{4.9-18}$$

Dieses Ergebnis überrascht uns nicht, da die Zustandsfunktion $\psi(x,0)$ Gl. (4.9-7) vom Typ der Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion (3.20-12a) ist.

Setzt man nun die Amplitudenfunktion $c(p)$ Gl. (4.9-14) in die allgemeine Lösung (4.9-2) der zeitabhängigen Schrödingergleichung (4.9-1) ein, so erhält man unter Verwendung von (4.9-17) für die zur Anfangsbedingung (4.9-7) gehörige Lösung

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\Delta p}}\int\limits_{\mathbb{R}} dp\,\exp\Big[-\frac{(p-p_0)^2}{4(\Delta p)^2} - \frac{i}{\hbar}(p-p_0)x_0 + \frac{i}{\hbar}\Big(px - \frac{p^2}{2m}\,t\Big)\Big]\,.$$

Den Exponenten im Integranden forme ich wieder zu einem vollständigen Quadrat in der Integrationsvariablen um:

$$\begin{aligned}[\,\ldots\,] &= -\Big\{p^2\underbrace{\Big[\frac{1}{4(\Delta p)^2} + \frac{it}{2m\hbar}\Big]}_{=:\,a(t)} - 2p\underbrace{\Big[\frac{p_0}{4(\Delta p)^2} + \frac{i(x-x_0)}{2\hbar}\Big]}_{=:\,b(x)}\Big\} + \frac{i}{\hbar}\,p_0x_0 - \frac{p_0^2}{4(\Delta p)^2} \\ &= -a\Big(p - \frac{b}{a}\Big)^2 + \frac{b^2}{a} + \frac{i}{\hbar}\,p_0x_0 - \frac{p_0^2}{4(\Delta p)^2}\,. \end{aligned} \tag{4.9-19}$$

Mithilfe der angegebenen Integralformel, welche wegen $\operatorname{Re} a > 0$ anwendbar ist, folgt dann

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\Delta p}}\,\sqrt{\frac{\pi}{a(t)}}\,\exp\Big[\frac{\big(b(x)\big)^2}{a(t)} - \frac{p_0^2}{4(\Delta p)^2} + \frac{i}{\hbar}\,p_0x_0\Big] \tag{4.9-20}$$

und

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta p}\,\frac{\pi}{|a(t)|}\,\exp\Big[2\,\mathrm{Re}\,\frac{\big(b(x)\big)^2}{a(t)} - \frac{p_0^2}{2(\Delta p)^2}\Big]\,.$$

Dabei ist nach Gl. (4.9-19)

$$|a(t)| = \frac{1}{4(\Delta p)^2}\,\sqrt{1+\frac{4(\Delta p)^4\,t^2}{m^2\hbar^2}}$$

und

$$2\,\mathrm{Re}\,\frac{b^2}{a} = \frac{2}{|a|^2}\,\mathrm{Re}\,(b^2a^*) = \frac{2}{|a|^2}\,\Big[\,\frac{p_0^2}{64(\Delta p)^6} + \frac{(x-x_0)\,p_0 t}{8m\hbar^2(\Delta p)^2} - \frac{(x-x_0)^2}{16\hbar^2(\Delta p)^2}\,\Big]\,,$$

was nach kurzer Umformung

$$2\,\mathrm{Re}\,\frac{b^2}{a} - \frac{p_0^2}{2(\Delta p)^2} = -\frac{\big(x-x_0-\frac{p_0}{m}\,t\big)^2}{8\hbar^2(\Delta p)^2\,|a(t)|^2}$$

ergibt. Mit der Abkürzung

$$\delta_t := 2\hbar\,\Delta p\,|a(t)| = \frac{\hbar}{2\Delta p}\,\sqrt{1+\frac{4(\Delta p)^4\,t^2}{m^2\hbar^2}} \tag{4.9-21}$$

erhält man dann

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\delta_t}\,\exp\Big[-\frac{\big(x-x_0-\frac{p_0}{m}\,t\big)^2}{2\delta_t^2}\Big]\,. \tag{4.9-22a}$$

Für die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$ hat sich also wieder eine normierte Gaußverteilung ergeben. Die Größen δ_t und δ_0 hängen dabei wegen (4.9-21) und (4.9-17) gemäß

$$\delta_t = \delta_0\,\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\delta_0^4}} \tag{4.9-22b}$$

zusammen. Mittelwert und Unschärfe der Verteilung (4.9-22a) sind durch

$$\langle\,X\,\rangle_t = \langle\,\psi(t)\,|\,X\,|\,\psi(t)\,\rangle = x_0 + \frac{p_0}{m}\,t\,, \tag{4.9-23}$$

$$(\Delta x)_t = \Big[\langle\,X^2\,\rangle_t - \langle\,X\,\rangle_t^2\Big]^{1/2} = \delta_t \tag{4.9-24}$$

gegeben. Wegen Gl. (4.9-10), (4.9-16) und (4.9-23) erfüllen die Erwartungswerte von $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ für die spezielle Anfangsbedingung (4.9-7) die in Aufgabe 4.2 (c) für beliebige Anfangsbedingungen bewiesenen Beziehungen (4.2-14). Weiter ergibt sich aus Gl. (4.9-11), (4.9-17), (4.9-22b) und (4.9-24)

$$(\Delta x)_t\cdot(\Delta p)_t \;=\; \frac{\hbar}{2}\,\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)_0^4}} \;>\; \frac{\hbar}{2} \quad \text{für} \quad t>0\,. \tag{4.9-25}$$

$\psi(x,t)$ ist für $t>0$ *keine* Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion. (S. dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 3.20.)

Die Abbildung 4.9-1 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichten $|\widetilde{\psi}(p,t)|^2$ und $|\psi(x,t)|^2$ für $t=0$ und $t>0$.

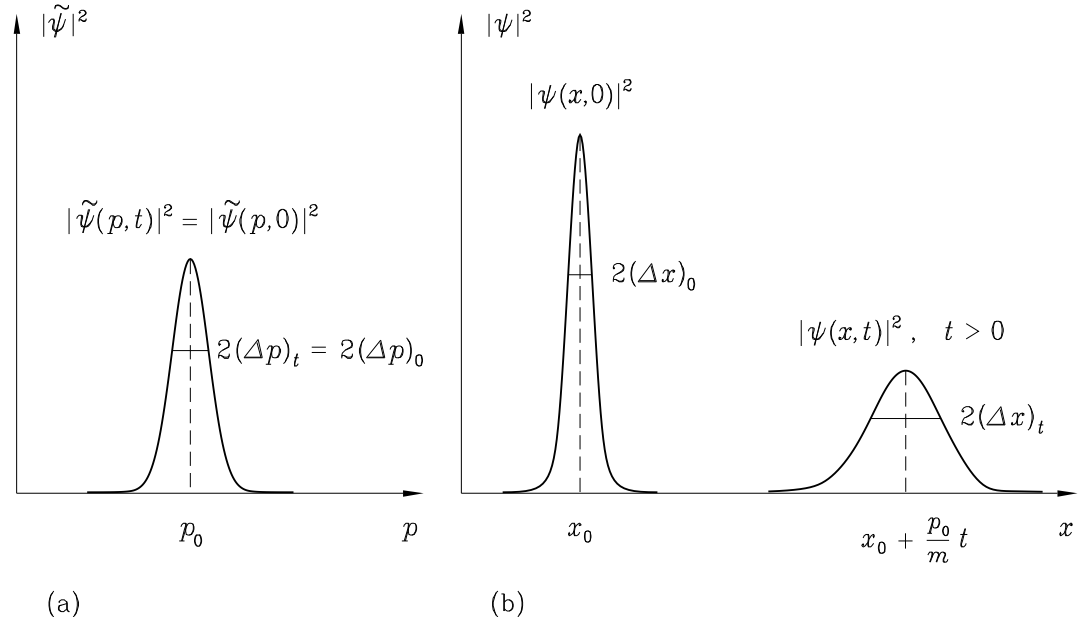


Abb. 4.9-1: Zerfließen des Wellenpaketes eines kräftefreien Teilchens:
(a) Wahrscheinlichkeitsdichte bzgl. des Teilchenimpulses;
(b) Wahrscheinlichkeitsdichte bzgl. des Teilchenortes

Bemerkungen

Das Breiterwerden der Verteilung $|\psi(x,t)|^2$, das so genannte „Zerfließen“ des Wellenpaketes, ist durch die Dispersion der Partialwellen in (4.9-2), d. h. die Abhängigkeit der Phasengeschwindigkeit von der Kreiswellenzahl $k=p/\hbar$ bedingt:

$$v_{\mathrm{Ph}} = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{\hbar k}{2m}\,. \tag{4.9-26}$$

Das Zerfließen erfolgt umso rascher, je kleiner die Anfangsunschärfe und je kleiner die Teilchenmasse ist, es ist jedoch unabhängig von der Gruppengeschwindigkeit

$$v_{\mathrm{Gr}} = \Big(\frac{d\omega(k)}{dk}\Big)_{k=k_0} = \Big(\frac{dE(p)}{dp}\Big)_{p=p_0} = \frac{p_0}{m} \tag{4.9-27}$$

des Wellenpaketes.

Für ein gaußartiges Wellenpaket in drei Dimensionen ist $|\psi(\vec{r},t)|^2$ ein Produkt von drei Faktoren der Form (4.9-22a) in den Variablen x,y,z mit i. Allg. verschiedenen Unschärfen δ_{xt},

δ_{yt}, δ_{zt}. Im Spezialfall gleicher Anfangsunschärfen δ_0 in den drei Raumrichtungen erhält man insbesondere

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\,\delta_t)^3}\,\exp\!\left[-\frac{\left(\vec{r}-\vec{r}_0-\frac{\vec{p}_0}{m}\,t\right)^2}{2\delta_t^{\,2}}\right] \tag{4.9-28}$$

mit δ_t gemäß Gl. (4.9-22b).

S. auch die Aufgaben 4.10 und 4.11.

4.10 Aus Gl. (4.9-22b) folgt mit $\delta_\tau = 2\delta_0$

$$\tau = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\frac{m(2\delta_0)^2}{\hbar}\;. \tag{4.10-1}$$

$$(\alpha)\quad m = 10^{-3}\,\mathrm{g},\quad 2\delta_0 \approx 10^{-1}\,\mathrm{cm}\quad\Rightarrow\quad \tau \approx 10^{22}\,\mathrm{s} \approx 3\cdot 10^{14}\,\text{Jahre};$$
$$(\beta)\quad m \approx 10^{-27}\,\mathrm{g},\quad 2\delta_0 \approx 10^{-8}\,\mathrm{cm}\quad\Rightarrow\quad \tau \approx 10^{-16}\,\mathrm{s}.$$

4.11 $T = 1\,\mathrm{keV} \approx 10^{-9}\,\mathrm{erg}\quad\Rightarrow\quad v \approx 10^9\,\mathrm{cm/s},\;\; t = s/v \approx 10^{-6}\,\mathrm{s};$

$$\left.\begin{array}{l}\text{Gl. (4.9-22b)}\\ 2\delta_0 \approx 10^{-2}\,\mathrm{cm}\\ t \approx 10^{-6}\,\mathrm{s}\end{array}\right\}\quad\Rightarrow\quad \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\delta_0^4} \approx 4\cdot 10^{-4},\;\; 2\delta_t \approx 2\delta_0\,.$$

4.12 Da der Zustandsvektor allgemein nur bis auf einen unimodularen Faktor festgelegt werden kann, schreibe ich den Ansatz für $|\,\psi(0)\,\rangle$ in der Form

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}\left[|\,0\,\rangle + \beta\, e^{i\phi}\,|\,1\,\rangle\right],\qquad \beta \in \mathbb{R}_0^+,\quad \phi \in [0,2\pi)\,. \tag{4.12-1}$$

Damit folgt für $t > 0$

$$|\,\psi(t)\,\rangle = e^{-(i/\hbar)Ht}\,|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}}\left[|\,0\,\rangle\, e^{-i(\omega t/2)} + \beta\, e^{i\phi}\,|\,1\,\rangle\, e^{-i(3\omega t/2)}\right]. \tag{4.12-2}$$

Mit den Energieeigenfunktionen

$$\langle\, x\,|\,0\,\rangle \equiv u_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\!\left[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\right] = u_0^*(x)\,,$$
$$\langle\, x\,|\,1\,\rangle \equiv u_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\,2\alpha x\,\exp\!\left[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\right] = u_1^*(x)\,,\qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

ergibt sich für $t \geq 0$

$$W(x,t) = |\langle\, x\,|\,\psi(t)\,\rangle|^2 = \frac{1}{1+\beta^2}\left\{\left[u_0(x)\right]^2 + \beta^2\left[u_1(x)\right]^2 + 2\beta\cos(\omega t-\phi)\,u_0(x)\,u_1(x)\right\} \tag{4.12-3}$$

und wegen

$$\int_0^{+\infty} dx \left[u_0(x)\right]^2 = \int_0^{+\infty} dx \left[u_1(x)\right]^2 = \frac{1}{2}\,,$$

$$\int_0^{+\infty} dx\, u_0(x)\, u_1(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} d\xi\, \xi\, \exp\left[-\xi^2\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

folgt für die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$W(t) = \int_0^{+\infty} dx\, W(x,t)$$

für $t \geq 0$ der Ausdruck

$$W(t) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{4\beta}{1+\beta^2}\,\cos\left(\omega t - \phi\right)\right]. \tag{4.12-4}$$

Die Parameter β und ϕ sind nun so zu bestimmen, dass

$$W(0) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{4\beta}{1+\beta^2}\,\cos\phi\right] =: f(\beta,\phi) \tag{4.12-5}$$

den größtmöglichen Wert annimmt. Aus

$$\frac{\partial f}{\partial \beta} = 0 \quad\Rightarrow\quad (1-\beta^2)\cos\phi = 0\,, \qquad \frac{\partial f}{\partial \phi} = 0 \quad\Rightarrow\quad \beta \sin\phi = 0$$

findet man, dass die Funktion $f(\beta,\phi)$ ihr Maximum für $\beta = 1$, $\phi = 0$ annimmt:

$$f_{\max} = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\right].$$

Somit folgt für die gesuchten Größen

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\,0\,\rangle + |\,1\,\rangle\right], \qquad |\,\psi(t)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\,0\,\rangle\, e^{-i(\omega t/2)} + |\,1\,\rangle\, e^{-i(3\omega t/2)}\right]; \tag{4.12-6}$$

$$W(t) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\,\cos\omega t\right], \quad t \geq 0\,; \tag{4.12-7}$$

$$W_{\max} = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\right] = 0{,}899\,, \quad W_{\min} = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\right] = 0{,}101\,. \tag{4.12-8}$$

4.13*

(a) Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}\,x^2\right\}\psi(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \tag{4.13-1}$$

kann als Überlagerung der zugehörigen stationären Zustände geschrieben werden:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\, u_n(x)\, \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\, E_n t\Big] \tag{4.13-2}$$

($u_n(x)$ s. Gl. (A.5-5b), E_n s. Gl. (A.5-7)). Die Koeffizienten c_n sind aus der Anfangsbedingung unter Benützung der Orthogonalitätsbeziehungen (A.5-5a) der Energieeigenzustände zu berechnen:

$$\psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\, u_n(x) \quad \Rightarrow \quad c_n = \int_{\mathbb{R}} dx'\, u_n^*(x')\, \psi(x',0)\,. \tag{4.13-3}$$

Die aus den Koeffizienten c_n gebildete Spaltenmatrix $\hat{c}$ repräsentiert den Ketvektor $|\,\psi(0)\,\rangle$ in der Energiedarstellung ($\{n\}$-Darstellung).

Alle bisher angeschriebenen Beziehungen kann man auch rein formal durch Einschieben der Vollständigkeitsbeziehung des Basissystems $\{\,|\,n\,\rangle,\ n \in \mathbb{N}_0\,\}$ und des „Basissystems“ $\{\,|\,x'\,\rangle,\ x' \in \mathbb{R}\,\}$ bzw. der Spektraldarstellung des Operators der zeitlichen Entwicklung erhalten:

$$\psi(x,t) \equiv \langle\, x\,|\,\psi(t)\,\rangle = \langle\, x\,|\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\, Ht\Big]\,|\,\psi(0)\,\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\, x\,|\,n\,\rangle\, \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\, E_n t\Big]\, \langle\, n\,|\,\psi(0)\,\rangle\,,$$

$$c_n := \langle\, n\,|\,\psi(0)\,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx'\, \langle\, n\,|\,x'\,\rangle \langle\, x'\,|\,\psi(0)\,\rangle\,.$$

Die spezielle für den Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ gegebene Zustandsfunktion (Anfangsbedingung für die zeitabhängige Schrödingergleichung)

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{\alpha^2 (x-a)^2}{2}\Big]\,, \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{4.13-4}$$

ist von der Form der Grundzustands-Eigenfunktion eines „verschobenen“ linearen harmonischen Oszillators mit Kraftzentrum am Ort $x = a$. Sie ist vom Typ der Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion (3.20-12a) mit

$$\langle\, X\,\rangle_0 = \langle\, \psi(0)\,|\,X\,|\,\psi(0)\,\rangle = a\,, \qquad \langle\, P\,\rangle_0 = \langle\, \psi(0)\,|\,P\,|\,\psi(0)\,\rangle = 0\,; \tag{4.13-5a}$$

$$(\Delta x)_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}\,, \qquad (\Delta p)_0 = \frac{\sqrt{2}\,\alpha\hbar}{2} \quad \Rightarrow \tag{4.13-5b}$$

$$(\Delta x)_0 \cdot (\Delta p)_0 = \big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{\min} = \frac{\hbar}{2} \tag{4.13-5c}$$

(s. auch Gl. (4.9-7) bis (4.9-11) und (4.9-18)). Aus Gl. (4.13-3) erhält man für die Anfangsbedingung (4.13-4) ($\xi = \alpha x$)

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!\, \pi}} \int_{\mathbb{R}} d\xi\, \exp\Big\{-\frac{1}{2}\Big[(\xi - \alpha a)^2 + \xi^2\Big]\Big\}\, H_n(\xi)\,,$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!\, \pi}}\, \exp\Big[-\frac{(\alpha a)^2}{4}\Big] \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\, \exp\Big\{-\Big[\xi - \frac{\alpha a}{2}\Big]^2\Big\} H_n(\xi)}_{\sqrt{\pi}\,(\alpha a)^n}\,,$$

$$c_n = \frac{(\alpha a)^n}{\sqrt{2^n\, n!}}\, \exp\Big[-\frac{(\alpha a)^2}{4}\Big]\,. \tag{4.13-6}$$

Einsetzen dieser Koeffizienten in die allgemeine Lösung (4.13-2) der zeitabhängigen Schrödingergleichung (4.13-1) gibt unter Verwendung der erzeugenden Funktion der Hermitepolynome (A.2-18)

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{(\alpha a)^2}{4} - \frac{(\alpha x)^2}{2} - i\,\frac{\omega t}{2}\Big] \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\alpha x)}{n!} \Big[\frac{\alpha a}{2}\, e^{-i\omega t}\Big]^n}$$
$$\exp\Big[-\frac{(\alpha a)^2}{4}\, e^{-2i\omega t} + \alpha^2 a x\, e^{-i\omega t}\Big]$$

bzw.

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{\alpha^2 (x - a\cos\omega t)^2}{2}\Big] \times \exp\Big[-i\Big(\frac{\omega t}{2} + \alpha^2 a x \sin\omega t - \frac{(\alpha a)^2}{4}\, \sin 2\omega t\Big)\Big] \tag{4.13-7}$$

und

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}\, \exp\Big[-\frac{(x - a\cos\omega t)^2}{2\delta_0^2}\Big]\,, \qquad \delta_0 := \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}\,. \tag{4.13-8}$$

Die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$ ist eine normierte Gaußverteilung mit dem Mittelwert

$$\langle X \rangle_t = \langle \psi(t) \,|\, X \,|\, \psi(t) \rangle = a\cos\omega t = \langle X \rangle_0 \cos\omega t \tag{4.13-9}$$

und der Unschärfe

$$(\Delta x)_t = \Big[\langle X^2 \rangle_t - \langle X \rangle_t^2\Big]^{1/2} = (\Delta x)_0 = \delta_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}\ (= \Delta x \ \text{ bezeichnet}). \tag{4.13-10}$$

(b) Erwartungswert und Unschärfe des Teilchenimpulses kann man in Analogie zu Aufgabe 4.9 unmittelbar anschreiben, da die Variable x in die zeitabhängige Zustandsfunktion (4.13-7) auf genau dieselbe Weise eingeht wie in die Zustandsfunktion $\psi(x,0)$ von Gl. (4.9-7): $\psi(x,t)$ Gl. (4.13-7) ist vom Typ der Minimum-Unschärfenprodukt-Funktion (3.20-12a), und es folgt

$$\langle P \rangle_t = \langle \psi(t) \,|\, P \,|\, \psi(t) \rangle = -\hbar\alpha^2 a \sin\omega t = -m\omega \langle X \rangle_0 \sin\omega t\,, \tag{4.13-11}$$

$$(\Delta p)_t = \Big[\langle P^2 \rangle_t - \langle P \rangle_t^2\Big]^{1/2} = (\Delta p)_0 = \frac{\sqrt{2}\,\hbar\alpha}{2}\ (= \Delta p \ \text{ bezeichnet}) \tag{4.13-12}$$

und

$$(\Delta x)_t \cdot (\Delta p)_t = \big(\Delta x \cdot \Delta p\big)_{\min} = \frac{\hbar}{2}\,, \quad \forall\, t,\ t \geq 0\,. \tag{4.13-13}$$

(c) Die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator zu einem Zeitpunkt $t > 0$ in seinem n-ten Anregungszustand, d. h. mit der Energie $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, anzutreffen, ist durch

$$W_n(t) = |\langle\, n \,|\, \psi(t) \,\rangle|^2 = |\langle\, n \,|\, e^{-(i/\hbar)Ht} \,|\, \psi(0) \,\rangle|^2 = |\langle\, n \,|\, \psi(0) \,\rangle|^2 = |c_n|^2 \tag{4.13-14}$$

gegeben und ist somit nicht von der Zeit abhängig. Es gilt

$$W_n = \frac{1}{n!}\left[\frac{(\alpha a)^2}{2}\right]^n \exp\left[-\frac{(\alpha a)^2}{2}\right]. \tag{4.13-15}$$

Bemerkungen

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$ oszilliert ohne Änderung ihrer Gestalt um den Ursprung, und zwar nach demselben Bewegungsgesetz wie ein klassischer Oszillator mit dem Anfangsort $x(0) = a$ und dem Anfangsimpuls $p(0) = 0$. (In Aufgabe 4.3 wurde gezeigt, dass die Erwartungswerte von $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ für *beliebige* Anfangsbedingungen die klassischen Beziehungen erfüllen; vgle. Gl. (4.13-9), (4.13-11) mit Gl. (4.3-9), (4.3-10).)

Anfangszustände $|\,\psi(0)\,\rangle = |\,u\,\rangle$, für welche $|\psi(x,t)|^2$ im Laufe der Zeit nicht die Gestalt ändert, nennt man *kohärente Zustände des linearen harmonischen Oszillators*. Die kohärenten Zustände $|\,u\,\rangle$, $\langle\, u \,|\, u \,\rangle = 1$, bilden eine zweiparametrige Schar von Vektoren, wobei

$$u(x) \equiv \langle\, x \,|\, u \,\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, \exp\left[-\frac{\alpha^2(x-a)^2}{2} + \frac{i}{\hbar}\, p_0 x + i\gamma\right], \tag{4.13-16a}$$

$$\alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,, \quad \langle\, X \,\rangle = a\,, \quad \langle\, P \,\rangle = p_0 \tag{4.13-16b}$$

gilt ($a \in \mathbb{R}$, $p_0 \in \mathbb{R}$ Scharparameter). Sie sind *spezielle Minimum-Unschärfenprodukt-Zustände* (s. Gl. (3.20-12)), nämlich solche mit

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,. \tag{4.13-16c}$$

Der Leser beachte: Wählt man als Anfangsbedingung für die zeitabhängige Schrödingergleichung (4.13-1) eine Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion (3.20-12a) mit $(\Delta x)^2 \neq \hbar/2m\omega$ oder irgendeine andere nicht zur Schar (4.13-16) gehörige Funktion, so ändert $|\psi(x,t)|^2$ im Laufe der Zeit die Gestalt und nimmt erst wieder nach jeweils einer vollen Periode $T = 2\pi/\omega$ die ursprüngliche Gestalt an.

Die kohärenten Zustände des linearen harmonischen Oszillators (auch *kanonische kohärente Zustände* genannt) werden in vielen Gebieten der theoretischen Physik, insbesondere in der Quantentheorie der elektromagnetischen Strahlung, in der Festkörperphysik und in der Elementarteilchenphysik benützt.[3] Ich schreibe im Folgenden ein paar Eigenschaften dieser Zustände an. Eine ausführliche Diskussion mit allen Rechenschritten findet der Leser in [1].

Die Schar der kohärenten Zustände des linearen harmonischen Oszillators kann in der Form

$$\left\{|\,u_\beta\,\rangle = \exp\left[-\frac{|\beta|^2}{2}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}\,|\,n\,\rangle\,, \quad \beta \in \mathbb{C}\right\} \tag{4.13-17}$$

[3] Siehe Klauder, J. R., und B. Skagerstam: Coherent States. Applications in Physics and Mathematical Physics. World Scientific Publishing Company, Singapore 1985.

geschrieben werden ($|\,n\,\rangle$, $n \in \mathbb{N}_0$, Energieeigenzustände des Oszillators). Die Vektoren $|\,u_\beta\,\rangle$, $\beta \in \mathbb{C}$, bilden ein (über-)vollständiges System von nichtorthogonalen normierten Vektoren,

$$\frac{1}{\pi}\iint\limits_{\mathbb{R}\,\mathbb{R}} |\,u_\beta\,\rangle\, d(\mathrm{Re}\,\beta)\, d(\mathrm{Im}\,\beta)\, \langle\,u_\beta\,| = \mathbb{1}\,, \tag{4.13-18}$$

$$|\langle\,u_\beta\,|\,u_{\beta'}\,\rangle|^2 = e^{-|\beta-\beta'|^2}\,. \tag{4.13-19}$$

$|\,u_\beta\,\rangle$ ist Eigenvektor des Vernichtungsoperators a – welcher kein Normaloperator ist – zum Eigenwert β:

$$a\,|\,u_\beta\,\rangle = \beta\,|\,u_\beta\,\rangle\,, \qquad \beta \in \mathbb{C}\,. \tag{4.13-20}$$

Die zugehörigen Funktionen in der Ortsdarstellung, $u_\beta(x) \equiv \langle\,x\,|\,u_\beta\,\rangle$, sind die Funktionen (4.13-16a) mit

$$a = \frac{\sqrt{2}}{\alpha}\,\mathrm{Re}\,\beta\,, \qquad p_0 = \sqrt{2}\,\alpha\hbar\,\mathrm{Im}\,\beta\,. \tag{4.13-21}$$

Ist $|\,\psi(0)\,\rangle$ ein kohärenter Zustand, so ist $|\,\psi(t)\,\rangle$ für jedes feste $t > 0$ ebenfalls ein kohärenter Zustand, denn es gilt

$$e^{-(i/\hbar)Ht}\,|\,u_\beta\,\rangle = e^{-i\omega t/2}\,|\,u_{\beta\exp(-i\omega t)}\,\rangle\,. \tag{4.13-22}$$

Die Wahrscheinlichkeitverteilung (4.13-15) ist eine normierte *Poissonverteilung*

$$W_n = \frac{\lambda^n}{n!}\,e^{-\lambda} \tag{4.13-23}$$

mit dem Mittelwert

$$\bar{n} = \lambda = \frac{(\alpha a)^2}{2} = \frac{m\omega a^2}{2\hbar}\,. \tag{4.13-24}$$

Von besonderem Interesse ist der Fall eines Wellenpaketes, dessen „Breite“ sehr klein ist gegen die Schwingungsweite a des Paketzentrums (s. die Abbildung 4.13-1):

$$2\,\Delta x \ll |\langle\,X\,\rangle_t|_{\max} = a\,. \tag{4.13-25}$$

Aus den Beziehungen (4.13-11), (4.13-12) und $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ kann man dann leicht sehen, dass in diesem Fall auch

$$2\,\Delta p \ll |\langle\,P\,\rangle_t|_{\max} = m\omega a \quad \text{und} \quad E_0 \ll V(a) = \frac{m\omega^2}{2}\,a^2 \tag{4.13-26}$$

gilt. Es tragen dann in Gl. (4.13-2) – wie man zeigen kann – hauptsächlich jene stationären Zustände zu $\psi(x,t)$ bei, deren Energie $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ näherungsweise gleich ist der Energie $E_{\mathrm{kl}} = V(a)$ eines klassischen Oszillators der Kreisfrequenz ω und Schwingungsweite a. Man trifft also das System am wahrscheinlichsten mit einer Energie $E_{n_0} \approx E_{\mathrm{kl}}$ an. Im Grenzfall (4.13-25) ist nämlich $\bar{n} \gg 1$ und das Maximum der Poissonverteilung liegt in der Nähe ihres Mittelwertes: $n_0 \approx \bar{n} \gg 1 \;\Rightarrow\; E_{n_0} \approx n_0\hbar\omega \approx m\omega^2 a^2/2$. Man kann in diesem Grenzfall von einer *„quasiklassischen Bewegung“* sprechen. Ein sehr instruktives Zahlenbeispiel dazu findet man in [1].

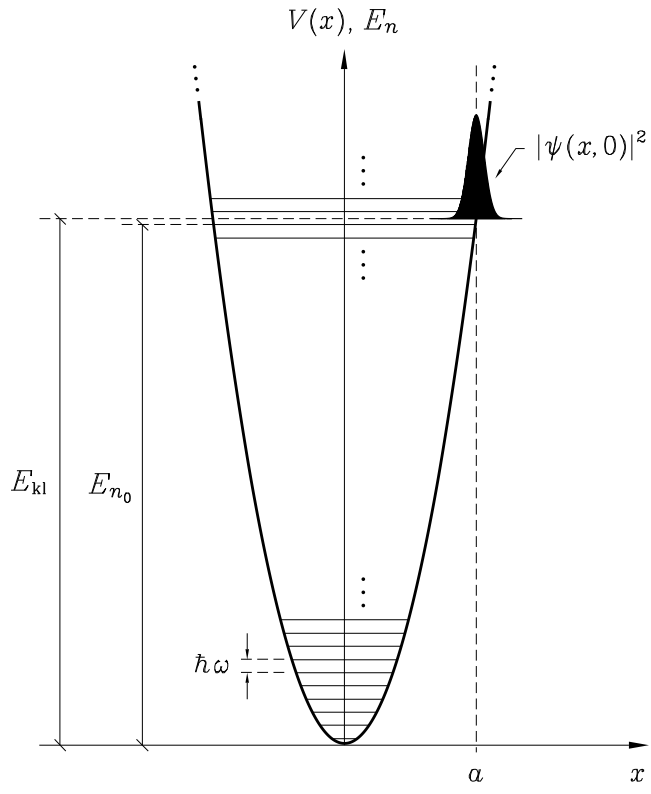


Abb. 4.13-1: „Quasiklassischer“ Grenzfall für ein Teilchen im eindimensionalen Oszillatorpotential

S. auch Aufgabe 4.14.

4.14* Der Hamiltonoperator des Systems ist durch Gl. (2.16-1) bzw. (2.16-2) gegeben, und die zeitabhängige Schrödingergleichung lautet daher in der Ortsdarstellung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2}{2}\,(x-x_0)^2-\frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2\right\}\psi(x,t)=i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\;,\quad x_0:=\frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}\;. \tag{4.14-1}$$

Diese Differentialgleichung ist mit der Anfangsbedingung

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\!\left[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\right],\qquad \alpha:=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{4.14-2}$$

zu lösen.

Wie der Vergleich von (4.14-1) und (4.14-2) mit (4.13-1) und (4.13-4) zeigt, handelt es sich mathematisch um ein weitgehend analoges Problem wie in Aufgabe 4.13. Man kann deshalb die Rechnung von Aufgabe 4.13 Schritt für Schritt übertragen. In der Entwicklung (4.13-2) treten die Eigenfunktionen $u_n(x)$ und Eigenwerte E_n von Gl. (2.16-4), (2.16-3) an die Stelle von (A.5-5b), (A.5-7). Mit diesen Eigenfunktionen $u_n(x)$ kann man aus Gl. (4.13-3) die „neuen“ Entwicklungskoeffizienten c_n berechnen usf. Man kann die gesuchten Ergebnisse aber auch unmittelbar anschreiben. Man hat lediglich $x \to x - x_0$,

$a \to -x_0$ zu setzen und den anderen Nullpunkt der Energiezählung zu beachten.

(a) Aus Gl. (4.13-7) folgt

$$\begin{aligned}\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{\alpha^2(x-x_0+x_0\cos\omega t)^2}{2}\Big] \\ \times\exp\Big[-i\Big(\frac{\omega t}{2}+\alpha^2 x_0\,(x-x_0)\sin\omega t-\frac{(\alpha x_0)^2}{4}\,\sin 2\omega t\Big)\Big] \\ \times\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\,\frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2\,t\Big]\,.\end{aligned} \tag{4.14-3}$$

Dabei wurde in Gl. (4.13-7) $x \to x - x_0$, $a \to -x_0$ gesetzt und der unimodulare Faktor in der dritten Zeile hinzugefügt. Dieser berücksichtigt den zusätzlichen konstanten Term $-m\omega^2 x_0^2/2$ im wellenmechanischen Hamiltonoperator (vgle. (4.14-1) mit (4.13-1)), welcher auch in der Nullpunktsenergie in Erscheinung tritt (vgle. (2.16-3) und (A.5-7)).

(b) Für die Wahrscheinlichkeit, das System zu einem Zeitpunkt $t > 0$ in seinem n-ten Energieeigenzustand anzutreffen, d. h. bei einer Messung der Energie des Oszillators den Messwert

$$E_n = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar\omega - \frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2\,, \qquad n \in \mathbb{N}_0 \tag{4.14-4}$$

zu finden, folgt aus Gl. (4.13-15) mit $a \to -x_0$

$$W_n = \frac{1}{n!}\Big[\frac{(\alpha x_0)^2}{2}\Big]^n \exp\Big[-\frac{(\alpha x_0)^2}{2}\Big]\,. \tag{4.14-5}$$

Bemerkungen

Die Diskussion der Zustandsfunktion $\psi(x,t)$ bzw. der zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x,t)|^2$ sowie der im Grenzfall

$$\mathcal{E} \gg \frac{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}{|q|}\,, \qquad \text{d. h.} \qquad \frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2 = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \gg \hbar\omega\,, \tag{4.14-6}$$

resultierenden „quasiklassischen Bewegung“ kann vollkommen analog zu Aufgabe 4.13 durchgeführt werden. Im entgegengesetzten Grenzfall

$$\mathcal{E} \ll \frac{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}{|q|}\,, \qquad \text{d. h.} \qquad \frac{m\omega^2}{2}\,x_0^2 = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \ll \hbar\omega\,, \tag{4.14-7}$$

folgt aus (4.14-5)

$$W_n \approx \frac{1}{n!}\Big[\frac{(\alpha x_0)^2}{2}\Big]^n, \quad n \neq 0\,; \qquad W_0 = \exp\Big[-\frac{(\alpha x_0)^2}{2}\Big] \approx 1 - \frac{(\alpha x_0)^2}{2}\,. \tag{4.14-8}$$

S. auch Aufgabe 5.5.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 4.1 bis 4.14 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 4.1 bis 4.14 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T4.1 Behandle für ein Teilchen der Masse m in einem homogenen Kraftfeld mit dem Potential $V(x) = -fx\,,\ f \in \mathbb{R}^+$, dieselben Punkte wie in Aufgabe 4.2.

T4.2 Die Zustandsfunktion eines Teilchens der Masse m, welches sich in einem homogenen Kraftfeld mit dem Potential $V(x) = -fx$ befindet, besitze zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ die Form

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}}\,\exp\Big[-\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} + \frac{i}{\hbar}\,p_0 x\Big]$$

($f \in \mathbb{R}^+,\ x_0, p_0 \in \mathbb{R},\ \delta_0 \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben).

(a) Berechne die Erwartungswerte für den Ort, den Impuls und die kinetische Energie des Teilchens für $t \geq 0$ und kommentiere die Ergebnisse.

(b) Zeige, dass für die Unschärfen von Teilchenort und Teilchenimpuls für $t \geq 0$ die folgenden Beziehungen gelten:

$$(\Delta x)_t = \delta_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\delta_0^4}}\,, \qquad (\Delta p)_t = (\Delta p)_0 = \frac{\hbar}{2\delta_0}\,.$$

(Hinweis: Warum wird es bei dieser Aufgabe zweckmäßig sein, das Heisenbergbild zu benützen? [Wer die Aufgabe T4.1 gelöst hat, kann von den Ergebnissen von T4.1 ausgehen.])

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\,\xi^2 e^{-\beta\xi^2} = \frac{1}{4\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\,, \qquad \beta \in \mathbb{R}^+.)$$

(Beachte: Die Beziehungen für die Unschärfen von Teilchenort und Teilchenimpuls sind mit den Beziehungen identisch, die wir in Aufgabe 4.9 bei gleicher Zustandsfunktion für $t_0 = 0$ für ein *kräftefreies Teilchen* erhalten haben; siehe die Gleichungen (4.9-24), (4.9-22b) und (4.9-17).)

Ergebnis für der Erwartungswert der kinetischen Energie:

$$\langle T \rangle_t = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8m\delta_0^2} + \frac{fp_0 t}{m} + \frac{f^2 t^2}{2m}\,.$$

T4.3* Die Zustandsfunktion eines Teilchens der Masse m, welches sich in einem homogenen Kraftfeld mit dem Potential $V(x) = -fx$ befindet, besitze zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ die Form

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\delta_0}}\,\exp\Big[-\frac{(x-x_0)^2}{4\delta_0^2} + \frac{i}{\hbar}\,p_0 x\Big]$$

($f \in \mathbb{R}^+$, $x_0, p_0 \in \mathbb{R}$, $\delta_0 \in \mathbb{R}^+$ vorgegeben). Berechne die Zustandsfunktion $\psi(x,t)$ für $t > 0$ und zeige, dass $|\psi(x,t)|^2$ für $t \geq 0$ die Form einer normierten Gaußverteilung besitzt,

(a) deren Mittelwert durch $\langle X \rangle_t = x_0 + (p_0/m)t + (f/2m)t^2$ gegeben ist;

(b) deren mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert δ_t^2 nach dem Gesetz

$$\delta_t^2 = \delta_0^2\Big(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\delta_0^4}\Big)$$

zeitlich anwächst („Zerfließen“ des Wellenpaketes).

(Die stationären Zustände für ein Teilchen im homogenen Kraftfeld können dabei als bekannt angesehen werden; siehe dazu die Aufgabe T3.8.)

(Anleitung: Es ist zweckmäßig, die Integration über die Energie E als erste auszuführen. Verwende ferner die Formel

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{-c(\xi-d)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}\,, \qquad c, d \in \mathbb{C}\,;\ \ \mathrm{Re}\,c > 0\,;\ \ \sqrt{c} := \sqrt{|c|}\,e^{i\arg c/2}\,.)$$

T4.4 Die Energieeigenwerte E_1, E_2 ($E_2 > E_1$) eines Zwei-Zustand-Systems sowie die zugehörigen auf eins normierten Energieeigenvektoren $|\,1\,\rangle$, $|\,2\,\rangle$ seien bekannt, und der einer Observablen $\mathcal{A}$ zugeordnete Operator A sei gegeben durch:

$$A := |\,1\,\rangle\,2\,\langle\,1\,| + |\,1\,\rangle\,2i\,\langle\,2\,| - |\,2\,\rangle\,2i\,\langle\,1\,| - |\,2\,\rangle\langle\,2\,|\,.$$

(a) Berechne die möglichen Messwerte a_1, a_2 ($a_2 > a_1$) der Observablen $\mathcal{A}$.

(b) Eine Messung der Observablen $\mathcal{A}$ zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ habe das Ergebnis a_1 ergeben. Berechne

(b1) die Wahrscheinlichkeit $W_1(t)$ dafür, dass man bei einer neuerlichen Messung von $\mathcal{A}$ zu einem Zeitpunkt $t > 0$ abermals den Messwert a_1 findet;

(b2) die Wahrscheinlichkeit $W_2(t)$ dafür, dass man bei einer neuerlichen Messung von $\mathcal{A}$ zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert a_2 findet.

Zwischen welchen Werten variieren $W_1(t)$, $W_2(t)$ in Abhängigkeit von der Zeit?

Ergebnis für $W_1(t)$: $\quad W_1(t) = \frac{1}{25}(17 + 8\cos\omega_{12}t)\,, \qquad \omega_{12} := (E_2 - E_1)/\hbar\,.$

T4.5 Der Zustandsvektor eines linearen harmonischen Oszillators sei zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ durch die folgende Linearkombination seiner Energieeigenvektoren $|\,0\,\rangle$, $|\,1\,\rangle$ gegeben:

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,0\,\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,1\,\rangle\,.$$

Berechne das Unschärfenprodukt $(\Delta x)_t \cdot (\Delta p)_t$ für $t > 0$.

Welche Lösungswege (Heisenbergbild oder Schrödingerbild; abstrakter Formalismus [„darstellungsfrei"], Orts-, Impuls- oder Energiedarstellung) werden am vorteilhaftesten sein? Woran erkennt man, dass die Verwendung des Diracformalismus trotz der Nichtbeschränktheit der Operatoren X und P bei dieser Aufgabe keine Probleme verursachen kann?

(Anleitung: Es ist vorteilhaft, wenn man Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$ verwendet, also Energien in Einheiten $\hbar\omega$, Abstände in Einheiten $(\hbar/m\omega)^{1/2}$, Zeiten in Einheiten ω^{-1} und Impulse in Einheiten $(m\hbar\omega)^{1/2}$ angibt, und erst wieder bei den Ergebnissen zu den konventionellen Einheiten übergeht.)

Ergebnis: $$(\Delta x)_t \cdot (\Delta p)_t = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(1+\sin^2\omega t)(1+\cos^2\omega t)}\,.$$

T4.6 Zwei nichtwechselwirkende unterscheidbare Teilchen mit gleicher Masse befinden sich in einem harmonischen Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ (eindimensionales Problem, Zustandsraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$).

(a) Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ sei der Zustandsvektor des Zweiteilchensystems durch

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}\,|\,0\,0\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,0\,1\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\,1\,0\,\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}\,|\,1\,1\,\rangle$$

gegeben ($|\,n_1 n_2\,\rangle = |\,n_1\,\rangle^{(1)} |\,n_2\,\rangle^{(2)}$, $n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0$, gemeinsame [auf eins normierte] Eigenvektoren von $H^{(1)}$, $H^{(2)}$).

(a1) Lässt sich der Zustandsvektor $|\,\psi(t)\,\rangle$ für $t \geq 0$ als direktes Produkt $|\,\psi_1(t)\,\rangle^{(1)} |\,\psi_2(t)\,\rangle^{(2)}$ schreiben? Berechne $|\,\psi(t)\,\rangle$ für $t > 0$.

(a2) Berechne die Wahrscheinlichkeiten $W_n^{(1)}(t)$, $W_n^{(2)}(t)$ dafür, dass man bei einer Messung der Energie von Teilchen 1 bzw. von Teilchen 2 zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N}_0$, findet.

(a3) Berechne die Wahrscheinlichkeit $W_n(t)$ dafür, dass man bei einer Messung der Energie des Zweiteilchensystems zu einem Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert $E_n = (n+1)\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N}_0$, findet.

(a4) Berechne für $t > 0$ die Größen $\langle\, H^{(1)} H^{(2)} \,\rangle_t$ und $\langle\, H^{(1)} \,\rangle_t \langle\, H^{(2)} \,\rangle_t$ und kommentiere das Ergebnis.

(b) Behandle die Fragen der Punkte (a1) bis (a4) für den Anfangszustand

$$|\,\psi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\,|\,0\,0\,\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\,|\,0\,1\,\rangle + \frac{i}{\sqrt{5}}\,|\,1\,0\,\rangle\,.$$

(Die Lösung des Eigenwertproblems des linearen harmonischen Oszillators kann dabei als bekannt angenommen werden.)

(Bemerkung: „Korrelation“ gibt es nicht nur zwischen *wechselwirkenden* Subsystemen. Eine entsprechende Präparation zum Anfangszeitpunkt [$|\,\psi(0)\,\rangle$ kein Produktzustand] führt auch bei Nichtvorhandensein einer Wechselwirkung zu einer „Verkettung“ der Subsysteme für $t > 0$.)

5. Störungstheorie. Variationsverfahren

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. Kapitel 9.

Angaben

5.1 Der Hamiltonoperator des so genannten „verschobenen“ linearen harmonischen Oszillators besitzt die Form

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2 - \gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,X$$

(γ dimensionslose reelle Konstante).

(a) Wie lauten die exakten Eigenwerte $E_n(\gamma)$ und die exakten Eigenvektoren $|\,u_n(\gamma)\,\rangle$ von H? Für welche Werte des Parameters γ ist die Konvergenz einer störungstheoretischen Entwicklung für $E_n(\gamma)$ zu erwarten, wenn man $W := -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,X$ als „Störung“ ansieht?

(b) Führe die Berechnung der Eigenwerte $E_n(\gamma)$ von

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2\,, \qquad W = -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,X$$

in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie durch.

(Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann dabei als bekannt angenommen werden; siehe Anhang A.5, Gl. (A.5-5b) und (A.5-7).)

(Anleitung zu (b): Drücke den Operator W durch den Oszillatorquanten-Erzeugungsoperator $a^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator a aus; s. Anhang A.5.)

5.2 Behandle dieselbe Aufgabenstellung wie in Aufgabe 5.1 für einen linearen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2\,, \qquad W = \gamma\,\frac{m\omega^2}{2}\,X^2\,; \qquad \gamma > -1\,.$$

5.3 Der Hamiltonoperator eines anharmonischen linearen Oszillators sei durch

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2\,, \qquad W = \lambda\sqrt{\frac{m^3\omega^5}{\hbar}}\,X^3 + \mu\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,X^4$$

mit $\lambda \in \mathbb{R},\ \mu \in \mathbb{R}^+$ gegeben. Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Eigenwerte $E_n(\lambda, \mu)$ von H.

(Die Lösung des ungestörten Problems kann dabei als bekannt angenommen werden; siehe Anhang A.5, Gl. (A.5-5b) und (A.5-7).)

(Anleitung: Drücke den Operator W durch den Oszillatorquanten-Erzeugungsoperator $a^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator a aus; s. Anhang A.5.)

5.4 Der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen Oszillators sei durch

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \frac{1}{2m}\,(P_1^2 + P_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}\,(X_1^2 + X_2^2)\,, \qquad W = \gamma\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,X_1^2 X_2^2$$

(γ dimensionslose positive reelle Konstante) gegeben.

(a) Berechne die störungstheoretische Energiekorrektur erster und zweiter Ordnung für den Grundzustand von H_0.

(b) Berechne die Energiekorrekturen erster Ordnung für die zwei niedrigsten Anregungsniveaus von H_0 sowie die zugehörigen Eigenvektoren nullter Ordnung von H.

(Die Lösung des ungestörten Problems kann dabei als bekannt angenommen werden. Siehe die analogen Beziehungen von Anhang A.4 für den dreidimensionalen Fall.)

(Anleitung: Drücke den Operator W durch die Oszillatorquanten-Erzeugungsoperatoren $a_1^\dagger, a_2^\dagger$ bzw. die Vernichtungsoperatoren a_1, a_2 aus; s. Anhang A.5.)

5.5 Ein geladener linearer harmonischer Oszillator (Ladung q, Masse m, Kreisfrequenz ω) befinde sich in seinem Grundzustand. Zu einem bestimmten Zeitpunkt werde „plötzlich“ ein homogenes elektrisches Feld $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\,\vec{e}_x,\ \mathcal{E} > 0$, eingeschaltet, welches nach seinem Einschalten zeitlich konstant sein soll. Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator nach dem Einschalten der Störung in seinem n-ten Energieeigenzustand anzutreffen.

(Die Energieeigenzustände des ungestörten linearen harmonischen Oszillators können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.5.)

(Anleitung: Siehe Anhang A.6, Gl. (A.6-21), (A.6-22).)

5.6 Ein geladener linearer harmonischer Oszillator (Ladung q, Masse m, Kreisfrequenz ω) befinde sich zur Zeit $t_0 = -\infty$ in seinem Grundzustand. Berechne in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator zur Zeit $t = +\infty$ in seinem n-ten Energieeigenzustand anzutreffen, wenn er im Zeitintervall $(-\infty, +\infty)$ der Wirkung des zeitabhängigen homogenen elektrischen Feldes

$$\mathcal{E}(t) = \frac{A}{\sqrt{\pi}\,\tau_0}\,\exp\!\left[-\frac{t^2}{\tau_0^2}\right]$$

$(A, \tau_0 \in \mathbb{R}^+)$ unterworfen ist. Unter welcher Voraussetzung bzgl. der Größe von A und τ_0 ist die Beschränkung auf erste Ordnung Störungstheorie möglich?

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{-c(\xi-d)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}\,, \qquad c \in \mathbb{R}^+,\ \ d \in \mathbb{C}\,.)$$

5.7

(a) Führe das Variationsverfahren für ein Teilchen der Masse m im Potential

$$V(x) = \begin{cases} fx & \text{für } \ x \geq 0 \\ +\infty & \text{für } \ x < 0 \end{cases}\,, \qquad f > 0$$

unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{ \widetilde{u}(x\,;\alpha) = x\, e^{-\alpha x},\ \ x \in \mathbb{R}_0^+,\ \ \alpha \in \mathbb{R}^+ \right\}$$

(α Variationsparameter) durch.

(b) Warum sind diese Versuchsfunktionen geeignet, eine brauchbare Näherung für die Grundzustandsenergie E_0 zu liefern?

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^n e^{-p\xi} = \frac{n!}{p^{n+1}}\,, \qquad p \in \mathbb{R}^+,\ \ n \in \mathbb{N}_0\,.)$$

5.8

(a) Führe das Variationsverfahren für den linearen harmonischen Oszillator unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{ \widetilde{u}(x\,;\alpha) = \frac{1}{\alpha^2 + x^2}\,,\ \ x \in \mathbb{R}\,,\ \ \alpha \in \mathbb{R}^+ \right\}$$

(α Variationsparameter) durch.

(b) Kommentiere das Ergebnis.

(Anleitung: Verwende die Formeln

$$\int_0^{+\infty} \frac{dx}{(\alpha^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{4\alpha^3}\,, \qquad \int_0^{+\infty} dx\, \frac{x^2}{(\alpha^2 + x^2)^2} = \frac{\pi}{4\alpha}\,,$$

$$\int_0^{+\infty} \frac{dx}{(\alpha^2 + x^2)^3} = \frac{3\pi}{16\alpha^5}\,, \qquad \int_0^{+\infty} dx\, \frac{x^2}{(\alpha^2 + x^2)^4} = \frac{\pi}{32\alpha^5}\,.)$$

5.9*

(a) Führe das Variationsverfahren für ein Teilchen der Masse m im unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |x| \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases}$$

unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{ \tilde{u}(x;\alpha) = 1 - \frac{x^2}{a^2} + \alpha\left(1 - \frac{x^4}{a^4}\right), \quad |x| \le a\,, \quad \alpha \in \mathbb{R} \right\}$$

(α Variationsparameter) durch.

(b) Vergleiche mit der exakten Lösung des Problems und kommentiere die Ergebnisse.

(Die exakte Lösung des Problems kann dabei als bekannt angesehen werden; s. die Lösung von Aufgabe 2.10.)

5.10 Der Hamiltonoperator eines anharmonischen linearen Oszillators sei durch

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X^2 + \frac{m^2\omega^3}{10\hbar} X^4$$

gegeben.

(a) Führe das Variationsverfahren unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{ \tilde{u}(x;\alpha) = e^{-\alpha x^2}, \quad x \in \mathbb{R}\,, \quad \alpha \in \mathbb{R}^+ \right\}$$

(α Variationsparameter) durch.

(b) Vergleiche mit der exakten Grundzustandsenergie[1] $E_0 = 0{,}559146\,\hbar\omega$ und kommentiere das Ergebnis.

(Anleitung: Verwende für die Rechnung Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$. Benütze die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^{2n} e^{-\beta\xi^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1}\, n!\, \beta^n} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\,, \qquad \beta \in \mathbb{R}^+, \quad n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Benütze ferner: Die kubische Gleichung $y^3 + 3py + 2q = 0$ besitzt im Falle $p^3 + q^2 > 0$ nur eine reelle Lösung, und es gilt für $p < 0$

$$y = -\frac{2\sqrt{-p}}{\sin 2\psi}\,, \qquad \tan\psi = \left[\tan\frac{\varphi}{2}\right]^{1/3}, \qquad \sin\varphi = \frac{\sqrt{-p^3}}{q}\,,$$

[1] Siehe Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

$$-\frac{\pi}{4} < \psi < \frac{\pi}{4}\,, \qquad -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}\,.)$$

5.11

(a) Welche Ergebnisse hat man zu erwarten, wenn man das Variationsverfahren für einen dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillator der Masse m und Kreisfrequenz ω unter Verwendung einer Versuchsfunktionenschar der Form

$$\{\,\widetilde{u}(\vec{r};\alpha) = \widetilde{R}(r;\alpha)\,Y_{10}(\Omega),\ \ \vec{r}\in\mathbb{R}^3,\ \ \alpha\in\mathbb{R}^+\}$$

mit

$$\begin{aligned}
&\text{Fall 1:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r}\\
&\text{Fall 2:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r^2}\\
&\text{Fall 3:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = r\,e^{-\alpha r}\\
&\text{Fall 4:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = r\,e^{-\alpha r^2}
\end{aligned}$$

durchführt? (α Variationsparameter)

(b) Führe die Rechnung für die gegebenen Versuchsfunktionenscharen durch und kommentiere die Ergebnisse.

(Anleitung: Verwende für die Rechnung Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$ und benütze die Formeln

$$\int_0^{+\infty} d\rho\,\rho^n\,e^{-\lambda\rho} = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}\,, \qquad \int_0^{+\infty} d\rho\,\rho^{2n}\,e^{-\lambda\rho^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1}n!\,\lambda^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}\,, \qquad n\in\mathbb{N}_0\,,\ \ \lambda\in\mathbb{R}^+.)$$

5.12* Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem anziehenden sphärisch symmetrischen Exponentialpotential

$$V(r) = -V_0\exp\left[-\frac{r}{r_0}\right], \qquad V_0 > 0\,,\ \ r_0 > 0\,.$$

(a) Berechne unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{\,\widetilde{u}(\vec{r};\alpha) := \exp\left[-\frac{\alpha}{2}\frac{r}{r_0}\right],\ \ \alpha\in\mathbb{R}^+\right\}$$

(α Variationsparameter) den Erwartungswert

$$\widetilde{E}(\alpha) := \langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle / \langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle\,.$$

(b) Zeige, dass die Funktion $\widetilde{E}(\alpha)$, $\alpha \in \mathbb{R}^+$, je nach der Größe des Potentialparameters[2]

$$\xi := \frac{m V_0 r_0^2}{\hbar^2}$$

entweder überhaupt keinen stationären Wert oder einen Wendepunkt mit horizontaler Tangente bei $\alpha = \frac{1}{3}$ oder ein relatives Maximum im Bereich $\alpha < \frac{1}{3}$ und ein relatives Minimum im Bereich $\alpha > \frac{1}{3}$ besitzt. Zeige ferner, dass das Minimum bei $E < 0$ liegt, wofern $\xi > \frac{27}{32}$ gilt, und skizziere den Verlauf der Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha) := \widetilde{E}(\alpha)/V_0$ für einige typische ξ-Werte.

(c) Angenommen es gilt $\xi > \frac{27}{32}$. Was kann man dann bezüglich der Existenz gebundener Zustände aussagen, und welche Bedeutung kommt dann dem Minimum $\widetilde{E}$ der Funktion $\widetilde{E}(\alpha)$ zu?

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho\, \rho^\nu\, e^{-\beta\rho} = \frac{\nu!}{\beta^{\nu+1}}\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}_0\,, \quad \beta \in \mathbb{R}^+.)$$

5.13* Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem Potential V, welches eine homogene Funktion vom Grade n in den Koordinaten ist. Ferner besitze der Hamiltonoperator

$$H = T + V = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

ein zumindest teilweise diskretes Spektrum. Beweise mithilfe des Variationsverfahrens, dass für einen Energieeigenzustand zu einem diskreten Eigenwert das *quantenmechanische Virialtheorem* $2\langle T\rangle = n\langle V\rangle$ gilt.

(Eine Funktion $f(\vec{r})$ heißt *homogen vom Grade n*, wenn sie die Eigenschaft besitzt, dass $f(\lambda\vec{r}) = \lambda^n f(\vec{r})\,,\ \lambda \in \mathbb{R}^+$, gilt.)

(Anleitung: $u(\vec{r})$ sei die auf eins normierte Energieeigenfunktion zu dem betreffenden gebundenen Zustand, auf den sich die Erwartungswerte von T und V im Virialtheorem beziehen. Wähle dann als Versuchsfunktionenschar

$$\{\,\widetilde{u}(\vec{r};\alpha) = u(\alpha\vec{r}),\ \ \vec{r} \in \mathbb{R}^3,\ \ \alpha \in \mathbb{R}^+\}\,.)$$

5.14 Der Hamiltonoperator eines anisotropen zweidimensionalen Oszillators besitze die Form $H = H_0 + W$ mit

$$H_0 = \frac{1}{2m}\,(P_1^2 + P_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}\,(X_1^2 + X_2^2)\,, \qquad W = \gamma m\omega^2 X_1 X_2\,,$$

wobei γ eine reelle Konstante mit $0 < \gamma < 1$ ist.

[2]Die Teilchenmasse m sehen wir als fest vorgegeben an.

(a) Woraus kann man ersehen, dass der Hamiltonoperator H ein rein diskretes Spektrum mit einem kleinsten Eigenwert $E_0 > 0$ besitzt?

(b)* Berechne die Eigenwerte von H exakt. Gib insbesondere die Grundzustandsenergie E_0 und die niedrigste Anregungsenergie E_1 von H an.

(c) Berechne die störungstheoretische Energiekorrektur erster und zweiter Ordnung für die Grundzustandsenergie E_0^0 von H_0 und die Energiekorrekturen erster Ordnung für das niedrigste Anregungsniveau E_1^0 von H_0 und vergleiche mit den Ergebnissen von Punkt (b).

(d) Führe das Variationsverfahren unter Verwendung der Versuchsvektorenschar

$$\left\{ |\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle = |\,1\,0\,\rangle + \beta\, e^{i\phi}\,|\,0\,1\,\rangle,\ \ \beta \in \mathbb{R}^+,\ \phi \in [0, 2\pi) \right\}$$

(β, ϕ Variationsparameter) durch. Dabei sollen die Vektoren $|\,n_1 n_2\,\rangle$ die Eigenvektoren von H_0 zu den Eigenwerten $E^0_{n_1+n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega$ sein.

(e) Welche Bedeutung besitzt der unter (d) erhaltene Wert $\widetilde{E}_{\min}$ für allgemeine Werte von γ $(0 < \gamma < 1)$ und welche zusätzliche Bedeutung besitzt er darüber hinaus für $\gamma \ll 1$?

(f) Vergleiche für einige spezielle γ-Werte die exakten Eigenwerte E_0 und E_1 von Punkt (b) mit den entsprechenden in den Punkten (c) und (d) erhaltenen Näherungswerten bzw. Schranken.

(Anleitung: Verwende für alle Rechnungen Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$.)

(Anleitung zu (b): Zeige, dass in der x_1x_2-Ebene Spiegelungssymmetrie bezüglich der Geraden $x_1 = \pm x_2$ vorliegt, und führe eine entsprechende geeignete kanonische Transformation durch.)

Lösungen

5.1

(a) Die exakte Lösung des Eigenwertproblems des „verschobenen“ linearen harmonischen Oszillators wurde bereits in Aufgabe 2.16 behandelt. Es muss lediglich in (2.16-1) und (2.16-2) $q\mathcal{E}$ durch $\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}$ ersetzt werden. Somit (s. Abb. 5.1-1):

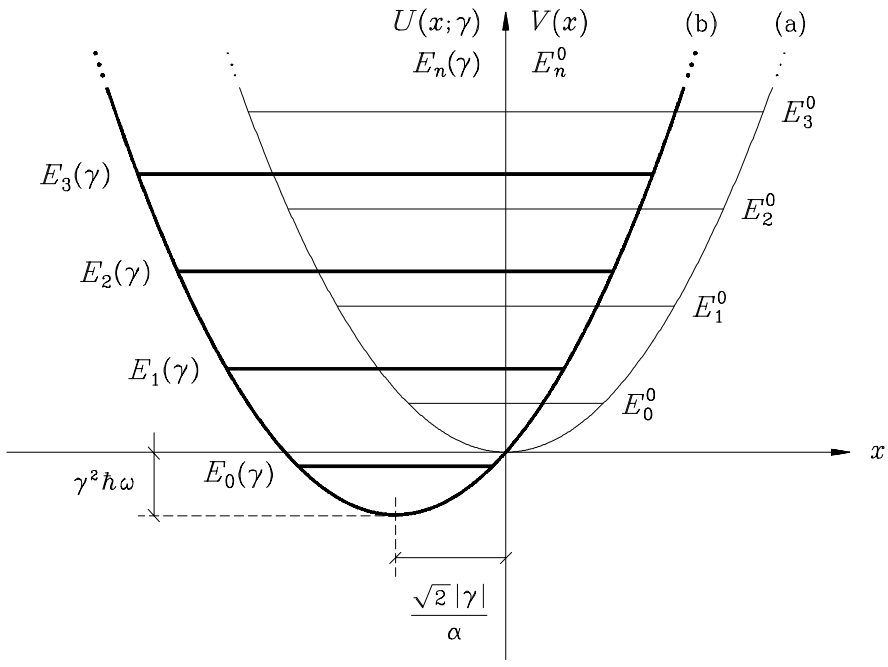


Abb. 5.1-1: Potentialverlauf und Energieeigenwerte:
(a) für den „ungestörten“ Oszillator mit dem Potential $V(x) = m\omega^2x^2/2$;
(b) für den „gestörten“ („verschobenen“) Oszillator mit dem Potential $U(x;\gamma) = m\omega^2x^2/2 - \gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,x$ (für $\gamma < 0$ gezeichnet)

$$H(\gamma)\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle = E_n(\gamma)\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle\,; \qquad E_n(\gamma) = \Big(n + \frac{1}{2} - \gamma^2\Big)\hbar\omega\,, \tag{5.1-1}$$

$$u_n(x;\gamma) \equiv \langle\, x\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\Big]\,H_n\Big(\alpha\,(x-x_0)\Big)\,, \tag{5.1-2}$$

$$\alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,, \quad x_0 := \frac{\sqrt{2}\,\gamma}{\alpha}\,; \quad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{5.1-3}$$

Da die exakte Lösung für $E_n(\gamma)$ ein Polynom zweiten Grades im Störungsparameter γ ist, hat man zu erwarten, dass sich in zweiter Ordnung Störungstheorie die *exakten*

Eigenwerte $E_n(\gamma)$ ergeben, und alle Korrekturen höherer Ordnung null sind, sodass die störungstheoretische Entwicklung für $E_n(\gamma)$ für beliebig großes $|\gamma|$, d. h. für beliebig starke Störung, konvergiert.

(b) Nach Anhang A.6, Gl. (A.6-1) bis (A.6-9) gilt ($|\,u_n^0\,\rangle \equiv |\,n\,\rangle$)

$$E_n(\gamma) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\gamma) + \epsilon_n^{(2)}(\gamma) + \dots\,, \tag{5.1-4}$$

$$|\,u_n(\gamma)\,\rangle = |\,n\,\rangle + |\,\chi_n^{(1)}(\gamma)\,\rangle + |\,\chi_n^{(2)}(\gamma)\,\rangle + \dots\,; \tag{5.1-5}$$

$$\epsilon_n^{(1)}(\gamma) = \langle\, n\,|\,W(\gamma)\,|\,n\,\rangle\,, \qquad |\,\chi_n^{(1)}(\gamma)\,\rangle = \sum_{n'\neq n} \frac{\langle\, n'\,|\,W(\gamma)\,|\,n\,\rangle}{E_n^0 - E_{n'}^0}\,|\,n'\rangle\,, \tag{5.1-6}$$

$$\epsilon_n^{(2)}(\gamma) = \langle\, n\,|\,W(\gamma)\,|\,\chi_n^{(1)}(\gamma)\,\rangle\,, \dots \tag{5.1-7}$$

Mit (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-3), (A.5-7))

$$W(\gamma) = -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,X = -\gamma\hbar\omega\,(a^\dagger + a)\,, \tag{5.1-8a}$$

$$E_n^0 - E_{n'}^0 = (n - n')\hbar\omega \tag{5.1-8b}$$

folgt (s. (A.5-9))

$$\langle\, n'\,|\,W\,|\,n\,\rangle = -\gamma\hbar\omega\left[\sqrt{n+1}\;\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\;\delta_{n',n-1}\right] \tag{5.1-9}$$

und

$$\epsilon_n^{(1)} = 0\,, \qquad |\,\chi_n^{(1)}\,\rangle = \gamma\left[\sqrt{n+1}\,|\,n+1\,\rangle - \sqrt{n}\,|\,n-1\,\rangle\right], \tag{5.1-10}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_n^{(2)} &= -\gamma\hbar\omega\,\langle\, n\,|\,(a^\dagger + a)\,|\,\chi_n^{(1)}\,\rangle \\ &= -\gamma^2\hbar\omega\left[\sqrt{n+1}\,\langle\, n\,|\,a\,|\,n+1\,\rangle - \sqrt{n}\,\langle\, n\,|\,a^\dagger\,|\,n-1\,\rangle\right] \\ &= -\gamma^2\hbar\omega\left[(n+1) - n\right] = -\gamma^2\hbar\omega\,.\end{aligned} \tag{5.1-11}$$

Damit haben wir tatsächlich in zweiter Ordnung Störungstheorie die exakten Eigenwerte von $H = H_0 + W$ erhalten:

$$E_n^{[2]}(\gamma) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\gamma) + \epsilon_n^{(2)}(\gamma) = \Big(n + \frac{1}{2} - \gamma^2\Big)\hbar\omega = E_n(\gamma)\,. \tag{5.1-12}$$

Bemerkungen

Während man für die Eigenwerte $E_n(\gamma)$ in zweiter Ordnung Störungstheorie bereits das exakte Ergebnis erhält, und alle Korrekturen $\epsilon_n^{(i)}$, $i \geq 3$, null sind, gibt es in allen Ordnungen vom Nullvektor verschiedene Korrekturvektoren $|\,\chi_n^{(i)}\,\rangle$ zu $|\,u_n^0\,\rangle \equiv |\,n\,\rangle$. Hinreichende Kleinheit der Störung ist somit Voraussetzung dafür, dass man die Entwicklung für die Eigenvektoren $|\,u_n(\gamma)\,\rangle$ näherungsweise nach endlich vielen Gliedern abbrechen kann.

5.2

(a) Wegen $\gamma > -1$ ist $1+\gamma$ positiv, und der Hamiltonoperator H kann mit

$$\widetilde{\omega}(\gamma) := \omega\sqrt{1+\gamma} \tag{5.2-1}$$

in der Form

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\widetilde{\omega}^2}{2}\,X^2 \tag{5.2-2}$$

geschrieben werden, wobei $\widetilde{\omega}^2 > 0$ ist. Die exakte Lösung des Eigenwertproblems des gestörten Hamiltonoperators lautet somit nach Anhang A.5, Gl. (A.5-5b) und (A.5-7):

$$H(\gamma)\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle = E_n(\gamma)\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle\,; \tag{5.2-3}$$

$$E_n(\gamma) = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar\widetilde{\omega}(\gamma) = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\sqrt{1+\gamma}\;\hbar\omega\,, \tag{5.2-4}$$

$$u_n(x\,;\gamma) \equiv \langle\, x\,|\,u_n(\gamma)\,\rangle = \sqrt{\frac{\widetilde{\alpha}}{2^n\,n!\,\sqrt{\pi}}}\;\exp\Big[-\frac{(\widetilde{\alpha}x)^2}{2}\Big]\,H_n(\widetilde{\alpha}x)\,, \tag{5.2-5}$$

$$\widetilde{\alpha} = \widetilde{\alpha}(\gamma) := \sqrt{\frac{m\widetilde{\omega}(\gamma)}{\hbar}}\;\;;\quad n\in\mathbb{N}_0\,. \tag{5.2-6}$$

Die Binomialentwicklung

$$\sqrt{1+\gamma} = 1 + \frac{\gamma}{2} - \frac{\gamma^2}{8} + \frac{\gamma^3}{16} - + \ldots \tag{5.2-7}$$

konvergiert für $|\gamma| \le 1$. Die störungstheoretische Berechnung von $E_n(\gamma)$ muss dementsprechend auf die für $|\gamma| \le 1$ konvergente Entwicklung

$$E_n(\gamma) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\gamma) + \epsilon_n^{(2)}(\gamma) + \epsilon_n^{(3)}(\gamma) + \ldots\,; \tag{5.2-8a}$$

$$E_n^0 = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar\omega\,, \qquad \epsilon_n^{(1)}(\gamma) = \frac{\gamma}{2}\,E_n^0\,, \tag{5.2-8b}$$

$$\epsilon_n^{(2)}(\gamma) = -\frac{\gamma^2}{8}\,E_n^0\,, \qquad \epsilon_n^{(3)}(\gamma) = \frac{\gamma^3}{16}\,E_n^0\,,\;\ldots \tag{5.2-8c}$$

führen. (Der Fall $\gamma = -1$ muss allerdings ausgeschlossen werden; s. die Bemerkungen zum Spektrum von H am Ende der Aufgabe.)

Die Abbildung 5.2-1 zeigt Potentialverlauf und Energieniveaus des „ungestörten“ und des „gestörten“ Oszillators (für $\gamma > 0$ gezeichnet). Wie in Aufgabe 5.1 (s. Abb. 5.1-1) liegen auch hier die Energieniveaus des gestörten Oszillators äquidistant. Während in Aufgabe 5.1 jedoch das gesamte Niveauschema gegenüber dem ungestörten Problem lediglich verschoben war, ist der Abstand aufeinander folgender Niveaus hier beim gestörten und ungestörten Problem verschieden groß.

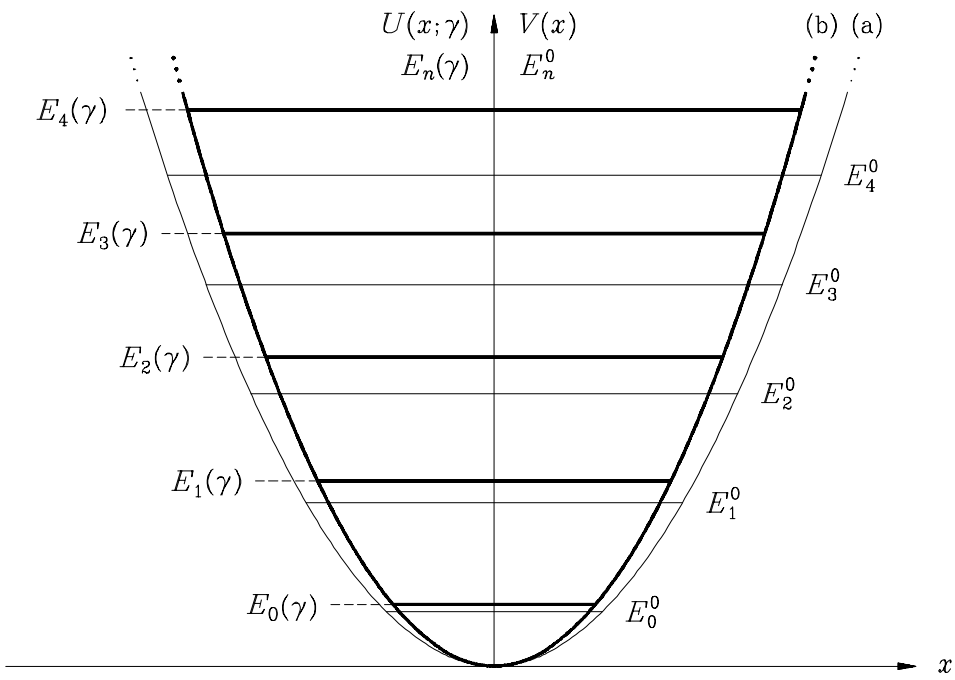


Abb. 5.2-1: Potentialverlauf und Energieeigenwerte:
(a) für den „ungestörten“ Oszillator mit dem Potential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$;
(b) für den „gestörten“ Oszillator mit dem Potential $U(x;\gamma) = (1+\gamma)m\omega^2 x^2/2$ (für $\gamma > 0$ gezeichnet)

(b) Mit (s. Gl. (3.22-2))

$$W(\gamma) = \gamma\,\frac{m\omega^2}{2}\,X^2 = \gamma\,\frac{\hbar\omega}{4}\left[(a^\dagger)^2 + 2N + \mathbb{1} + a^2\right] \tag{5.2-9}$$

folgt wegen Anhang A.5, Gl. (A.5-9) ($|\,u_n^0\,\rangle \equiv |\,n\,\rangle$)

$$\langle\, n' \,|\, W \,|\, n \,\rangle = \gamma\,\frac{\hbar\omega}{4}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\;\delta_{n',n+2} + (2n+1)\,\delta_{n'n} + \sqrt{n(n-1)}\;\delta_{n',n-2}\right]. \tag{5.2-10}$$

Einsetzen dieser Matrixelemente in die Formeln (5.1-6), (5.1-7) und Berücksichtigung von (5.1-8b) gibt die folgenden störungstheoretischen Korrekturen:

$$\epsilon_n^{(1)}(\gamma) = \frac{\gamma}{2}\Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega\,, \tag{5.2-11}$$

$$|\,\chi_n^{(1)}(\gamma)\,\rangle = \frac{\gamma}{8}\left[\sqrt{n(n-1)}\,|\,n-2\,\rangle - \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|\,n+2\,\rangle\right], \tag{5.2-12}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_n^{(2)}(\gamma) &= \langle\, n \,|\, W(\gamma) \,|\, \chi_n^{(1)}(\gamma) \,\rangle = \frac{\gamma^2}{8}\,\frac{\hbar\omega}{4}\Big[n(n-1) - (n+1)(n+2)\Big] \\ &= -\frac{\gamma^2}{8}\Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar\omega\,.\end{aligned} \tag{5.2-13}$$

Diese Ergebnisse stimmen mit (5.2-8b), (5.2-8c) überein.

Bemerkungen

Die Potenzreihe für $E_n(\gamma)$ konvergiert für $|\gamma| \le 1$, die „Störung“ W muss also keineswegs „klein“ sein gegen das Potential V, um die Konvergenz der Störungsreihe zu gewährleisten. Natürlich ist $|\gamma| \ll 1$ Voraussetzung dafür, dass man bereits in erster Ordnung Störungstheorie einen brauchbaren Näherungswert für $E_n(\gamma)$ erhält. (Für $\gamma = 0{,}1$ weicht $E_n^{[1]} = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}$ nur um 0,1% von E_n ab.)

Der Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,(1+\gamma)X^2$$

besitzt für beliebiges $\gamma > -1$ ein diskretes Spektrum (Eigenwerte s. Gl. (5.2-4), Eigenfunktionen von $H^{\{x\}}$ s. Gl. (5.2-5), (5.2-6)). Für $\gamma \le -1$ hingegen ist das Spektrum von H kontinuierlich. (Siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13.)

5.3 In erster Ordnung Störungstheorie gilt (s. Anhang A.6, Gl. (A.6-5), (A.6-7))

$$E_n \approx E_n^{[1]} = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)} \tag{5.3-1}$$

mit ($|\, u_n^0 \,\rangle \equiv |\, n \,\rangle$)

$$\epsilon_n^{(1)} = \langle\, n \,|\, W \,|\, n \,\rangle\,. \tag{5.3-2}$$

Da X^3 ein ungerader Operator bzgl. räumlicher Inversion ist, und die Eigenzustände $|\, n \,\rangle$ von H_0 Eigenvektoren des Paritätsoperators sind (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-5c)), folgt $\langle\, n \,|\, X^3 \,|\, n \,\rangle = 0$. (Siehe auch Gl. (3.22-1).) Weiter gilt gemäß Gl. (3.22-8)

$$\langle\, n \,|\, X^4 \,|\, n \,\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (6n^2 + 6n + 3)\,. \tag{5.3-3}$$

Die Eigenwerte des gestörten Hamiltonoperators hängen somit in erster Ordnung Störungstheorie nicht von λ ab:

$$E_n^{[1]} = E_n^{[1]}(\mu) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\mu) = \left[n + \frac{1}{2} + \frac{3\mu}{2}\Big(n^2 + n + \frac{1}{2}\Big)\right]\hbar\omega\,. \tag{5.3-4}$$

Die Energieniveaus des anharmonischen Oszillators sind nicht äquidistant.

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

In der Angabe wurde vorsorglich $\mu > 0$ vorausgesetzt, womit ein rein diskretes Spektrum von $H = H_0 + W$ garantiert ist, doch ist es interessant auch die Fälle $\mu < 0$ und $\mu = 0$ in die Betrachtungen einzubeziehen. – Es wird manchen Leser überraschen, dass die *Störungsreihe*

für beliebige Werte von λ, μ (λ, μ nicht beide null) *divergiert.*[3] Wie kann man dies plausibel machen und welche Bedeutung hat dann der oben berechnete Ausdruck von Gl. (5.3-4)?

Betrachtet man den Verlauf des wellenmechanischen Potentials

$$U(x;\lambda,\mu) = \frac{m\omega^2}{2}\,x^2 + \lambda\sqrt{\frac{m^3\omega^5}{\hbar}}\,x^3 + \mu\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,x^4\,, \qquad \lambda,\mu \in \mathbb{R}\,, \tag{5.3-5}$$

so stellt man fest, dass dieses im Fall $\mu > 0$ für beliebiges λ für $x \to \pm\infty$ gegen $+\infty$, im Fall $\mu < 0$ jedoch gegen $-\infty$ strebt. Der Hamiltonoperator des gestörten Problems besitzt daher im Falle $\mu > 0$ (für beliebiges λ) ein rein diskretes Spektrum, während im Falle $\mu < 0$ das Spektrum rein kontinuierlich ist. Im letzteren Falle erwartet man das Divergieren der Störungsreihe. Dieses Divergieren ist aber ein Fingerzeig dafür, dass die Störungsreihe auch für $\mu > 0$ divergiert, da eine Potenzreihe entweder in einem endlichen Intervall („Konvergenzkreis“) um die Entwicklungsstelle konvergiert oder ihr Konvergenzradius null ist, sie also divergiert. Wie man allerdings zeigen kann, liefert die störungstheoretische Rechnung für $\mu > 0$ eine *asymptotische Entwicklung* für die diskreten Eigenwerte $E_n(\lambda,\mu)$, d. h. der Ausdruck (5.3-4) und die höheren Partialsummen

$$E_n^{[2]}(\lambda,\mu) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\mu) + \epsilon_n^{(2)}(\lambda,\mu),\ \ldots$$

sind für hinreichend kleine $|\lambda|$, μ und nicht zu hohe Ordnung der Partialsumme Näherungswerte für die exakten diskreten Eigenwerte $E_n(\lambda,\mu)$.

Auch für $\mu = 0$, $\lambda \neq 0$ besitzt H ein rein kontinuierliches Spektrum (s. Abb. 5.3-1) und man erwartet wieder das Divergieren der Störungsreihe. Es ist interessant, dass sogar in diesem Falle die durch formale Anwendung der Störungstheorie erhaltenen diskreten Werte

$$E_n^{[2]}(\lambda) = E_n^0 + \epsilon_n^{(2)}(\lambda)\,, \qquad E_n^{[3]}(\lambda) = E_n^0 + \epsilon_n^{(2)}(\lambda) + \epsilon_n^{(3)}(\lambda),\ \ldots$$

physikalische Bedeutung haben. Sie stellen nämlich für hinreichend kleines $|\lambda|$ und nicht zu hohe Ordnung der Partialsumme Näherungswerte für Stellen $E_n(\lambda)$ im Kontinuum dar, die dadurch ausgezeichnet sind, dass Wellenpakete von stationären Zuständen, deren Energien aus einem engen Bereich um $E_n(\lambda)$ stammen, sehr lange in der Nähe des Ursprungs verweilen, also *quasigebundene Zustände* beschreiben.[4] Die (für $\lambda > 0$ bei negativen x liegende) „Schwelle“ wird für kleine $|\lambda|$ sehr breit, und ein Teilchen in einem quasistationären Zustand kann diese Schwelle nur mit geringer Wahrscheinlichkeit durchdringen und die Potentialmulde verlassen. Für ein beschränktes Zeitintervall können die quasistationären Zustände näherungsweise durch die stationären Zustände

$$\psi_n(x,t;\lambda) = u_n(x;\lambda)\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,E_n(\lambda)\,t\Big]$$

ersetzt werden.

[3] Siehe Reed, M., und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd.IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

[4] Siehe z. B. Blochinzew, D. I.: Grundlagen der Quantenmechanik. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main 2000.

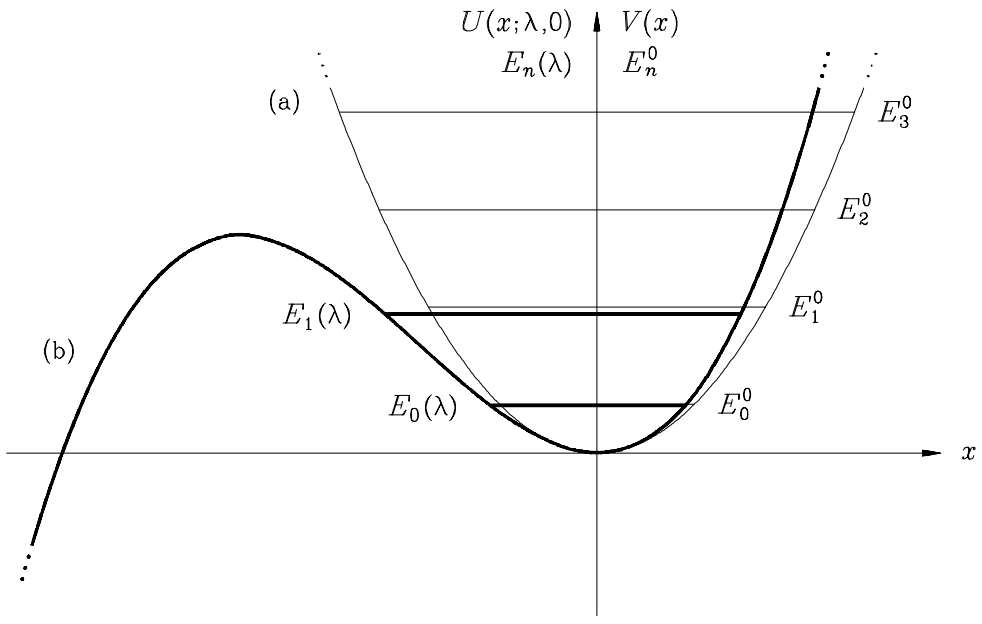


Abb. 5.3-1: Stationäre bzw. quasistationäre Zustände:
(a) für den „ungestörten“ Oszillator mit dem Potential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$;
(b) für den „gestörten“ Oszillator mit dem Potential $U(x;\lambda > 0, 0)$ (s. Gl. (5.3-5))

S. auch Aufgabe 9.4 und die Bemerkungen dazu (Starkeffekt und Selbstionisation beim Wasserstoffatom) sowie Aufgabe 5.10.

5.4 Lösung des Eigenwertproblems des ungestörten Hamiltonoperators (siehe die analogen Beziehungen von Anhang A.4 für den dreidimensionalen Fall):

$$H_0\,|\,n_1 n_2\,\rangle = E^0_{n_1+n_2}\,|\,n_1 n_2\,\rangle\,; \qquad E^0_{n_1+n_2} = (n_1+n_2+1)\hbar\omega\,, \tag{5.4-1a}$$

$$|\,n_1 n_2\,\rangle = |\,n_1\,\rangle^{(1)}|\,n_2\,\rangle^{(2)}\,, \qquad \langle\, x_1 x_2\,|\,n_1 n_2\,\rangle = {}^{(1)}\langle\, x_1\,|\,n_1\,\rangle^{(1)}\,{}^{(2)}\langle\, x_2\,|\,n_2\,\rangle^{(2)}\,, \tag{5.4-1b}$$

$${}^{(k)}\langle\, x_k\,|\,n_k\,\rangle^{(k)} \equiv u_{n_k}(x_k) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^{n_k}\,n_k!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\!\left[-\frac{(\alpha x_k)^2}{2}\right] H_{n_k}(\alpha x_k)\,, \tag{5.4-1c}$$

$$\alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;; \quad k = 1,2\,; \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0\,. \tag{5.4-1d}$$

In Tab. 5.4-1 sind für die drei niedrigsten Energieniveaus des ungestörten Problems jeweils die Vielfachheit sowie ein orthonormiertes Basissystem des betreffenden Eigenraumes angeführt. Um die Anwendung der Formeln (A.6-4) bis (A.6-13) von Anhang A.6 zu erleichtern, wird dabei neben der Bezeichnungsweise von Gl. (5.4-1) noch die Bezeichnungsweise von Gl. (A.6-2) benützt.

Tab. 5.4-1: Eigenwerte E_n^0, Vielfachheiten g_n^0 und zugehörige orthonormierte Eigenvektoren $|\,u_{n\nu}^0\,\rangle$, $\nu = 1, 2, \ldots, g_n^0$, für die drei niedrigsten Energieniveaus des zweidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators

$n = n_1 + n_2$	E_n^0	g_n^0	$\lvert\,u_{n\nu}^0\,\rangle,\ \nu = 1, 2, \ldots, g_n^0$
0	$\hbar\omega$	1	$\lvert\,u_{01}^0\,\rangle \equiv \lvert\,u_0^0\,\rangle = \lvert\,0\,0\,\rangle$
1	$2\hbar\omega$	2	$\lvert\,u_{11}^0\,\rangle = \lvert\,1\,0\,\rangle$, $\lvert\,u_{12}^0\,\rangle = \lvert\,0\,1\,\rangle$
2	$3\hbar\omega$	3	$\lvert\,u_{21}^0\,\rangle = \lvert\,2\,0\,\rangle$, $\lvert\,u_{22}^0\,\rangle = \lvert\,0\,2\,\rangle$, $\lvert\,u_{23}^0\,\rangle = \lvert\,1\,1\,\rangle$

(a) *Eigenwert* E_0^0: $g_0^0 = 1$ (keine Entartung)

In diesem Fall sind die Formeln (A.6-7), (A.6-9) anwendbar, und mit den Bezeichnungen von Tab. 5.4-1 folgt

$$\epsilon_0^{(1)} = \langle\,0\,0\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle\,, \qquad \epsilon_0^{(2)} = \sum_{\substack{n_1,n_2=0\\(n_1,n_2)\neq(0,0)}}^{\infty} \frac{|\langle\,n_1 n_2\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle|^2}{E_0^0 - E_{n_1+n_2}^0}\,. \tag{5.4-2}$$

Für die Matrixelemente der „Störung“

$$W = \gamma\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,X_1^2 X_2^2 \tag{5.4-3}$$

gilt

$$\langle\,n_1 n_2\,|\,W\,|\,n_1' n_2'\,\rangle = \gamma\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,{}^{(1)}\langle\,n_1\,|\,X_1^2\,|\,n_1'\,\rangle^{(1)}\,{}^{(2)}\langle\,n_2\,|\,X_2^2\,|\,n_2'\,\rangle^{(2)} \tag{5.4-4}$$

mit (s. Gl. (5.2-9), (5.2-10))

$$\begin{aligned}{}^{(k)}\langle\,n_k\,|\,X_k^2\,|\,n_k'\,\rangle^{(k)} = \frac{\hbar}{2m\omega}\Big[&\sqrt{(n_k'+1)(n_k'+2)}\;\delta_{n_k,n_k'+2} + (2n_k'+1)\,\delta_{n_k n_k'}\\ &+ \sqrt{n_k'\,(n_k'-1)}\;\delta_{n_k,n_k'-2}\Big]\,.\end{aligned} \tag{5.4-5}$$

Somit:

$$\epsilon_0^{(1)} = \frac{\gamma}{4}\,\hbar\omega\,, \tag{5.4-6}$$

$$\epsilon_0^{(2)} = \frac{|\langle\,2\,0\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle|^2}{-2\hbar\omega} + \frac{|\langle\,0\,2\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle|^2}{-2\hbar\omega} + \frac{|\langle\,2\,2\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle|^2}{-4\hbar\omega} = -\frac{3\gamma^2}{16}\,\hbar\omega\,; \tag{5.4-7}$$

$$E_0^{[1]} = E_0^0 + \epsilon_0^{(1)} = \Big(1 + \frac{\gamma}{4}\Big)\hbar\omega\,, \tag{5.4-8}$$

$$E_0^{[2]} = E_0^0 + \epsilon_0^{(1)} + \epsilon_0^{(2)} = \Big(1 + \frac{\gamma}{4} - \frac{3\gamma^2}{16}\Big)\hbar\omega\,. \tag{5.4-9}$$

(b) *Eigenwert* E_1^0: $g_1^0 = 2$ (Entartung)

Nach Anhang A.6 werden in diesem Fall die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster Ordnung $\epsilon_{1\nu}^{(1)}$, $\nu = 1, 2$, durch „Diagonalisieren“ der Matrix des Störoperators im Entartungsraum zu E_1^0,

$$\widehat{W} = \begin{bmatrix} \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle & \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle \\ \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle & \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle \end{bmatrix}, \tag{5.4-10}$$

erhalten (s. (A.6-10) bis (A.6-13) und Tab. 5.4-1). Mit Gl. (5.4-4), (5.4-5) erhält man

$$\widehat{W} = (3\gamma/4)\hbar\omega \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{5.4-11}$$

Die Matrix $\widehat{W}$ ist bereits „diagonal“, und es folgt

$$\epsilon_{11}^{(1)} = \epsilon_{12}^{(1)} = \frac{3\gamma}{4}\,\hbar\omega\,; \tag{5.4-12}$$

$$E_{1\nu}^{[1]} = E_1^0 + \epsilon_{1\nu}^{(1)} = 2\Big(1 + \frac{3\gamma}{8}\Big)\hbar\omega\,, \quad \nu = 1, 2\,. \tag{5.4-13}$$

Die Entartung wird also in erster Ordnung Störungstheorie *nicht aufgehoben*, und die Eigenvektoren nullter Ordnung von H bleiben unbestimmt. (Jeder Vektor $|\,\chi\,\rangle$ des Entartungsraumes ist Eigenvektor nullter Ordnung von H, da jede Spaltenmatrix

$$\widehat{\chi} = \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\, 1\,0\,|\,\chi\,\rangle \\ \langle\, 0\,1\,|\,\chi\,\rangle \end{bmatrix} \tag{5.4-14}$$

Eigen-Spaltenmatrix der Matrix (5.4-11) ist.)

Eigenwert E_2^0: $g_2^0 = 3$ (Entartung)
Matrix des Störoperators im Entartungsraum (s. Tab. 5.4-1):

$$\widehat{W} = \begin{bmatrix} \langle\, 2\,0\,|\,W\,|\,2\,0\,\rangle & \langle\, 2\,0\,|\,W\,|\,0\,2\,\rangle & \langle\, 2\,0\,|\,W\,|\,1\,1\,\rangle \\ \langle\, 0\,2\,|\,W\,|\,2\,0\,\rangle & \langle\, 0\,2\,|\,W\,|\,0\,2\,\rangle & \langle\, 0\,2\,|\,W\,|\,1\,1\,\rangle \\ \langle\, 1\,1\,|\,W\,|\,2\,0\,\rangle & \langle\, 1\,1\,|\,W\,|\,0\,2\,\rangle & \langle\, 1\,1\,|\,W\,|\,1\,1\,\rangle \end{bmatrix}; \tag{5.4-15}$$

Einsetzen von (5.4-4), (5.4-5):

$$\widehat{W} = (\gamma/4)\hbar\omega \begin{bmatrix} 5 & 2 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}; \tag{5.4-16}$$

Eigenwertproblem der Matrix $\widehat{W}$: Aus der Eigenwertgleichung

$$\widehat{W}\,\widehat{\chi} = \epsilon_2^{(1)}\,\widehat{\chi} \tag{5.4-17}$$

folgt für die Energiekorrekturen die Säkulargleichung

$$\det(\widehat{W} - \epsilon_2^{(1)}\widehat{\mathbb{1}}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{EW von } \widehat{W}\text{: } \epsilon_{2\nu}^{(1)},\ \nu = 1,2,3\,. \tag{5.4-18}$$

Man erhält:

$$\epsilon_{21}^{(1)} = \frac{3\gamma}{4}\,\hbar\omega\,, \qquad \epsilon_{22}^{(1)} = \frac{7\gamma}{4}\,\hbar\omega\,, \qquad \epsilon_{23}^{(1)} = \frac{9\gamma}{4}\,\hbar\omega\,; \tag{5.4-19}$$

$$E_{2\nu}^{[1]} = E_2^0 + \epsilon_{2\nu}^{(1)} = \begin{cases} 3\Big(1+\dfrac{\gamma}{4}\Big)\hbar\omega & \text{für} \quad \nu = 1 \\ 3\Big(1+\dfrac{7\gamma}{12}\Big)\hbar\omega & \text{für} \quad \nu = 2 \\ 3\Big(1+\dfrac{3\gamma}{4}\Big)\hbar\omega & \text{für} \quad \nu = 3 \end{cases}. \tag{5.4-20}$$

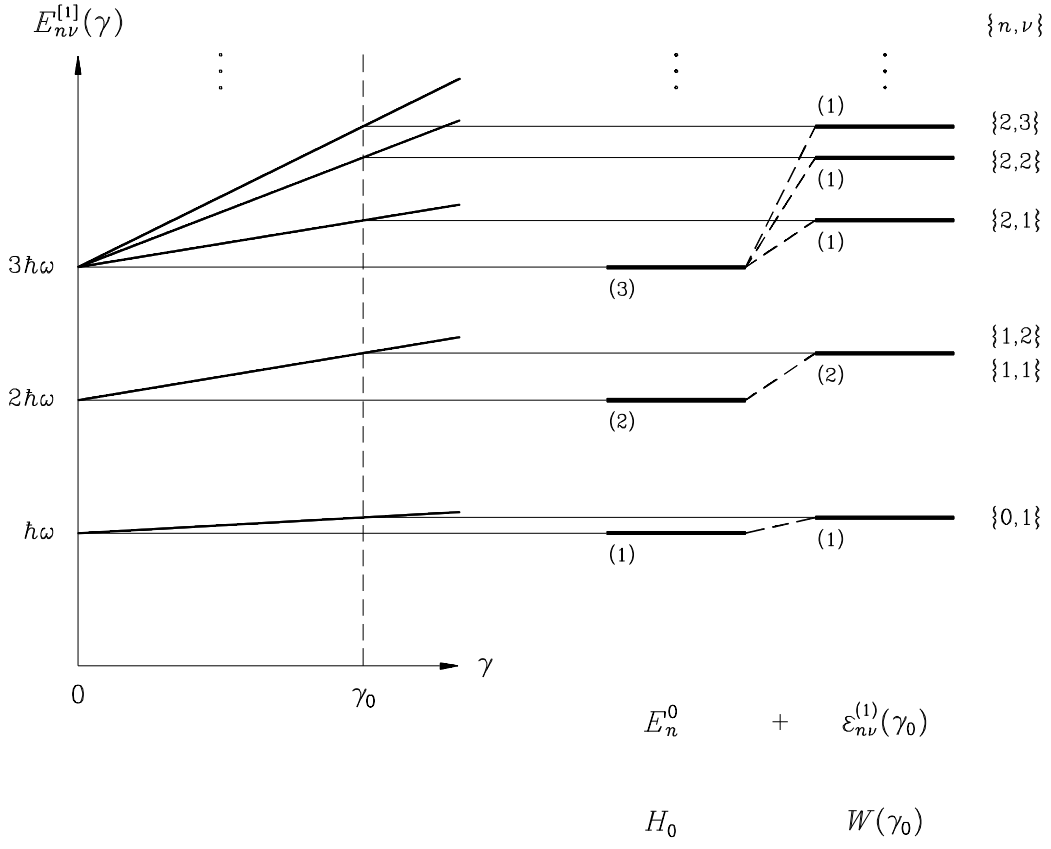


Abb. 5.4-1: Spektrum von $H(\gamma) = H_0 + W(\gamma)$ in erster Ordnung Störungstheorie (H_0 Hamiltonoperator des zweidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators, $W(\gamma)$ Störpotential Gl. (5.4-3)); in runden Klammern sind die jeweiligen Vielfachheiten angegeben)

Die Entartung wird also in erster Ordnung Störungstheorie *vollkommen aufgehoben*, und die Eigenvektoren nullter Ordnung von H sind (bis auf Phasenfaktoren) eindeutig bestimmt. Aus der Eigenwertgleichung (5.4-17) erhält man nach Einsetzen der Eigenwerte $\epsilon_{2\nu}^{(1)},\ \nu = 1,2,3$, die entsprechenden Eigen-Spaltenmatrizen. Das Ergebnis für die auf eins normierten Eigenvektoren nullter Ordnung von H zu den Eigenwerten $E_{2\nu}(\gamma),\ \nu = 1,2,3$, lautet:

$$|\,\chi_{21}^{(0)}\,\rangle = e^{i\alpha_1}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,2\,0\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,0\,2\,\rangle\right], \tag{5.4-21a}$$

$$|\,\chi_{22}^{(0)}\,\rangle = e^{i\alpha_2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,2\,0\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,0\,2\,\rangle\right], \tag{5.4-21b}$$

$$|\,\chi_{23}^{(0)}\,\rangle = e^{i\alpha_3}\,|\,1\,1\,\rangle\,. \tag{5.4-21c}$$

Bemerkungen

Da der Hamiltonoperator H mit dem Paritätsoperator Π vertauscht, gibt es exakte Eigenvektoren von H mit definiter Parität. Die exakten Eigenvektoren von H können aber nicht mehr Produktzustände sein. (Die wellenmechanische Schrödingergleichung des gestörten Systems lässt sich in x_1, x_2 nicht separieren.) Im Rahmen der Störungstheorie ergeben sich in nullter Näherung ebenfalls Eigenvektoren von H mit definiter Parität, da alle Vektoren des Eigenraumes zu $E_{n_1+n_2}^0$ dieselbe Parität $\pi = (-1)^{n_1+n_2}$ besitzen. Der näherungsweise Eigenvektor $|\,\chi_{23}^{(0)}\,\rangle$ von Gl. (5.4-21c) ist nach wie vor Produktzustand, dagegen sind die näherungsweisen Eigenvektoren $|\,\chi_{21}^{(0)}\,\rangle$, $|\,\chi_{22}^{(0)}\,\rangle$ von Gl. (5.4-21a), (5.4-21b) Linearkombinationen von Produktzuständen.

Die in erster Ordnung Störungstheorie erhaltene Verminderung der Entartung steht mit der geringeren Symmetrie von H bzgl. Drehungen in der x_1x_2-Ebene im Zusammenhang. Die Abbildung 5.4-1 zeigt das Spektrum von H wie es sich in erster Ordnung Störungstheorie ergibt.

5.5 Für die Wahrscheinlichkeit, den Oszillator zu einem beliebigen Zeitpunkt nach dem „plötzlichen Einschalten“ der „Störung“ $W = -q\mathcal{E}X$ in seinem n-ten (d. h. im n-ten *gestörten*) Energieeigenzustand anzutreffen, gilt nach Anhang A.6, Gl. (A.6-21) in erster Ordnung Störungstheorie für $n \neq 0$

$$W_n^{[1]} \equiv W_{0(H_0)\to n(H)}^{[1]} = \frac{|\langle\, n\,|\,W\,|\,0\,\rangle|^2}{(E_n^0 - E_0^0)^2} = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{\hbar^2\omega^2 n^2}\,|\langle\, n\,|\,X\,|\,0\,\rangle|^2\,. \tag{5.5-1}$$

Die Vektoren $|\,n\,\rangle$ sind dabei Eigenvektoren von H_0. Wegen (A.5-3), (A.5-9) gilt

$$\langle\, n\,|\,X\,|\,0\,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\;\delta_{n1}$$

und es folgt

$$W_n^{[1]} = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}\,\delta_{n1}\,, \quad n \neq 0\,; \qquad W_0^{[1]} = 1 - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}\,. \tag{5.5-2}$$

Voraussetzung für die Brauchbarkeit dieser Näherung ist (s. Gl. (A.6-23))

$$\mathcal{E} \ll \frac{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}{|q|} \ . \tag{5.5-3}$$

Bemerkungen

In Aufgabe 4.14 wurden die exakten Wahrscheinlichkeiten

$$W_n \equiv W_{0(H_0)\to n(H)} \ , \qquad n \in \mathbb{N}_0 \tag{5.5-4}$$

gemäß Formel (A.6-19) unter Verwendung der in Aufgabe 2.16 erhaltenen exakten Eigenzustände von $H = H_0 + W$ berechnet. Im Grenzfall (5.5-3) ergaben sich dabei die Ausdrücke (4.14-8), welche bei Vernachlässigung von Beiträgen der Ordnung

$$\Big[\frac{(\alpha x_0)^2}{2}\Big]^2 = \Big[\frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}\Big]^2$$

mit (5.5-2) übereinstimmen.

Nach Gl. (2.16-3) sind die exakten Eigenwerte von $H = H_0 + W$ durch

$$E_n = E_n^0 - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} = (n + \frac{1}{2} - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3})\hbar\omega \tag{5.5-5}$$

gegeben. Die Größe W_n gibt somit die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass man bei einer determinativen Messung der Energie des gestörten Oszillators den Messwert (5.5-5) findet, wenn eine präparative Messung der Energie vor dem Einschalten der Störung den Messwert $E_0^0 = \hbar\omega/2$ ergeben hat.

Siehe auch Aufgabe 9.5.

5.6 Nach Anhang A.6, Gl. (A.6-15) gilt für die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie für $n \in \mathbb{N}$ ($|\, u_n^0 \,\rangle \equiv |\, n \,\rangle$)

$$W_{0\to n}^{[1]} \equiv W_{0\to n}^{[1]}(+\infty, -\infty) = \frac{A^2q^2}{\pi\hbar^2\tau_0^2}\left|\int_{\mathbb{R}} d\tau \, \exp\Big[in\omega\tau - \Big(\frac{\tau}{\tau_0}\Big)^2\Big]\langle\, n \,|\, X \,|\, 0 \,\rangle\right|^2 . \tag{5.6-1}$$

Wegen (A.5-3) und (A.5-9) gilt

$$\langle\, n \,|\, X \,|\, 0 \,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ \delta_{n1} \tag{5.6-2}$$

und es folgt für $n \in \mathbb{N}$

$$W_{0\to n}^{[1]} = \delta_{n1}\,\frac{A^2q^2}{2\pi m\hbar\omega\tau_0^2}\left|\int_{\mathbb{R}} d\tau \, \exp\Big[i\omega\tau - \Big(\frac{\tau}{\tau_0}\Big)^2\Big]\right|^2 . \tag{5.6-3}$$

Ergänzen des Exponenten im Integranden zu einem vollständigen Quadrat in der Integrationsvariablen,

$$i\omega\tau - \Big(\frac{\tau}{\tau_0}\Big)^2 = -\frac{1}{\tau_0^2}\Big(\tau - i\,\frac{\omega\tau_0^2}{2}\Big)^2 - \frac{(\omega\tau_0)^2}{4} \ ,$$

und Benützung der angegebenen Integrationsformel gibt

$$\int_{\mathbb{R}} d\tau \, \exp\Big[i\omega\tau - \Big(\frac{\tau}{\tau_0}\Big)^2\Big] = \sqrt{\pi}\,\tau_0 \, \exp\Big[-\frac{(\omega\tau_0)^2}{4}\Big] .$$

Somit folgt

$$W^{[1]}_{0\to 1} = \frac{A^2q^2}{2m\hbar\omega} \, \exp\Big[-\frac{(\omega\tau_0)^2}{2}\Big] ; \qquad W^{[1]}_{0\to n} = 0 , \quad n = 2,3,4,\ldots ; \tag{5.6-4a}$$

$$W^{[1]}_{0\to 0} = 1 - \frac{A^2q^2}{2m\hbar\omega} \, \exp\Big[-\frac{(\omega\tau_0)^2}{2}\Big] . \tag{5.6-4b}$$

Voraussetzung für die Brauchbarkeit dieser Näherung ist (siehe die Erläuterungen Anhang A.6, zweiter Absatz nach Gl. (A.6-17))

$$\frac{A^2q^2}{2m\hbar\omega} \, \exp\Big[-\frac{(\omega\tau_0)^2}{2}\Big] \ll 1 . \tag{5.6-5}$$

Diese Voraussetzung ist jedenfalls erfüllt, falls $A^2q^2/2m \ll \hbar\omega$ gilt.

5.7

(a) Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

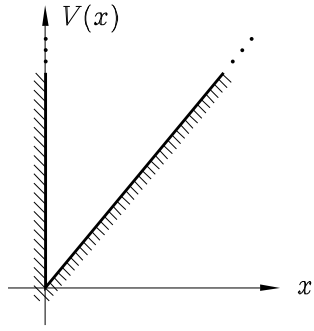


Abb. 5.7-1: Potential $V(x)$

$$\widetilde{E}(\alpha) := \frac{\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle}{\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle} , \tag{5.7-1a}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) \;\to\; \text{stationärer Wert} . \tag{5.7-1b}$$

Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\Big\{ \widetilde{u}(x;\alpha) = x\, e^{-\alpha x}, \;\; x \in \mathbb{R}_0^+, \;\; \alpha \in \mathbb{R}^+ \Big\} \tag{5.7-2}$$

folgt zunächst einmal

$$\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle = \int_0^{+\infty} dx\, x^2 e^{-2\alpha x} = \frac{1}{4\alpha^3} . \tag{5.7-3}$$

Ferner ergibt sich mit dem Potential von Abb. 5.7-1

$$\begin{aligned} \langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle &= \int_0^{+\infty} dx\, x\, e^{-\alpha x} \Big\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + fx \Big\} x\, e^{-\alpha x} \\ &= \frac{\hbar^2\alpha}{m} \int_0^{+\infty} dx\, x\, e^{-2\alpha x} - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \int_0^{+\infty} dx\, x^2 e^{-2\alpha x} + f \int_0^{+\infty} dx\, x^3 e^{-2\alpha x} , \end{aligned}$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \frac{\hbar^2}{8m\alpha}+\frac{3f}{8\alpha^4}\;; \qquad \widetilde{E}(\alpha) \;=\; \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}+\frac{3f}{2\alpha}\;; \tag{5.7-4}$$

$$\frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha}=0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0=\Big(\frac{3mf}{2\hbar^2}\Big)^{1/3}, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0)=\frac{9}{4}\Big(\frac{2f^2\hbar^2}{3m}\Big)^{1/3}. \tag{5.7-5}$$

(b) Die Versuchsfunktionen sind für $x=0$ null und besitzen wie die exakte Grundzustands-Eigenfunktion $u_0(x)$ keine weiteren Nullstellen. Da man von der exakten Lösung überdies exponentielles Verschwinden für $x\to+\infty$ erwartet, ist $\{\,\widetilde{u}(x\,;\alpha)\}$ als geeignete Versuchsfunktionenschar für die Gewinnung einer guten Näherung für die exakte Grundzustandsenergie E_0 anzusehen.

Bemerkungen

Das betrachtete Potential beschreibt mit $f=mg$ (g Gravitationskonstante) die potentielle Energie eines Teilchens der Masse m, welches sich in einem homogenen Gravitationsfeld „bewegt“ und bei $x=0$ von einer ideal reflektierenden Ebene „zurückgeworfen“ wird („tanzender Ball“). Die exakte Behandlung des Problems (s. [16]) gibt für die Grundzustandsenergie

$$E_0=2{,}338\,\Big(\frac{f^2\hbar^2}{2m}\Big)^{1/3}. \tag{5.7-6}$$

Das Variationsverfahren hat somit tatsächlich einen guten Näherungswert für die Grundzustandsenergie ergeben: $\widetilde{E}(\alpha_0)=1{,}059\,E_0$. Die exakte Grundzustands-Eigenfunktion $u_0(x)$ ist eine Airyfunktion, welche sich asymptotisch wie

$$u_0(x\to+\infty)\;\propto\;\Big[\frac{x-x_0}{a}\Big]^{-1/4}\exp\Big\{-\frac{2}{3}\Big[\frac{x-x_0}{a}\Big]^{3/2}\Big\}, \tag{5.7-7a}$$

$$x_0=2{,}338\,a\,, \qquad a:=\Big(\frac{\hbar^2}{2mf}\Big)^{1/3} \tag{5.7-7b}$$

verhält.

5.8

(a) Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha)=\frac{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}\;\to\;\text{stationärer Wert}\,. \tag{5.8-1}$$

Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\Big\{\,\widetilde{u}(x\,;\alpha)=\frac{1}{\alpha^2+x^2}\,,\;\; x\in\mathbb{R}\,,\;\; \alpha\in\mathbb{R}^+\Big\} \tag{5.8-2}$$

folgt

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\int\limits_{\mathbb{R}}\frac{dx}{(\alpha^2+x^2)^2}\;=\;\frac{\pi}{2\alpha^3}\;, \tag{5.8-3}$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\int\limits_{\mathbb{R}}dx\;\frac{1}{\alpha^2+x^2}\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}\,x^2\Big\}\,\frac{1}{\alpha^2+x^2}\;,$$

$$\langle\, \widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \frac{\hbar^2}{m}\int\limits_{\mathbb{R}} \frac{dx}{(\alpha^2+x^2)^3} \;-\; \frac{4\hbar^2}{m}\int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\frac{x^2}{(\alpha^2+x^2)^4} \;+\; \frac{m\omega^2}{2}\int\limits_{\mathbb{R}} dx\,\frac{x^2}{(\alpha^2+x^2)^2}\;,$$

$$\langle\, \widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \frac{\hbar^2\pi}{8m\alpha^5} + \frac{m\omega^2\pi}{4\alpha}\;; \qquad \widetilde{E}(\alpha) \;=\; \frac{\hbar^2}{4m\alpha^2} + \frac{m\omega^2\alpha^2}{2}\;; \tag{5.8-4}$$

$$\frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0 = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}\,m\omega}\right)^{1/2}, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{\sqrt{2}}{2}\,\hbar\omega\,. \tag{5.8-5}$$

(b) Da die Versuchsfunktionen (5.8-2) wie die exakte Grundzustands-Eigenfunktion gerade Funktionen ohne Nullstellen sind, war eine obere Schranke $\widetilde{E}(\alpha_0)$ für die Grundzustandsenergie E_0 zu erwarten, welche näher bei $E_0 = \hbar\omega/2$ als bei irgendeinem der Anregungsniveaus $E_1 = 3\hbar\omega/2,\ E_2 = 5\hbar\omega/2, \ldots$ liegt.

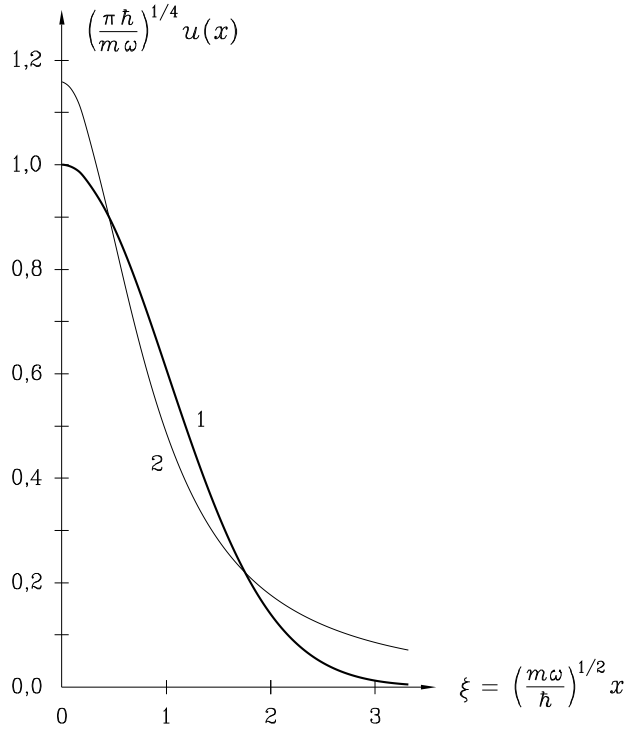


Abb. 5.8-1: Auf eins normierte, mit

$$\left(\tfrac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/4}$$

multiplizierte Funktionen:

$$1 \ldots e^{-\xi^2/2}$$

(exakte Eigenfunktion zu E_0);

$$2 \ldots \left(\tfrac{\sqrt{2}}{\pi}\right)^{1/4}\left[\tfrac{1}{\sqrt{2}} + \xi^2\right]^{-1}$$

(s. Gl. (5.8-2), (5.8-3) und (5.8-5))

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Die Abbildung 5.8-1 zeigt den Verlauf der mit $(\pi\hbar/m\omega)^{1/4}$ multiplizierten normierten Funktionen $\widetilde{u}(x;\alpha_0)$, $u_0(x)$ (exakte Lösung). Wie man aus der Abbildung sieht, weicht die aus dem Variationsverfahren erhaltene Näherungsfunktion für große x-Werte beträchtlich von der exakten Eigenfunktion für den Grundzustand ab. Da bei der Berechnung des Erwartungswertes des Oszillatorpotentials wegen dessen x^2-Verhaltens die Funktionswerte aus diesem Bereich entscheidend eingehen, ergab sich trotz den unter (b) angeführten Eigenschaften der Versuchs-

funktionen eine ziemlich schlechte Näherung für die Grundzustandsenergie: $\widetilde{E}(\alpha_0) = 1{,}414\,E_0$.

5.9*

(a) Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle} \;\rightarrow\; \text{stationärer Wert}\,. \tag{5.9-1}$$

Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{\widetilde{u}(x\,;\alpha) = 1 - \frac{x^2}{a^2} + \alpha\left(1 - \frac{x^4}{a^4}\right),\;\; |x| \le a\,,\;\; \alpha \in \mathbb{R}\right\} \tag{5.9-2}$$

erhält man durch Ausführen der elementaren Integrationen

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = \int_{-a}^{+a} dx\left[1 - \frac{x^2}{a^2} + \alpha\left(1 - \frac{x^4}{a^4}\right)\right]^2 = 2a\left(\frac{32}{5\cdot 9}\,\alpha^2 + \frac{64}{3\cdot 5\cdot 7}\,2\alpha + \frac{8}{3\cdot 5}\right), \tag{5.9-3}$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = \int_{-a}^{+a} dx\;\widetilde{u}^*(x\,;\alpha)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\widetilde{u}(x\,;\alpha)}{dx^2}\right\} = \frac{\hbar^2}{ma}\left(\frac{16}{7}\,\alpha^2 + \frac{16}{5}\,\alpha + \frac{4}{3}\right); \tag{5.9-4}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{f(\alpha)}{g(\alpha)} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} f(\alpha) &:= \frac{4}{7}\,\alpha^2 + \frac{4}{5}\,\alpha + \frac{1}{3}\,, \\ g(\alpha) &:= \frac{8}{5\cdot 9}\,\alpha^2 + \frac{32}{3\cdot 5\cdot 7}\,\alpha + \frac{2}{3\cdot 5}\,; \end{aligned} \tag{5.9-5}$$

$$\frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad f(\alpha)\,g'(\alpha) = f'(\alpha)\,g(\alpha)\,. \tag{5.9-6}$$

Die Bestimmungsgleichung (5.9-6) für die α-Werte, für die $\widetilde{E}(\alpha)$ stationär ist, nimmt nach einer einfachen Zwischenrechnung die Form

$$33\alpha^2 + 35\alpha + \frac{21}{4} = 0 \tag{5.9-7}$$

an. Man erhält daraus

$$\alpha_{1,2} = \frac{-35 \pm 2\sqrt{133}}{66} = \begin{cases} -\,0{,}180831 \\ -\,0{,}879775 \end{cases}. \tag{5.9-8}$$

Wegen (5.9-6) gilt für diese speziellen α-Werte

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{f(\alpha)}{g(\alpha)} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{f'(\alpha)}{g'(\alpha)} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{2}{7}\,\alpha + \frac{1}{5}\right)\left(\frac{4}{5\cdot 9}\,\alpha + \frac{8}{3\cdot 5\cdot 7}\right)^{-1}. \tag{5.9-9}$$

Setzt man hier (5.9-8) ein, so erhält man nach Zusammenfassen

$$\widetilde{E}(\alpha_{1,2}) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{9\,(28 \pm 5\sqrt{133}\,)}{151 \pm 14\sqrt{133}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,(14 \mp \sqrt{133}\,)\,; \tag{5.9-10}$$

$$\widetilde{E}(\alpha_1) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,2{,}467437\,, \quad \widetilde{E}(\alpha_2) = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,25{,}53256\,. \tag{5.9-11}$$

(b) Die Versuchsfunktionen (5.9-2) sind gerade Funktionen und erfüllen die Randbedingungen $u(\pm a) = 0$. Sie besitzen im Intervall $(-a, +a)$ keine Nullstelle, falls $\alpha \geq -\frac{1}{2}$ oder $\alpha < -1$ ist, und zwei Nullstellen, falls $-1 < \alpha < -\frac{1}{2}$ gilt. Für $\alpha = -1$ besitzt die entsprechende Versuchsfunktion eine doppelte Nullstelle bei $x = 0$. Es war deshalb von vornherein zu erwarten, dass das Variationsverfahren auf einen Wert $\alpha_1 \geq -\frac{1}{2}$ oder $\alpha_1 < -1$ und einen Wert $\alpha_2 \in (-1, -\frac{1}{2})$ führt (s. Gl. (5.9-8)). Die zugehörigen Energien stellen dementsprechend Näherungswerte für die Eigenwerte E_0 und E_2 dar. Nach Gl. (2.10-1) gilt

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{\pi^2}{4} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,2{,}467401\,, \qquad E_2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{9\pi^2}{4} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,22{,}20661\,. \tag{5.9-12}$$

Da das Variationsverfahren stets eine obere Schranke für den Eigenwert E_0 liefert, musste sich $\widetilde{E}(\alpha_1) > E_0$ ergeben. Das Bestehen der Beziehung $\widetilde{E}(\alpha_2) > E_2$ ist eine Folge der näherungsweisen Orthogonalität von $\widetilde{u}(x\,;\alpha_2)$ zu $u_0(x)$ (s. weiter unten) und der exakten Orthogonalität zu $u_1(x)$.

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Wie man aus Gl. (5.9-11), (5.9-12) sieht, weicht $\widetilde{E}(\alpha_1)$ von E_0 nur um ungefähr ein tausendstel Prozent ab. Das auf eins normierte Polynom vierten Grades $\widetilde{u}(x\,;\alpha_1)$ approximiert die auf eins normierte Grundzustands-Eigenfunktion $u_0(x)$ sehr gut. (Quantitative Aussagen s. weiter unten.) Eine gröbere Näherung erhält man, wenn man ein Polynom zweiten Grades ansetzt. Nach Erfüllung der Randbedingungen $u(\pm a) = 0$ und Normierung enthält ein solches Polynom keinen freien Parameter mehr, und man kann daher keine Variation mehr durchführen. Der zugehörige Erwartungswert der Energie ergibt jedoch – wie in Aufgabe 3.11 gezeigt wurde – schon eine recht gute Näherung für E_0, und zwar (s. Gl. (3.11-8))

$$\langle\, H \,\rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{5}{2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\,2{,}5\,. \tag{5.9-13}$$

Mit den auf eins normierten Vektoren $|\,\widetilde{u}(\alpha_1)\,\rangle$, $|\,\widetilde{u}(\alpha_2)\,\rangle$, $|\,u_0\,\rangle$ ergibt sich nach elementarer Rechnung

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha_1)\,|\,\widetilde{u}(\alpha_2)\,\rangle = N(\alpha_1)\,N(\alpha_2)\Big[\frac{32}{5{\cdot}9}\,\alpha_1\alpha_2 + \frac{64}{3{\cdot}5{\cdot}7}\,(\alpha_1+\alpha_2) + \frac{8}{3{\cdot}5}\Big]\,, \tag{5.9-14a}$$

$$\langle\, u_0\,|\,\widetilde{u}(\alpha_k)\,\rangle = N(\alpha_k)\,\frac{16\sqrt{2}}{\pi^3}\Big[1 + 6\Big(1 - \frac{8}{\pi^2}\Big)\alpha_k\Big]\,, \tag{5.9-14b}$$

$$N(\alpha_k) := \Big[\frac{32}{5{\cdot}9}\,\alpha_k^2 + \frac{64}{3{\cdot}5{\cdot}7}\,2\alpha_k + \frac{8}{3{\cdot}5}\Big]^{-1/2}, \quad k = 1, 2\,. \tag{5.9-14c}$$

Mit (5.9-8) liefert dies

$$\langle\, \widetilde{u}(\alpha_1) \,|\, \widetilde{u}(\alpha_2) \,\rangle = 0 \quad \text{(exakt)}, \tag{5.9-15a}$$

$$\langle\, u_0 \,|\, \widetilde{u}(\alpha_1) \,\rangle = 0{,}9999997 =: c_0\,, \tag{5.9-15b}$$

$$\langle\, u_0 \,|\, \widetilde{u}(\alpha_2) \,\rangle = 0{,}0004332\,. \tag{5.9-15c}$$

Die exakte Orthogonalität der Funktion $\widetilde{u}(\alpha_2)$ zur Funktion $\widetilde{u}(\alpha_1)$ bedingt zusammen mit $\widetilde{u}(\alpha_1) \approx u_0$ die näherungsweise Orthogonalität von $\widetilde{u}(\alpha_2)$ zu u_0. Das quantitative Maß für die Güte der Näherung $u_0 \approx \widetilde{u}(\alpha_1)$ im Sinne der Hilbertraum-Metrik ist

$$\|u_0 - \widetilde{u}(\alpha_1)\| = \Big[\int_{-a}^{+a} dx\, |u_0(x) - \widetilde{u}(x;\alpha_1)|^2\Big]^{1/2} = \sqrt{2 - 2c_0} = 0{,}0008\,.$$

Der Leser zeichne die Graphen der normierten Funktionen u_0, $\widetilde{u}(\alpha_1)$.

5.10

(a) Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle}{\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle} \;\to\; \text{stationärer Wert}\,. \tag{5.10-1}$$

Ich verwende für die Rechnung Einheiten, in denen $\hbar = m = \omega = 1$ gesetzt ist, um die Ausdrücke zu vereinfachen. Im Endergebnis kehre ich dann wieder zu den konventionellen Einheiten zurück. Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\Big\{\, \widetilde{u}(x;\alpha) = e^{-\alpha x^2}, \quad x \in \mathbb{R}\,, \quad \alpha \in \mathbb{R}^+ \Big\} \tag{5.10-2}$$

und dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2}\,(P^2 + X^2) + \frac{1}{10}\,X^4 \tag{5.10-3}$$

ergibt sich dann

$$\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-2\alpha x^2} = 2\int_0^{+\infty} dx\, e^{-2\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;, \tag{5.10-4}$$

$$\begin{aligned} \langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\alpha x^2}\Big[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{10}\Big] e^{-\alpha x^2} \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx \Big[\alpha - \Big(2\alpha^2 - \frac{1}{2}\Big)x^2 + \frac{x^4}{10}\Big] e^{-2\alpha x^2} = \Big[\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{8\alpha} + \frac{3}{160\alpha^2}\Big]\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;; \end{aligned} \tag{5.10-5}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{8\alpha} + \frac{3}{160\alpha^2}\;; \qquad \frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha^3 - \frac{\alpha}{4} - \frac{3}{40} = 0\,. \tag{5.10-6}$$

Ich verwende nun die in der Anleitung angeführten Formeln. Mit

$$p = -\frac{1}{12}\,, \quad q = -\frac{3}{80} \qquad \Rightarrow \qquad p^3 + q^2 > 0$$

ergibt sich nach elementarer Rechnung für die einzige reelle Wurzel von (5.10-6)

$$\alpha_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}}\Big(\frac{10}{\sqrt{243}+\sqrt{143}}\Big)^{-1/3}\Big[1+\Big(\frac{10}{\sqrt{243}+\sqrt{143}}\Big)^{2/3}\Big] = 0{,}610598\,,$$

$$\widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{\alpha_0}{2} + \frac{1}{8\alpha_0} + \frac{3}{160\alpha_0^2} = 0{,}560307\,.$$

In konventionellen Einheiten:

$$\alpha_0 = 0{,}610598\,\frac{m\omega}{\hbar}\,, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0) = 0{,}560307\,\hbar\omega\,. \tag{5.10-7}$$

(b) Da die Versuchsfunktionen (5.10-2) wie die (unbekannte) exakte Eigenfunktion für den Grundzustand, $u_0(x)$, im Unendlichen exponentiell abfallende gerade Funktionen ohne Knoten sind, war eine obere Schranke $\widetilde{E}(\alpha_0)$ für die Grundzustandsenergie

$$E_0 = 0{,}559146\,\hbar\omega \tag{5.10-8}$$

zu erwarten, welche näher bei E_0 als beim ersten Anregungsniveau liegt. Der gefundene Näherungswert $\widetilde{E}(\alpha_0)$ weicht von E_0 nur um 0,2 % ab.

Ohne x^4-Term im wellenmechanischen Potential gilt

$$u_0(x) \propto \exp\Big[-\frac{1}{2}\,\frac{m\omega}{\hbar}\,x^2\Big]\,,$$

mit x^4-Term muss die Eigenfunktion u_0 für $x \to \pm\infty$ rascher abfallen. Mit dem Ansatz (5.10-2) war deshalb für α_0 von vornherein ein Wert $\alpha_0 > 0{,}5\,m\omega/\hbar$ zu erwarten.

Bemerkungen

Man würde vielleicht erwarten, dass man mit der Versuchsfunktionenschar $\{e^{-\alpha|x|^3}\}$ oder $\{e^{-\alpha x^4}\}$ einen besseren Näherungswert für E_0 erhalten kann. Dies trifft nicht zu: $\widetilde{E}(\alpha_0)$ weicht von E_0 dann um 5,2 % bzw. um 15,8 % ab.

Interessant ist auch noch der Vergleich mit dem Ergebnis der störungstheoretischen Rechnung von Aufgabe 5.3. Aus Gl. (5.3-4) erhält man für $\mu = 1/10$

$$E_0^{[1]} = \Big(\frac{1}{2} + \frac{3}{40}\Big)\hbar\omega = 0{,}575\,\hbar\omega\,,$$

was um 2,8 % von E_0 abweicht. Es sei aber nochmals daran erinnert, dass die Störungsreihe divergiert und lediglich als asymptotische Entwicklung für kleine μ ($\mu > 0$) einen Sinn hat.

5.11 Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle} \;\to\; \text{stationärer Wert}\,; \tag{5.11-1}$$

Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,\vec{R}^2\,. \tag{5.11-2}$$

Im Rahmen der vorliegenden Aufgabe sehen wir die exakte Lösung des Eigenwertproblems von H (s. Anhang A.4, Gl. (A.4-24) bis (A.4-29)) als unbekannt an.

Wir verwenden für die Rechnung Einheiten, in denen $\hbar = m = \omega = 1$ gesetzt ist, um die Ausdrücke zu vereinfachen. Im Endergebnis kehren wir dann wieder zu den konventionellen Einheiten zurück.

(a) Wenn wir uns auch auf den Standpunkt stellen, dass wir die exakte Eigenfunktion u_0 für den Grundzustand nicht kennen, ist doch klar, dass das Variationsverfahren mit den gegebenen Versuchsfunktionenscharen eine *obere Schranke für die niedrigste Anregungsenergie* E_1 liefern muss, da u_0 jedenfalls eine „s-Funktion“ sein muss ($u_0 \equiv u_{000}$), und aufgrund der Orthogonalität der Winkelteile daher sicher

$$\langle\, u_0 \,|\, \tilde{u}(\alpha) \,\rangle = 0\,, \quad \forall\alpha \in \mathbb{R}^+ \quad \Rightarrow \quad \tilde{E}(\alpha) \geq E_1\,, \quad \forall\alpha \in \mathbb{R}^+ \tag{5.11-3}$$

gilt. Wir können aber noch mehr sagen: Aus der asymptotischen Form der zeitunabhängigen Schrödingergleichung sieht man, dass die exakten Energieeigenfunktionen für $r \to +\infty$ proportional zu $\exp(-r^2/2)$ abfallen. Außerdem wissen wir, dass eine „p-Funktion“ ($l = 1$) für $r \to 0+$ proportional zu r gegen null strebt. Berücksichtigt man noch, dass die angesetzte Radialfunktion in allen vier Fällen für $0 < r < +\infty$ keine Nullstellen („Knoten“) besitzt, so ergeben sich die folgenden Erwartungen: Für den Ansatz 4 kann man eine obere Schranke für E_1 erwarten, welche E_1 sehr gut approximiert. Auch für die Ansätze 2 und 3 kann man obere Schranken für E_1 erwarten, welche näher bei E_1 liegen als bei E_2, doch wird E_1 nicht besonders gut angenähert werden. Für den Ansatz 1 dagegen, bei welchem die Radialfunktion weder das richtige Verhalten am Ursprung besitzt, noch im Unendlichen rasch genug abfällt, kann man nicht einmal erwarten, dass das Minimum von $\tilde{E}(\alpha)$ näher bei E_1 als bei E_2 liegt.

(b) Für eine Versuchsfunktionenschar der Form

$$\{\, \tilde{u}(\vec{r};\alpha) = \tilde{R}(r;\alpha)\, Y_{10}(\Omega),\ \ \vec{r} \in \mathbb{R}^3,\ \ \alpha \in \mathbb{R}^+\} \tag{5.11-4}$$

folgt mit dem Hamiltonoperator (Gl. (5.11-2) mit $m = \omega = 1$)

$$H = \frac{1}{2}\,\vec{P}^2 + \frac{1}{2}\,\vec{R}^2 \tag{5.11-5}$$

zunächst die Beziehung ($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} H^{\{\vec{r}\}}\,\tilde{u}(\vec{r};\alpha) &= \left\{-\frac{1}{2}\,\Delta + \frac{1}{2}\,r^2\right\}\tilde{R}(r;\alpha)\, Y_{10}(\Omega) \\ &= Y_{10}(\Omega)\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right] + \frac{1}{2}\,r^2\right\}\tilde{R}(r;\alpha)\,, \end{aligned} \tag{5.11-6}$$

und wegen $\int_{[4\pi]} d\Omega\, |Y_{10}(\Omega)|^2 = 1$ ergibt sich weiter

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |\tilde{u}(\vec{r};\alpha)|^2 \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^2 \Big[\tilde{R}(r;\alpha)\Big]^2, \tag{5.11-7}$$

$$\begin{aligned}\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;&=\; \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; \tilde{u}^*(\vec{r};\alpha)\Big(H^{\{\vec{r}\}}\,\tilde{u}(\vec{r};\alpha)\Big) \\ &=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^2\, \tilde{R}(r;\alpha)\Big\{-\frac{1}{2}\Big[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\Big] + \frac{1}{2}\,r^2\Big\}\tilde{R}(r;\alpha)\,.\end{aligned} \tag{5.11-8}$$

Fall 1: $\tilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r}$

$$\Big\{-\frac{1}{2}\Big[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\Big] + \frac{1}{2}\,r^2\Big\}\tilde{R}(r;\alpha) = \Big[\frac{1}{r^2} + \frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{r^2}{2}\Big]e^{-\alpha r}\,;$$

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^2 e^{-2\alpha r} \;=\; \frac{1}{4\alpha^3}\;, \tag{5.11-9}$$

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\Big[1 + \alpha r - \frac{\alpha^2 r^2}{2} + \frac{r^4}{2}\Big]e^{-2\alpha r} \;=\; \frac{5}{8\alpha} + \frac{3}{8\alpha^5}\;; \tag{5.11-10}$$

$$\tilde{E}(\alpha) = \frac{5\alpha^2}{2} + \frac{3}{2\alpha^2}\;; \qquad \frac{d\tilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0 = \Big(\frac{3}{5}\Big)^{1/4}, \quad \tilde{E}(\alpha_0) = \sqrt{15}\,. \tag{5.11-11}$$

In konventionellen Einheiten:

$$\alpha_0 = \Big(\frac{3}{5}\Big)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;, \qquad \tilde{E}(\alpha_0) = \sqrt{15}\,\hbar\omega = 3{,}8730\,\hbar\omega\,. \tag{5.11-12}$$

Fall 2: $\tilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r^2}$

$$\Big\{-\frac{1}{2}\Big[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\Big] + \frac{1}{2}\,r^2\Big\}\tilde{R}(r;\alpha) = \Big[\frac{1}{r^2} + 3\alpha + \Big(\frac{1}{2} - 2\alpha^2\Big)r^2\Big]e^{-\alpha r^2}\,;$$

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^2 e^{-2\alpha r^2} \;=\; \frac{1}{8\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;, \tag{5.11-13}$$

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\Big[1 + 3\alpha r^2 + \Big(\frac{1}{2} - 2\alpha^2\Big)r^4\Big]e^{-2\alpha r^2} \;=\; \Big[\frac{11}{16} + \frac{3}{64\alpha^2}\Big]\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;; \tag{5.11-14}$$

$$\tilde{E}(\alpha) = \frac{11\alpha}{2} + \frac{3}{8\alpha}\;; \qquad \frac{d\tilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0 = \frac{\sqrt{33}}{22}\;, \quad \tilde{E}(\alpha_0) = \frac{\sqrt{33}}{2}\;. \tag{5.11-15}$$

In konventionellen Einheiten:

$$\alpha_0 = \frac{\sqrt{33}}{22}\,\frac{m\omega}{\hbar}\;, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{\sqrt{33}}{2}\,\hbar\omega = 2{,}8723\,\hbar\omega\;. \tag{5.11-16}$$

Fall 3: $\widetilde{R}(r;\alpha) = r\,e^{-\alpha r}$

$$\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right] + \frac{1}{2}\,r^2\right\}\widetilde{R}(r;\alpha) = \left[2\alpha - \frac{\alpha^2 r}{2} + \frac{r^3}{2}\right]e^{-\alpha r}\;;$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\,r^4 e^{-2\alpha r} = \frac{3}{4\alpha^5}\;, \tag{5.11-17}$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\left[2\alpha r^3 - \frac{\alpha^2 r^4}{2} + \frac{r^6}{2}\right]e^{-2\alpha r} = \frac{3}{8\alpha^3} + \frac{45}{16\alpha^7}\;; \tag{5.11-18}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\alpha^2}{2} + \frac{15}{4\alpha^2}\;; \qquad \frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0 = \left(\frac{15}{2}\right)^{1/4}, \quad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{\sqrt{30}}{2}\;. \tag{5.11-19}$$

In konventionellen Einheiten:

$$\alpha_0 = \left(\frac{15}{2}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{\sqrt{30}}{2}\,\hbar\omega = 2{,}7386\,\hbar\omega\;. \tag{5.11-20}$$

Fall 4: $\widetilde{R}(r;\alpha) = r\,e^{-\alpha r^2}$

$$\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right] + \frac{1}{2}\,r^2\right\}\widetilde{R}(r;\alpha) = \left[5\alpha r + \left(\frac{1}{2} - 2\alpha^2\right)r^3\right]e^{-\alpha r^2}\;;$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\,r^4 e^{-2\alpha r^2} = \frac{3}{32\alpha^2}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;, \tag{5.11-21}$$

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle \;=\; \int\limits_0^{+\infty} dr\left[5\alpha r^4 + \left(\frac{1}{2} - 2\alpha^2\right)r^6\right]e^{-2\alpha r^2} = \left[\frac{15}{64\alpha} + \frac{15}{256\alpha^3}\right]\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\;; \tag{5.11-22}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{5\alpha}{2} + \frac{5}{8\alpha}\;; \qquad \frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad\Rightarrow\quad \alpha_0 = \frac{1}{2}\;, \quad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{5}{2}\;. \tag{5.11-23}$$

In konventionellen Einheiten:

$$\alpha_0 = \frac{1}{2}\,\frac{m\omega}{\hbar}\;, \qquad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{5}{2}\,\hbar\omega = 2{,}5\,\hbar\omega\;. \tag{5.11-24}$$

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Das Ergebnis der Rechnung entspricht den unter Punkt (a) ausgesprochenen Erwartungen.

Nach Anhang A.4, Gl. (A.4-24) bis (A.4-27c) gilt für den exakten Eigenwert E_1 und die zugehörigen exakten Eigenfunktionen u_{11m_l}, wenn man $\hbar = m = \omega = 1$ setzt,

$$E_1 = \frac{5}{2}\,; \quad u_{11m_l}(\vec{r}) = \Big(\frac{64}{9\pi}\Big)^{1/4} r\, e^{-r^2/2}\, Y_{1m_l}(\Omega)\,, \quad m_l = 0, \pm 1. \tag{5.11-25}$$

Der Ansatz 4 hat also die *exakte Lösung* für das erste Anregungsniveau ergeben, in den Fällen 2 und 3 liegen die Schranken für E_1 um 14,9 % bzw. 9,5 % über E_1, und im Fall 1 gilt sogar (s. Gl. (A.4-24)) $\widetilde{E}(\alpha_0) > E_2 = 3{,}5$.

Die Abbildung 5.11-1 zeigt die mit r multiplizierten, auf eins normierten Radialfunktionen, also die Funktionen

$$\text{Fall 1:} \quad r\widetilde{R}(r;\alpha_0) = 2\alpha_0^{3/2} r\, e^{-\alpha_0 r} \qquad (\alpha_0 \text{ s. Gl. (5.11-11)}); \tag{5.11-26a}$$

$$\text{Fall 2:} \quad r\widetilde{R}(r;\alpha_0) = \Big(\frac{128\alpha_0^3}{\pi}\Big)^{1/4} r\, e^{-\alpha_0 r^2} \qquad (\alpha_0 \text{ s. Gl. (5.11-15)}); \tag{5.11-26b}$$

$$\text{Fall 3:} \quad r\widetilde{R}(r;\alpha_0) = 2\Big(\frac{\alpha_0^5}{3}\Big)^{1/2} r^2 e^{-\alpha_0 r} \qquad (\alpha_0 \text{ s. Gl. (5.11-19)}); \tag{5.11-26c}$$

$$\text{Fall 4:} \quad r\widetilde{R}(r;\alpha_0) = r\,R_{11}(r) = \Big(\frac{64}{9\pi}\Big)^{1/4} r^2 e^{-r^2/2} \qquad \begin{array}{l}(\text{exakte Lösung}\\ \text{für } n = l = 1).\end{array} \tag{5.11-26d}$$

Die Funktion 1 stimmt mit der zur exakten Lösung gehörigen Funktion 4 bedeutend schlechter überein als die Funktionen 2 und 3, sie hat auch eine wesentlich höhere Schranke für den Eigenwert E_1 ergeben. Von den Funktionen 2 und 3 hat man den Eindruck, dass sie die exakte Lösung „alles in allem“ gleich gut approximieren. Das quantitative Maß für die Güte der Näherung $u_{110} \approx \widetilde{u}(\alpha_0)$ im Sinne der Hilbertraum-Metrik ist

$$\begin{aligned} \delta &:= \|u_{110} - \widetilde{u}(\alpha_0)\| = \Big[\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |u_{110}(\vec{r}) - \widetilde{u}(\vec{r};\alpha_0)|^2\Big]^{1/2} \\ &= \Big[2 - 2\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, u_{110}(\vec{r})\, \widetilde{u}(\vec{r};\alpha_0)\Big]^{1/2} = \Big[2 - 2\int\limits_0^{+\infty} dr\, r^2\, R_{11}(r)\, \widetilde{R}(r;\alpha_0)\Big]^{1/2}. \end{aligned} \tag{5.11-27}$$

Berechnet man die Größe δ für die Fälle 1 bis 4, so findet man

$$\delta_1 = 0{,}41377\,, \quad \delta_2 = 0{,}21436\,, \quad \delta_3 = 0{,}22085\,, \quad \delta_4 = 0\,. \tag{5.11-28}$$

(Für eine zu u_{110} orthogonale auf eins normierte Funktion ergäbe sich $\delta = \sqrt{2}$.) Die Funktion 2 approximiert also die exakte Lösung im Sinne der Norm geringfügig besser als die Funktion 3 dies tut. Dennoch liefert sie – wie wir gesehen haben – einen merklich schlechteren Näherungswert für den Eigenwert E_1 als die Funktion 3.

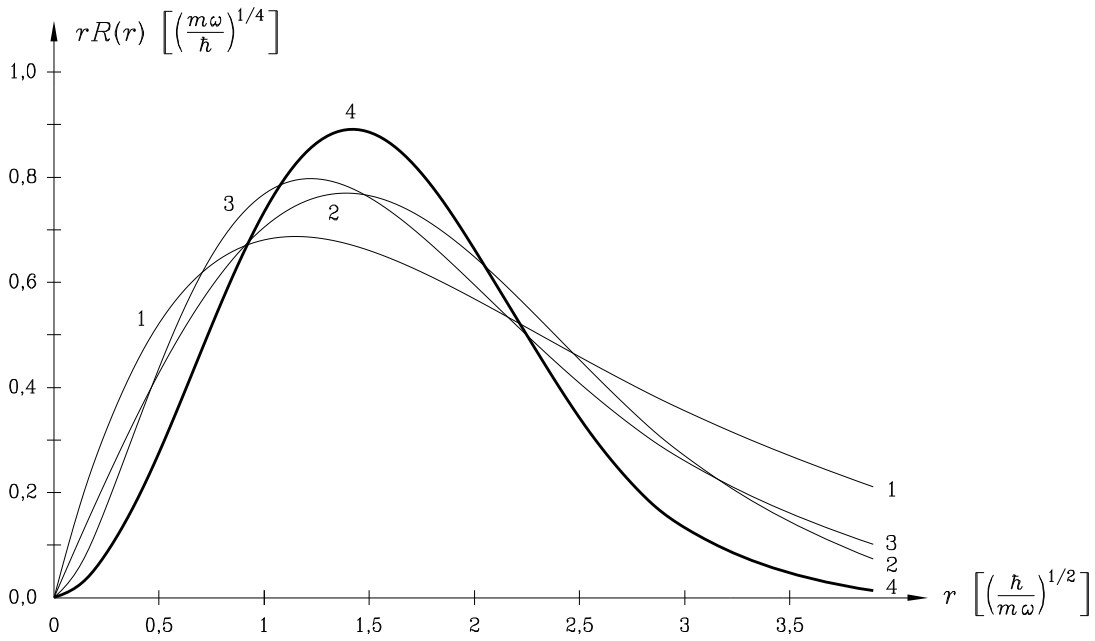


Abb. 5.11-1: Mit r multiplizierte auf eins normierte Radialfunktionen für die Fälle 1, 2, 3, 4 (siehe Gl. (5.11-26)). Die Kurve 4 stellt zugleich die exakte Lösung dar.

Bei der Anwendung des Variationsverfahrens „im wirklichen Leben“ besteht die Kunst nicht primär darin, die Rechnung für gegebene Versuchsfunktionenscharen durchzuführen, sondern darin, *Ansätze* zu finden, welche geeignet sind, den gesuchten Eigenwert möglichst gut zu approximieren. Wie die obige Aufgabe illustriert, kann man unter Umständen durch Ausnützen von Symmetrien auch bei *unbekannter Grundzustands-Eigenfunktion* Versuchsfunktionenscharen angeben, welche *exakte obere Schranken für die niedrigste Anregungsenergie* E_1 liefern. Um den unbekannten Eigenwert E_1 möglichst gut zu approximieren, muss man allerdings noch weitere Überlegungen anstellen (z. B. hinsichtlich des Verhaltens der Versuchsfunktionen am Ursprung und im Unendlichen, der Anzahl der radialen Nullstellen etc.). *Vor* Durchführung der Rechnung ist es i. Allg. nicht vorhersagbar, welcher von zwei Ansätzen die niedrigere Schranke liefern wird. (So war es im gegebenen Beispiel nicht von vornherein klar, dass der Ansatz 3 eine deutlich niedrigere Schranke ergeben würde als der Ansatz 2.) *Nach* Durchführung der Rechnung weiß man von der niedrigeren Schranke nur, dass sie E_1 besser, nicht aber *wie gut* sie E_1 approximiert, da es im Rahmen des Variationsverfahrens kein Mittel zur Fehlerabschätzung gibt. Wo dies möglich ist, wird man deshalb bestrebt sein, zum Variationsverfahren komplementäre Näherungsmethoden anzuwenden, welche die Berechnung *unterer Schranken* von Eigenwerten gestatten.[5]

[5] Siehe dazu Weinstein, A., und W. Stenger: Methods of Intermediate Problems for Eigenvalues. Academic Press, New York 1972.

5.12*

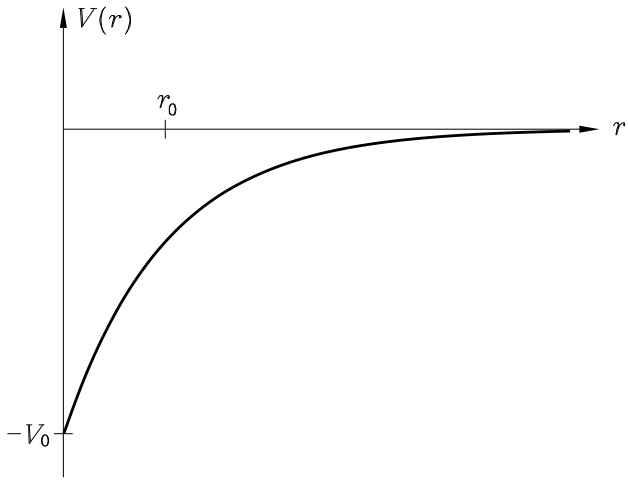


Abb. 5.12-1: Exponentialpotential

In den Bemerkungen zu Aufgabe 2.13 wurden die qualitativen Bedingungen besprochen, welche erfüllt sein müssen, damit ein Potential in drei Raumdimensionen gebundene Zustände besitzt. Danach ist zu erwarten, dass das Exponentialpotential von Abb. 5.12-1 mindestens einen gebundenen Zustand besitzt, wofern der Parameter

$$\xi := \frac{m V_0 r_0^2}{\hbar^2} \tag{5.12-1}$$

einen bestimmten Wert $\xi_{\min}$ der Größenordnung 1 überschreitet.

(a) Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{ \tilde{u}(\vec{r};\alpha) := \exp\left[-\frac{\alpha}{2}\frac{r}{r_0}\right],\ \ \alpha \in \mathbb{R}^+ \right\} \tag{5.12-2}$$

folgt

$$\langle\, \tilde{u}(\alpha) \,|\, \tilde{u}(\alpha) \,\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |\tilde{u}(\vec{r};\alpha)|^2 = 4\pi \int_0^{+\infty} dr\, r^2 \exp\left[-\alpha\frac{r}{r_0}\right] = 4\pi\frac{2r_0^3}{\alpha^3}\ , \tag{5.12-3}$$

$$\begin{aligned}
\langle\, \tilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \tilde{u}(\alpha) \,\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\ \tilde{u}^*(\vec{r};\alpha)\left(H^{\{\vec{r}\}}\,\tilde{u}(\vec{r};\alpha)\right) \\
&= 4\pi \int_0^{+\infty} dr\, r^2 \exp\left[-\frac{\alpha}{2}\frac{r}{r_0}\right]\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right] - V_0 \exp\left[-\frac{r}{r_0}\right]\right\}\exp\left[-\frac{\alpha}{2}\frac{r}{r_0}\right] \\
&= 4\pi \int_0^{+\infty} dr \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\alpha^2}{4r_0^2}\,r^2 - \frac{\alpha}{r_0}\,r\right] - V_0 r^2 \exp\left[-\frac{r}{r_0}\right]\right\}\exp\left[-\alpha\frac{r}{r_0}\right] \\
&= 4\pi\left[\frac{\hbar^2 r_0}{4m\alpha} - \frac{2V_0 r_0^3}{(\alpha+1)^3}\right].
\end{aligned} \tag{5.12-4}$$

Damit ergibt sich für den Erwartungswert der Energie

$$\tilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\, \tilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \tilde{u}(\alpha) \,\rangle}{\langle\, \tilde{u}(\alpha) \,|\, \tilde{u}(\alpha) \,\rangle} = V_0\left[\frac{\hbar^2}{8mV_0 r_0^2}\,\alpha^2 - \frac{\alpha^3}{(\alpha+1)^3}\right]. \tag{5.12-5}$$

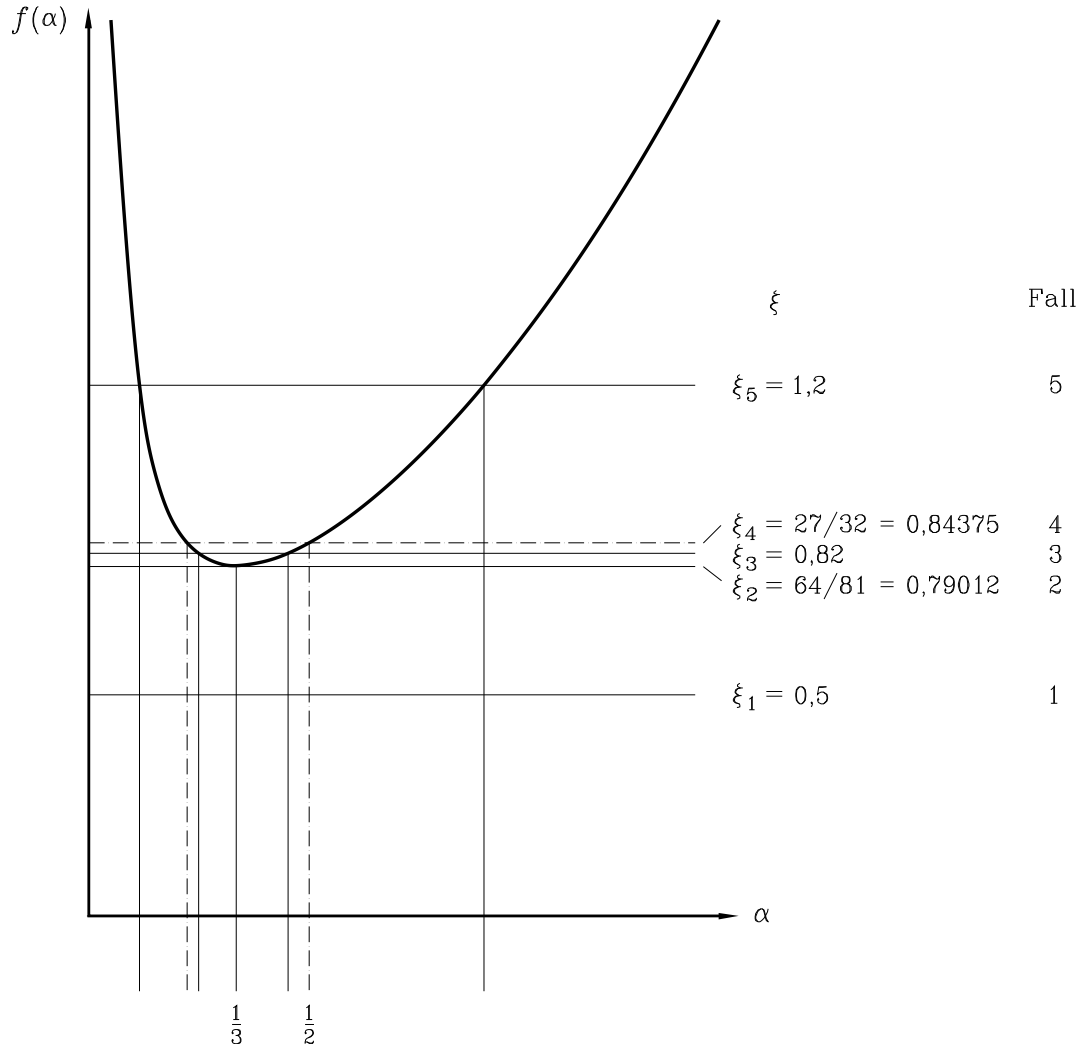


Abb. 5.12-2: Die Funktion $f(\alpha)$ und die Lösungen von Gl. (5.12-9) für fünf verschiedene ξ-Werte

(b) Mit der Funktion

$$\widetilde{\varepsilon}(\alpha) \equiv \widetilde{\varepsilon}(\alpha;\xi) = \frac{\alpha^2}{8\xi} - \frac{\alpha^3}{(\alpha+1)^3} \tag{5.12-6}$$

schreibt sich der Erwartungswert von Gl. (5.12-5) in der Form

$$\widetilde{E}(\alpha) \equiv \widetilde{E}(\alpha; V_0, \xi) = V_0\, \widetilde{\varepsilon}(\alpha;\xi)\,. \tag{5.12-7}$$

Die zu untersuchenden *qualitativen* Eigenschaften von $\widetilde{E}(\alpha)$ sind durch die entsprechenden qualitativen Eigenschaften von $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ bestimmt, sodass wir uns vorübergehend

nur mit $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ befassen müssen.[6]

Erste und zweite Ableitung der Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha) \equiv \widetilde{\varepsilon}(\alpha;\xi)$ sind gegeben durch

$$\frac{d\widetilde{\varepsilon}(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\alpha}{4\xi} - \frac{3\alpha^2}{(\alpha+1)^4} \;, \qquad \frac{d^2\widetilde{\varepsilon}(\alpha)}{d\alpha^2} = \frac{1}{4\xi} - \frac{6\alpha(1-\alpha)}{(\alpha+1)^5} \;. \tag{5.12-8}$$

Falls $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ stationäre Werte besitzt, werden diese aus der Gleichung

$$\frac{d\widetilde{\varepsilon}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad f(\alpha) := \frac{(\alpha+1)^4}{12\alpha} = \xi \tag{5.12-9}$$

erhalten. Die Klassifikation der stationären Werte wird dadurch erleichtert, dass für jene Werte von α, für die $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ stationär ist, $\operatorname{sign}\widetilde{\varepsilon}''(\alpha) = \operatorname{sign} f'(\alpha)$ gilt. (Der Leser zeige dies mithilfe der Gleichungen (5.12-8) und (5.12-9) selbst.)

Die Abbildung 5.12-2 zeigt den Graphen der Funktion $f(\alpha)$ und den Graphen der Funktion $g(\alpha) := \xi$ (horizontale Gerade) für fünf verschiedene ξ-Werte. Die Bedingung (5.12-9) für die Existenz stationärer Werte der Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ hat dann die Form $f(\alpha) = g(\alpha)$ (Lösungen = Schnittpunkte der Graphen).

Die Abbildung 5.12-3 zeigt den Graphen der Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ für die fünf ξ-Werte von Abb. 5.12-2.

Was sieht man aus diesen Abbildungen?

Fall 1: Für $\xi < \frac{64}{81} = 0{,}79012$ hat die Gleichung (5.12-9) *keine* Lösung, d. h. die Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ ist streng monoton wachsend. Für die Abbildungen wurde $\xi = \xi_1 = 0{,}5$ gewählt.

Fall 2: Für $\xi = \xi_2 = \frac{64}{81}$ gibt es *eine* Lösung von Gl. (5.12-9), und zwar für $\alpha = \frac{1}{3}$. Die Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ ist monoton wachsend und besitzt wegen $f'(\frac{1}{3}) = 0$ und $\widetilde{\varepsilon}'(\frac{1}{3}) = 0$ an der Stelle $\alpha = \frac{1}{3}$ einen Wendepunkt mit horizontaler Tangente.

Fälle 3, 4, 5: Für $\xi > \frac{64}{81}$ gibt es *zwei* Lösungen von Gl. (5.12-9), d. h. die Funktion $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ besitzt *zwei* stationäre Werte, und zwar ein Maximum im Bereich $\alpha < \frac{1}{3}$ $(f'(\alpha) < 0)$ und ein Minimum im Bereich $\alpha > \frac{1}{3}$ $(f'(\alpha) > 0)$.

Fall 3: Für $\frac{64}{81} < \xi < \frac{27}{32} = 0{,}84375$ liegt das Minimum von $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ im positiven Bereich. Für die Abbildungen wurde $\xi = \xi_3 = 0{,}82$ gewählt.

Fall 4: Für $\xi = \xi_4 = \frac{27}{32}$ liegt das Minimum von $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ auf der Abszisse, und zwar an der Stelle $\alpha = \frac{1}{2}$.

Fall 5: Für $\xi > \frac{27}{32}$ liegt das Minimum von $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ im negativen Bereich, d. h. $\widetilde{E}(\alpha)$ besitzt ein Minimum bei $E < 0$. Für die Abbildungen wurde $\xi = \xi_5 = 1{,}2$ gewählt.

(c) Besitzt das Potential mindestens einen gebundenen Zustand (Eigenwert $E_0 < 0$), was für $\xi > \xi_{\min}$ ($\xi_{\min}$ unbekannt[7]) der Fall ist, so gilt nach dem Variationsprinzip für

[6] Beachte, dass die Größen α, ξ und $\widetilde{\varepsilon}(\alpha)$ dimensionslos sind.

[7] „Unbekannt“ ist hier und im Folgenden im Sinne von *unbekannt im Rahmen der gegebenen Aufgabenstellung* gemeint. Zur exakten Lösung siehe die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

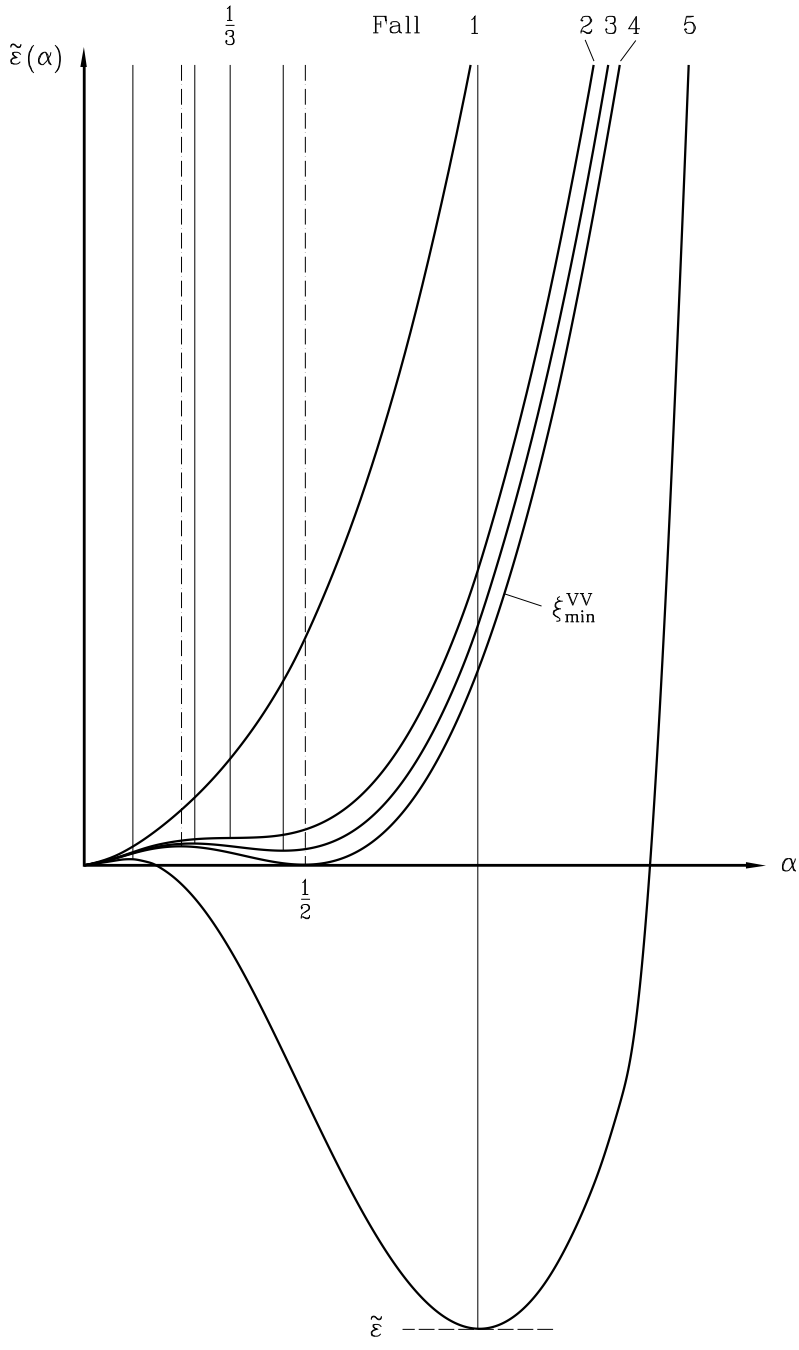


Abb. 5.12-3: Die Funktion $\tilde{\varepsilon}(\alpha)$ Gl. (5.12-6) für die fünf ξ-Werte von Abb. 5.12-2

den Ansatz (5.12-2)[8]

$$\widetilde{E}(\alpha) > E_0\,, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}^+, \tag{5.12-10}$$

gleichgültig, ob $\widetilde{E}(\alpha)$ ein Minimum bei $E < 0$ hat oder nicht. Da $\widetilde{E}(\alpha)$ für $\xi > \frac{27}{32}$ ein Minimum bei $E < 0$ hat, stellt

$$\xi > \xi_{\text{min}}^{\text{VV}} := \frac{27}{32} = 0{,}84375 \tag{5.12-11}$$

eine *hinreichende* (nicht notwendige) Bedingung dafür dar, dass das Exponentialpotential mindestens einen gebundenen Zustand besitzt, d. h. $\xi_{\text{min}}^{\text{VV}}$ stellt eine obere Schranke für ξ_{min} dar. In den Bemerkungen am Ende der Aufgabe werden auch eine *notwendige* (nicht hinreichende) Bedingung und die *notwendige und hinreichende* Bedingung $\xi > \xi_{\text{min}}$ besprochen.

Ist die Bedingung $\xi > \frac{27}{32}$ erfüllt, so besitzt das Potential *sicher* mindestens einen gebundenen Zustand, und das bei $E < 0$ liegende Minimum $\widetilde{E}$ der Funktion $\widetilde{E}(\alpha)$ stellt gemäß (5.12-10) die beste obere Schranke für den Energieeigenwert E_0 dar, die man mit dem Ansatz (5.12-2) erhalten kann. Von dieser oberen Schranke kann man aus den folgenden Gründen erwarten, dass sie den (unbekannten) Eigenwert E_0 gut approximiert:

- Die Versuchsfunktionen $\widetilde{u}(\vec{r}\,;\alpha)$ besitzen wie die (unbekannte) Energieeigenfunktion $u_0(\vec{r}\,)$ „1s-Charakter“ (Winkelunabhängigkeit, keine radialen Knoten).
- Der Ansatz weist auch das „passende“ asymptotische Verhalten auf, denn nach der asymptotischen Form der zeitunabhängigen Schrödingergleichung muss für $u_0(\vec{r}\,)$ für $r \to +\infty$

$$u_0(\vec{r}\,) \sim A\, e^{-\kappa_0 r} \quad \text{mit} \quad \kappa_0 := \sqrt{-\frac{2mE_0}{\hbar^2}} \tag{5.12-12}$$

  (A Konstante) gelten.

Im Fall des konkreten Beispiels $\xi = \xi_5 = 1{,}2$ erhält man den vom Variationsverfahren gelieferten Näherungswert für den Eigenwert E_0, indem man den in Abb. 5.12-3 eingezeichneten Wert $\widetilde{\varepsilon}$ für das Minimum von $\widetilde{\varepsilon}(\alpha) \equiv \widetilde{\varepsilon}(\alpha; 1{,}2)$ mit V_0 multipliziert (s. Gl. (5.12-7)).

Bemerkungen

In den Bemerkungen zu Aufgabe 2.25 wurde das *Bargmannkriterium* besprochen, das unter den dort genannten Voraussetzungen für das betrachtete Potential eine notwendige Bedingung dafür liefert, dass das Potential mindestens einen gebundenen Zustand besitzt. Das Exponentialpotential erfüllt die Voraussetzungen für die Anwendbarkeit des Bargmannkriteriums, und dieses liefert wegen

$$\int_0^{+\infty} dr\, r\, |V(r)| = V_0 \int_0^{+\infty} dr\, r \exp\Big[-\frac{r}{r_0}\Big] = V_0 r_0^2 \tag{5.12-13}$$

[8] Das Gleichheitszeichen können wir ausschließen, da wir wissen, dass die (unbekannte) Eigenfunktion $u_0(\vec{r}\,)$ nicht in der Funktionenschar (5.12-2) enthalten ist.

als *notwendige* (nicht hinreichende) Bedingung dafür, dass das Exponentialpotential mindestens einen gebundenen Zustand besitzt,

$$\xi > \frac{1}{2} = 0{,}5\,. \tag{5.12-14}$$

Der Vergleich mit der *hinreichenden* (nicht notwendigen) Bedingung (5.12-11) zeigt, dass $\xi_{\min}$ zwischen 0,5 und 0,84375 liegen muss.

Das Eigenwertproblem für das Exponentialpotential lässt sich exakt lösen (siehe z. B. [16]). Die Eigenwertbedingungen lauten

$$J_{q(E)}(c) = 0\,, \qquad E < 0 \tag{5.12-15a}$$

mit

$$q(E) := \left[-\frac{8mEr_0^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad c := \left[\frac{8mV_0r_0^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{8\xi}\,. \tag{5.12-15b}$$

$\xi = \xi_{\min}$ ist dadurch bestimmt, dass $E = E_0 = 0_-$ gilt. Ist c_1 die erste Nullstelle von $J_0(c)$, so gilt also $\xi_{\min} = c_1^2/8$. Mit $c_1 = 2{,}404826$ erhält man daraus

$$\xi_{\min} = 0{,}722898\,. \tag{5.12-16}$$

Eine *notwendige und hinreichende Bedingung* dafür, dass das Exponentialpotential mindestens einen gebundenen Zustand besitzt, ist also $\xi > 0{,}722898$. Ist diese Bedingung erfüllt, so ist E_0 durch den niedrigsten Wert $E < 0$ gegeben, für den die Gleichung $J_{q(E)}(c) = 0$ mit dem entsprechenden c erfüllt ist. Für die zugehörige Eigenfunktion gilt dann

$$u_0(\vec{r}) = \frac{N}{r}\,J_{q_0}\Big(c\exp\Big[-\frac{1}{2}\frac{r}{r_0}\Big]\Big) \quad \text{mit} \quad q_0 := \left[-\frac{8mE_0r_0^2}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.12-17}$$

(N Normierungskonstante). Für $r \to +\infty$ ergibt sich daraus mit $q_0 = 2\kappa_0 r_0$ das asymptotische Verhalten (5.12-12).

5.13* Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle} \;\to\; \text{stationärer Wert}\,. \tag{5.13-1}$$

Mit der Versuchsfunktionenschar

$$\{\,\widetilde{u}(\vec{r};\alpha) = u(\alpha\vec{r}),\;\; \vec{r}\in\mathbb{R}^3,\;\; \alpha\in\mathbb{R}^+\}\,, \tag{5.13-2}$$

wobei

$$H^{\{\vec{r}\}}u(\vec{r}) = E_k\,u(\vec{r})\,, \qquad \langle\,u\,|\,u\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,|u(\vec{r})|^2 = 1 \tag{5.13-3}$$

gelten soll, folgt

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,|\widetilde{u}(\vec{r};\alpha)|^2 = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,|u(\alpha\vec{r})|^2 = \frac{1}{\alpha^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3\xi\,|u(\vec{\xi})|^2 = \frac{1}{\alpha^3} \tag{5.13-4}$$

und unter Beachtung von $V(\vec{r}) = V(\alpha^{-1}\vec{\xi}) = \alpha^{-n} V(\vec{\xi})$

$$\begin{aligned}
\langle\, \widetilde{u}(\alpha) \,|\, H \,|\, \widetilde{u}(\alpha) \,\rangle &= \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; \widetilde{u}^*(\vec{r};\alpha) \left(H^{\{\vec{r}\}}\, \widetilde{u}(\vec{r};\alpha) \right) \\
&= \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; u^*(\alpha\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\, \Delta_{\vec{r}}\, u(\alpha\vec{r}) \right\} + \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; V(\vec{r})\, |u(\alpha\vec{r})|^2 \\
&= \frac{1}{\alpha^3}\, \alpha^2 \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3\xi\; u^*(\vec{\xi}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\, \Delta_{\vec{\xi}}\, u(\vec{\xi}) \right\}}_{\langle\, T \,\rangle} + \frac{1}{\alpha^3}\, \frac{1}{\alpha^n} \underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3\xi\; V(\vec{\xi})\, |u(\vec{\xi})|^2}_{\langle\, V \,\rangle} ;
\end{aligned} \tag{5.13-5}$$

$$\widetilde{E}(\alpha) = \alpha^2 \langle\, T \,\rangle + \frac{1}{\alpha^n} \langle\, V \,\rangle ; \qquad \frac{d\widetilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad 2\alpha \langle\, T \,\rangle - n\, \frac{1}{\alpha^{n+1}} \langle\, V \,\rangle = 0 . \tag{5.13-6}$$

Da $\widetilde{u}(\vec{r};1) = u(\vec{r})$ voraussetzungsgemäß Eigenfunktion von $H^{\{\vec{r}\}}$ ist (siehe Gl. (5.13-3)), muss der stationäre Wert von $\widetilde{E}(\alpha)$ für $\alpha = 1$ angenommen werden. Setzt man $\alpha = 1$ in (5.13-6) ein, so erhält man

$$\langle\, H \,\rangle = E_k = \langle\, T \,\rangle + \langle\, V \,\rangle , \qquad 2 \langle\, T \,\rangle = n \langle\, V \,\rangle . \tag{5.13-7}$$

Bemerkungen

Es ist offensichtlich, dass der obige Beweis des quantenmechanischen Virialtheorems für *alle* Eigenvektoren von H schlüssig ist. Siehe dazu auch den alternativen Beweis des Theorems in Aufgabe 4.6 und die Bemerkungen dazu. Bezüglich zweier Spezialfälle s. Aufgabe 4.6 (b).

5.14 Ich verwende für alle Rechnungen Einheiten, in denen $\hbar = m = \omega = 1$ gesetzt ist, um die Ausdrücke zu vereinfachen. In den Endergebnissen kehre ich dann wieder zu den konventionellen Einheiten zurück.

Bei Verwendung von Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$ besitzt der Hamiltonoperator die Form $H = H_0 + W$ mit

$$H_0 = \frac{1}{2}(P_1^2 + P_2^2) + \frac{1}{2}(X_1^2 + X_2^2) , \qquad W = \gamma X_1 X_2 . \tag{5.14-1}$$

(a) Dass der Hamiltonoperator H ein rein diskretes Spektrum mit einem kleinsten Eigenwert $E_0 > 0$ besitzt, kann man leicht sehen, wenn man das *Gesamtpotential* in der $\{x_1 x_2\}$-Darstellung anschreibt und zu Polarkoordinaten $x_1 = \rho\cos\varphi$, $x_2 = \rho\sin\varphi$ übergeht:

$$V(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \gamma x_1 x_2 = \frac{1}{2}\rho^2 (1 + \gamma \sin 2\varphi) =: V[\rho, \varphi] . \tag{5.14-2}$$

Wegen $0 < \gamma < 1$ gilt

$$V[\rho, \varphi] \geq 0\,, \quad \forall \rho, \varphi \quad \text{und} \quad V[\rho \to +\infty, \varphi] \to +\infty\,, \quad \forall \varphi\,, \tag{5.14-3}$$

woraus für das Spektrum von H

$$\sigma(H) = \{E_0, E_1, E_2, \dots\} \quad \text{mit} \quad 0 < E_0 < E_1 < E_2 < \dots \tag{5.14-4}$$

folgt.

(b)* Spiegelung in der x_1x_2-Ebene an der Geraden $x_1 = +x_2$ bedeutet – beschrieben durch Polarkoordinaten – die Transformation $\mathscr{S}_+\colon\ \rho \to \rho,\ \varphi \to \frac{\pi}{2} - \varphi$ (siehe Abb. 5.14-1). Das Gesamtpotential (5.14-2) ist wegen $\sin(\pi - 2\varphi) = \sin 2\varphi$ gegenüber dieser Transformation invariant. Da der Operator der kinetischen Energie in Bezug auf *beliebige* Drehungen um den Ursprung invariant ist, ist er auch invariant gegenüber der Spiegelung $\mathscr{S}_+$, und damit ist auch der Hamiltonoperator H invariant gegenüber $\mathscr{S}_+$. Analoges gilt für die Spiegelung an der Geraden $x_1 = -x_2$, welche in Polarkoordinaten durch $\mathscr{S}_-\colon\ \rho \to \rho,\ \varphi \to \frac{3\pi}{2} - \varphi$ gegeben ist.

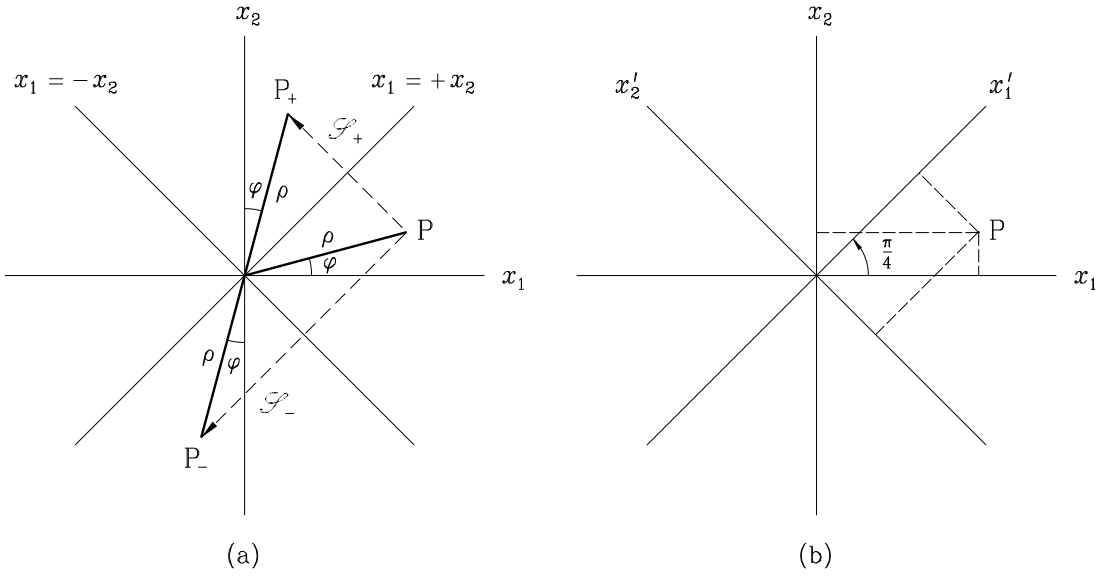


Abb. 5.14-1: (a): Spiegelungen $\mathscr{S}_\pm$ an den Geraden $x_1 = \pm x_2$
(b): Wahl des neuen Koordinatensystems

Aufgrund dieser Symmetrien des Hamiltonoperators lässt sich das Eigenwertproblem von H einfacher behandeln, wenn man ein Koordinatensystem benützt, dessen Achsen mit den Geraden $x_1 = \pm x_2$ zusammenfallen. Derartige Koordinatensysteme erhält man, indem man das ursprüngliche Koordinatensystem um $\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}$ oder $\frac{7\pi}{4}$ dreht. Wir wählen

die erste dieser Möglichkeiten (siehe Abb. 5.14-1), also die Koordinatentransformation

$$x_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)\,, \qquad x_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)\,, \tag{5.14-5}$$

und führen entsprechend die kanonische Transformation

$$X_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_1 + X_2)\,, \qquad X_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_1 - X_2)\,, \tag{5.14-6a}$$

$$P_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_1 + P_2)\,, \qquad P_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_1 - P_2) \tag{5.14-6b}$$

durch. (Der Leser verifiziere, dass die „gestrichenen“ Operatoren tatsächlich kanonische Vertauschungsbeziehungen erfüllen.)

Die Umkehrtransformation zu (5.14-6) lautet

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_1' + X_2')\,, \qquad X_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_1' - X_2')\,, \tag{5.14-7a}$$

$$P_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_1' + P_2')\,, \qquad P_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_1' - P_2')\,. \tag{5.14-7b}$$

Drückt man H_0 und W durch die neuen fundamentalen Operatoren aus, so erhält man[9]

$$H_0 = \frac{1}{2}(P_1'^2 + P_2'^2) + \frac{1}{2}(X_1'^2 + X_2'^2)\,, \qquad W = \frac{\gamma}{2}(X_1'^2 - X_2'^2)\,. \tag{5.14-8}$$

Dies ergibt für $H = H_0 + W$ einen Ausdruck der Form

$$H = H_1 + H_2 \tag{5.14-9a}$$

mit

$$H_1 := \frac{1}{2}P_1'^2 + \frac{1}{2}(1+\gamma)X_1'^2\,, \qquad H_2 := \frac{1}{2}P_2'^2 + \frac{1}{2}(1-\gamma)X_2'^2\,. \tag{5.14-9b}$$

Durch die kanonische Transformation (5.14-6) haben wir also das Eigenwertproblem von H auf das zweier nicht gekoppelter linearer harmonischer Oszillatoren mit zu $\sqrt{1+\gamma}$ bzw. $\sqrt{1-\gamma}$ proportionalen Kreisfrequenzen[10] zurückgeführt.

Aus der neuen Form (5.14-9) des Hamiltonoperators H ist wegen $0 < \gamma < 1$ *explizit* ersichtlich, dass H ein rein diskretes Spektrum mit einem kleinsten Eigenwert $E_0 > 0$ besitzt.

Die exakten Eigenwerte von H sind durch

$$E_{n_1 n_2}(\gamma) = \Big(n_1 + \frac{1}{2}\Big)\sqrt{1+\gamma} + \Big(n_2 + \frac{1}{2}\Big)\sqrt{1-\gamma}\,, \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0 \tag{5.14-10}$$

gegeben.

[9] Beachte die Invarianz von H_0 bezüglich beliebiger Drehungen um den Ursprung.
[10] In konventionellen Einheiten: $\omega_1 = \omega\sqrt{1+\gamma}$, $\omega_2 = \omega\sqrt{1-\gamma}$.

Die Abbildung 5.14-2 zeigt die Graphen der Funktionen $E_{n_1n_2}(\gamma)$ für $n_1+n_2=0,1,2$. Für $\gamma\to 0$ gilt $E_{n_1n_2}(\gamma)\to E^0_{n_1+n_2}=n_1+n_2+1$. Für $\gamma\to 1$ streben alle $E_{0n_2}(\gamma)$ gegen $\frac{\sqrt{2}}{2}$, alle $E_{1n_2}(\gamma)$ gegen $\frac{3\sqrt{2}}{2}$, alle $E_{2n_2}(\gamma)$ gegen $\frac{5\sqrt{2}}{2}$, usf.

Für die Grundzustandsenergie E_0 und die niedrigste Anregungsenergie E_1 und deren Vielfachheit gilt

$$E_0(\gamma)=E_{00}(\gamma)=\frac{1}{2}\left(\sqrt{1+\gamma}+\sqrt{1-\gamma}\right),\quad g_0=1\quad\text{für}\quad 0<\gamma<1\,; \tag{5.14-11}$$

$$E_1(\gamma)=E_{01}(\gamma)=\frac{1}{2}\left(\sqrt{1+\gamma}+3\sqrt{1-\gamma}\right),\quad g_1=1\quad\text{für}\quad 0<\gamma<1\,. \tag{5.14-12}$$

Die weitere Reihenfolge der Eigenwerte sowie deren Vielfachheit hängt vom Wert von γ ab. Beispielsweise gilt (siehe Abb. 5.14-2)

$$E_2(\gamma)=E_{10}(\gamma)=\frac{1}{2}\left(3\sqrt{1+\gamma}+\sqrt{1-\gamma}\right),\quad g_2=1\quad\text{für}\quad 0<\gamma<0{,}6\,; \tag{5.14-13a}$$

$$E_2(0{,}6)=E_{10}(0{,}6)=E_{02}(0{,}6)=\frac{7\sqrt{10}}{10}\,,\qquad g_2=2\,; \tag{5.14-13b}$$

$$E_2(\gamma)=E_{02}(\gamma)=\frac{1}{2}\left(\sqrt{1+\gamma}+5\sqrt{1-\gamma}\right),\quad g_2=1\quad\text{für}\quad 0{,}6<\gamma<1\,. \tag{5.14-13c}$$

Multiplikation mit $\hbar\omega$ liefert die Eigenwerte in konventionellen Einheiten.

(c) Die Lösung des Eigenwertproblems des „ungestörten“ Hamiltonoperators H_0 ist in Aufgabe 5.4, Gl. (5.4-1) angeschrieben. In Tabelle 5.4-1 sind für die niedrigsten Energieniveaus des ungestörten Problems jeweils die Vielfachheit sowie ein orthonormiertes Basissystem des betreffenden Eigenraumes angeführt. Um die Anwendung der Formeln (A.6-4) bis (A.6-13) von Anhang A.6 zu erleichtern, wurde dabei neben der Bezeichnungsweise von Gl. (5.4-1) auch die Bezeichnungsweise von Gl. (A.6-2) benützt. (In allen diesen Beziehungen ist noch $\hbar=m=\omega=1$ und damit $\alpha=1$ zu setzen.)

Eigenwert E^0_0: $g^0_0=1$ (keine Entartung)

In diesem Fall sind die Formeln (A.6-7), (A.6-9) anwendbar, und mit den Bezeichnungen von Tab. 5.4-1 folgt

$$\epsilon^{(1)}_0=\langle\,0\,0\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle\,,\qquad \epsilon^{(2)}_0=\sum_{\substack{n_1,n_2=0\\(n_1,n_2)\neq(0,0)}}^{\infty}\frac{|\langle\,n_1n_2\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle|^2}{E^0_0-E^0_{n_1+n_2}}\,. \tag{5.14-14}$$

Für die Matrixelemente der „Störung“ W, welche wir durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken (s. Anhang A.5, Gl. (A.5-3)),

$$W=\gamma X_1X_2=\frac{\gamma}{2}(a_1^\dagger+a_1)(a_2^\dagger+a_2)\,, \tag{5.14-15}$$

folgt mit Anhang A.5, Gl. (A.5-9)

$$\langle\,n_1n_2\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle=\frac{\gamma}{2}\,\delta_{n_11}\,\delta_{n_21}\,. \tag{5.14-16}$$

Damit ergibt sich für die Energiekorrekturen erster und zweiter Ordnung

$$\epsilon_0^{(1)}(\gamma) = \langle\, 0\,0\,|\,W\,|\,0\,0\,\rangle = 0\,, \qquad \epsilon_0^{(2)}(\gamma) = \frac{\gamma^2}{4}\,\frac{1}{1-3} = -\frac{\gamma^2}{8}\,, \tag{5.14-17}$$

und man erhält für die Grundzustandsenergie E_0 von H in zweiter Ordnung Störungstheorie den Näherungswert

$$E_0(\gamma) \approx E_0^{[2]}(\gamma) = E_0^0 + \epsilon_0^{(1)}(\gamma) + \epsilon_0^{(2)}(\gamma) = 1 - \frac{\gamma^2}{8} \quad \text{für} \quad \gamma \ll 1. \tag{5.14-18}$$

Vergleich mit der exakten Lösung (5.14-11): Einsetzen der für $0 < \gamma < 1$ gültigen Binomialentwicklungen ergibt

$$\begin{aligned} E_0(\gamma) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1+\gamma} + \sqrt{1-\gamma}\right) &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\gamma}{2} - \frac{\gamma^2}{8} + - \ldots + 1 - \frac{\gamma}{2} - \frac{\gamma^2}{8} - \ldots\right) \\ &= 1 - \frac{\gamma^2}{8} - \ldots \end{aligned} \tag{5.14-19}$$

Eigenwert E_1^0: $g_1^0 = 2$ (Entartung)

Nach Anhang A.6 werden in diesem Fall die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster Ordnung $\epsilon_{1\nu}^{(1)}$, $\nu = 1, 2$, durch „Diagonalisieren“ der Matrix des Störoperators im Entartungsraum zu E_1^0,

$$\widehat{W} = \begin{bmatrix} \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle & \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle \\ \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle & \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle \end{bmatrix} = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{5.14-20}$$

erhalten (s. (A.6-10) bis (A.6-13) und Tab. 5.4-1). Die Eigenwerte dieser Matrix sind

$$\epsilon_{11}^{(1)} = -\frac{\gamma}{2}\,, \qquad \epsilon_{12}^{(1)} = +\frac{\gamma}{2}\,, \tag{5.14-21}$$

und wir erhalten für die Eigenwerte E_1 und E_2 von H in erster Ordnung Störungstheorie die Näherungswerte

$$E_1(\gamma) \approx E_{11}^{[1]}(\gamma) = E_1^0 + \epsilon_{11}^{(1)}(\gamma) = 2 - \frac{\gamma}{2} \quad \text{für} \quad \gamma \ll 1; \tag{5.14-22}$$

$$E_2(\gamma) \approx E_{12}^{[1]}(\gamma) = E_1^0 + \epsilon_{12}^{(1)}(\gamma) = 2 + \frac{\gamma}{2} \quad \text{für} \quad \gamma \ll 1. \tag{5.14-23}$$

Vergleich mit der exakten Lösung (5.14-12) für $E_1(\gamma)$ und der für $0 < \gamma < 0{,}6$ gültigen exakten Lösung (5.14-13a) für $E_2(\gamma)$:

$$E_1(\gamma) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1+\gamma} + 3\sqrt{1-\gamma}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\gamma}{2} - + \ldots + 3 - \frac{3\gamma}{2} - \ldots\right) = 2 - \frac{\gamma}{2} - \ldots\,, \tag{5.14-24}$$

$$E_2(\gamma) = \frac{1}{2}\left(3\sqrt{1+\gamma} + \sqrt{1-\gamma}\right) = \frac{1}{2}\left(3 + \frac{3\gamma}{2} - + \ldots + 1 - \frac{\gamma}{2} - \ldots\right) = 2 + \frac{\gamma}{2} - \ldots \tag{5.14-25}$$

Multiplikation mit $\hbar\omega$ liefert die entsprechenden Energien in konventionellen Einheiten.

(d) Ritzsches Verfahren (β, ϕ Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\beta,\phi) = \frac{\langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle}{\langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle} \;\to\; \text{stationärer Wert}\,. \tag{5.14-26}$$

(Beachte, dass $H = H(\gamma)$, also $\widetilde{E}(\beta,\phi) = \widetilde{E}(\beta,\phi;\gamma)$ gilt.) Mit den Versuchsvektoren

$$|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle = |\,1\,0\,\rangle + \beta\, e^{i\phi}\,|\,0\,1\,\rangle \tag{5.14-27}$$

folgt

$$H_0\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle = E_1^0\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle = 2\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle\,, \qquad \langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle = 1+\beta^2 \tag{5.14-28}$$

und

$$\widetilde{E}(\beta,\phi) = 2 + \frac{\langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,W\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle}{\langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle} = 2 + \frac{1}{1+\beta^2}\overbrace{\langle\, \widetilde{u}(\beta,\phi)\,|\,W\,|\,\widetilde{u}(\beta,\phi)\,\rangle}^{=:\,F(\beta,\phi)} \tag{5.14-29}$$

mit

$$F(\beta,\phi) = \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle + \beta^2\langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle + \beta\, e^{i\phi}\langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle + \beta\, e^{-i\phi}\langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle\,. \tag{5.14-30}$$

Mit dem Ausdruck (5.14-15) für W und mit Gl. (A.5-9) von Anhang A.5 erhält man

$$\langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle = \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle = 0\,, \qquad \langle\, 1\,0\,|\,W\,|\,0\,1\,\rangle = \langle\, 0\,1\,|\,W\,|\,1\,0\,\rangle = \frac{\gamma}{2}\,, \tag{5.14-31}$$

und damit folgt weiter

$$F(\beta,\phi) = \gamma\,\beta\cos\phi\,, \qquad \widetilde{E}(\beta,\phi) \equiv \widetilde{E}(\beta,\phi;\gamma) = 2 + \gamma\,\frac{\beta}{1+\beta^2}\cos\phi\,. \tag{5.14-32}$$

Berechnung der stationären Werte von $\widetilde{E}(\beta,\phi)$ unter Beachtung von $\beta \in \mathbb{R}^+$, $\phi \in [0, 2\pi)$:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial\widetilde{E}}{\partial\beta} &= \gamma\,\frac{1-\beta^2}{(1+\beta^2)^2}\cos\phi = 0 \\ \frac{\partial\widetilde{E}}{\partial\phi} &= -\gamma\,\frac{\beta}{1+\beta^2}\sin\phi = 0 \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \beta = 1,\;\; \phi = 0, \pi\,. \tag{5.14-33}$$

Für die stationären Werte von $\widetilde{E}(\beta,\phi)$ und die zugehörigen *auf eins normierten* Vektoren $|\,\widetilde{u}\,\rangle$ gilt also:

$$\widetilde{E}(1,\pi;\gamma) = 2 - \frac{\gamma}{2} = \widetilde{E}_{\min}(\gamma)\,, \qquad |\,\widetilde{u}(1,\pi)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,1\,0\,\rangle - |\,0\,1\,\rangle\Big)\,; \tag{5.14-34a}$$

$$\widetilde{E}(1,0;\gamma) = 2 + \frac{\gamma}{2}\,, \qquad |\,\widetilde{u}(1,0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,1\,0\,\rangle + |\,0\,1\,\rangle\Big)\,. \tag{5.14-34b}$$

Multiplikation mit $\hbar\omega$ liefert die Energien in konventionellen Einheiten.

(e) Der Hamiltonoperator $H = H_0 + W$ ist inversionssymmetrisch bezüglich des Ursprungs der x_1x_2-Ebene. Da die Grundzustandsenergie E_0 von H nicht entartet ist, muss die exakte Grundzustands-Eigenfunktion $u_0(x_1, x_2)$ *gerade Parität* besitzen.[11] Da die Versuchsfunktionen $\widetilde{u}(x_1, x_2; \beta, \phi)$ für alle $\beta \in \mathbb{R}^+$, $\phi \in [0, 2\pi)$ *ungerade Parität* besitzen, gilt

$$\langle\, u_0 \,|\, \widetilde{u}(\beta, \phi) \,\rangle = 0\,, \quad \forall \beta \in \mathbb{R}^+,\ \phi \in [0, 2\pi)\,, \tag{5.14-35}$$

und aus dem Variationsprinzip folgt daher[12]

$$E_1(\gamma) < \widetilde{E}_{\min}(\gamma) = 2 - \frac{\gamma}{2} \quad \text{für} \quad 0 < \gamma < 1\,. \tag{5.14-36}$$

Da $|\, \widetilde{u}(1, \pi) \,\rangle$, $|\, \widetilde{u}(1, 0) \,\rangle$ als „beste Vektoren“ im Eigenraum $\mathscr{H}(E_1^0)$ von H_0 im Sinne des Variationsprinzips auch Eigenvektoren nullter Ordnung von H im Sinne der Störungstheorie erster Ordnung sein müssen, mussten sich für $\widetilde{E}(1, \pi; \gamma)$, $\widetilde{E}(1, 0; \gamma)$ dieselben Werte ergeben, wie sie die Störungstheorie erster Ordnung zu E_1^0 in Punkt (c) lieferte (siehe Gl. (5.14-22), (5.14-23)):

$$\widetilde{E}(1, \pi; \gamma) = \widetilde{E}_{\min}(\gamma) = E_{11}^{[1]}(\gamma)\,, \qquad \widetilde{E}(1, 0; \gamma) = E_{12}^{[1]}(\gamma)\,. \tag{5.14-37}$$

Daraus folgt aber für $\gamma \ll 1$ (siehe Abb. 5.14-2)

$$\widetilde{E}(1, \pi; \gamma) = \widetilde{E}_{\min}(\gamma) \approx E_1(\gamma)\,, \qquad \widetilde{E}(1, 0; \gamma) \approx E_2(\gamma)\,. \tag{5.14-38}$$

(f) *Zahlenbeispiele:*

Tab. 5.14-1: Abweichung zwischen $E_0^{[2]}$ und E_0 in Prozent

γ	Abweichung
0,01	$3{,}9 \cdot 10^{-8}$ %
0,2	0,0064 %
0,4	0,11 %
0,6	0,67 %
0,8	2,9 %

Tab. 5.14-2: Abweichung zwischen $E_{11}^{[1]} = \widetilde{E}_{\min}$ und E_1 in Prozent

γ	Abweichung
0,01	0,0013 %
0,2	0,56 %
0,4	2,7 %
0,6	7,5 %
0,8	19,3 %

[11] Aus den genannten Symmetriegründen weiß man das auch dann, wenn man $u_0(x_1, x_2)$ nicht kennt. Wir haben aber in Punkt (b) das Eigenwertproblem exakt gelöst und können $u_0(x_1, x_2)$ explizit anschreiben. Siehe die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

[12] Das Gleichheitszeichen können wir ausschließen, da wir wissen, dass die exakte Eigenfunktion zum Eigenwert E_1 nicht in der Funktionenschar $\widetilde{u}(x_1, x_2; \beta, \phi)$ enthalten ist.

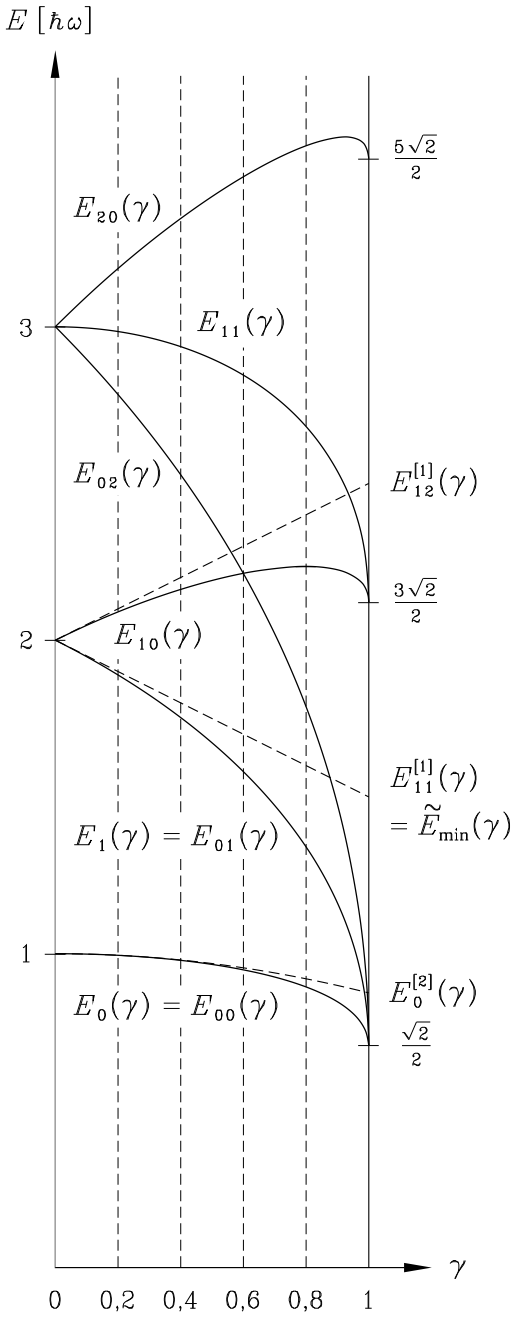


Abb. 5.14-2: Exakte Energieeigenwerte und Ergebnisse der Störungsrechnung und des Variationsverfahrens

Bemerkungen

In Punkt (b) wurde das Eigenwertproblem von H exakt gelöst, es wurden aber nur die Eigenwerte angeschrieben, da nur diese gefragt waren. Natürlich kann man auch die zugehörigen Eigenvektoren bzw. Eigenfunktionen angeben. Beispielsweise gilt für die auf eins normierte

exakte Grundzustands-Eigenfunktion u_0 bei Verwendung konventioneller Einheiten und mit $\alpha := (m\omega/\hbar)^{1/2}$ in der $\{x_1' x_2'\}$-Darstellung (s. Gl. (3.20-11))

$$u_0[x_1', x_2'] = \frac{\alpha\,(1-\gamma^2)^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \exp\Big[-\sqrt{1+\gamma}\,\frac{\alpha^2 x_1'^2}{2} - \sqrt{1-\gamma}\,\frac{\alpha^2 x_2'^2}{2}\Big] \tag{5.14-39}$$

und in der $\{x_1 x_2\}$-Darstellung (s. Gl. (5.14-5))

$$u_0(x_1, x_2) = \frac{\alpha\,(1-\gamma^2)^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \exp\Big[-\sqrt{1+\gamma}\,\frac{\alpha^2 (x_1+x_2)^2}{4} - \sqrt{1-\gamma}\,\frac{\alpha^2 (x_1-x_2)^2}{4}\Big]\,. \tag{5.14-40}$$

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 5.1 bis 5.14 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 5.1 bis 5.14 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T5.1 Ein Teilchen der Masse m befinde sich im Potential (eindimensionales Problem)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad -a \le x < 0 \\ -V_0 & \text{für} \quad 0 < x \le a \\ +\infty & \text{für} \quad |x| > a \end{cases} , \qquad V_0 > 0 \,.$$

Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Energieniveaus E_{n-1}, $n \in \mathbb{N}$, des Systems, wobei die gegenüber dem gewöhnlichen unendlich tiefen Kastenpotential im Bereich $0 < x \le a$ vorhandene Potentialabsenkung als Störung betrachtet werden soll.

(Die Lösung des ungestörten Problems kann dabei als bekannt angenommen werden; siehe Gl. (2.10-1), (2.10-2). Wer ambitioniert ist, sollte versuchen, das Ergebnis mittels „Kopfrechnung“ zu ermitteln.)

(Siehe dazu auch die Aufgabe T2.3.)

T5.2 Der Hamiltonoperator eines gestörten linearen Oszillators besitze die Form $H = H_0 + W$ mit

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X^2 \,, \qquad W = -\gamma \sqrt{\frac{\hbar^3 \omega}{m}}\, \delta(X) \,; \qquad 0 < \gamma \ll 1 \,.$$

(a) Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Energiekorrekturen zu den ungestörten Energieeigenwerten E_n^0.

(b) Gib einen Näherungsausdruck für diese Energiekorrekturen für große n an.

(c) Berechne für den Spezialfall $\gamma = \sqrt{\pi}/20$ die numerischen Werte der Energiekorrekturen für $n = 0, 1, 2, 3$ und zeichne das entsprechende Energieniveauschema für H_0 und H.

(d) Kommentiere die Ergebnisse.

(Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann dabei als bekannt angenommen werden.)

(Anleitung: Es ist vorteilhaft, wenn man Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$ verwendet, also Energien in Einheiten $\hbar\omega$ und Abstände in Einheiten $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ angibt, und erst wieder bei

den Ergebnissen zu den konventionellen Einheiten übergeht. Verwende ferner die Formeln

$$H_{2\nu}(0) = (-1)^\nu \frac{(2\nu)!}{\nu!}\,, \quad H_{2\nu+1}(0) = 0\,, \quad \nu \in \mathbb{N}_0\,;$$

$$k! \sim \sqrt{2\pi k}\, k^k e^{-k} \quad \text{für natürliche Zahlen } k \gg 1.)$$

T5.3 In einem dreidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathscr{H}$ seien zwei lineare Operatoren H_0, W durch ihre Wirkung auf die Vektoren einer orthonormierten Basis $\{|\,e_1\,\rangle, |\,e_2\,\rangle, |\,e_3\,\rangle\}$ folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned}
H_0\,|\,e_1\,\rangle &:= -\,|\,e_1\,\rangle\,, & W\,|\,e_1\,\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_2\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_3\,\rangle\,,\\
H_0\,|\,e_2\,\rangle &:= |\,e_2\,\rangle\,, & W\,|\,e_2\,\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_1\,\rangle + |\,e_2\,\rangle - |\,e_3\,\rangle\,,\\
H_0\,|\,e_3\,\rangle &:= |\,e_3\,\rangle\,; & W\,|\,e_3\,\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,e_1\,\rangle - |\,e_2\,\rangle + |\,e_3\,\rangle\,.
\end{aligned}$$

Ferner sei durch $H(\lambda) := H_0 + \lambda W$ eine Operatorenschar $\{H(\lambda),\ \lambda \in \mathbb{R}^+\}$ definiert.

(a) Zeige, dass die Operatoren H_0, W selbstadjungiert, aber nicht vertauschbar sind. Was folgt daraus bezüglich der Eigenwertprobleme von H_0 und $H(\lambda)$?

(b) Zeige, dass für beliebiges festes $\lambda \in \mathbb{R}^+$ der entsprechende Operator $H(\lambda)$ nur einfache Eigenwerte $E_m(\lambda)$ besitzt, und stelle die λ-Abhängigkeit der Eigenwerte $E_m(\lambda)$, $m = 1, 2, 3$, graphisch dar. Für welche λ-Werte konvergieren die Potenzreihenentwicklungen der Funktionen $E_m(\lambda)$ mit der Entwicklungsstelle $\lambda = 0$?

(c) Berechne die zu den Eigenwerten $E_m(\lambda)$ gehörigen auf eins normierten Eigenvektoren $|\,u_m(\lambda)\,\rangle$ von $H(\lambda)$.

(d) Gib die Eigenwerte E_n^0 von H_0 und deren Vielfachheiten g_n^0 an.

(e) Gib für die Eigenräume $\mathscr{H}(E_n^0)$ von H_0 orthonormierte Basissysteme $\{|\,u_{n\nu}^0\,\rangle,\ \nu = 1, 2, \ldots, g_n^0\}$ an.

(f) Berechne mithilfe der Störungstheorie unter der Annahme $\lambda \ll 1$ Näherungswerte für die Eigenwerte $E_{n\nu}(\lambda)$ von $H(\lambda)$, und zwar in erster Ordnung, falls $g_n^0 > 1$, und in zweiter Ordnung, falls $g_n^0 = 1$ ist. Vergleiche mit den Ergebnissen von (b). Welche Korrespondenz besteht zwischen den Indizierungen m bzw. $n\nu$ der Eigenwerte von $H(\lambda)$?

(g) Bestimme mithilfe der Störungstheorie die zu den Eigenwerten $E_{n\nu}(\lambda)$ gehörigen Eigenvektoren nullter Ordnung $|\,\chi_{n\nu}^{(0)}\,\rangle$ von $H(\lambda)$ und vergleiche sie unter Beachtung der Korrespondenz $m \leftrightarrow n\nu$ mit den Vektoren $|\,u_m(\lambda \to 0+)\,\rangle$ von (c).

Ergebnisse zu (b): $E_1(\lambda) = -\sqrt{1+\lambda^2}\,, \quad E_2(\lambda) = +\sqrt{1+\lambda^2}\,, \quad E_3(\lambda) = 1+2\lambda\,.$

(Bemerkung: Man kann natürlich auch die Operatorenschar $\{H(\lambda),\ \lambda \in \mathbb{R}\}$ betrachten. Die Festlegung $\lambda \in \mathbb{R}^+$ wurde in der Angabe nur deshalb getroffen, um die Aufgabe einfacher und kürzer zu halten. Für $\lambda = -4/3$ ist nämlich $1+2\lambda = -\sqrt{1+\lambda^2}$, sodass Entartung auftritt.)

T5.4 Der Hamiltonoperator eines gestörten zweidimensionalen Oszillators besitze die Form $H = H_0 + W$ mit

$$H_0 = \frac{1}{2m}\,(P_1^2 + P_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}\,(X_1^2 + X_2^2)\,, \qquad W = \gamma\,\frac{m^2\omega^3}{\hbar}\,X_1 X_2\,(X_1^2 + X_2^2)$$

($\gamma > 0$ vorgegebene dimensionslose Konstante).

(a) Berechne die störungstheoretische Energiekorrektur erster und zweiter Ordnung für den Grundzustand von H_0.

(b) Berechne die Energiekorrekturen erster Ordnung für das niedrigste Anregungsniveaus von H_0.

Skizziere den Verlauf des wellenmechanischen Gesamtpotentials $V(r,\varphi) + W(r,\varphi)$ für einen festen Wert von γ für einige Richtungen φ. Besitzt der Hamiltonoperator H überhaupt diskrete Eigenwerte? Falls nein, welchen Sinn haben dann die störungstheoretisch berechneten Energien?

(Die Lösung des ungestörten Problems kann dabei als bekannt angenommen werden. Siehe die analogen Beziehungen von Anhang A.4 für den dreidimensionalen Fall.)

(Anleitung: Es ist vorteilhaft, wenn man Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$ verwendet, also Energien in Einheiten $\hbar\omega$, Abstände in Einheiten $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ und Impulse in Einheiten $(m\hbar\omega)^{1/2}$ angibt, und erst wieder bei den Ergebnissen zu den konventionellen Einheiten übergeht. Drücke ferner den Operator W durch die Oszillatorquanten-Erzeugungsoperatoren $a_1^\dagger, a_2^\dagger$ bzw. die Vernichtungsoperatoren a_1, a_2 aus; s. Anhang A.5.)

Ergebnisse:

$$E_0^{[2]}(\gamma) = E_0^0 + \epsilon_0^{(1)}(\gamma) + \epsilon_0^{(2)}(\gamma) = (1 - \frac{21\gamma^2}{16})\hbar\omega\,,$$

$$E_{11}^{[1]}(\gamma) = E_1^0 + \epsilon_{11}^{(1)}(\gamma) = (2 - \frac{3\gamma}{2})\hbar\omega\,, \quad E_{12}^{[1]}(\gamma) = E_1^0 + \epsilon_{12}^{(1)}(\gamma) = (2 + \frac{3\gamma}{2})\hbar\omega\,.$$

T5.5 Ein geladener linearer harmonischer Oszillator (Ladung q, Masse m, Kreisfrequenz ω) befinde sich zur Zeit $t_0 = -\infty$ in seinem Grundzustand. Berechne in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator zur Zeit $t = +\infty$ in seinem n-ten Energieeigenzustand anzutreffen, wenn er im Zeitintervall $(-\infty, +\infty)$ der Wirkung des zeitabhängigen homogenen elektrischen Feldes

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0\, e^{-|t|/\tau_0} \cos\omega t$$

($\mathcal{E}_0, \tau_0 \in \mathbb{R}^+$) unterworfen ist. Unter welcher Voraussetzung bzgl. der Größe von $\mathcal{E}_0$ und τ_0 ist die Beschränkung auf erste Ordnung Störungstheorie möglich?

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi \cos\alpha\xi\, e^{-\beta\xi} = \frac{\beta}{\alpha^2+\beta^2}\,, \qquad \alpha\in\mathbb{R}\,, \quad \beta\in\mathbb{R}^+.)$$

T5.6 Ein Teilchen mit einem räumlichen Freiheitsgrad $x\in\mathbb{R}$ befinde sich in einem bis auf allfällige endliche Sprünge stetigen Potential V mit den Eigenschaften $V(x)<0$ für $x\in\mathbb{R}$ und $V(x\to\pm\infty)\to 0_-$.

Beweise mithilfe des Variationsprinzips, dass ein solches Potential mindestens einen gebundenen Zustand besitzt.

(Anleitung: Benütze die bekannte Tatsache, dass ein anziehendes Kastenpotential beliebiger Breite und Tiefe mindestens einen gebundenen Zustand besitzt.)

(Bemerkung: Hinsichtlich der Existenz gebundener Zustände bei Potentialmulden in drei Raumdimensionen siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13.)

T5.7 Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem eindimensionalen anziehenden δ-förmigen Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\, D\,\delta(x)\,, \qquad D>0\,.$$

(a) Führe das Variationsverfahren unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar

$$\left\{\,\widetilde{u}(x;\alpha) = e^{-\alpha x^2},\ \ x\in\mathbb{R}\,,\ \ \alpha\in\mathbb{R}^+\right\}$$

(α Variationsparameter) durch.

(b) Vergleiche mit dem exakten Energieeigenwert $E_0 = -\hbar^2 D^2/2m$ und kommentiere das Ergebnis.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^{2n} e^{-\beta\xi^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n!\,\beta^n}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\,, \qquad \beta\in\mathbb{R}^+,\ \ n\in\mathbb{N}_0\,.)$$

T5.8* Ein Teilchen der Masse m befinde sich in dem sphärisch symmetrischen Potential

$$V(r) = \beta\,\frac{\hbar^2}{m}\, r^4\,, \qquad \beta\in\mathbb{R}^+$$

(anharmonischer dreidimensionaler isotroper Oszillator).

(a) Führe das Variationsverfahren unter Verwendung der folgenden Versuchsfunktionenscharen durch (α Variationsparameter):

$$\{\,\widetilde{u}(\vec{r};\alpha) = \widetilde{R}(r;\alpha)\,Y_{00}(\Omega),\ \ \vec{r}\in\mathbb{R}^3,\ \ \alpha\in\mathbb{R}^+\}$$

mit

$$\text{Fall 1:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r^2}$$
$$\text{Fall 2:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r^3}$$
$$\text{Fall 3:} \quad \widetilde{R}(r;\alpha) = e^{-\alpha r^4}$$

Welche Schrankeneigenschaften sind von den Ergebnissen $\widetilde{E}_i(\alpha_0)$, $i = 1, 2, 3$, der drei Fälle zu erwarten? Welcher Ansatz wird die niedrigste Schranke liefern?

(b) Führe die Rechnung für diese Versuchsfunktionenscharen durch. Berechne die Zahlenfaktoren f_i in den Ergebnissen

$$\widetilde{E}_i(\alpha_0) = f_i \, \beta^{1/3} \, \frac{\hbar^2}{m} \,, \qquad i = 1, 2, 3$$

der drei Fälle numerisch. Entsprechen die Ergebnisse den Erwartungen?

(Anleitung: Verwende die für $n \in \mathbb{N}_0$, $\lambda \in \mathbb{R}^+$ gültigen Formeln

$$\int_0^{+\infty} d\rho \, \rho^{2n} \, e^{-\lambda\rho^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n! \, \lambda^n} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \,,$$
$$\int_0^{+\infty} d\rho \, \rho^{n} \, e^{-\lambda\rho^3} = \frac{1}{3} \, \lambda^{-(n+1)/3} \, \Gamma\Big(\frac{n+1}{3}\Big) \,,$$
$$\int_0^{+\infty} d\rho \, \rho^{n} \, e^{-\lambda\rho^4} = \frac{1}{4} \, \lambda^{-(n+1)/4} \, \Gamma\Big(\frac{n+1}{4}\Big) \,.)$$

Ergebnisse:

$$\text{Fall 1:} \quad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{9}{4} \Big(\frac{5}{4}\Big)^{1/3} \beta^{1/3} \, \frac{\hbar^2}{m} \,,$$
$$\text{Fall 2:} \quad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{9}{4} \, \Gamma\Big(\frac{4}{3}\Big) \Big(\frac{16}{9}\Big)^{1/3} \beta^{1/3} \, \frac{\hbar^2}{m} \,,$$
$$\text{Fall 3:} \quad \widetilde{E}(\alpha_0) = \frac{3}{4} \, 75^{1/3} \Big[\Gamma\Big(\frac{5}{4}\Big)\Big]^{2/3} \Big[\Gamma\Big(\frac{3}{4}\Big)\Big]^{-2/3} \beta^{1/3} \, \frac{\hbar^2}{m} \,.$$

6. Drehimpuls. Drehungen

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. die Kapitel 7 und 9.

Angaben

6.1 Zeige: Vertauscht ein Operator A mit zwei Komponenten eines Drehimpulsoperators $\vec{J}$, so vertauscht er auch mit der dritten Komponente.

6.2 $\{|\,\tau jm\,\rangle\}$ sei eine Standardbasis von Drehimpulseigenzuständen (j, m Quantenzahlen zu $\vec{J}^2$ und J_z).

(a) In welchen der Zustände $|\,\tau jm\,\rangle$ zu festem j besitzt die Unbestimmtheit der Komponenten $\mathcal{J}_x$ und $\mathcal{J}_y$ des betreffenden Drehimpulses den kleinsten Wert und wie groß ist dieser?

(b) Gibt es im betrachteten Zustandsraum Zustände, in denen *alle* Komponenten des betreffenden Drehimpulses einen „scharfen Wert“ besitzen?

6.3 Ein Rotator mit zwei Freiheitsgraden, den räumlichen Polarwinkeln ϑ, φ, besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Zustandsfunktion

$$\psi(\vartheta,\varphi) \equiv \langle\,\vartheta\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle = N\,(\sin\vartheta\,\cos\varphi + \sin\vartheta\,\sin\varphi + \sqrt{3}\,\cos\vartheta)$$

(N Normierungskonstante).

(a) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Drehimpulsquadrats des Rotators den Messwert $2\hbar^2$ findet?

(b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man bei einer Messung des zum Operatorensatz $\{\vec{L}^2, L_z\}$ gehörigen Observablensatzes das Messwertpaar $\{2\hbar^2, 0\}$?

(Anleitung: Verwende die Formeln (A.2-13) von Anhang A.2.)

6.4 Stelle die Eigenvektoren der Komponenten S_x und S_y des Spinoperators $\vec{S}$ eines Spins $s = \frac{1}{2}$ im Basissystem der Eigenvektoren der Komponente S_z dar.

6.5* Ein Spin $s = \frac{1}{2}$ sei zu einem bestimmten Zeitpunkt im Zustand

$$|\,\chi\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|+\rangle + \frac{1+i}{2}\,|-\rangle$$

($|+\rangle$, $|-\rangle$ Eigenvektoren von S_z). Für welche Raumrichtungen besitzt dann die Projektion des Spins die Unschärfe null?

(Anleitung: Der Operator der Spinprojektion bezüglich einer Richtung $\vec{e}$, $|\vec{e}| = 1$, ist durch $\vec{S}\cdot\vec{e}$ gegeben.)

6.6 Welche Unbestimmtheitsbeziehung ergibt sich für die Unschärfen der Komponenten $\mathcal{S}_x$ und $\mathcal{S}_y$ eines Spins $s = \frac{1}{2}$ aufgrund der Vertauschungsbeziehung der zugehörigen Operatoren S_x und S_y? Zeige, dass in einem Eigenzustand einer der Komponenten von $\vec{S}$ in dieser Unbestimmtheitsbeziehung das Gleichheitszeichen gilt.

6.7 Eine reine Gesamtheit von Spins $s = \frac{1}{2}$ sei in einem Zustand, in welchem die Observable $\mathcal{S}_z$ den „scharfen Wert“ $+\frac{\hbar}{2}$ besitzt. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Spinkomponente bezüglich einer z'-Achse, welche mit der z-Achse den Winkel ϑ einschließt, den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ bzw. den Messwert $-\frac{\hbar}{2}$ findet, und wie groß ist der Erwartungswert von $\mathcal{S}_{z'}$?

6.8

(a) Zeige, dass der im Spin-$\frac{1}{2}$-Hilbertraum definierte Operator

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{\sigma}\cdot\vec{e}\right)$$

($\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ Spinoperator, $\vec{e}$ Einheitsvektor) alle Eigenschaften besitzt, die den Dichteoperator einer reinen Gesamtheit kennzeichnen.

(b)* Welche reine Gesamtheit beschreibt dieser Dichteoperator?

(Anleitung zu (b): Drücke die Operatoren $\mathbb{1}$ und $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ durch die Eigenvektoren $|u_{\pm\vec{e}}\rangle$ von $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ aus.)

6.9 Der Dichteoperator einer gemischten Gesamtheit von Spins $s = \frac{1}{2}$ sei zu einem bestimmten Zeitpunkt durch

$$\rho = |+\rangle\, p\, \langle +| + |-\rangle (1-p)\, \langle -|, \qquad 0 < p < 1$$

gegeben ($|+\rangle$, $|-\rangle$ Eigenvektoren von S_z). Hängt die Wahrscheinlichkeit W_{+x} dafür, dass man bei einer Messung der x-Komponente eines Spins der Gesamtheit den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ findet, vom Wert des statistischen Gewichtes p ab?

6.10

(a) Zum betrachteten Zeitpunkt liege eine reine Gesamtheit von Spins $s = \frac{1}{2}$ mit dem Zustandsvektor

$$|\chi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|+\rangle + \frac{1}{2}|-\rangle$$

vor.

(a1) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Spinprojektion bzgl. der Richtung $\vec{e} = (\frac{\sqrt{3}}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2})$ zum betreffenden Zeitpunkt den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ findet.

(a2) Berechne für den betreffenden Zeitpunkt den Erwartungswert der Spinprojektion bzgl. der Richtung $\vec{e} = (\frac{\sqrt{3}}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2})$.

(b) Zum betrachteten Zeitpunkt liege eine gemischte Gesamtheit von Spins $s = \frac{1}{2}$ mit dem Dichteoperator

$$\rho = |+\rangle \frac{3}{4} \langle +| + |-\rangle \frac{1}{4} \langle -|$$

vor. Berechne auch für diesen Fall die unter (a1), (a2) gefragten Größen.

(Anleitung: Der Operator der Spinprojektion bezüglich einer Richtung $\vec{e}$, $|\vec{e}| = 1$, ist durch $\vec{S} \cdot \vec{e}$ gegeben.)

6.11 Ein Spin $s = \frac{1}{2}$ befinde sich in einem Zustand $|\chi\rangle$, für welchen der Erwartungswert der z-Komponente des Spins den Wert $+\frac{\hbar}{2}$ besitzt. Kann man dann schließen, dass der Vektor $|\chi\rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ sein muss?

6.12 Ein Spin $s = \frac{3}{2}$ befinde sich in einem Zustand $|\chi\rangle$, für welchen der Erwartungswert der z-Komponente des Spins den Wert $+\frac{\hbar}{2}$ besitzt.

(a) Kann man dann schließen, dass der Vektor $|\chi\rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ sein muss?

(b) Ändert sich an der Aussage von (a) etwas, wenn man zusätzlich annimmt, dass die Erwartungswerte von $\mathcal{S}_x$ und $\mathcal{S}_y$ im Zustand $|\chi\rangle$ null sind?

6.13* Ein System von zwei unterscheidbaren Spins $s = \frac{1}{2}$ (Zustandsraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$) sei zu einem bestimmten Zeitpunkt in einem reinen Zustand mit dem Zustandsvektor

$$|\chi\rangle = \alpha |++\rangle + \beta |+-\rangle + \gamma |-+\rangle + \delta |--\rangle ,$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$$

($|m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle^{(1)} |m_2\rangle^{(2)}$ gemeinsame Eigenvektoren von $S_z^{(1)}$, $S_z^{(2)}$). Nun werde das Subsystem Spin (1) (Zustandsraum $\mathscr{H}^{(1)}$) für sich allein betrachtet. Bestimme den Dichteoperator $\rho^{(1)}$ in $\mathscr{H}^{(1)}$, der zum betrachteten Zeitpunkt den Zustand des Subsystems Spin (1) beschreibt, und zeige, dass sich das Subsystem dann und nur dann in einem reinen Zustand befindet, wenn zwischen α, β, γ und δ die Beziehung $\alpha\delta = \beta\gamma$ besteht. Wie sieht der Zustandsvektor $|\varphi\rangle^{(1)} \in \mathscr{H}^{(1)}$ dieses reinen Zustandes aus?

(Hinweis: Beachte, dass alle physikalischen Aussagen über das Subsystem Spin (1), insbesondere die Erwartungswerte der durch die Operatoren $\mathbb{1}^{(1)}$, $S_x^{(1)}$, $S_y^{(1)}$ und $S_z^{(1)}$ repräsentierten Observablen, nicht von der gewählten Beschreibungsart abhängen dürfen.)

6.14 Ein Elektron befinde sich in einem Magnetfeld $\vec{B}$, welches durch sein Vektorpotential $\vec{A}$ gegeben sei.

(a) Wie lautet die zeitabhängige Schrödingergleichung für die zweikomponentige Zustandsfunktion $\widehat{\psi}(\vec{r},t)$ des Elektrons in der $\{\vec{r}\,m_s\}$-Darstellung?

(b) Zeige, dass für Magnetfelder $\vec{B}$, die nicht vom Ort abhängen, die Dynamik des Spins von der Dynamik der „Bahnbewegung“ durch den Ansatz

$$\widehat{\psi}(\vec{r},t) = \begin{bmatrix} \psi(\vec{r}+,t) \\ \psi(\vec{r}-,t) \end{bmatrix} = \phi(\vec{r},t)\,\widehat{\chi}(t)\,, \qquad \widehat{\chi}(t) = \begin{bmatrix} \chi(+,t) \\ \chi(-,t) \end{bmatrix}$$

separiert werden kann. Wie lauten die Bewegungsgleichungen („Schrödingergleichungen“) für die Zustandsfunktion $\phi(\vec{r},t)$ und den Spinor $\widehat{\chi}(t)$?

(Hinweis: Der bei der Durchführung der Separation auftretende zeitabhängige Separationsparameter kann ohne Einschränkung der Allgemeinheit identisch null gesetzt werden.)

6.15* Der Spin eines Elektrons stehe bei einem Experiment unter der Einwirkung eines physikalischen Apparates, der so konstruiert ist, dass der Spin-Hamiltonoperator H_{S} in der $\{m_s\}$-Darstellung durch

$$\langle +|\,H_{\mathrm{S}}\,|+\rangle = \langle -|\,H_{\mathrm{S}}\,|-\rangle = 0\,, \qquad \langle +|\,H_{\mathrm{S}}\,|-\rangle = \langle -|\,H_{\mathrm{S}}\,|+\rangle = \hbar\omega_0$$

gegeben ist (ω_0 positive reelle Konstante der Dimension $(\text{Zeit})^{-1}$; $|+\rangle$, $|-\rangle$ Eigenvektoren von S_z).

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich der Spin zum Zeitpunkt $t > 0$ im Zustand $|+\rangle$ befindet, wenn er sich zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ in diesem Zustand befand.

(b) Schreibe die stationären Zustände des Systems als Linearkombinationen der Vektoren $|+\rangle$, $|-\rangle$ an. Wie lauten die zugehörigen Energien?

(c) Zu jedem Zeitpunkt $t \geq 0$ gibt es eine Richtung $\vec{e}\,(t)$ im Raum, in Bezug auf welche der Spin im Zustand „auf“ ist. Bestimme diese Richtung.

(d) Überlege, welche Art von Experiment diesen Effekt ergibt, und schreibe den zugehörigen Hamiltonoperator H_{S} bzw. die Größe ω_0 an.

6.16* Der Spin eines Elektrons befinde sich in einem homogenen zeitlich konstanten Magnetfeld $\vec{B} = B\,\vec{e}_x$, $B > 0$. Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ gehöre er einer gemischten Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho(0) = |+\rangle\,\frac{1}{4}\,\langle +| + |-\rangle\,\frac{3}{4}\,\langle -|$$

an ($|+\rangle$, $|-\rangle$ Eigenvektoren von S_z).

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der z-Komponente des Spins zum Zeitpunkt $t \geq 0$ den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ findet.

(b) Berechne den Erwartungswert der z-Komponente des Spins für den Zeitpunkt $t \geq 0$.

6.17* Der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ eines Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens mit den räumlichen Freiheitsgraden ϑ, φ (ϑ, φ räumliche Polarwinkel) besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt in der $\{\vartheta\varphi m_s\}$-Darstellung die Form

$$\widehat{\psi}(\vartheta,\varphi) = \begin{bmatrix} \langle\,\vartheta\varphi+\,|\,\psi\,\rangle \\ \langle\,\vartheta\varphi-\,|\,\psi\,\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{00}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix}.$$

Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der x-Komponente des Spins den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ zu finden

(a) für den Fall, dass die Messung zum betreffenden Zeitpunkt (d.h. im „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$) durchgeführt wird;

(b) für den Fall, dass zum betreffenden Zeitpunkt (d.h. im „Zustand“ $|\,\psi\,\rangle$) eine Messung des Bahndrehimpulsquadrats durchgeführt wird, diese den Messwert $2\hbar^2$ ergibt, und unmittelbar darauf die x-Komponente des Spins gemessen wird.

(Anleitung: Verwende, dass die Entwicklung des Eigenvektors von S_x zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ im Basissystem der Eigenvektoren von S_z durch

$$|\,u_{+x}\,\rangle_{\mathrm{S}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,+\,\rangle_{\mathrm{S}} + |\,-\,\rangle_{\mathrm{S}}\big)$$

gegeben ist.[1])

(Hinweis: Hilfe zu Punkt (b) kann man in den Bemerkungen zu Aufgabe 3.26 finden.)

6.18 Schreibe die Spineigenvektoren $|\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,SM_S\,\rangle \equiv |\,SM_S\,\rangle$ eines Systems von zwei Spins $s = \frac{1}{2}$, welche gemeinsame Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z sind, im Basissystem der gemeinsamen Eigenvektoren

$$|\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,m_1m_2\,\rangle \equiv |\,m_1m_2\,\rangle = |\,m_1\,\rangle^{(1)}\,|\,m_2\,\rangle^{(2)}$$

von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ an.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

6.19 Schreibe die Spineigenvektoren $|\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,s_{12}\,SM_S\,\rangle \equiv |\,s_{12}\,SM_S\,\rangle$ eines Systems von drei Spins $s = \frac{1}{2}$, welche gemeinsame Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $(\vec{S}^{(3)})^2$, $(\vec{S}^{(12)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z sind, im Basissystem der gemeinsamen Eigenvektoren

$$|\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,m_1m_2m_3\,\rangle \equiv |\,m_1m_2m_3\,\rangle = |\,m_1\,\rangle^{(1)}\,|\,m_2\,\rangle^{(2)}\,|\,m_3\,\rangle^{(3)}$$

[1] Siehe dazu die Lösung (6.4-4) von Aufgabe 6.4.

von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $(\vec{S}^{(3)})^2$, $S_z^{(1)}$, $S_z^{(2)}$ und $S_z^{(3)}$ an.

($\vec{S}^{(12)} := \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ Spin-„Zwischensumme“, $\vec{S} := \vec{S}^{(12)} + \vec{S}^{(3)}$ Gesamtspin)

(Anleitung: Verwende die Lösung (6.18-2), (6.18-3) von Aufgabe 6.18 und die Tabelle A.7-1 bzw. A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

6.20 Der Hamiltonoperator eines Systems von zwei Spins $s = \frac{1}{2}$ sei durch

$$H_S = \frac{a}{\hbar}(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) + \frac{4b}{\hbar^2}\,\vec{S}^{(1)}\cdot\vec{S}^{(2)}$$

gegeben ($a, b \in \mathbb{R}^+$; $\vec{S}^{(1)}$, $\vec{S}^{(2)}$ Spinoperator zu Spin (1) bzw. zu Spin (2)). Berechne die Eigenwerte von H_S und schreibe die zugehörigen Eigenvektoren im Basissystem der Eigenvektoren $|\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,m_1 m_2\,\rangle \equiv |\,m_1 m_2\,\rangle = |\,m_1\,\rangle^{(1)}|\,m_2\,\rangle^{(2)}$ von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ an. Für welches Verhältnis a/b tritt Entartung auf?

6.21* Betrachtet wird ein Teilchen mit den drei räumlichen Freiheitsgraden $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$. Der unitäre Operator $D(\theta\vec{e})$, der im Zustandsraum $\mathscr{H}$ des Teilchens der Koordinatentransformation

$$\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r} := e^{\theta\vec{e}\,\times}\,\vec{r} \equiv \vec{r} + \frac{\theta}{1!}\,(\vec{e}\times\vec{r}) + \frac{\theta^2}{2!}\,[\vec{e}\times(\vec{e}\times\vec{r})] + \frac{\theta^3}{3!}\,\{\vec{e}\times[\vec{e}\times(\vec{e}\times\vec{r})]\} + \ldots$$

(Drehung des physikalischen Systems im $\mathbb{R}^3$ mit Drehachse $\vec{e}$ und Drehwinkel θ) zugeordnet ist, kann durch seine Wirkung im Basissystem der Eigenvektoren $|\,\vec{r}\,\rangle$ des Ortsoperators $\vec{R} = (X_1, X_2, X_3)$ gemäß

$$D(\theta\vec{e})\,|\,\vec{r}\,\rangle := |\,\mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}\,\rangle$$

definiert werden. $D(\theta\vec{e})$ wird als *Drehoperator* zur Drehung $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}$ bezeichnet.

(a) Betrachte zunächst eine infinitesimale Drehung $\vec{r}\,' = \mathscr{D}(d\theta\,\vec{e})\,\vec{r}$ und zeige ausgehend von der Definition des Drehoperators D und der Forderung der Unitarität von D, dass für eine derartige Drehung

$$D(d\theta\,\vec{e}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,d\theta\,\vec{L}\cdot\vec{e} \quad \text{mit} \quad L_j = \sum_{k,l=1}^{3} \epsilon_{jkl} X_k P_l\,, \quad j = 1,2,3$$

gilt ($\vec{L}$ Bahndrehimpulsoperator).

(b) Berechne aus dem Ergebnis von (a) den Drehoperator $D(\theta\vec{e})$ für einen endlichen Drehwinkel θ.

6.22 Im Spinhilbertraum eines Teilchens ist der Drehoperator $D(\theta\vec{e})$ zur Drehung $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}$ (s. Aufgabe 6.21) durch

$$D(\theta\vec{e}) = \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\theta\,\vec{S}\cdot\vec{e}\,\Big]$$

gegeben.

(a) Vereinfache diese Operatorfunktion von S_x, S_y und S_z für den Fall $s = \frac{1}{2}$ unter Verwendung der Eigenschaften des Spinoperators $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$.

(b) Benütze den unter (a) erhaltenen Ausdruck für die Berechnung der Drehmatrixelemente $D^{(1/2)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ (α, β, γ Eulerwinkel).

(Anleitung zu (b): Verwende Gl. (A.7-12), (A.7-13) von Anhang A.7.)

6.23 Berechne die in Aufgabe 3.3 gefragte Intensität speziell für die folgenden Feldgradientenrichtungen der modifizierten Stern-Gerlach-Apparate S und T (y-Richtung $\equiv$ Strahlrichtung):

S: Feldgradientenrichtung $\equiv$ positive z-Richtung;

T: Feldgradientenrichtung halbiert den Winkel zwischen positiver z-Richtung und positiver x-Richtung.

(Anleitung: Beachte die übliche Definition der Eulerwinkel [s. Anhang A.11] und verwende die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1/2)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-53).)

6.24 Berechne die in den Aufgaben 3.4 bis 3.7 gefragten Intensitäten speziell für die folgenden Feldgradientenrichtungen der modifizierten Stern-Gerlach-Apparate S und T (y-Richtung $\equiv$ Strahlrichtung):

S: Feldgradientenrichtung $\equiv$ positive z-Richtung;

T: Feldgradientenrichtung halbiert den Winkel zwischen positiver z-Richtung und positiver x-Richtung.

(Anleitung: Beachte die übliche Definition der Eulerwinkel [s. Anhang A.11] und verwende die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-54).)

6.25 Berechne die in den Aufgaben 3.8 und 3.9 gefragten Größen speziell für die folgenden Feldgradientenrichtungen der modifizierten Stern-Gerlach-Apparate S, T und R (y-Richtung $\equiv$ Strahlrichtung):

S: Feldgradientenrichtung $\equiv$ positive z-Richtung;

T: Feldgradientenrichtung halbiert den Winkel zwischen positiver z-Richtung und positiver x-Richtung;

R: Feldgradientenrichtung $\equiv$ positive x-Richtung.

(Anleitung: Beachte die übliche Definition der Eulerwinkel [s. Anhang A.11] und verwende die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-54).)

6.26 Ein System mit einem Spin $s_1 = 1$ und einem Spin $s_2 = \frac{1}{2}$ befinde sich zu einem bestimmten Zeitpunkt im Gesamtspin-Eigenzustand

$$|\,\chi\,\rangle = |\,1\,\tfrac{1}{2}\,SM_S\,\rangle \equiv |\,SM_S\,\rangle$$

mit den Quantenzahlen $S = \frac{3}{2}$, $M_S = \frac{1}{2}$ ($|\,\chi\,\rangle$ gemeinsamer Eigenvektor von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z). Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der x-Komponenten der beiden Spins zum betreffenden Zeitpunkt das Messwertpaar $\{+\hbar, +\frac{\hbar}{2}\}$ erhält.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-1 bzw. A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sowie die Drehmatrizen $\widehat{D}^{(1/2)}$, $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-53), (A.2-54).)

6.27 Beweise mithilfe der fundamentalen Vertauschungsbeziehungen

$$[X_j, P_k] = i\hbar\,\delta_{jk}\mathbb{1}\,,$$

(a) dass die Operatoren

$$R^{(1)}_{\pm 1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\,(X_1 \pm iX_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{1,\pm 1}(\Theta,\Phi)\,,$$
$$R^{(1)}_{0} = X_3 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{10}(\Theta,\Phi)$$

mit den Komponenten des Bahndrehimpulsoperators $\vec{L}$ die Vertauschungsbeziehungen ($L_\pm := L_1 \pm iL_2$)

$$[L_\pm, R^{(1)}_q] = \sqrt{(1 \mp q)(2 \pm q)}\,\hbar R^{(1)}_{q\pm 1}\,, \qquad [L_3, R^{(1)}_q] = q\hbar R^{(1)}_q\,, \qquad q = 0, \pm 1$$

erfüllen und somit die sphärischen Standardkomponenten eines Vektoroperators $\vec{R}$ (eines irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{R}^{(1)}$ vom Rang 1) in Bezug auf den Bahndrehimpuls $\vec{L}$ bilden;

(b) dass $\vec{R}^2 := X_1^2 + X_2^2 + X_3^2$ ein drehinvarianter Operator in Bezug auf den Bahndrehimpuls $\vec{L}$ ist, d. h. dass $[L_j, \vec{R}^2] = \mathbb{0}$, $j = 1, 2, 3$, gilt.

(Anleitung: Siehe die Abschnitte über *drehinvariante Operatoren* und *Vektoroperatoren* in Anhang A.7.)

6.28 Im Zustandsraum eines Teilchens mit drei räumlichen Freiheitsgraden $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ seien Zustände $|\,nlm\,\rangle$ gegeben, für welche die zugehörigen Funktionen in der Ortsdarstellung die Form

$$u_{nlm}(\vec{r}) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,nlm\,\rangle = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\Omega)$$

besitzen (l, m Quantenzahlen zu $\vec{L}^2$ und L_z).

(a) Berechne das reduzierte Matrixelement $\langle\, n'l' \,\|\, \mathsf{R}^{(1)} \,\|\, nl \,\rangle$ des Ortsoperators $\vec{R}$, d. h. des irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{R}^{(1)}$ mit den sphärischen Standardkomponenten

$$R_q^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, R\, Y_{1q}(\Theta, \Phi)\,, \qquad q = 0, \pm 1\,.$$

(b) Welche Beziehung muss zwischen l' und l bestehen, damit das reduzierte Matrixelement von null verschieden sein kann? („Auswahlregel“ bezüglich l)

(Anleitung: Verwende die Clebsch-Gordan-Reihe Anhang A.2, Gl. (A.2-11). Beachte die Symmetriebeziehung Anhang A.7, Gl.(A.7-32a) für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

6.29 Beweise die folgende Aussage: Ist $\mathsf{T}^{(2)}$ ein irreduzibler Tensoroperator vom Rang 2 in Bezug auf den Drehimpuls $\vec{J}$, und ist $\{|\, \tau jm \,\rangle\}$ eine Standardbasis (j, m Quantenzahlen zu $\vec{J}^2$ und J_z), so ist der Erwartungswert zur sphärischen Komponente $T_0^{(2)}$ in einem Zustand $|\, \tau jm \,\rangle$ mit $j = 0$ oder $j = \frac{1}{2}$ null.

6.30 Berechne das reduzierte Matrixelement $\langle\, \tau' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \tau j \,\rangle$ des Drehimpulsoperators $\vec{J}$ in einer Standardbasis $\{|\, \tau jm \,\rangle\}$ (j, m Quantenzahlen zu $\vec{J}^2$ und J_z).

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-2 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

6.31* Beweise das folgende Theorem: Ist $\vec{A}$ Vektoroperator in Bezug auf den Drehimpuls $\vec{J}$, so gilt in einer Standardbasis $\{|\, \tau jm \,\rangle\}$ (j, m Quantenzahlen zu $\vec{J}^2$ und J_z)

$$\langle\, \tau jm \,|\, A_z \,|\, \tau jm \,\rangle \;=\; \frac{m\hbar}{j(j+1)\hbar^2}\, \langle\, \tau jm \,|\, \vec{J}\cdot\vec{A} \,|\, \tau jm \,\rangle\,.$$

(Anleitung: Schreibe das innere Produkt $\vec{J}\cdot\vec{A}$ mithilfe der sphärischen Komponenten von $\vec{J}$ und $\vec{A}$ an. Beachte die Tabelle A.7-2 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

6.32 Die Vektoren $|\, \gamma j_1 j_2 jm \,\rangle$ seien gemeinsame Eigenvektoren der Operatoren $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$, $\vec{J}^2$ und J_z (Standardbasis in Bezug auf $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$).

(a) Zeige, dass die Operatoren $\vec{A} := g_1\vec{J}^{(1)} + g_2\vec{J}^{(2)}$ und $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$ für beliebiges $g_1, g_2 \in \mathbb{R}$ in den Teilräumen zu jeweils festem γ, j_1, j_2 und j durch Matrizen repräsentiert werden, welche proportional sind.

(b)* Berechne den Proportionalitätsfaktor für gegebenes $g_1, g_2, \gamma, j_1, j_2$ und j.

(Anleitung: Verwende das Wigner-Eckart-Theorem sowie die in Aufgabe 6.31 bewiesene Formel.)

Lösungen

6.1

$$[J_x, A] = \mathbb{0}\,, \quad [J_y, A] = \mathbb{0} \quad \Rightarrow \quad [\underbrace{[J_x, J_y]}_{i\hbar J_z}, A] = \mathbb{0}\,, \quad [J_z, A] = \mathbb{0}\,.$$

6.2

(a)

$$(\Delta J_x)^2 = \langle\, J_x^2 \,\rangle - \langle\, J_x \,\rangle^2\,, \qquad (\Delta J_y)^2 = \langle\, J_y^2 \,\rangle - \langle\, J_y \,\rangle^2\,. \tag{6.2-1}$$

Nach Anhang A.7, Gl. (A.7-4), (A.7-5) gilt

$$\langle\, \tau jm \,|\, J_\pm \,|\, \tau jm \,\rangle = 0\,, \quad \langle\, \tau jm \,|\, (J_\pm)^2 \,|\, \tau jm \,\rangle = \langle\, \tau jm \,|\, (J_\mp)^\dagger J_\pm \,|\, \tau jm \,\rangle = 0 \tag{6.2-2}$$

und daraus folgt für einen Eigenzustand $|\, \tau jm \,\rangle$ von $\vec{J}^2$ und J_z

$$\langle\, J_x \,\rangle = \langle\, J_y \,\rangle = 0\,, \tag{6.2-3}$$

$$\langle\, J_x^2 \,\rangle = \langle\, J_y^2 \,\rangle = \frac{1}{4}\langle\, J_+J_- + J_-J_+ \,\rangle = \frac{1}{2}\langle\, \vec{J}^2 - J_z^2 \,\rangle = \frac{1}{2}\big[j(j+1) - m^2\big]\hbar^2. \tag{6.2-4}$$

Somit gilt in einem Zustand $|\, \tau jm \,\rangle$

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \sqrt{\frac{j(j+1) - m^2}{2}}\ \hbar\,. \tag{6.2-5}$$

Der kleinste Wert dieses Ausdrucks für gegebenes j liegt für $m = \pm j$ vor. Die Unbestimmtheit von $\mathcal{J}_x$ und $\mathcal{J}_y$ besitzt also ihren kleinsten Wert in den Zuständen $|\, \tau\, j, \pm j \,\rangle$, und dieser Wert ist durch

$$(\Delta J_x)_{\min} = (\Delta J_y)_{\min} = \sqrt{\frac{j}{2}}\ \hbar \tag{6.2-6}$$

gegeben.

(b) *Behauptung:*

$$\Delta J_k = 0,\ \ k = 1,2,3,\ \text{im Zustand } |\, \psi \,\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad |\, \psi \,\rangle = \sum_\tau c_\tau\, |\, \tau\, 0\, 0 \,\rangle\,. \tag{6.2-7}$$

Beweis, dass die angegebene Form von $|\, \psi \,\rangle$ *notwendig* ist:
Zunächst einmal gilt (s. Aufgabe 1.30)

$$\Delta J_k = 0,\ \ k = 1,2,3,\ \text{im Zustand } |\, \psi \,\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad J_k\, |\, \psi \,\rangle = \alpha_k\, |\, \psi \,\rangle\,,\ \ k = 1,2,3.$$

Damit folgt aber

$$\underbrace{[J_j, J_k]}_{i\hbar J_l}\, |\, \psi \,\rangle = \underbrace{(\alpha_j\alpha_k - \alpha_k\alpha_j)}_{0}\, |\, \psi \,\rangle = \emptyset\,, \quad (j,k,l) = (1,2,3),\ (2,3,1),\ (3,1,2)$$

$$\Rightarrow \quad J_l\, |\, \psi \,\rangle = \emptyset\,,\ \ l = 1,2,3 \quad \Rightarrow \quad \vec{J}^2\, |\, \psi \,\rangle = \emptyset \quad \Rightarrow \quad |\, \psi \,\rangle = \sum_\tau c_\tau\, |\, \tau\, 0\, 0 \,\rangle\,.$$

Beweis, dass die angegebene Form von $|\,\psi\,\rangle$ *hinreichend* ist:

$$|\,\psi\,\rangle = \sum_\tau c_\tau\,|\,\tau\,0\,0\,\rangle \quad \Rightarrow \quad J_3\,|\,\psi\,\rangle = \emptyset\,, \quad J_\pm\,|\,\psi\,\rangle = \emptyset \quad \Rightarrow$$
$$J_k\,|\,\psi\,\rangle = \emptyset\,, \quad k = 1,2,3 \quad \Rightarrow \quad \Delta J_k = 0\,, \quad k = 1,2,3.$$

Bemerkungen

Wie viele linear unabhängige Zustände der Form (6.2-7) es gibt, hängt vom betrachteten System ab. Handelt es sich beispielsweise um einen Rotator im Raum (s. Aufgabe 2.24), so gibt es nur einen einzigen derartigen Zustand, nämlich $|\,l = 0, m_l = 0\,\rangle$ (s. Gl. (2.24-1)). Handelt es sich hingegen um ein spinloses Teilchen in einem sphärisch symmetrischen harmonischen Oszillatorpotential (s. Gl. (A.4-24) bis (A.4-26) von Anhang A.4), so gibt es abzählbar unendlich viele linear unabhängige Zustände, in denen die Observablen $\mathcal{L}_x$, $\mathcal{L}_y$ und $\mathcal{L}_z$ zugleich „scharfe Werte“ besitzen, nämlich die Zustände $|\,n, l = 0, m_l = 0\,\rangle$, $n = 0, 2, 4, \ldots$ Was es wegen der Unverträglichkeit der Drehimpulskomponenten *nicht* geben kann, ist ein *vollständiges* System gemeinsamer Eigenvektoren. (Die s-Zustände $|\,n\,0\,0\,\rangle$, $n = 0, 2, 4, \ldots$ des angeführten Beispiels bilden *kein* Basissystem im Zustandsraum.)

6.3 Die benötigten Wahrscheinlichkeitsamplituden („Überlappungsintegrale“) kann man besonders einfach berechnen, wenn man beachtet, dass sich die Zustandsfunktion $\psi(\vartheta, \varphi)$ wegen (A.2-13) als Linearkombination von Kugelflächenfunktionen $Y_{1m}(\vartheta, \varphi)$ schreiben lässt. Man findet auf diese Weise für den Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$:

$$|\,\psi\,\rangle = N\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left\{-\frac{1-i}{2}\,|\,1\,1\,\rangle + \sqrt{\frac{3}{2}}\,|\,1\,0\,\rangle + \frac{1+i}{2}\,|\,1,-1\,\rangle\right\}, \tag{6.3-1a}$$

$$\psi(\vartheta,\varphi) \equiv \langle\,\vartheta\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle\,, \qquad Y_{1m}(\vartheta,\varphi) \equiv \langle\,\vartheta\,\varphi\,|\,1m\,\rangle\,, \quad m = 0, \pm 1\,; \tag{6.3-1b}$$

Normierung von $|\,\psi\,\rangle$:

$$\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = |N|^2\,\frac{8\pi}{3}\left\{\frac{1}{2} + \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\right\} = 1 \quad \Rightarrow$$
$$|N|\sqrt{\frac{8\pi}{3}} = N\sqrt{\frac{8\pi}{3}} = \sqrt{\frac{2}{5}} \quad (N \text{ positiv reell gewählt}). \tag{6.3-2}$$

Auf eins normierter Zustandsvektor:

$$|\,\psi\,\rangle = -\frac{1-i}{\sqrt{10}}\,|\,1\,1\,\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\,|\,1\,0\,\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{10}}\,|\,1,-1\,\rangle\,. \tag{6.3-3}$$

(a) Da $|\,\psi\,\rangle$ eine Linearkombination von Drehimpulseigenzuständen mit $l = 1$ ist, wird der Messwert $l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ bei einer Messung des Drehimpulsquadrats mit der Wahrscheinlichkeit eins gefunden. Mathematisch können wir dies folgendermaßen

ausdrücken (beachte, dass $\langle\, lm \,|\, \psi \,\rangle$ für $l \neq 1$ null ist):

$$W(\{2\hbar^2\}) \;=\; \sum_{m=-1}^{+1} |\langle\, 1m \,|\, \psi \,\rangle|^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} |\langle\, lm \,|\, \psi \,\rangle|^2 = \langle\, \psi \,|\, \psi \,\rangle \;=\; 1\,. \tag{6.3-4}$$

(b)

$$W(\{2\hbar^2, 0\}) \;=\; |\langle\, 1\,0 \,|\, \psi \,\rangle|^2 = \frac{3}{5}\,. \tag{6.3-5}$$

6.4 In der $\{m_s\}$-Darstellung gilt (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-10a))

$$|+\rangle \equiv |\, u_{+z} \,\rangle \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{u}_{+z} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad |-\rangle \equiv |\, u_{-z} \,\rangle \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{u}_{-z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{6.4-1}$$

und (s. (A.7-6), (A.7-10b)) $\sigma_j \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\sigma}_j$ mit

$$\widehat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{6.4-2}$$

Eine Möglichkeit, die Eigenvektoren von S_x bzw. S_y als Linearkombinationen der Vektoren $|+\rangle$, $|-\rangle$ zu finden, ist das Lösen des Eigenwertproblems der Paulimatrizen $\widehat{\sigma}_x$, $\widehat{\sigma}_y$. Beide Matrizen besitzen (ebenso wie $\widehat{\sigma}_z$) die Eigenwerte $\lambda_{1,2} = \pm 1$, da die Säkulargleichung jeweils $\lambda^2 - 1 = 0$ lautet. (Siehe dazu die Aufgabe 1.17(a2).) Bezeichne ich die entsprechenden Eigenvektoren von S_x mit $|\, u_{\pm x} \,\rangle$ und jene von S_y mit $|\, u_{\pm y} \,\rangle$, so folgt in der $\{m_s\}$-Darstellung

$$\widehat{\sigma}_x\, \widehat{u}_{\pm x} = \pm \widehat{u}_{\pm x}\,, \qquad \widehat{\sigma}_y\, \widehat{u}_{\pm y} = \pm \widehat{u}_{\pm y} \quad \Rightarrow \tag{6.4-3a}$$

$$\widehat{u}_{\pm x} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{i\alpha_\pm} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{u}_{\pm y} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\, e^{i\beta_\pm} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i \end{bmatrix}. \tag{6.4-3b}$$

Mit (6.4-1) gibt dies

$$|\, u_{\pm x} \,\rangle = e^{i\alpha_\pm}\, \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle \pm |-\rangle \Big)\,, \qquad |\, u_{\pm y} \,\rangle = e^{i\beta_\pm}\, \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle \pm i\, |-\rangle \Big)\,. \tag{6.4-4}$$

Die Phasenfaktoren bleiben dabei unbestimmt.

Bemerkungen

Eine *andere* Möglichkeit, die Eigenvektoren von S_x und S_y zu bestimmen, bietet das Transformationsgesetz der Drehimpuls-Eigenvektoren bei räumlichen Drehungen.

Für die spezielle Drehung von Abb. 6.4-1, bei der die z'-Achse (wie gewünscht) mit der x-Achse zusammenfällt und bei der $y' = y$ gilt, hat man die Eulerwinkel $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = \pi/2$

(s. Anhang A.11), und aus Gl. (A.7-14) folgt mit der Drehmatrix (A.2-53) für die Eigenvektoren von $S_x = S_{z'}$

$$|\,u_{+x}\,\rangle = |+\rangle' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right), \qquad |\,u_{-x}\,\rangle = |-\rangle' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-|+\rangle + |-\rangle\right). \tag{6.4-5}$$

Die Phasenfaktoren $e^{i\alpha_+} = 1$, $e^{i\alpha_-} = -1$ entsprechen einer Standardbasis für die spezielle Lage des $x'y'z'$-Systems. Für andere Lagen der y'-Achse in der Ebene senkrecht zur x-Achse ergeben sich andere Phasenfaktoren.

Analog folgt für die Drehung von Abb. 6.4-2, bei der die z'-Achse mit der y-Achse zusammenfällt und außerdem $y' = -x$ gilt, aus (A.7-14) und (A.2-53) wegen $\alpha = \beta = \pi/2$ (s. Gl. (A.11-2)) und $\gamma = 0$ für die Eigenvektoren von $S_y = S_{z'}$

$$|\,u_{+y}\,\rangle = |+\rangle' = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle + i\,|-\rangle\Big), \qquad |\,u_{-y}\,\rangle = |-\rangle' = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}\Big(-|+\rangle + i\,|-\rangle\Big). \tag{6.4-6}$$

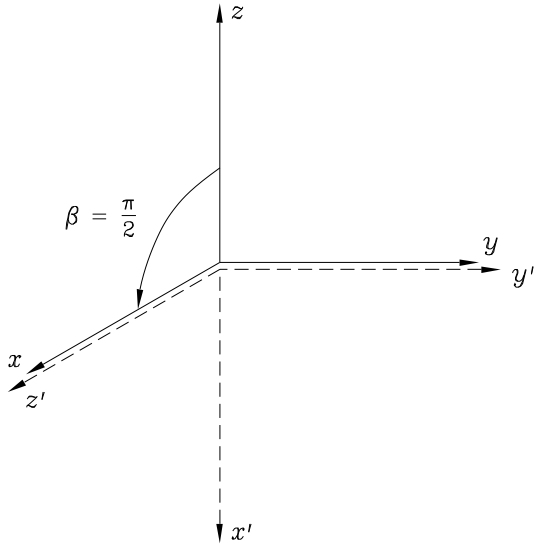


Abb. 6.4-1: Drehung mit den Eulerwinkeln $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = \pi/2$

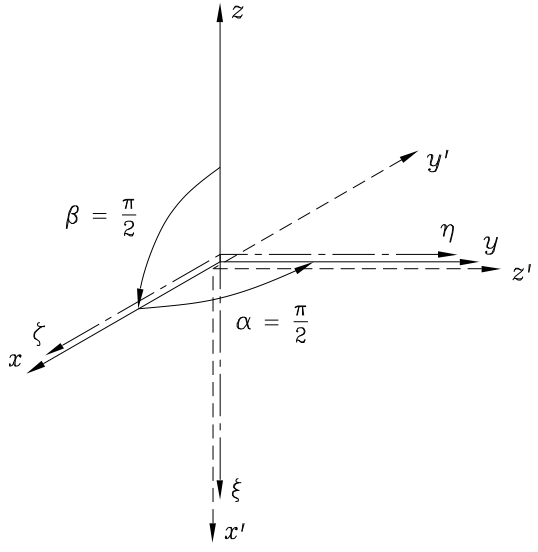


Abb. 6.4-2: Drehung mit den Eulerwinkeln $\alpha = \beta = \pi/2$, $\gamma = 0$

6.5* *Lösungsweg 1:* Die Spinprojektion bzgl. der Richtung $\vec{e} = (e_x, e_y, e_z)$, $|\vec{e}| = 1$, besitzt im Zustand

$$|\,\chi\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|+\rangle + \frac{1+i}{2}\,|-\rangle \tag{6.5-1}$$

dann und nur dann einen „scharfen Wert“ (d. h. die Unschärfe null), wenn $|\,\chi\,\rangle$ Eigenvektor

des Operators $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ ist (s. Aufgabe 1.30). Da (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-9b))

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{e})^2 = \sum_{j,k=1}^{3} \sigma_j\sigma_k e_j e_k = \sum_{j=1}^{3} \overbrace{\sigma_j^2}^{\mathbb{1}} e_j^2 + \underbrace{\sum_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{3} \overbrace{\sigma_j\sigma_k}^{-\sigma_k\sigma_j}\, \overbrace{e_j e_k}^{e_k e_j}}_{\mathbb{0}} = \mathbb{1}\sum_{j=1}^{3} e_j^2 = \mathbb{1} \tag{6.5-2a}$$

und

$$\mathrm{Sp}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{e}) = \sum_{j=1}^{3} \overbrace{\mathrm{Sp}\,(\sigma_j)}^{0} e_j = 0 \tag{6.5-2b}$$

gilt, und der Operator $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ selbstadjungiert ist, besitzt er wie die Operatoren $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (siehe die Lösung von Aufgabe 6.4) die Eigenwerte $\lambda_{1,2} = \pm 1$. (Diese Aussage erhält man auch durch Lösen der Säkulargleichung der Matrix (6.7-5).) Mit Gl. (A.7-6) bis (A.7-8) folgt

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,|+\rangle &= \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-)\,e_x\,|+\rangle + \frac{1}{2i}(\sigma_+ - \sigma_-)\,e_y\,|+\rangle + \sigma_z e_z\,|+\rangle \\ &= (e_x + ie_y)\,|-\rangle + e_z\,|+\rangle \end{aligned} \tag{6.5-3a}$$

und analog

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,|-\rangle = (e_x - ie_y)\,|+\rangle - e_z\,|-\rangle\,. \tag{6.5-3b}$$

Einsetzen von (6.5-1) in die Bestimmungsgleichung für $\vec{e}$,

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,|\,\chi\,\rangle = \pm\,|\,\chi\,\rangle\,, \tag{6.5-4}$$

liefert

$$\begin{aligned} \left[\frac{1+i}{2}(e_x - ie_y) + \frac{1}{\sqrt{2}}e_z\right]|+\rangle + \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y) - \frac{1+i}{2}e_z\right]|-\rangle \\ = \pm\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,|+\rangle + \frac{1+i}{2}\,|-\rangle\right]. \end{aligned} \tag{6.5-5}$$

Koeffizientenvergleich bei den (orthogonalen und daher linear unabhängigen) Vektoren $|+\rangle$, $|-\rangle$, und darauf folgende Zerlegung in Real- und Imaginärteile gibt die folgenden Bestimmungsgleichungen für e_x, e_y, e_z:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}e_x + \frac{1}{\sqrt{2}}e_y + e_z &= \pm 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e_x - \frac{1}{\sqrt{2}}e_y &= 0 \\ \sqrt{2}\,e_x - e_z &= \pm 1 \\ \sqrt{2}\,e_y - e_z &= \pm 1 \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad e_x = e_y = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\,,\quad e_z = 0\,,$$

also

$$\vec{e} = \pm\left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}, \tfrac{1}{\sqrt{2}}, 0\right). \tag{6.5-6}$$

Lösungsweg 2: Aus der Forderung $\Delta(\vec{\sigma}\cdot\vec{e}) = 0$ folgt wegen (6.5-2a) die Gleichung $\langle\,\chi\,|\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,|\,\chi\,\rangle = \pm 1$. Bildung des inneren Produkts von $|\,\chi\,\rangle$ Gl. (6.5-1) mit dem bereits berechneten Vektor $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,|\,\chi\,\rangle$ (s. die linke Seite von Gl. (6.5-5)) liefert dann als Bestimmungsgleichung für $\vec{e}$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,e_x + \frac{1}{\sqrt{2}}\,e_y = \pm 1\,. \tag{6.5-7}$$

Quadriert man (6.5-7) und zieht man die so erhaltene Gleichung von $e_x^2 + e_y^2 + e_z^2 = 1$ ab, so ergibt sich

$$\frac{1}{2}\,(e_x - e_y)^2 + e_z^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad e_x = e_y\,, \quad e_z = 0\,. \tag{6.5-8}$$

Mit (6.5-7) folgt dann sofort wieder $\vec{e} = \pm(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)$.

6.6 Wegen

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \tag{6.6-1}$$

muss die Unbestimmtheitsbeziehung für S_x und S_y

$$\Delta S_x \cdot \Delta S_y \geq \frac{\hbar}{2}\,|\langle\,S_z\,\rangle| \tag{6.6-2}$$

lauten (s. (3.25-4)).

In einem Eigenzustand von S_z ist gemäß Gl. (6.2-5)

$$\Delta S_x = \Delta S_y = \frac{\hbar}{2} \tag{6.6-3}$$

und wegen

$$|\langle\,S_z\,\rangle| = |\langle\pm|\,S_z\,|\pm\rangle| = \frac{\hbar}{2} \tag{6.6-4}$$

gilt in der Unbestimmtheitsbeziehung (6.6-2) das Gleichheitszeichen.

In einem Eigenzustand von S_x hat man (s. die Lösung von Aufgabe 6.2; man muss dort lediglich die Bezeichnungen zyklisch vertauschen: $z \to x$, $x \to y$, $y \to z$)

$$\Delta S_x = 0\,, \quad \Delta S_y = \frac{\hbar}{2}\,, \quad \langle\,S_z\,\rangle = 0\,, \tag{6.6-5}$$

und in (6.6-2) trifft wieder das Gleichheitszeichen zu. Eine analoge Aussage kann man für einen Eigenzustand von S_y machen, da dann

$$\Delta S_x = \frac{\hbar}{2}\,, \quad \Delta S_y = 0\,, \quad \langle\,S_z\,\rangle = 0 \tag{6.6-6}$$

gilt.

6.7 *Lösungsweg 1:* Mit dem Richtungsvektor

$$\vec{e} = (e_x, e_y, e_z) = (\sin\vartheta\cos\varphi,\ \sin\vartheta\sin\varphi,\ \cos\vartheta) \tag{6.7-1}$$

und Gl. (6.5-3a) folgt für den Erwartungswert der vom Operator $S_{z'} := \vec{S}\cdot\vec{e} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ repräsentierten Observablen $\mathcal{S}_{z'}$ im Zustand $|+\rangle \equiv |\,u_{+z}\,\rangle$

$$\langle\, S_{z'}\,\rangle = \langle +|\,\vec{S}\cdot\vec{e}\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,e_z = \frac{\hbar}{2}\cos\vartheta\,. \tag{6.7-2}$$

Der Operator $S_{z'} = \vec{S}\cdot\vec{e}$ besitzt wie der Operator S_z die Eigenwerte $\pm\frac{\hbar}{2}$ (s. die Lösung von Aufgabe 6.5). Bezeichne ich die Eigenvektoren von $\vec{S}\cdot\vec{e}$ zu den Eigenwerten $\pm\frac{\hbar}{2}$ mit $|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle$, so gilt also

$$\vec{S}\cdot\vec{e}\,|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\,|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle\,. \tag{6.7-3}$$

Gesucht sind die Wahrscheinlichkeiten

$$W_{\pm\vec{e}} = |\langle\, u_{\pm\vec{e}}\,|+\rangle|^2\,. \tag{6.7-4}$$

Man kann diese Wahrscheinlichkeiten finden, indem man die Eigenvektoren $|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle$ in der $\{m_s\}$-Darstellung bestimmt, d. h. das Eigenwertproblem der Matrix (s. Gl. (A.7-10b) von Anhang A.7) ($e_\pm := e_x \pm i e_y$)

$$\vec{S}\cdot\vec{e} \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\vec{S}\cdot\vec{e}} = \tfrac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} e_z & e_- \\ e_+ & -e_z \end{bmatrix} = \tfrac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta\,e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta\,e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{bmatrix} \tag{6.7-5}$$

löst. (Der Leser führe diese Rechnung selbständig durch.) Man kann die Berechnung der Eigenvektoren $|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle$ aber auch umgehen, da man unmittelbar zwei Bestimmungsgleichungen für $W_{+\vec{e}}$, $W_{-\vec{e}}$ angeben kann. Aus der Spektraldarstellung von $\vec{S}\cdot\vec{e}$,

$$\vec{S}\cdot\vec{e} = \frac{\hbar}{2}\Big[\,|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{+\vec{e}}\,| - |\,u_{-\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{-\vec{e}}\,|\Big]\,, \tag{6.7-6}$$

und der Vollständigkeitsbeziehung

$$\mathbb{1} = |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{+\vec{e}}\,| + |\,u_{-\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{-\vec{e}}\,| \tag{6.7-7}$$

ergeben sich durch Bilden des Erwartungswertes bzgl. des Zustandes $|+\rangle$ die Gleichungen

$$\langle +|\,\vec{S}\cdot\vec{e}\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\Big[W_{+\vec{e}} - W_{-\vec{e}}\Big] = \frac{\hbar}{2}\cos\vartheta\,, \tag{6.7-8}$$

$$\langle +|+\rangle \quad = \quad W_{+\vec{e}} + W_{-\vec{e}} \quad = 1 \tag{6.7-9}$$

mit der Lösung

$$W_{+\vec{e}} = \frac{1}{2}\Big(1+\cos\vartheta\Big) = \cos^2\frac{\vartheta}{2}\,, \tag{6.7-10}$$

$$W_{-\vec{e}} = \frac{1}{2}\Big(1-\cos\vartheta\Big) = \sin^2\frac{\vartheta}{2}\,. \tag{6.7-11}$$

Wie zu erwarten war, hängen diese Wahrscheinlichkeiten nicht vom Winkel φ ab.

Lösungsweg 2: Aufgrund des Transformationsverhaltens von Vektoroperatoren und Drehimpuls-Eigenvektoren bei räumlichen Drehungen (s. Anhang A.7, insbesondere Gl. (A.7-18) und (A.7-14)) erhält man für die Eigenvektoren

$$|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle \equiv |\pm\rangle' \equiv D(\alpha\beta\gamma)\,|\pm\rangle \tag{6.7-12}$$

des Operators $\vec{S}\cdot\vec{e} \equiv S_{z'} \equiv D(\alpha\beta\gamma)\,S_z\,D^\dagger(\alpha\beta\gamma)$ ($\alpha=\varphi$, $\beta=\vartheta$ Polarwinkel der Richtung $\vec{e}$, γ beliebig; s. Anhang A.11) mit der Drehmatrix (A.2-53)

$$|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle = e^{-i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2}\,|+\rangle + e^{i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2}\,|-\rangle\,, \tag{6.7-13}$$

$$|\,u_{-\vec{e}}\,\rangle = -e^{-i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2}\,e^{i\gamma/2}\,|+\rangle + e^{i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2}\,e^{i\gamma/2}\,|-\rangle\,. \tag{6.7-14}$$

Wegen $\beta=\vartheta$ folgt für (6.7-4) sofort wieder (6.7-10) bzw. (6.7-11). Den Erwartungswert zum Operator $\vec{S}\cdot\vec{e} = S_{z'}$ im Zustand $|+\rangle$ berechnet man dann am zweckmäßigsten mithilfe der Formel

$$\langle+|\,\vec{S}\cdot\vec{e}\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,[W_{+\vec{e}} - W_{-\vec{e}}]\,.$$

Bemerkungen

Die Möglichkeit, die Wahrscheinlichkeiten $W_i = \langle\,\psi\,|\,P_i\,|\,\psi\,\rangle$ für die Messwerte a_i einer Observablen $\mathcal{A}$ aus dem Erwartungswert von $\mathcal{A}$ und der Beziehung, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit eins ist, d. h. aus

$$\langle\,\psi\,|\,A\,|\,\psi\,\rangle = \sum_i a_i W_i = \langle\,A\,\rangle \quad \text{und} \quad \langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = \sum_i W_i = 1$$

zu berechnen, besteht immer dann, wenn es nur zwei Eigenwerte gibt. Bei mehr als zwei Eigenwerten ist die Bestimmung der Eigenvektoren von A nicht zu umgehen.

6.8 Ich drücke die Operatoren $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ und $\mathbb{1}$ durch die Eigenvektoren $|\,u_{\pm\vec{e}}\,\rangle$ von $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ aus (s. Gl. (6.7-6) und (6.7-7)):

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{e} = |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{+\vec{e}}\,| - |\,u_{-\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{-\vec{e}}\,|\,, \tag{6.8-1}$$

$$\mathbb{1} = |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{+\vec{e}}\,| + |\,u_{-\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{-\vec{e}}\,| \tag{6.8-2}$$

$$\Rightarrow \quad \rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{\sigma}\cdot\vec{e}\right) = |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle\langle\,u_{+\vec{e}}\,|\,. \tag{6.8-3}$$

(a) ρ ist ein Projektionsoperator ($\rho^\dagger=\rho$, $\rho^2=\rho$) mit der Spur eins, besitzt also alle Eigenschaften eines Dichteoperators einer reinen Gesamtheit.

(b)* ρ beschreibt eine reine Gesamtheit mit dem Zustandsvektor $|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle$, d. h. eine reine Gesamtheit mit „Spin auf“ in Bezug auf die Richtung $\vec{e}$.

6.9 *Nein.* Nach Gl. (6.4-4) gilt in den reinen Zuständen $|\pm\rangle$

$$W_{+x}(\pm) = |\langle u_{+x}|\pm\rangle|^2 = \frac{1}{2}\,. \tag{6.9-1}$$

(Dieses Ergebnis folgt auch aus Gl. (6.7-10), (6.7-11) mit $\vec{e} = \vec{e}_x$, also $\vartheta = \frac{\pi}{2}$.) Mittelung *gleicher* Wahrscheinlichkeiten gibt aber bei beliebigen statistischen Gewichten wieder dieselbe Wahrscheinlichkeit für das Gemisch:

$$W_{+x} = p\,W_{+x}(+) + (1-p)\underbrace{W_{+x}(-)}_{W_{+x}(+)} = W_{+x}(+) = \frac{1}{2}\,. \tag{6.9-2}$$

6.10 *Lösungsweg 1:* Mit den Eigenvektoren $|u_{\pm\vec{e}}\rangle$ von $\vec{S}\cdot\vec{e} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}$ zu den Eigenwerten $\pm\frac{\hbar}{2}$ und den entsprechenden Projektionsoperatoren

$$P_{\pm\vec{e}} := |u_{\pm\vec{e}}\rangle\langle u_{\pm\vec{e}}| \tag{6.10-1}$$

gelten die Operatorgleichungen

$$\left.\begin{aligned}\vec{\sigma}\cdot\vec{e} &= P_{+\vec{e}} - P_{-\vec{e}}\\ \mathbb{1} &= P_{+\vec{e}} + P_{-\vec{e}}\end{aligned}\right\} \quad\Longleftrightarrow\quad P_{\pm\vec{e}} = \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} \pm \vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\right]. \tag{6.10-2}$$

Durch Erwartungswertbildung erhält man daraus die Gleichungen

$$\left.\begin{aligned}\langle\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\rangle &= W_{+\vec{e}} - W_{-\vec{e}}\\ 1 &= W_{+\vec{e}} + W_{-\vec{e}}\end{aligned}\right\} \quad\Longleftrightarrow\quad W_{\pm\vec{e}} = \frac{1}{2}\left[1 \pm \langle\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\rangle\right]. \tag{6.10-3}$$

Dabei sind

$$W_{\pm\vec{e}} = \langle\,P_{\pm\vec{e}}\,\rangle \tag{6.10-4}$$

die Wahrscheinlichkeiten dafür, dass man bei einer Messung der Spinprojektion bzgl. der Richtung $\vec{e}$ in der betreffenden Gesamtheit die Messwerte $\pm\frac{\hbar}{2}$ findet.

In der $\{m_s\}$-Darstellung gilt nach Gl. (6.7-5) für $\vec{e} = (\frac{\sqrt{3}}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2})$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{e} \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\vec{\sigma}\cdot\vec{e}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}-3i}{4} \\ \frac{\sqrt{3}+3i}{4} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \tag{6.10-5}$$

woraus mit Gl. (6.10-2)

$$P_{+\vec{e}} \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{P}_{+\vec{e}} = \frac{1}{2}\left[\widehat{\mathbb{1}} + \widehat{\vec{\sigma}\cdot\vec{e}}\,\right] = \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}-3i}{8} \\ \frac{\sqrt{3}+3i}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \tag{6.10-6}$$

folgt. Mithilfe dieser Matrix und mit

$$\text{(a)}\quad \chi \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\chi} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \qquad \text{(b)}\quad \rho \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\rho} = \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \tag{6.10-7}$$

erhalten wir unmittelbar die gesuchte Wahrscheinlichkeit:

$$\text{(a1)}\qquad W_{+\vec{e}} = \langle P_{+\vec{e}} \rangle = \langle \chi | P_{+\vec{e}} | \chi \rangle = \widehat{\chi}^{\dagger} \widehat{P}_{+\vec{e}}\, \widehat{\chi}$$
$$= \widehat{\chi}^{\dagger} \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}-3i}{8} \\ \frac{\sqrt{3}+3i}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{7\sqrt{3}-3i}{16} \\ \frac{5+3\sqrt{3}\,i}{16} \end{bmatrix} = \frac{13}{16}\,; \tag{6.10-8a}$$

$$\text{(b1)}\qquad W_{+\vec{e}} = \langle P_{+\vec{e}} \rangle = \mathrm{Sp}\big(\rho P_{+\vec{e}}\big) = \mathrm{Sp}\big(\widehat{\rho}\, \widehat{P}_{+\vec{e}}\big)$$
$$= \mathrm{Sp}\Big[\begin{bmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}-3i}{8} \\ \frac{\sqrt{3}+3i}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \Big] = \mathrm{Sp} \begin{bmatrix} \frac{9}{16} & * \\ \diamond & \frac{1}{16} \end{bmatrix} = \frac{10}{16}\,. \tag{6.10-8b}$$

(Die nicht benötigten Matrixelemente $*, \diamond$ von $\widehat{\rho}\, \widehat{P}_{+\vec{e}}$ wurden dabei nicht berechnet.) Wegen (s. Gl. (6.10-3))

$$\langle \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \rangle = 2 W_{+\vec{e}} - 1 \tag{6.10-9}$$

folgt daraus für die gesuchten Erwartungswerte

$$\text{(a2)}\qquad \langle \vec{S} \cdot \vec{e} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \rangle = \frac{5}{8} \frac{\hbar}{2}\,; \qquad \text{(b2)}\qquad \langle \vec{S} \cdot \vec{e} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \rangle = \frac{1}{4} \frac{\hbar}{2}\,. \tag{6.10-10}$$

(Wir hätten natürlich ebenso gut unter Benützung von Gl. (6.10-5) und Gl. (6.10-7) *zuerst* $\langle \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \rangle$ und *dann* mithilfe von Gl. (6.10-3) $W_{+\vec{e}}$ berechnen können. S. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 6.7.)

Lösungsweg 2: Beim Lösungsweg 1 wurde der Eigenvektor $|\, u_{+\vec{e}} \rangle$ nicht benötigt. Nun wollen wir die gesuchten Wahrscheinlichkeiten mithilfe von $|\, u_{+\vec{e}} \rangle$ berechnen. Um $|\, u_{+\vec{e}} \rangle$ zu erhalten, muss man entweder das Eigenwertproblem der Matrix Gl. (6.10-5) lösen oder das Transformationsverhalten von Vektoroperatoren und Drehimpuls-Eigenvektoren bei räumlichen Drehungen ausnützen. Der entsprechende Weg zur Berechnung von $|\, u_{+\vec{e}} \rangle$ ist in Aufgabe 6.7, Lösungsweg 2, für allgemeines $\vec{e}$ ausführlich beschrieben. Spezialisierung von Gl. (6.7-13) für die gegebene Raumrichtung, deren Polarwinkel $\vartheta = \varphi = \frac{\pi}{3}$ sind, gibt ($\alpha = \varphi$, $\beta = \vartheta$; Phasenfaktor des Eigenvektors willkürlich so gewählt, dass der Koeffizient von $|+\rangle$ positiv reell ist)

$$|\, u_{+\vec{e}} \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} |+\rangle + \frac{1 + i\sqrt{3}}{4} |-\rangle\,, \tag{6.10-11}$$

also

$$\langle u_{+\vec{e}} | + \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,, \qquad \langle u_{+\vec{e}} | - \rangle = \frac{1 - i\sqrt{3}}{4}\,. \tag{6.10-12}$$

Berechnung der Wahrscheinlichkeit $W_{+\vec{e}}$:

$$\text{(a1)}\qquad W_{+\vec{e}} = \langle P_{+\vec{e}} \rangle = \langle \chi | P_{+\vec{e}} | \chi \rangle = |\langle u_{+\vec{e}} | \chi \rangle|^2\,, \tag{6.10-13}$$

$$\langle u_{+\vec{e}} \,|\, \chi \rangle = \widehat{u}^{\dagger}_{+\vec{e}}\, \widehat{\chi} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1-i\sqrt{3}}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \frac{7-i\sqrt{3}}{8} \,,$$

$$W_{+\vec{e}} = \left| \frac{7-i\sqrt{3}}{8} \right|^2 = \frac{13}{16} \,. \tag{6.10-14}$$

(b1) Bei Verwendung des Basissystems $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ für die Spurbildung folgt

$$\begin{aligned} W_{+\vec{e}} = \langle P_{+\vec{e}} \rangle = \mathrm{Sp}\big(\rho P_{+\vec{e}}\big) &= \underbrace{\langle + | \rho}_{\frac{3}{4}\langle + |} P_{+\vec{e}} \,|+\rangle + \underbrace{\langle - | \rho}_{\frac{1}{4}\langle - |} P_{+\vec{e}} \,|-\rangle \\ &= \underbrace{\frac{3}{4} |\langle u_{+\vec{e}} \,|+\rangle|^2}_{\frac{9}{16}} + \underbrace{\frac{1}{4} |\langle u_{+\vec{e}} \,|-\rangle|^2}_{\frac{1}{16}} = \frac{10}{16} \,. \end{aligned} \tag{6.10-15}$$

Die Berechnung von $\langle \vec{S}\cdot\vec{e} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \vec{\sigma}\cdot\vec{e} \rangle$ erfolgt dann wie beim Lösungsweg 1 mithilfe von Gl. (6.10-9).

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Alle reinen Gesamtheiten mit Zustandsvektoren

$$|\,\chi(\delta)\rangle := \frac{\sqrt{3}}{2} |+\rangle + \frac{1}{2} e^{i\delta} |-\rangle \,, \qquad \delta \in [0, 2\pi) \tag{6.10-16}$$

verhalten sich untereinander und im Vergleich zu einer gemischten Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho = |+\rangle \frac{3}{4} \langle + | + |-\rangle \frac{1}{4} \langle - | \tag{6.10-17}$$

in Bezug auf Messungen der *z-Komponente* des Spins statistisch gleich: $W_{+z} = \frac{3}{4}$, $W_{-z} = \frac{1}{4}$. *Hinsichtlich Messungen anderer Spinkomponenten hingegen verhalten sich diese Gesamtheiten i. Allg. statistisch verschieden,* da die in der Linearkombination von Gl. (6.10-16) enthaltenen Zustände $|+\rangle$, $|-\rangle$ dann in einer von δ abhängigen Weise *interferieren.* Um dies für die gegebene Richtung $\vec{e}$ deutlich sichtbar zu machen, setze ich in

$$W_{+\vec{e}}(\chi(\delta)) = \langle \chi(\delta) \,|\, P_{+\vec{e}} \,|\, \chi(\delta) \rangle = |\langle u_{+\vec{e}} \,|\, \chi(\delta) \rangle|^2 \tag{6.10-18}$$

die Beziehung

$$\langle u_{+\vec{e}} \,|\, \chi(\delta) \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \langle u_{+\vec{e}} \,|+\rangle + \frac{1}{2} e^{i\delta} \langle u_{+\vec{e}} \,|-\rangle \tag{6.10-19}$$

ein. Bildung des Absolutquadrats liefert dann

$$\begin{aligned} W_{+\vec{e}}(\chi(\delta)) &= \frac{3}{4} |\langle u_{+\vec{e}} \,|+\rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle u_{+\vec{e}} \,|-\rangle|^2 + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathrm{Re}\big[e^{i\delta} \langle u_{+\vec{e}} \,|+\rangle^* \langle u_{+\vec{e}} \,|-\rangle\big] \\ &= \frac{3}{4} W_{+\vec{e}}(+) + \frac{1}{4} W_{+\vec{e}}(-) + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathrm{Re}\big[e^{i\delta} \langle u_{+\vec{e}} \,|+\rangle^* \langle u_{+\vec{e}} \,|-\rangle\big] \\ &= \frac{10}{16} + \frac{3}{16} \big(\cos\delta + \sqrt{3} \sin\delta\big) \,. \end{aligned} \tag{6.10-20}$$

Für eine gemischte Gesamtheit mit dem Dichteoperator ρ Gl. (6.10-17) dagegen gilt (6.10-15), also

$$W_{+\vec{e}}(\rho) = \frac{3}{4}\,|\langle u_{+\vec{e}}|+\rangle|^2 + \frac{1}{4}\,|\langle u_{+\vec{e}}|-\rangle|^2 = \frac{3}{4}\,W_{+\vec{e}}(+) + \frac{1}{4}\,W_{+\vec{e}}(-) = \frac{10}{16} \qquad (6.10\text{-}21)$$

(Mittelung der Wahrscheinlichkeiten für die Gemischzustände mit den statistischen Gewichten entsprechend Gesetz (5) von Anhang A.10, Tabelle A.10-1).

Die Formeln (6.10-20), (6.10-21) unterscheiden sich um den δ-abhängigen *Interferenzterm*

$$\frac{\sqrt{3}}{2}\,\mathrm{Re}\left[e^{i\delta}\langle u_{+\vec{e}}|+\rangle^*\langle u_{+\vec{e}}|-\rangle\right] = \frac{3}{16}\left(\cos\delta + \sqrt{3}\sin\delta\right). \qquad (6.10\text{-}22)$$

Für $\delta = 0$ nimmt der Interferenzterm den Wert $\frac{3}{16}$ an, womit die Differenz zwischen den Wahrscheinlichkeiten (6.10-14) und (6.10-15) „erklärt“ ist.

Wie der Vergleich von (6.10-16) mit (6.7-13) zeigt, ist $|\,\chi(\delta)\,\rangle$ Eigenvektor von $\vec{S}\cdot\vec{e}\,'(\delta)$,

$$\vec{e}\,'(\delta) = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\cos\delta,\ \frac{\sqrt{3}}{2}\sin\delta,\ \frac{1}{2}\right), \qquad (6.10\text{-}23)$$

zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$. Die Richtungen $\vec{e}\,'(\delta)$, $\delta \in [0, 2\pi)$, liegen auf dem Mantel eines Kreiskegels, dessen Drehachse die z-Achse ist. Die Polarwinkel von $\vec{e}\,'(\delta)$ sind durch $\vartheta = \frac{\pi}{3}$, $\varphi = \delta$ gegeben, und es gilt $\vec{e}\,'(\frac{\pi}{3}) = \vec{e}$. Damit ist physikalisch klar, warum die Wahrscheinlichkeiten $W_{+z}(\chi(\delta))$, $W_{-z}(\chi(\delta))$ nicht von δ abhängen.

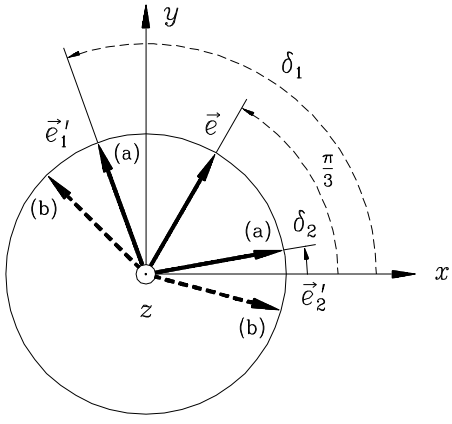


Abb. 6.10-1: Projektion der Richtungen $\vec{e}$, $\vec{e}\,'_1 \equiv \vec{e}\,'(\delta_1)$, $\vec{e}\,'_2 \equiv \vec{e}\,'(\delta_2)$ auf die xy-Ebene:

Fall (a): $\delta_2 = \frac{2\pi}{3} - \delta_1$;

Fall (b): $\delta_2 = \frac{8\pi}{3} - \delta_1$

Für ein beliebiges festes $\delta_1 \in [0, 2\pi)$, $\delta_1 \neq \frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$, gibt es jeweils ein zugehöriges $\delta_2 \neq \delta_1$ mit der Eigenschaft, dass die Richtungen $\vec{e}\,'(\delta_1)$, $\vec{e}\,'(\delta_2)$ mit der gegebenen festen Richtung $\vec{e}$ denselben Winkel einschließen. Wie man aus Abb. 6.10-1 entnimmt, ist δ_2 bei gegebenem δ_1 durch $\delta_2 = \frac{2\pi}{3} - \delta_1$ oder durch δ_1 zwischen null und $\frac{2\pi}{3}$ oder zwischen $\frac{2\pi}{3}$ und 2π liegt. Zwei reine Gesamtheiten mit Zustandsvektoren $|\,\chi(\delta_1)\,\rangle$, $|\,\chi(\delta_2)\,\rangle$ besitzen dann gleiches statistisches Verhalten hinsichtlich der z-Komponente *und* hinsichtlich der Komponente in Richtung $\vec{e}$. (Der Leser verifiziere selbst, dass der Interferenzterm (6.10-22) für derartige Richtungen $\vec{e}\,'(\delta_1)$, $\vec{e}\,'(\delta_2)$ gleich ist.) Sie besitzen aber *nicht* in Bezug auf *alle* Raumrichtungen gleiches statistisches Verhalten.

Um eine reine Gesamtheit von Spins herzustellen, welche unmittelbar nach der Präparation durch den Zustandsvektor (6.10-16) beschrieben wird, muss man eine präparative Messung der Spinprojektion auf die Richtung $\vec{e}\,'(\delta)$ Gl. (6.10-23) durchführen und Systeme mit dem Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ selektieren. – Dagegen kann eine gemischte Gesamtheit mit einem gegebenen Dichteoperator (also mit eindeutig festgelegten statistischen Eigenschaften bzgl. beliebiger Spinmessungen) grundsätzlich

auf verschiedene Arten hergestellt werden. (Siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 6.25.) *Eine* Möglichkeit, eine Gesamtheit mit dem Dichteoperator Gl. (6.10-17) herzustellen, ist die experimentelle Zusammenführung zweier reiner Teilgesamtheiten mit „Spin auf“ bzw. mit „Spin ab“ bzgl. der z-Achse, wobei die erste Teilgesamtheit dreimal so viele Systeme enthalten muss wie die zweite.

6.11 *Ja.* In Aufgabe 1.29 wurde allgemein die folgende Aussage bewiesen: Ist A ein selbstadjungierter Operator mit den nichtentarteten diskreten Eigenwerten a_i, so folgt aus $\langle u | A | u \rangle = a_k$, $\langle u | u \rangle = 1$, dann und nur dann, dass $| u \rangle$ Eigenvektor von A zum Eigenwert a_k ist, falls a_k der *kleinste* oder der *größte* Eigenwert von A ist. Da $+\frac{\hbar}{2}$ der größte Eigenwert von S_z ist, ist also der Erwartungswert zu S_z dann und nur dann gleich $+\frac{\hbar}{2}$, wenn der Zustandsvektor $| \chi \rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ ist.

Spezialisiere zur Übung den Beweis von Aufgabe 1.29 auf den vorliegenden Fall.

6.12

(a) *Nein.* Da $+\frac{\hbar}{2}$ der *zweitgrößte* Eigenwert von S_z ist, kann man *nicht* schließen, dass $| \chi \rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ sein muss (siehe Aufgabe 1.29).

(b) *Nein.* Gegenbeispiel: Für den Vektor $| \chi \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \, | \frac{3}{2} \, \frac{3}{2} \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} | \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle$ gilt (siehe Anhang A.7, Gl. (A.7-3) bis (A.7-5))

$$\langle \chi | \chi \rangle = 1 \,, \quad S_z | \chi \rangle \neq \frac{\hbar}{2} | \chi \rangle \,, \quad \langle \chi | S_z | \chi \rangle = \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{3} \right) \frac{3}{2} \hbar = \frac{\hbar}{2}$$

und

$$\langle \chi | S_\pm | \chi \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \chi | S_x | \chi \rangle = \langle \chi | S_y | \chi \rangle = 0 \,.$$

6.13* Ist $A^{(1)}$ der Operator zur Observablen $\mathcal{A}^{(1)}$ des Subsystems Spin (1), so kann man den Erwartungswert dieser Observablen einerseits in Bezug auf den reinen Zustand des zusammengesetzten Systems „Spin (1) + Spin (2)“ berechnen, andrerseits in Bezug auf den (wie sich zeigen wird i. Allg. gemischten) Zustand des Subsystems Spin (1). Die statistische Aussage, die ein solcher Erwartungswert beinhaltet, darf nicht von der gewählten Beschreibungsform abhängen, d. h. es muss

$$\langle \chi | (A^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}) | \chi \rangle = \mathrm{Sp}^{(1)} (\rho^{(1)} A^{(1)}) \tag{6.13-1}$$

gelten (Spurbildung bzgl. $\mathscr{H}^{(1)}$).

Ich bestimme die Matrix des Dichteoperators $\rho^{(1)}$ in der $\{m_s\}$-Darstellung, indem ich die selbstadjungierten Operatoren $\mathbb{1}^{(1)}$, $\sigma_x^{(1)}$, $\sigma_y^{(1)}$ und $\sigma_z^{(1)}$ bzw. (mathematisch gleichwertig und einfacher zu behandeln) die Operatoren

$$P_\pm^{(1)} := \frac{1}{2} (\mathbb{1}^{(1)} \pm \sigma_z^{(1)}) = | \pm \rangle^{(1)\,(1)} \langle \pm | \,, \qquad \frac{1}{2} \sigma_\pm^{(1)} := \frac{1}{2} (\sigma_x^{(1)} \pm i \sigma_y^{(1)}) = | \pm \rangle^{(1)\,(1)} \langle \mp | \tag{6.13-2}$$

in die Beziehung (6.13-1) einsetze. Mit

$$|\chi\rangle = \alpha\,|++\rangle + \beta\,|+-\rangle + \gamma\,|-+\rangle + \delta\,|--\rangle\,, \tag{6.13-3a}$$

$$\langle\chi\,|\,\chi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \tag{6.13-3b}$$

folgt

$$(P_+^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\,\rangle = \alpha\,|++\rangle + \beta\,|+-\rangle\,, \quad (\tfrac{1}{2}\,\sigma_+^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\,\rangle = \gamma\,|++\rangle + \delta\,|+-\rangle\,, \tag{6.13-4}$$

$$(P_-^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\,\rangle = \gamma\,|-+\rangle + \delta\,|--\rangle\,, \quad (\tfrac{1}{2}\,\sigma_-^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\,\rangle = \alpha\,|-+\rangle + \beta\,|--\rangle\,; \tag{6.13-5}$$

$$\langle\chi\,|\,(P_+^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2\,, \quad \langle\chi\,|\,(\tfrac{1}{2}\,\sigma_+^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\rangle = \alpha^*\gamma + \beta^*\delta\,, \tag{6.13-6}$$

$$\langle\chi\,|\,(P_-^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\rangle = |\gamma|^2 + |\delta|^2\,, \quad \langle\chi\,|\,(\tfrac{1}{2}\,\sigma_-^{(1)}\otimes\mathbb{1}^{(2)})\,|\,\chi\rangle = \alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*\,. \tag{6.13-7}$$

Spurbildung bzgl. $\mathscr{H}^{(1)}$ unter Verwendung des Basissystems $\{\,|+\rangle^{(1)},\,|-\rangle^{(1)}\}$ gibt

$$\mathrm{Sp}^{(1)}\,(\rho^{(1)}P_+^{(1)}) = {}^{(1)}\langle+|\,\rho^{(1)}\,|+\rangle^{(1)} =: \rho_{11}\,, \tag{6.13-8}$$

$$\mathrm{Sp}^{(1)}\,(\rho^{(1)}P_-^{(1)}) = {}^{(1)}\langle-|\,\rho^{(1)}\,|-\rangle^{(1)} =: \rho_{22}\,, \tag{6.13-9}$$

$$\mathrm{Sp}^{(1)}\,(\rho^{(1)}\tfrac{1}{2}\,\sigma_+^{(1)}) = {}^{(1)}\langle-|\,\rho^{(1)}\,|+\rangle^{(1)} =: \rho_{21} = \rho_{12}^*\,, \tag{6.13-10}$$

$$\mathrm{Sp}^{(1)}\,(\rho^{(1)}\tfrac{1}{2}\,\sigma_-^{(1)}) = {}^{(1)}\langle+|\,\rho^{(1)}\,|-\rangle^{(1)} =: \rho_{12}\,. \tag{6.13-11}$$

Mit Gl. (6.13-1) und (6.13-6) bis (6.13-11) erhalte ich

$$\rho^{(1)} \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\rho}^{(1)} = \begin{bmatrix} |\alpha|^2 + |\beta|^2 & \alpha\gamma^* + \beta\,\delta^* \\ \alpha^*\gamma + \beta^*\delta & |\gamma|^2 + |\delta|^2 \end{bmatrix} = \left(\widehat{\rho}^{(1)}\right)^\dagger. \tag{6.13-12}$$

Wegen der Normierung (6.13-3b) gilt $\mathrm{Sp}^{(1)}\rho^{(1)} = 1$. Ein reiner Zustand liegt dann und nur dann vor, falls $\rho^{(1)}$ auch idempotent, also Projektionsoperator ist. Wegen

$$\left(\widehat{\rho}^{(1)}\right)^2 = \begin{bmatrix} \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right)^2 + |\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*|^2 & \alpha\gamma^* + \beta\,\delta^* \\ \alpha^*\gamma + \beta^*\delta & \left(|\gamma|^2 + |\delta|^2\right)^2 + |\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*|^2 \end{bmatrix} \tag{6.13-13}$$

führt dies auf die Bedingung

$$\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right)^2 + |\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2\,. \tag{6.13-14}$$

(Gleichsetzen von ρ_{22} und $(\widehat{\rho}^2)_{22}$ gibt wegen (6.13-3b) dieselbe Bedingung.) Einsetzen von (6.13-3b) in (6.13-14) gibt

$$\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right)\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2\right) - |\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*|^2 = 0\,, \tag{6.13-15}$$

$$|\alpha|^2\,|\delta|^2 + |\beta|^2\,|\gamma|^2 - \alpha\,\delta\,\beta^*\gamma^* - \alpha^*\delta^*\beta\,\gamma = 0 \quad \Rightarrow$$

$$|\alpha\,\delta - \beta\,\gamma|^2 = 0 \quad \Rightarrow \tag{6.13-16}$$

$$\alpha\delta = \beta\gamma \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{array}{l}\text{Die Subsysteme Spin (1) bilden eine}\\ \text{reine Gesamtheit (Zustandsvektor } |\,\varphi\,\rangle^{(1)}).\end{array} \tag{6.13-17}$$

Den betreffenden Zustandsvektor $|\,\varphi\,\rangle^{(1)}$ berechne ich ausgehend von

$$\rho^{(1)} = |\,\varphi\,\rangle^{(1)}\,{}^{(1)}\langle\,\varphi\,| \tag{6.13-18}$$

und (6.13-12):

$$\left.\begin{aligned}
\rho_{11} &= {}^{(1)}\langle +|\,\rho^{(1)}\,|+\rangle^{(1)} = |{}^{(1)}\langle +|\,\varphi\,\rangle^{(1)}|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2\\
\rho_{22} &= {}^{(1)}\langle -|\,\rho^{(1)}\,|-\rangle^{(1)} = |{}^{(1)}\langle -|\,\varphi\,\rangle^{(1)}|^2 = |\gamma|^2 + |\delta|^2\\
\rho_{12} &= {}^{(1)}\langle +|\,\rho^{(1)}\,|-\rangle^{(1)} = {}^{(1)}\langle +|\,\varphi\,\rangle^{(1)}\,{}^{(1)}\langle -|\,\varphi\,\rangle^{(1)*} = \alpha\gamma^* + \beta\delta^*\\
\alpha\delta &= \beta\gamma
\end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow$$

$$|\,\varphi\,\rangle^{(1)} = e^{i\eta}\Big[\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}\,e^{i\arg(\alpha\gamma^*+\beta\delta^*)}\,|+\rangle^{(1)} + \sqrt{|\gamma|^2+|\delta|^2}\,|-\rangle^{(1)}\Big]\,, \qquad \alpha\delta = \beta\gamma\,. \tag{6.13-19}$$

Der Vektor $|\,\varphi\,\rangle^{(1)}$ wurde dabei in einer Form angeschrieben, die von keinem der Koeffizienten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ voraussetzt, dass er von null verschieden ist.

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Löst man das Eigenwertproblem der Dichtematrix (6.13-12), so erhält man die Spektraldarstellung von $\rho^{(1)}$:

$$\rho^{(1)} = |\,1\,\rangle^{(1)}\,p_1\,{}^{(1)}\langle\,1\,| + |\,2\,\rangle^{(1)}\,p_2\,{}^{(1)}\langle\,2\,|\,. \tag{6.13-20}$$

Es ergibt sich

$$p_{1,2} = \frac{1}{2}\big[1 \pm (1 - 4\,|\alpha\delta - \beta\gamma|^2)^{\frac{1}{2}}\big]\,, \tag{6.13-21a}$$

$$|\,j\,\rangle^{(1)} = N_j\,\big[(\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*)\,|+\rangle^{(1)} + (p_j - |\alpha|^2 - |\beta|^2)\,|-\rangle^{(1)}\big]\,, \tag{6.13-21b}$$

$$N_j := e^{i\eta_j}\big[(p_j - |\alpha|^2 - |\beta|^2)^2 + |\alpha\gamma^* + \beta\,\delta^*|^2\big]^{-\frac{1}{2}}\,, \quad j = 1, 2\,. \tag{6.13-21c}$$

Im Spezialfall $\alpha\delta = \beta\gamma$ wird $p_1 = 1$, $p_2 = 0$ und $|\,1\,\rangle^{(1)} \propto |\,\varphi\,\rangle^{(1)}$, es liegt also ein reiner Zustand vor (s. Gl. (6.13-18), (6.13-19)). Für $\alpha\delta \neq \beta\gamma$ hingegen handelt es sich um ein echtes statistisches Gemisch der orthogonalen Zustände $|\,1\,\rangle^{(1)}$, $|\,2\,\rangle^{(1)}$.

Die Aufgabe illustriert das stochastische Element in der zeitlichen Entwicklung einer Gesamtheit *offener* Systeme.[2] Bringt man auf irgendeine Weise je einen Spin (1), „Mitglied“ einer reinen Gesamtheit mit dem Zustandsvektor $|\,v\,\rangle^{(1)}$, in Wechselwirkung mit einem Spin (2), „Mitglied“ einer reinen Gesamtheit mit dem Zustandsvektor $|\,w\,\rangle^{(2)}$, so führt die zeitliche Entwicklung der gekoppelten Systeme ausgehend vom Anfangszustand $|\,v\,\rangle^{(1)}\,|\,w\,\rangle^{(2)}$ zu einem Zustandsvektor

[2] Siehe Jauch, J. M.: Die Wirklichkeit der Quanten. Ein zeitgenössischer galileischer Dialog. Carl Hanser Verlag, München 1973.

der Form (6.13-3). Trennt man die Systeme nach einer Weile (etwa durch „Abschalten der Wechselwirkung“), so ist die Gesamtheit der Spins (1) (und ebenso die der Spins (2)) im Allgemeinen *gemischt*.

6.14

(a) Zweikomponentige Spinorfunktion des Zustandes $|\,\psi(t)\,\rangle$ in $\{\vec{r}\,m_s\}$-Darstellung, d. h. im Basissystem $\{|\,\vec{r}\,m_s\,\rangle = |\,\vec{r}\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|\,m_s\,\rangle_{\mathrm{S}}\}$:

$$\widehat{\psi}(\vec{r},t) = \begin{bmatrix} \langle\,\vec{r}+\,|\,\psi(t)\,\rangle \\ \langle\,\vec{r}-\,|\,\psi(t)\,\rangle \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \psi(\vec{r}+,t) \\ \psi(\vec{r}-,t) \end{bmatrix}; \tag{6.14-1}$$

Schrödingergleichung für $\widehat{\psi}(\vec{r},t)$:

$$\left\{\frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q_{\mathrm{e}}}{c}\,\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 \widehat{\mathbb{1}} + \mu_{\mathrm{B}}\vec{B}(\vec{r},t)\cdot\vec{\widehat{\sigma}}\right\}\widehat{\psi}(\vec{r},t) = i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\psi}(\vec{r},t)}{\partial t}\,, \tag{6.14-2a}$$

$$q_{\mathrm{e}} = -e \quad (e \text{ Elementarladung}), \qquad \mu_{\mathrm{B}} := \frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}\,; \tag{6.14-2b}$$

$$\widehat{\mathbb{1}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\sigma}_j,\ j=1,2,3,\ \text{s. Gl. (A.7-10b)}. \tag{6.14-2c}$$

Dies ist ein System von zwei (im Falle $\vec{B} \neq (0,0,B)$ gekoppelten) partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die Funktionen $\psi(\vec{r}+,t)$, $\psi(\vec{r}-,t)$.

(b) Homogenes Magnetfeld $\vec{B} = \vec{B}(t)$: Mit dem Produktansatz

$$|\,\psi(t)\,\rangle = |\,\phi(t)\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|\,\chi(t)\,\rangle_{\mathrm{S}}\,, \tag{6.14-3a}$$

d. h.

$$\widehat{\psi}(\vec{r},t) = \begin{bmatrix} \psi(\vec{r}+,t) \\ \psi(\vec{r}-,t) \end{bmatrix} = \phi(\vec{r},t)\,\widehat{\chi}(t)\,, \qquad \widehat{\chi}(t) = \begin{bmatrix} \chi(+,t) \\ \chi(-,t) \end{bmatrix}, \tag{6.14-3b}$$

$$\phi(\vec{r},t) \equiv {}_{\mathrm{B}}\langle\,\vec{r}\,|\,\phi(t)\,\rangle_{\mathrm{B}}\,, \qquad \chi(\pm,t) \equiv {}_{\mathrm{S}}\langle\,\pm\,|\,\chi(t)\,\rangle_{\mathrm{S}}\,, \tag{6.14-3c}$$

folgt

$$\begin{aligned}\frac{1}{\phi(\vec{r},t)}\left\{\frac{1}{2m_{\mathrm{e}}}\left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\,\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2\phi(\vec{r},t) - i\hbar\,\frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t}\right\}\widehat{\chi}(t) \\ = -\mu_{\mathrm{B}}\Big(\vec{B}(t)\cdot\vec{\widehat{\sigma}}\Big)\widehat{\chi}(t) + i\hbar\,\frac{d\widehat{\chi}(t)}{dt}\,.\end{aligned} \tag{6.14-4}$$

Da die rechte Seite dieser Gleichung ein nur von t abhängiger Spinor ist, muss der Faktor von $\widehat{\chi}(t)$ auf der linken Gleichungsseite eine Funktion von t allein sein. Setzt man diese Funktion $C(t)$, die die Rolle eines „Separationsparameters“ spielt, identisch

gleich null (siehe dazu die Bemerkungen am Ende der Aufgabe), so ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\frac{1}{2m_\mathrm{e}}\Big(-i\hbar\vec{\nabla}+\frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)\Big)^2\phi(\vec{r},t)=i\hbar\,\frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t}\;, \tag{6.14-5}$$

$$\mu_\mathrm{B}\big(\vec{B}(t)\cdot\vec{\hat{\sigma}}\,\big)\,\widehat{\chi}(t)=i\hbar\,\frac{d\widehat{\chi}(t)}{dt}\;. \tag{6.14-6}$$

Die Gleichung (6.14-5) ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung für die „Bahnzustandsfunktion“ $\phi(\vec{r},t)$ („Schrödingergleichung“ für die „Bahnbewegung“) und (6.14-6) ist ein davon unabhängiges System von zwei (im Falle $\vec{B}\neq(0,0,B)$ gekoppelten) gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung für die Spinorkomponenten $\chi(+,t)$, $\chi(-,t)$ („Schrödingergleichung“ für die „Spinbewegung“).

Bemerkungen

Für einen Anfangszustand der Form $|\,\psi(0)\,\rangle = |\,\phi(0)\,\rangle_\mathrm{B}|\,\chi(0)\,\rangle_\mathrm{S}$ hat man die Gleichungen (6.14-5), (6.14-6) mit den Anfangsbedingungen $\phi(\vec{r},0)$, $\widehat{\chi}(0)$ zu lösen, und die Gesamtzustandsfunktion für $t>0$ ist durch das entsprechende Produkt (6.14-3b) gegeben. Für einen *allgemeinen Anfangszustand* $|\,\psi(0)\,\rangle = |\,\phi_+\,\rangle_\mathrm{B}|\,\chi_+\,\rangle_\mathrm{S}+|\,\phi_-\,\rangle_\mathrm{B}|\,\chi_-\,\rangle_\mathrm{S}$ ($\{|\,\chi_+\,\rangle_\mathrm{S},\,|\,\chi_-\,\rangle_\mathrm{S}\}$ Basissystem von $\mathscr{H}_\mathrm{S}$), hat man die Gleichungen (6.14-5), (6.14-6) einmal mit den Anfangsbedingungen $\phi_+(\vec{r})$, $\widehat{\chi}_+$ und einmal mit den Anfangsbedingungen $\phi_-(\vec{r})$, $\widehat{\chi}_-$ zu lösen, und die Gesamtzustandsfunktion für $t>0$ ist mit den zugehörigen Teillösungen $\phi_+(\vec{r},t)$, $\widehat{\chi}_+(t)$ bzw. $\phi_-(\vec{r},t)$, $\widehat{\chi}_-(t)$ durch $\widehat{\psi}(\vec{r},t)=\phi_+(\vec{r},t)\,\widehat{\chi}_+(t)+\phi_-(\vec{r},t)\,\widehat{\chi}_-(t)$ gegeben.

Oft interessiert man sich nur für die Dynamik des Spins und man löst dann überhaupt nur die Gleichung (6.14-6) bzw. die Schrödingergleichung

$$\mu_\mathrm{B}\vec{B}(t)\cdot\vec{\sigma}\,|\,\chi(t)\,\rangle = i\hbar\,\frac{d}{dt}\,|\,\chi(t)\,\rangle \tag{6.14-7}$$

mit der entsprechenden Anfangsbedingung $\widehat{\chi}(0)$ bzw. $|\,\chi(0)\,\rangle$. Statt von einem Elektron spricht man dann einfach von einem *Spin* (Spin eines Elektrons; s. die Aufgaben 6.15, 6.16).

Für die Anwendungen wichtig ist auch der Fall, dass es sich bei den betrachteten Teilchen nicht um Elektronen, sondern um neutrale Atome handelt, deren resultierender innerer Drehimpuls $s=\frac{1}{2}$ von einem Valenzelektron herrührt (z. B. Silberatome im Grundzustand). Die Gleichung (6.14-6) bzw. die Gleichung (6.14-7) ist dann nach wie vor gültig, in der Gleichung (6.14-5) ist jedoch $e\to 0$ zu setzen, und die „Bahnbewegung“ ist dann eine kräftefreie Teilchenbewegung. Eine derartige Situation liegt bei der Messung des magnetischen Momentes des Elektrons nach der *Spinresonanzmethode* vor, bei der das $\vec{B}$-Feld aus einem zeitunabhängigen Feld und einem dazu senkrechten rotierenden oder oszillierenden Feld zusammengesetzt wird. Die Lösung der Bewegungsgleichung (6.14-7) gibt dann Resonanzeffekte, wenn die Feldfrequenz der Spin-Larmorfrequenz $\omega_\mathrm{L,S}=2\omega_\mathrm{L}=2\mu_\mathrm{B}B/\hbar$ gleich wird (s. [16]).

Setzt man bei der Durchführung der Separation (s. Gl. (6.14-4)) $C(t)$ nicht identisch gleich null, so erhält man anstelle von (6.14-5), (6.14-6) Bewegungsgleichungen mit den zusätzlichen Termen $-C(t)\,\phi(\vec{r},t)$ bzw. $+C(t)\,\widehat{\chi}(t)$ auf den linken Gleichungsseiten. Substituiert man in

diesen Gleichungen

$$\phi(\vec{r},t) = \widetilde{\phi}(\vec{r},t)\,\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t d\tau\, C(\tau)\Big]\,, \qquad \widehat{\chi}(t) = \widehat{\widetilde{\chi}}(t)\,\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t d\tau\, C(\tau)\Big]\,, \tag{6.14-8}$$

so ergeben sich einerseits für $\widetilde{\phi}$, $\widehat{\widetilde{\chi}}$ die Gleichungen (6.14-5), (6.14-6) und andrerseits gilt

$$\widetilde{\phi}\,\widehat{\widetilde{\chi}} = \phi\,\widehat{\chi} = \widehat{\psi}\,. \tag{6.14-9}$$

Man kann somit tatsächlich ohne Einschränkung der Allgemeinheit $C(t) \equiv 0$ setzen.

Bezüglich der Möglichkeit der Umeichung des Vektorpotentials und der damit verbundenen Transformation der Zustandsfunktion $\phi(\vec{r},t)$ s. die Bemerkungen zu Aufgabe 3.25.

6.15*

(a) Für die gesuchte Wahrscheinlichkeit gilt

$$W_+(t) = |\langle +\,|\,\chi(t)\,\rangle|^2 \tag{6.15-1}$$

mit

$$H_{\mathrm{S}}\,|\,\chi(t)\,\rangle = i\hbar\,\frac{d}{dt}\,|\,\chi(t)\,\rangle\,, \qquad \text{AB:}\ \ |\,\chi(0)\,\rangle = |\,+\rangle \tag{6.15-2}$$

und (s. (A.7-10b))

$$H_{\mathrm{S}} = \hbar\omega_0\sigma_x\,. \tag{6.15-3}$$

Berechnung von $|\,\chi(t)\,\rangle$:

Lösungsweg 1: Lösen der Schrödingergleichung (6.15-2) in der $\{m_s\}$-Darstellung:

$$\hbar\omega_0\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\chi(\vec{r}+,t)\\ \chi(\vec{r}-,t)\end{bmatrix} = i\hbar\begin{bmatrix}\dot{\chi}(\vec{r}+,t)\\ \dot{\chi}(\vec{r}-,t)\end{bmatrix} \quad \Rightarrow \tag{6.15-4}$$

$$\begin{aligned}\omega_0\,\chi(-,t) &= i\,\dot{\chi}(+,t)\\ \omega_0\,\chi(+,t) &= i\,\dot{\chi}(-,t)\end{aligned} \qquad \text{AB:}\ \ \chi(+,0) = 1,\ \ \chi(-,0) = 0. \tag{6.15-5}$$

Entkoppeln der Gleichungen gibt

$$\ddot{\chi} + \omega_0^2\,\chi = 0\,, \qquad \chi = \chi(\pm,t)\,. \tag{6.15-6}$$

Die gesuchten Spinorkomponenten $\chi(+,t)$, $\chi(-,t)$ können somit als Linearkombinationen von $\sin\omega_0 t$ und $\cos\omega_0 t$ geschrieben werden, und für die gegebene Anfangsbedingung ergibt sich als Lösung des Differentialgleichungssystems

$$\widehat{\chi}(t) = \begin{bmatrix}\cos\omega_0 t\\ -i\sin\omega_0 t\end{bmatrix} \tag{6.15-7}$$

bzw.

$$|\,\chi(t)\,\rangle = \cos\omega_0 t\,|+\rangle - i\sin\omega_0 t\,|-\rangle\,. \tag{6.15-8}$$

Lösungsweg 2: Eleganter und schneller führt die Benützung des Operators der zeitlichen Entwicklung zum Ziel. Mit (6.15-3) gilt

$$U_{\mathrm{S}}(t,0) = \exp\left(-i\omega_0 t\,\sigma_x\right) = \cos\left(\omega_0 t\,\sigma_x\right) - i\sin\left(\omega_0 t\,\sigma_x\right) \tag{6.15-9}$$

und wegen

$$\sigma_x^{2k} = \mathbb{1}\,, \quad \sigma_x^{2k+1} = \sigma_x\,, \quad k \in \mathbb{N}_0$$

folgt

$$U_{\mathrm{S}}(t,0) = \cos\omega_0 t\,\mathbb{1} - i\sin\omega_0 t\,\sigma_x\,. \tag{6.15-10}$$

Mit $|\,\chi(0)\,\rangle = |+\rangle$ und $\sigma_x\,|+\rangle = \frac{1}{2}\,(\sigma_+ + \sigma_-)\,|+\rangle = |-\rangle$ (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-6), (A.7-8)) ergibt sich

$$|\,\chi(t)\,\rangle = U_{\mathrm{S}}(t,0)\,|\,\chi(0)\,\rangle = (\cos\omega_0 t\,\mathbb{1} - i\sin\omega_0 t\,\sigma_x)\,|+\rangle = \cos\omega_0 t\,|+\rangle - i\sin\omega_0 t\,|-\rangle\,,$$

in Übereinstimmung mit (6.15-8).

Für die Wahrscheinlichkeit $W_+(t)$ von Gl. (6.15-1) ergibt sich mit (6.15-8)

$$W_+(t) = \cos^2\omega_0 t = \frac{1}{2}\,(1 + \cos 2\omega_0 t)\,. \tag{6.15-11}$$

Dies ist eine periodische Funktion mit der Periode $T = \pi/\omega_0$.

(b) Stationäre Spinzustände:

$$|\,\chi_E(t)\,\rangle = |\,u_E\,\rangle\,e^{-(i/\hbar)Et} \qquad \text{mit} \qquad H_{\mathrm{S}}\,|\,u_E\,\rangle = E\,|\,u_E\,\rangle\,. \tag{6.15-12}$$

Lösung des Eigenwertproblems von H_{S}: Wegen (6.15-3) sind die Eigenvektoren von H_{S} mit den bereits in Aufgabe 6.4 berechneten Eigenvektoren $|\,u_{\pm x}\,\rangle$ von σ_x identisch, und die zugehörigen Eigenwerte von H_{S} sind $E_\pm = \pm\hbar\omega_0$. Somit gilt für die stationären Zustände

$$|\,\chi_\pm(t)\,\rangle = e^{i\alpha_\pm}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle \pm |-\rangle\Big)\,e^{\mp i\omega_0 t}\,. \tag{6.15-13}$$

(c) Die Fragestellung bei diesem Punkt ist analog wie in Aufgabe 6.5, der einzige Unterschied besteht darin, dass der gegebene Vektor $|\,\chi\,\rangle$ hier zeitabhängig ist, und damit auch die Richtung $\vec{e}$ von der Zeit abhängt. Einsetzen von (6.15-8) in die Bestimmungsgleichung $\vec{\sigma}\cdot\vec{e}(t)\,|\,\chi(t)\,\rangle = +\,|\,\chi(t)\,\rangle$ für $\vec{e}(t)$ gibt unter Berücksichtigung von Gl. (6.5-3)

$$\begin{aligned}\Big[-i\sin\omega_0 t\,(e_x - ie_y) + \cos\omega_0 t\,e_z\Big]\,|+\rangle + \Big[\cos\omega_0 t\,(e_x + ie_y) + i\sin\omega_0 t\,e_z\Big]\,|-\rangle \\ = \cos\omega_0 t\,|+\rangle - i\sin\omega_0 t\,|-\rangle\,.\end{aligned} \tag{6.15-14}$$

Koeffizientenvergleich bei den (orthogonalen und daher linear unabhängigen) Vektoren $|+\rangle$, $|-\rangle$ und darauf folgende Zerlegung in Real- und Imaginärteile gibt $e_x(t) = 0$ sowie

$$\begin{aligned} -\sin\omega_0 t\, e_y + \cos\omega_0 t\, e_z &= \cos\omega_0 t \qquad |\cdot\cos\omega_0 t \\ \cos\omega_0 t\, e_y + \sin\omega_0 t\, e_z &= -\sin\omega_0 t \qquad |\cdot\sin\omega_0 t \end{aligned} \tag{6.15-15}$$

Addition gibt $(\cos^2\xi - \sin^2\xi = \cos 2\xi)$

$$e_z(t) = \cos 2\omega_0 t\,,$$

Subtraktion gibt $(2\sin\xi\cos\xi = \sin 2\xi)$

$$-\sin 2\omega_0 t\, e_y = 1 - \cos 2\omega_0 t\, e_z = 1 - \cos^2 2\omega_0 t = \sin^2 2\omega_0 t\,,$$

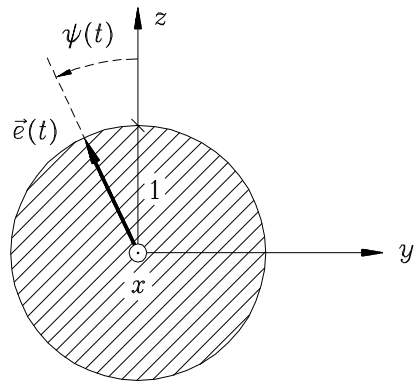


Abb. 6.15-1: Präzessionsbewegung des Vektors $\vec{e}(t)$: $\psi(t) = 2\omega_0 t$ modulo 2π mit Grundintervall $[0, 2\pi)$

also $e_y(t) = -\sin 2\omega_0 t$. Somit gilt

$$\vec{e}(t) = (0, -\sin 2\omega_0 t, \cos 2\omega_0 t)\,, \tag{6.15-16}$$

d. h. die „Spitze“ des Vektors $\vec{e}$ führt in der yz-Ebene eine Kreisbewegung mit der Winkelgeschwindigkeit $2\omega_0$ aus.

(d) Physikalische Realisierung des Effektes (s. Abb. 6.15-2; s. auch die Bemerkungen zu Aufgabe 6.14):

(I) Präparation des Anfangszustandes $|\,\chi(0)\,\rangle = |+\rangle$: Ein monoenergetischer Strahl von neutralen Atomen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ wird durch ein modifiziertes Stern-Gerlach-Filter (s. Anhang A.10) mit Feldgradientenrichtung $\equiv z$-Richtung so präpariert, dass der zugehörige Spinzustand $|+\rangle \equiv |\,u_{+z}\,\rangle$ ist. Die Intensität N kann in einem „Vorversuch“ mithilfe eines Zählers bestimmt werden.

(II) Die auf diese Weise präparierten neutralen Atome gelangen in einen Raumbereich mit einem homogenen zeitlich konstanten Magnetfeld $\vec{B} = B\,\vec{e}_x$, $B > 0$, zu dessen „Durchlaufen“ sie die Zeit t benötigen (kräftefreie „Bahnbewegung“, aber Larmorpräzession des Spins; s. die Bemerkungen zur Larmorpräzession am Ende der Aufgabe).

(III) Testen des Endzustandes durch ein Stern-Gerlach-Filter (gleicher Art wie unter (I) im Fall der Messung von $W_+(t)$ Gl. (6.15-1), (6.15-11)) und Messung der Intensität mithilfe eines Zählers.

Der Hamiltonoperator H_S lautet dann (s. Gl. (6.14-7))

$$H_\mathrm{S} = \mu_\mathrm{B}\vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \mu_\mathrm{B} B\,\sigma_x\,, \tag{6.15-17}$$

und es gilt

$$\omega_0 = \frac{\mu_\mathrm{B} B}{\hbar} =: \omega_\mathrm{L}\,. \tag{6.15-18}$$

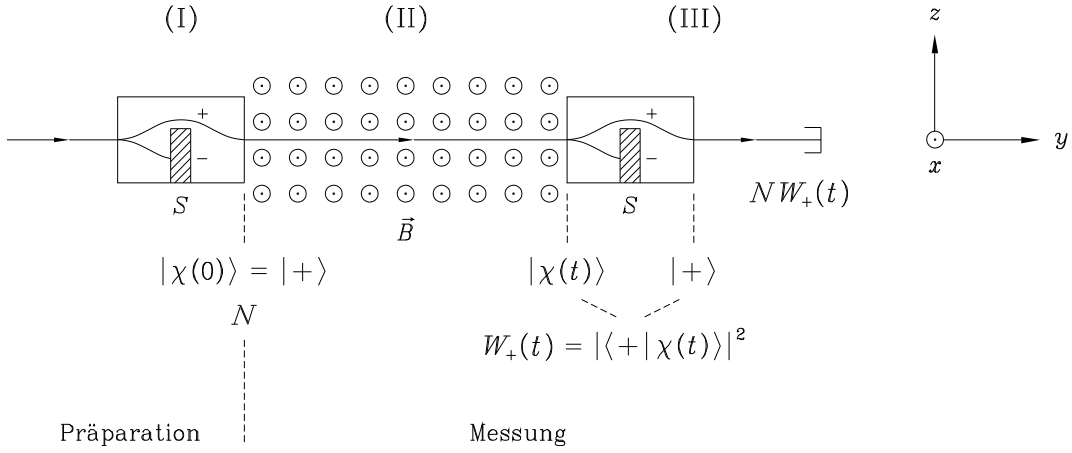


Abb. 6.15-2: Physikalische Apparatur zur Realisierung des Effektes

Bemerkungen

Die Kreisfrequenz $\omega_\mathrm{L} = \mu_\mathrm{B} B/\hbar$ wird als *Larmorfrequenz* bezeichnet. Es ist dies die Kreisfrequenz der Larmorpräzession für einen Bahndrehimpuls ($g_l = 1$). Der Erwartungswert des Spins hingegen führt nach dem *Satz von Larmor* eine Präzessionsbewegung mit der Kreisfrequenz $\omega_{\mathrm{L,S}} = 2\omega_\mathrm{L}$ um die Feldrichtung aus ($g_s = 2$). Da für einen beliebigen Drehimpuls $\vec{J}$ in einem Eigenzustand von $\vec{J}\cdot\vec{e}$, $|\vec{e}| = 1$, zum Eigenwert $m\hbar$ die Beziehung $\langle \vec{J} \rangle = m\hbar\vec{e}$ gilt (wie in Aufgabe 6.2 für $\vec{e} = \vec{e}_z$ bewiesen wurde), muss im vorliegenden Beispiel

$$\langle \chi(t) | \vec{\sigma} | \chi(t) \rangle = \vec{e}(t) \tag{6.15-19}$$

gelten. (Verifiziere diese Beziehung durch Einsetzen von (6.15-8) und (6.15-16).) Die Bewegung des Vektors $\vec{e}(t)$ gemäß Gl. (6.15-16) bzw. Abb. 6.15-1 stellt somit für $\omega_0 = \mu_\mathrm{B} B/\hbar$ die Larmorpräzession von $\langle \vec{\sigma} \rangle_t$ dar. Wegen $\langle \vec{\sigma} \rangle_{t=0} = (0,0,1)$ und $\vec{B} = (B,0,0)$ ist der Präzessionskegel zu einer Kreisfläche in der yz-Ebene entartet.

6.16* Nach Gl. (6.14-7) ist der Spin-Hamiltonoperator des Problems durch

$$H_\mathrm{S} = \mu_\mathrm{B} \vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \mu_\mathrm{B} B\,\sigma_x = \hbar\omega_\mathrm{L}\sigma_x \tag{6.16-1}$$

gegeben (s. auch Gl. (6.15-3), (6.15-18)). Dabei ist

$$\mu_\mathrm{B} := \frac{e\hbar}{2m_\mathrm{e}c}\,, \qquad \omega_\mathrm{L} := \frac{\mu_\mathrm{B} B}{\hbar}\,. \tag{6.16-2}$$

In der $\{m_s\}$-Darstellung gilt

$$H_\mathrm{S} \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{H}_\mathrm{S} = \hbar\omega_\mathrm{L}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \rho(0) \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\rho(0)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} \end{bmatrix}. \tag{6.16-3}$$

(a) *Lösungsweg 1:* Wie der Vergleich von (6.16-3) mit der Angabe von Aufgabe 4.8 zeigt, ist die Fragestellung des Punktes (a) mit der von Aufgabe 4.8 identisch, man hat lediglich den Operator A mit S_z, die Vektoren $|\,a_1\,\rangle$, $|\,a_2\,\rangle$ mit $|+\rangle$, $|-\rangle$ und die Kreisfrequenz ω_0 mit ω_L zu identifizieren sowie die Matrizen $\widehat{\tau}_j$ von Gl. (4.8-4), (4.8-6) als paulische Spinmatrizen zu interpretieren. Nach Gl. (4.8-7), (4.8-8) gilt somit

$$\rho(t) = \frac{1}{2}\,\mathbb{1} + \frac{1}{4}\sin 2\omega_\mathrm{L} t\;\sigma_y - \frac{1}{4}\cos 2\omega_\mathrm{L} t\;\sigma_z\,, \tag{6.16-4}$$

$$W_+(t) = \frac{1}{4}\,(2 - \cos 2\omega_\mathrm{L} t)\,. \tag{6.16-5}$$

Lösungsweg 2: Der Operator der zeitlichen Entwicklung des Systems ist nach (6.15-10) durch $(\omega_0 \to \omega_\mathrm{L})$

$$U_\mathrm{S}(t,0) = \cos\omega_\mathrm{L} t\;\mathbb{1} - i\sin\omega_\mathrm{L} t\;\sigma_x \tag{6.16-6}$$

gegeben. Für den reinen Anfangszustand $|\,\chi(0)\,\rangle = |+\rangle$ folgen damit die Gleichungen (6.15-8) und (6.15-11), d. h.

$$W_+(+,t) = \cos^2\omega_\mathrm{L} t = \frac{1}{2}\,(1 + \cos 2\omega_\mathrm{L} t)\,. \tag{6.16-7}$$

Analog erhält man wegen $\sigma_x\,|-\rangle = \frac{1}{2}\,(\sigma_+ + \sigma_-)\,|-\rangle = |+\rangle$ (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-6), (A.7-8)) für den reinen Anfangszustand $|\,\chi(0)\,\rangle = |-\rangle$

$$|\,\chi(t)\,\rangle = U_\mathrm{S}(t,0)\,|\,\chi(0)\,\rangle = -i\sin\omega_\mathrm{L} t\,|+\rangle + \cos\omega_\mathrm{L} t\,|-\rangle \tag{6.16-8}$$

und damit

$$W_+(-,t) = |\langle +|\,\chi(t)\,\rangle|^2 = \sin^2\omega_\mathrm{L} t = \frac{1}{2}\,(1 - \cos 2\omega_\mathrm{L} t)\,. \tag{6.16-9}$$

Mittelung der Wahrscheinlichkeiten (6.16-7) und (6.16-9) mit den statistischen Gewichten $p_+ = \frac{1}{4}$, $p_- = \frac{3}{4}$ gibt wieder den Ausdruck von Gl. (6.16-5).

(b) *Lösungsweg 1:* Mit dem Dichteoperator (6.16-4) erhält man

$$\langle\,\sigma_z\,\rangle_t = \mathrm{Sp}\,(\rho(t)\,\sigma_z) = \frac{1}{2}\underbrace{\mathrm{Sp}\,\sigma_z}_{0} + \frac{1}{4}\sin 2\omega_\mathrm{L} t\;\underbrace{\mathrm{Sp}\,\overbrace{(\sigma_y\sigma_z)}^{i\sigma_x}}_{0} - \frac{1}{4}\cos 2\omega_\mathrm{L} t\;\underbrace{\mathrm{Sp}\,\overbrace{\sigma_z^2}^{\mathbb{1}}}_{2}\,,$$

$$\langle\,S_z\,\rangle_t = \frac{\hbar}{2}\,\langle\,\sigma_z\,\rangle_t\,, \qquad \langle\,\sigma_z\,\rangle_t = -\frac{1}{2}\cos 2\omega_\mathrm{L} t\,. \tag{6.16-10}$$

Lösungsweg 2: Aus

$$\langle\,S_z\,\rangle_t = \frac{\hbar}{2}\,[W_+(t) - W_-(t)] = \frac{\hbar}{2}\,[2\,W_+(t) - 1] \tag{6.16-11}$$

folgt mit $W_+(t)$ Gl. (6.16-5) sofort wieder (6.16-10).

Lösungsweg 3: Für die reinen Zustände (6.15-8) ($\omega_0 \to \omega_\mathrm{L}$), (6.16-8), welche zu den reinen Anfangszuständen $|+\rangle$ bzw. $|-\rangle$ gehören, gilt

$$\langle\,\sigma_z\,\rangle_{\pm,t} = \pm\Big[\cos^2\omega_\mathrm{L}t - \sin^2\omega_\mathrm{L}t\Big] = \pm\cos 2\omega_\mathrm{L}t\,. \tag{6.16-12}$$

Aus

$$\langle\,\sigma_z\,\rangle_t = \frac{1}{4}\,\langle\,\sigma_z\,\rangle_{+,t} + \frac{3}{4}\,\langle\,\sigma_z\,\rangle_{-,t}$$

folgt dann wieder (6.16-10).

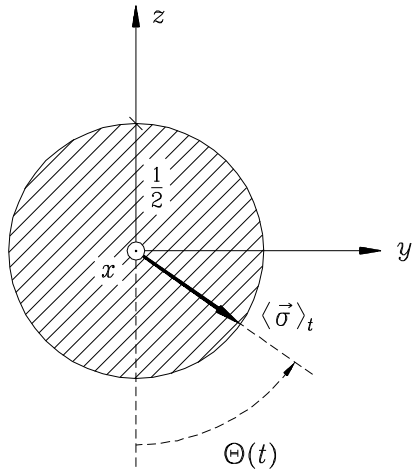


Abb. 6.16-1: Larmorpräzession von $\langle\,\vec\sigma\,\rangle_t$ für eine statistische Gesamtheit mit dem Dichteoperator Gl. (6.16-4): $\Theta(t) = 2\omega_\mathrm{L}t$ modulo 2π mit Grundintervall $[0, 2\pi)$

Bemerkungen

Bezüglich der Larmorpräzession des Erwartungswertes des Spins in einem reinen Zustand siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 6.15.

Auch im Falle eines statistischen Gemisches führt der Erwartungswert des Spins eine Präzessionsbewegung mit der Kreisfrequenz $2\omega_\mathrm{L}$ um die Feldrichtung aus. Im vorliegenden Beispiel ist

$$\langle\,\vec\sigma\,\rangle_{t=0} = \frac{1}{4}\,\langle\,\vec\sigma\,\rangle_{+,t=0} + \frac{3}{4}\,\langle\,\vec\sigma\,\rangle_{-,t=0} = -\frac{1}{2}\,\vec e_z\,,$$

und es folgt wegen $\vec B = B\vec e_x$, $B > 0$, für die Larmorpräzession (s. Abb. 6.16-1)

$$\langle\,\vec\sigma\,\rangle_t = \big(0, \tfrac{1}{2}\sin 2\omega_\mathrm{L}t, -\tfrac{1}{2}\cos 2\omega_\mathrm{L}t\big)\,. \tag{6.16-13}$$

Man hätte also (6.16-10) aufgrund des Satzes von Larmor sofort anschreiben können.

6.17* Der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$,

$$|\,\psi\,\rangle \xrightarrow{\{\vartheta\varphi m_s\}} \widehat\psi(\vartheta,\varphi) = \begin{bmatrix}\langle\,\vartheta\varphi+\,|\,\psi\,\rangle\\ \langle\,\vartheta\varphi-\,|\,\psi\,\rangle\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt6}\,Y_{00}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt6}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\\ \frac{1}{\sqrt6}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt2}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\end{bmatrix}, \tag{6.17-1a}$$

ist auf eins normiert – beachte, dass die Kugelflächenfunktionen ein Orthonormalsystem bilden – ,

$$\langle\,\psi\,|\,\psi\,\rangle = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\,\Big\{|\langle\,\vartheta\varphi+\,|\,\psi\,\rangle|^2 + |\langle\,\vartheta\varphi-\,|\,\psi\,\rangle|^2\Big\} = \frac{1}{6}+\frac{1}{6}+\frac{1}{6}+\frac{1}{2} = 1\,, \tag{6.17-1b}$$

es sind daher die Formeln von Anhang A.10, Abb. A.10-3 anwendbar.

(a) In diesem Fall ist der Projektionsoperator für die Berechnung der gesuchten Wahrscheinlichkeit nach der Formel $W = \langle P \rangle = \langle \psi \,|\, P \,|\, \psi \rangle$ durch

$$P_{+x} = \mathbb{1}_\mathrm{B} \otimes |\, u_{+x} \rangle_\mathrm{S}\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, |\, \vartheta\varphi \rangle_\mathrm{B}\, {}_\mathrm{B}\langle \vartheta\varphi \,| \otimes |\, u_{+x} \rangle_\mathrm{S}\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| \tag{6.17-2a}$$

gegeben, und für die Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_{+x}[\psi] = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, |{}_\mathrm{B}\langle \vartheta\varphi \,|\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,|\, \psi \rangle|^2 . \tag{6.17-2b}$$

Mit $|\, \psi \rangle$, Gl. (6.17-1a) und (siehe Gl. (6.4-5) von Aufgabe 6.4)

$${}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| = \frac{1}{\sqrt{2}} \big({}_\mathrm{S}\langle + \,| + {}_\mathrm{S}\langle - \,| \big) \quad \Rightarrow \quad {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| + \rangle_\mathrm{S} = {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| - \rangle_\mathrm{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{6.17-3}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} {}_\mathrm{B}\langle \vartheta\varphi \,|\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,|\, \psi \rangle &= \Big[\frac{1}{\sqrt{6}}\, Y_{00}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}}\, Y_{10}(\vartheta,\varphi) \Big]\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| + \rangle_\mathrm{S} \\ &\quad + \Big[\frac{1}{\sqrt{6}}\, Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}}\, Y_{10}(\vartheta,\varphi) \Big]\, {}_\mathrm{S}\langle u_{+x} \,| - \rangle_\mathrm{S} \\ &= \frac{1}{\sqrt{12}} \Big[Y_{00}(\vartheta,\varphi) + (1-\sqrt{3})\, Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{11}(\vartheta,\varphi) \Big] , \end{aligned} \tag{6.17-4}$$

$$\begin{aligned} W_{+x}[\psi] &= \frac{1}{12} \int\limits_{[4\pi]} d\Omega \Big| Y_{00}(\vartheta,\varphi) + (1-\sqrt{3})\, Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{11}(\vartheta,\varphi) \Big|^2 \\ &= \frac{1}{12} \Big[1 + (1-\sqrt{3})^2 + 1 \Big] = \frac{1}{6} (3-\sqrt{3}) = 0{,}2113 . \end{aligned} \tag{6.17-5}$$

(b) Die Observablen $\vec{\mathcal{L}}^2$ und $\mathcal{S}_x$ sind verträglich. Wie in den Bemerkungen zu Aufgabe 3.26 für beliebige Paare verträglicher Observablen ausgeführt wurde, gibt es zwei Möglichkeiten, die gesuchte *bedingte* Wahrscheinlichkeit zu berechnen. Man kann entweder (Lösungsweg 1) zuerst mithilfe des Projektionsoperators

$$P_{2\hbar^2} = \sum_{m_l=-1}^{+1} |\, 1\, m_l \rangle_\mathrm{B}\, {}_\mathrm{B}\langle 1\, m_l \,| \otimes \mathbb{1}_\mathrm{S} \tag{6.17-6}$$

($2\hbar^2$ entspricht $l(l+1)\hbar^2$ mit $l = 1$) gemäß

$$|\, \psi' \rangle = \frac{P_{2\hbar^2} |\, \psi \rangle}{\| P_{2\hbar^2} |\, \psi \rangle \|} \tag{6.17-7}$$

den „neuen“ Zustandsvektor $|\,\psi'\,\rangle$ berechnen, d. h. die der ersten Messung entsprechende „Zustandsreduktion“ durchführen, und hierauf die gesuchte Wahrscheinlichkeit mit dem Projektionsoperator (6.17-2a) nach der Formel

$$W_{+x}[\psi'] = \langle\,\psi'\,|\,P_{+x}\,|\,\psi'\,\rangle \tag{6.17-8}$$

berechnen oder man kann stattdessen (Lösungsweg 2) die Beziehung

$$W_{+x}[\psi'] = \frac{W_{\{2\hbar^2,+x\}}[\psi]}{W_{2\hbar^2}[\psi]} = \frac{\langle\,\psi\,|\,P_{\{2\hbar^2,+x\}}\,|\,\psi\,\rangle}{\langle\,\psi\,|\,P_{2\hbar^2}\,|\,\psi\,\rangle} \tag{6.17-9}$$

benützen, wobei der Projektionsoperator $P_{\{2\hbar^2,+x\}}$ durch

$$P_{\{2\hbar^2,+x\}} = P_{2\hbar^2}P_{+x} = P_{+x}P_{2\hbar^2} = \sum_{m_l=-1}^{+1} |\,1\,m_l\,\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\,1\,m_l\,|\otimes|\,u_{+x}\,\rangle_{\mathrm{S}\,\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,| \tag{6.17-10}$$

gegeben ist.

Lösungsweg 1: Mit $|\,\psi\,\rangle$, Gl. (6.17-1a) und dem Projektionsoperator $P_{2\hbar^2}$ Gl. (6.17-6) folgt

$$P_{2\hbar^2}\,|\,\psi\,\rangle \xrightarrow{\{\vartheta\varphi m_s\}} \widehat{P_{2\hbar^2}\psi}(\vartheta,\varphi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix}, \tag{6.17-11}$$

und wegen

$$\|P_{2\hbar^2}\,|\,\psi\,\rangle\|^2 = \frac{1}{6}+\frac{1}{6}+\frac{1}{2} = \frac{5}{6} \tag{6.17-12}$$

erhält man aus Gl. (6.17-7)

$$|\,\psi'\,\rangle \xrightarrow{\{\vartheta\varphi m_s\}} \widehat{\psi'}(\vartheta,\varphi) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \\ \frac{1}{\sqrt{5}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \sqrt{\frac{3}{5}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix}. \tag{6.17-13}$$

Die weitere Rechnung ist vollkommen analog zur Rechnung von Punkt (a). An die Stelle von Gl. (6.17-2b) tritt

$$W_{+x}[\psi'] = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\,|_{\mathrm{B}}\langle\,\vartheta\varphi\,|_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|\,\psi'\,\rangle|^2 \tag{6.17-14}$$

und anstelle der Gleichungen (6.17-4), (6.17-5) erhält man unter Beachtung von (6.17-3)

$$\begin{aligned} {}_{\mathrm{B}}\langle\,\vartheta\varphi\,|_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|\,\psi'\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\,{}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|+\rangle_{\mathrm{S}} \\ &\quad + \Big[\frac{1}{\sqrt{5}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \sqrt{\frac{3}{5}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\Big]\,{}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|-\rangle_{\mathrm{S}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}}\big[(1-\sqrt{3})\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{11}(\vartheta,\varphi)\big], \end{aligned} \tag{6.17-15}$$

$$\begin{aligned} W_{+x}[\psi'] &= \frac{1}{10}\int\limits_{[4\pi]} d\Omega \left|(1-\sqrt{3})\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{11}(\vartheta,\varphi)\right|^2 \\ &= \frac{1}{10}\left[(1-\sqrt{3})^2+1\right] = \frac{1}{10}(5-2\sqrt{3}) = 0{,}1536\,. \end{aligned} \tag{6.17-16}$$

Lösungsweg 2: Wir berechnen nun die Wahrscheinlichkeit $W_{+x}[\psi']$ mithilfe der Formel (6.17-9). Die Wahrscheinlichkeit $W_{2\hbar^2}[\psi]$ können wir wegen (6.17-12) sofort anschreiben:

$$W_{2\hbar^2}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{2\hbar^2}\,|\,\psi\,\rangle = \|P_{2\hbar^2}\,|\,\psi\,\rangle\|^2 = \frac{5}{6}\,. \tag{6.17-17}$$

Für die Wahrscheinlichkeit $W_{\{2\hbar^2,+x\}}[\psi]$ folgt mit dem Projektionsoperator (6.17-10)

$$W_{\{2\hbar^2,+x\}}[\psi] = \langle\,\psi\,|\,P_{\{2\hbar^2,+x\}}\,|\,\psi\,\rangle = \sum_{m_l=-1}^{+1} |{}_{\mathrm{B}}\langle\,1\,m_l\,|\,{}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|\,\psi\,\rangle|^2. \tag{6.17-18}$$

Mit $|\,\psi\,\rangle$, Gl. (6.17-1a) ergibt sich unter Beachtung von (6.17-3)

$$\begin{aligned} {}_{\mathrm{B}}\langle\,1\,m_l\,|\,{}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|\,\psi\,\rangle &= \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{1m_l}(\vartheta,\varphi)\left[\frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{00}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\right] {}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|+\rangle_{\mathrm{S}} \\ &\quad + \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{1m_l}(\vartheta,\varphi)\left[\frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi)\right] {}_{\mathrm{S}}\langle\,u_{+x}\,|-\rangle_{\mathrm{S}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{12}}\int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{1m_l}(\vartheta,\varphi)\Big[Y_{00}(\vartheta,\varphi) + (1-\sqrt{3})\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{11}(\vartheta,\varphi)\Big] \\ &= \frac{1}{\sqrt{12}}\Big[(1-\sqrt{3})\,\delta_{m_l 0} + \delta_{m_l 1}\Big]\,, \end{aligned} \tag{6.17-19}$$

$$W_{\{2\hbar^2,+x\}}[\psi] = \frac{1}{12}\left[(1-\sqrt{3})^2+1\right] = \frac{1}{12}(5-2\sqrt{3})\,. \tag{6.17-20}$$

Einsetzen von (6.17-20) und (6.17-17) in die Formel (6.17-9) gibt für $W_{+x}[\psi']$ wieder das Ergebnis (6.17-16).

6.18

$$\left.\begin{aligned} &|s_1 - s_2| \le S \le s_1 + s_2 \\ &s_1 = s_2 = \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad \begin{aligned} S &= 0 \quad \text{(Singulett)}, \\ S &= 1 \quad \text{(Triplett)}. \end{aligned} \tag{6.18-1}$$

Mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten von Tabelle A.7-3 folgt für die gemeinsamen Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z (s. Formel (A.7-26)):

Singulett-Spinzustand: $S = M_S = 0$

$$|\,0\,0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\rangle - |\,-\,+\,\rangle\Big)\,; \tag{6.18-2}$$

Triplett-Spinzustände: $S = 1,\ M_S = 0, \pm 1$

$$|\,1, \pm 1\,\rangle = |\,\pm\,\pm\,\rangle\,, \qquad |\,1\,0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\rangle + |\,-\,+\,\rangle\Big)\,. \tag{6.18-3}$$

Bemerkungen

Bezüglich des Verhaltens der Vektoren $|\,SM_S\,\rangle$ bei Spinvertauschung s. Aufgabe 7.5 und die Bemerkungen dazu.

6.19 Gemeinsame Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $(\vec{S}^{(12)})^2$ und $S_z^{(12)}$, wobei $\vec{S}^{(12)}$ der Operator der Spin-„Zwischensumme“ ist:

$$\vec{S}^{(12)} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}\,; \tag{6.19-1}$$

$$|\,s_{12}\,m_{12}\,\rangle^{(12)} \in \mathscr{H}^{(12)} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}\,, \tag{6.19-2}$$

$$|\,0\,0\,\rangle^{(12)},\ \ |\,1, \pm 1\,\rangle^{(12)},\ \ |\,1\,0\,\rangle^{(12)} \quad \text{s. Gl. (6.18-2), (6.18-3).} \tag{6.19-3}$$

Gemeinsame Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $(\vec{S}^{(3)})^2$, $(\vec{S}^{(12)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z, wobei $\vec{S}$ der Operator zum Gesamtspin ist:

$$\vec{S} = \vec{S}^{(12)} + \vec{S}^{(3)}\,; \tag{6.19-4}$$

$$\text{(I)}\quad \left.\begin{aligned} &|s_{12} - s_3| \le S \le s_{12} + s_3 \\ &s_{12} = 0,\ \ s_3 = \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad S = \frac{1}{2}\ \text{(Dublett)}. \tag{6.19-5}$$

Mit Formel (A.7-26) und Tabelle A.7-1 von Anhang A.7 sowie Gl. (6.18-2) folgt für die Vektoren $|\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,s_{12}\,SM_S\,\rangle \equiv |\,s_{12}\,SM_S\,\rangle$ des Dubletts zu $s_{12} = 0$:

$$|\,0\,\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\,\rangle = |\,0\,0\,\rangle^{(12)}|\pm\rangle^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\pm\,\rangle - |\,-\,+\,\pm\,\rangle\Big)\,. \tag{6.19-6}$$

$$\text{(II)}\quad \left.\begin{aligned} &|s_{12} - s_3| \le S \le s_{12} + s_3 \\ &s_{12} = 1,\ \ s_3 = \frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} S &= \frac{1}{2}\ \text{(Dublett)}, \\ S &= \frac{3}{2}\ \text{(Quartett)}. \end{aligned} \tag{6.19-7}$$

Gl. (A.7-26), Tab. A.7-1 oder Tab. A.7-3, Gl. (6.18-3):

Dublett zu $s_{12} = 1$:

$$|\,1\,\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,1\,1\,\rangle^{(12)}|-\rangle^{(3)} - \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,0\,\rangle^{(12)}|+\rangle^{(3)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(2\,|++-\rangle - |+-+\rangle - |-++\rangle\Big)\,, \tag{6.19-8}$$

$$|\,1\,\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,0\,\rangle^{(12)}|-\rangle^{(3)} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,1,-1\,\rangle^{(12)}|+\rangle^{(3)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(|+--\rangle + |-+-\rangle - 2\,|--+\rangle\Big)\,; \tag{6.19-9}$$

Quartett:

$$|\,1\,\tfrac{3}{2}, \pm\tfrac{3}{2}\,\rangle = |\,1, \pm 1\,\rangle^{(12)}|\,\pm\,\rangle^{(3)} = |\,\pm\pm\pm\,\rangle\,, \tag{6.19-10}$$

$$|\,1\,\tfrac{3}{2}, +\tfrac{1}{2}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,1\,\rangle^{(12)}|-\rangle^{(3)} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,1\,0\,\rangle^{(12)}|+\rangle^{(3)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle\Big)\,, \tag{6.19-11}$$

$$|\,1\,\tfrac{3}{2}, -\tfrac{1}{2}\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,1\,0\,\rangle^{(12)}|-\rangle^{(3)} + \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1,-1\,\rangle^{(12)}|+\rangle^{(3)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|+--\rangle + |-+-\rangle + |--+\rangle\Big)\,. \tag{6.19-12}$$

Bemerkungen

Bezüglich des Verhaltens der Vektoren $|\,s_{12}SM_S\,\rangle$ bei Permutationen der drei Spins $s = \frac{1}{2}$ siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 7.5 sowie die Aufgabe 7.8.

6.20 Die Lösung des Eigenwertproblems von

$$H_{\mathrm{S}} = \frac{a}{\hbar}\,(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) + \frac{4b}{\hbar^2}\,\vec{S}^{(1)}\cdot\vec{S}^{(2)} \tag{6.20-1}$$

kann durch „Diagonalisieren“ der (4×4)-Matrix $\widehat{H}_{\mathrm{S}}$ von H_{S} in einem beliebigen Basissystem von $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$, etwa $\{\,|\,m_1\,\rangle^{(1)}|\,m_2\,\rangle^{(2)},\ m_1, m_2 = \pm\tfrac{1}{2}\,\}$, gefunden werden. Man kann jedoch die Lösung unmittelbar anschreiben, wenn man zum Gesamtspin übergeht. Wegen

$$\vec{S}^{(1)}\cdot\vec{S}^{(2)} = \frac{1}{2}\Big[\vec{S}^2 - (\vec{S}^{(1)})^2 - (\vec{S}^{(2)})^2\Big] = \frac{1}{2}\,\vec{S}^2 - \frac{3}{4}\,\hbar^2\mathbb{1}\,, \tag{6.20-2}$$

$$S_z^{(1)} + S_z^{(2)} = S_z \tag{6.20-3}$$

gilt

$$H_{\mathrm{S}} = \frac{a}{\hbar}\, S_z + \frac{2b}{\hbar^2}\, \vec{S}^2 - 3b\,\mathbb{1}\,. \tag{6.20-4}$$

Die gemeinsamen Eigenvektoren $|\, SM_S \,\rangle$ von $\vec{S}^2$ und S_z, welche in Gl. (6.18-2), (6.18-3) in der verlangten Form angeschrieben sind, bilden also ein vollständiges Eigenvektorsystem von H_{S}. Aus

$$H_{\mathrm{S}}\,|\, SM_S \,\rangle = [a\, M_S + 2b\, S(S+1) - 3b]\,|\, SM_S \,\rangle\,, \tag{6.20-5a}$$

$$S = 0,\ M_S = 0\,; \quad S = 1,\ M_S = 0, \pm 1 \tag{6.20-5b}$$

folgt wegen $a > 0$, $b > 0$, dass nur im Fall $a/b = 4$ Entartung eintritt. Für $a/b \neq 4$ gibt es vier einfache Eigenwerte, nämlich $-3b$ (Eigenvektor $|\, 0\,0 \,\rangle$), $-a + b$ (Eigenvektor $|\, 1, -1 \,\rangle$), b (Eigenvektor $|\, 1\,0 \,\rangle$) und $a + b$ (Eigenvektor $|\, 1\,1 \,\rangle$). Für $a/b = 4$ gibt es den zweifachen Eigenwert $-3b$ (Eigenraum aufgespannt von $|\, 0\,0 \,\rangle$ und $|\, 1, -1 \,\rangle$) sowie die einfachen Eigenwerte b (Eigenvektor $|\, 1\,0 \,\rangle$) und $5b$ (Eigenvektor $|\, 1\,1 \,\rangle$).

6.21* Aus der formalen Definition

$$D(\theta\vec{e})\,|\, \vec{r} \,\rangle := |\, \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r} \,\rangle \tag{6.21-1}$$

und der Unitaritätsforderung für den Operator $D(\theta\vec{e})$, welche

$$\langle\, \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}\,|\, \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}_0 \,\rangle = \langle\, \vec{r}\,|\, D^{\dagger}(\theta\vec{e})\, D(\theta\vec{e})\,|\, \vec{r}_0 \,\rangle = \langle\, \vec{r}\,|\, \vec{r}_0 \,\rangle \tag{6.21-2}$$

gewährleistet, folgt für die Ortsdarstellung

$$\langle\, \vec{r}\,|\, D(\theta\vec{e})\,|\, \psi \,\rangle = \langle\, \vec{r}\,|\, [D^{-1}(\theta\vec{e})]^{\dagger}\,|\, \psi \,\rangle = \langle\, \mathscr{D}^{-1}(\theta\vec{e})\,\vec{r}\,|\, \psi \,\rangle\,,$$

also

$$\psi'(\vec{r}) \equiv D^{\{\vec{r}\}}(\theta\vec{e})\,\psi(\vec{r}) = \psi\Big(\mathscr{D}^{-1}(\theta\vec{e})\,\vec{r}\Big)\,. \tag{6.21-3}$$

Diese wellenmechanische Beziehung garantiert u. a., dass die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte im „gedrehten“ System am Ort $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\theta\vec{e})\,\vec{r}$ gleich ist wie im ursprünglichen System am Ort $\vec{r}$: $|\psi'(\vec{r}\,')|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$.

(a) Für eine infinitesimale Drehung $\vec{r}\,' = \mathscr{D}(d\theta\,\vec{e})\,\vec{r}$ gilt

$$\vec{r}\,' = \mathscr{D}(d\theta\,\vec{e})\,\vec{r} = \vec{r} + d\theta\,\vec{e} \times \vec{r} \tag{6.21-4}$$

und es folgt aus Gl. (6.21-3) wegen $\mathscr{D}^{-1}(d\theta\,\vec{e}) = \mathscr{D}(-d\theta\,\vec{e})$

$$D^{\{\vec{r}\}}(d\theta\,\vec{e})\,\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - d\theta\,\vec{e} \times \vec{r})\,. \tag{6.21-5}$$

Unter der Annahme, dass die Funktion ψ an der Stelle $\vec{r}$ in eine Taylorreihe entwickelt werden kann, gibt dies weiter

$$D^{\{\vec{r}\}}(d\theta\,\vec{e}\,)\,\psi(\vec{r}\,) = \psi(\vec{r}\,) - d\theta\,(\vec{e}\times\vec{r}\,)\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,) = \psi(\vec{r}\,) - d\theta\,(\vec{r}\times\vec{\nabla})\cdot\vec{e}\,\psi(\vec{r}\,)$$
$$= \psi(\vec{r}\,) - \frac{i}{\hbar}\,d\theta\,\vec{L}^{\{\vec{r}\}}\cdot\vec{e}\,\psi(\vec{r}\,)\,, \quad \forall\,\psi \quad \Rightarrow$$

$$D(d\theta\,\vec{e}\,) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\,d\theta\,\vec{L}\cdot\vec{e} \tag{6.21-6}$$

mit

$$\vec{L} = \vec{R}\times\vec{P}, \quad \text{d. h.} \quad L_j = \sum_{k,l=1}^{3}\epsilon_{jkl}X_kP_l\,, \quad j = 1,2,3\,. \tag{6.21-7}$$

(b) Mithilfe der Gruppeneigenschaft $D(\theta\vec{e}+d\theta\,\vec{e}\,) = D(\theta\vec{e}\,)\,D(d\theta\,\vec{e}\,) = D(d\theta\,\vec{e}\,)\,D(\theta\vec{e}\,)$ erhält man mit (6.21-6)

$$D(\theta\vec{e}+d\theta\,\vec{e}\,) - D(\theta\vec{e}\,) = -\frac{i}{\hbar}\,D(\theta\vec{e}\,)\,d\theta\,\vec{L}\cdot\vec{e}\,,$$

und daraus folgt durch Integration mit der „Anfangsbedingung“ $D(\vec{0}) = \mathbb{1}$

$$D(\theta\vec{e}\,) = \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\theta\,\vec{L}\cdot\vec{e}\,\Big]\,. \tag{6.21-8}$$

Bemerkungen

Bei der oben gegebenen elementaren Ableitung des Drehoperators mussten wir die Entwickelbarkeit der Zustandsfunktion in eine Taylorreihe voraussetzen. Der schließlich gefundene Drehoperator ist aber als unitärer Operator auf ganz $\mathscr{H}$ definiert. (Siehe die Bemerkungen über Potenzreihen nicht beschränkter selbstadjungierter Operatoren auf Seite 33.)

Aufgrund der Definition der Eulerwinkel α,β,γ (s. Anhang A.11: (1’), (2’), (3’)) gilt

$$\mathscr{D}(\alpha\beta\gamma) = \mathscr{D}(\alpha\vec{e}_z)\,\mathscr{D}(\beta\vec{e}_y)\,\mathscr{D}(\gamma\vec{e}_z) \tag{6.21-9}$$

und für den zugehörigen Drehoperator $D(\alpha\beta\gamma)$ folgt (A.7-12) mit $J_i \to L_i$. Beachte, dass bei Parametrisierung der Drehungen durch Drehachse, Drehsinn und Drehwinkel

$$D(\theta\vec{e}\,) = \exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\theta\vec{L}\cdot\vec{e}\,\big] \neq \exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\theta L_x e_x\big]\exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\theta L_y e_y\big]\exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\theta L_z e_z\big] \tag{6.21-10}$$

und bei Parametrisierung durch Eulerwinkel

$$D(\alpha\beta\gamma) = \exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\alpha L_z\big]\exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\beta L_y\big]\exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}\,\gamma L_z\big] \neq \exp\big[-\tfrac{i}{\hbar}(\alpha L_z+\beta L_y+\gamma L_z)\big] \tag{6.21-11}$$

ist, da die Drehimpulskomponenten nicht verträglich sind.

Zusammen mit der Definition des Drehoperators im Spinhilbertraum eines Teilchens (siehe Aufgabe 6.22) kann man ausgehend von (6.21-8) den Drehoperator im Zustandsraum eines Teilchens mit Spin und weiter im Zustandsraum eines Systems von N Teilchen mit Spin definieren. Es gilt dann im entsprechenden Produkthilbertraum

$$D(\theta\vec{e}\,) = \exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\,\theta\,\vec{J}\cdot\vec{e}\,\Big] \tag{6.21-12}$$

bzw. (A.7-12), wobei $\vec{J}$ den Operator des jeweiligen Gesamtdrehimpulses darstellt.

6.22

(a) Mit $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ folgt zunächst

$$D(\theta\vec{e}) = \exp\left[-i\,\frac{\theta}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\right] = \cos\left[\,\frac{\theta}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\right] - i\,\sin\left[\,\frac{\theta}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,\right]. \tag{6.22-1}$$

Wegen (s. Gl. (6.5-2a))

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{e})^{2k} = \mathbb{1}\,, \quad (\vec{\sigma}\cdot\vec{e})^{2k+1} = \vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,, \quad k \in \mathbb{N}_0 \tag{6.22-2}$$

gibt dies weiter

$$D(\theta\vec{e}) = \cos\frac{\theta}{2}\,\mathbb{1} - i\,\sin\frac{\theta}{2}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{e}\,. \tag{6.22-3}$$

(b) Definition der Drehmatrixelemente für $j = s = \frac{1}{2}$ ($|\,m\,\rangle$, $m = \pm\frac{1}{2}$, Eigenvektoren von S_z): Nach Anhang A.7, Gl. (A.7-12), (A.7-13) gilt

$$D^{(1/2)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) = \langle\, m'\,|\, D(\alpha\beta\gamma)\,|\, m\,\rangle = e^{-i\alpha m'}\, d^{(1/2)}_{m'm}(\beta)\, e^{-i\gamma m}\,, \tag{6.22-4}$$

$$d^{(1/2)}_{m'm}(\beta) := \langle\, m'\,|\, D(\beta\vec{e}_y)\,|\, m\,\rangle\,, \qquad m', m = \pm\tfrac{1}{2}\,. \tag{6.22-5}$$

Nun kann aber nach Gl. (6.22-3) der Drehoperator $D(\beta\vec{e}_y)$ in der Form

$$D(\beta\vec{e}_y) = \cos\frac{\beta}{2}\,\mathbb{1} - i\,\sin\frac{\beta}{2}\,\sigma_y \tag{6.22-6}$$

geschrieben werden. Mit der Paulimatrix $\widehat{\sigma}_y$ (s. (A.7-10b)) folgt also

$$\widehat{d}^{\,(1/2)}(\beta) = \widehat{D}(\beta\vec{e}_y) = \cos\frac{\beta}{2}\,\widehat{\mathbb{1}} - i\,\sin\frac{\beta}{2}\,\widehat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}. \tag{6.22-7}$$

Zusammen mit Gl. (6.22-4) erhält man die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1/2)}$ von Gl. (A.2-53).

6.23 Die Eulerwinkel eines mit dem T-Apparat fest verbundenen $x'y'z'$-Systems in Bezug auf das mit dem S-Apparat fest verbundene xyz-System sind durch (siehe Anhang A.11)

$$\alpha = \gamma = 0\,, \quad \beta = \frac{\pi}{4} \tag{6.23-1}$$

gegeben, da y- und y'-Richtung mit der Strahlrichtung zusammenfallen. Aufgrund des Transformationsverhaltens der Spineigenzustände bei räumlichen Drehungen (siehe Anhang A.7, Gl. (A.7-14)) gilt mit $|\pm S\,\rangle \equiv |\pm\rangle$, $|\pm T\,\rangle \equiv |\pm\rangle'$

$$\langle\, m'S\,|\, mT\,\rangle = D^{(1/2)}_{m'm}(0, \tfrac{\pi}{4}, 0) \tag{6.23-2}$$

und mit der Drehmatrix von Anhang A.2, Gl. (A.2-53) folgt für die in Gl. (3.3-2) benötigte Größe

$$|\langle +T\,|+S\,\rangle|^2 = \cos^2\frac{\pi}{8} = \frac{2+\sqrt{2}}{4}\,. \tag{6.23-3}$$

Für die in Aufgabe 3.3 gefragte Intensität gilt also

$$N' = \frac{2+\sqrt{2}}{4}\,N \;=\; 0{,}8536\,N\,. \tag{6.23-4}$$

Bemerkungen

Wie bereits in Aufgabe 6.7 diskutiert wurde, hängt die Wahrscheinlichkeit $W_{+\vec{e}} = |\langle\, u_{+\vec{e}}\,|+\rangle|^2$ nur vom Winkel ϑ zwischen den Quantisierungsrichtungen $\vec{e}_z$ und $\vec{e}$ ab, und zwar gilt (siehe Gl. (6.7-10)) $W_{+\vec{e}} = \cos^2\frac{\vartheta}{2}$. Es kommt also wegen $\beta = \vartheta$ (siehe Gl. (A.11-2)) überhaupt nicht auf die Eulerwinkel α, γ an. Entsprechend ergibt sich dieselbe Intensität (6.23-4) auch für einen Versuch, bei dem die Feldgradientenrichtung des T-Apparates den Winkel zwischen positiver z-Achse und *negativer* x-Achse halbiert.

6.24 Für die Eulerwinkel des T-Apparates gilt wie in Aufgabe 6.23

$$\alpha = \gamma = 0\,, \quad \beta = \frac{\pi}{4}\,. \tag{6.24-1}$$

Für Aufgabe 3.4 bis Aufgabe 3.7 werden die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle\, m'S\,|\,mT\,\rangle$, $m, m' = +1,\, 0, -1$, für Spin-1-Eigenvektoren benötigt. Nach Anhang A.7, Gl. (A.7-14) gilt mit $|\,m'S\,\rangle \equiv |\,1m'\,\rangle$ und $|\,mT\,\rangle \equiv |\,1m\,\rangle'$

$$\langle\, m'S\,|\,mT\,\rangle = D^{(1)}_{m'm}(0, \tfrac{\pi}{4}, 0)\,, \tag{6.24-2}$$

also wegen Anhang A.2, Gl. (A.2-54)

$$\langle +1, S\,|\pm 1, T\,\rangle = \langle -1, S\,|\mp 1, T\,\rangle = \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\right], \tag{6.24-3a}$$

$$\langle \pm 1, S\,|\,0, T\,\rangle = \langle\, 0, S\,|\mp 1, T\,\rangle = \mp\frac{1}{2}\,, \tag{6.24-3b}$$

$$\langle\, 0, S\,|\,0, T\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,. \tag{6.24-3c}$$

Damit erhält man folgende Intensitäten:

Aufgabe 3.4: Intensität $N_{1,2}$ für die Fälle (α) und (β):

$$(\alpha): \quad \text{s. Gl. (3.4-5)}: \quad N_{1,2} = \frac{N}{16} = 0{,}0625\,N\,, \tag{6.24-4}$$

$$(\beta): \quad \text{s. Gl. (3.4-7)}: \quad N_{1,2} = \frac{N}{8} = 0{,}1250\,N\,; \tag{6.24-5}$$

Aufgabe 3.5: Intensität $N_{1,2}$:

$$\text{s. Gl. (3.5-3)}: \quad N_{1,2} = \frac{33 - 20\sqrt{2}}{64}\,N = 0{,}0737\,N\,; \tag{6.24-6}$$

Aufgabe 3.6: Intensität $N_{1,2}$:

$$\text{s. Gl. (3.6-8):} \quad N_{1,2} = \frac{39 - 16\sqrt{2}}{128}\, N = 0{,}1279\, N\,; \tag{6.24-7}$$

Aufgabe 3.7: Intensität $N_{1,2}$:

$$\text{s. Gl. (3.7-2):} \quad N_{1,2} = \frac{23 - 10\sqrt{2}}{64}\, N = 0{,}1384\, N\,. \tag{6.24-8}$$

6.25 T- und S-Apparat besitzen zueinander dieselbe räumliche Lage wie in Aufgabe 6.24, somit sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle\, m'S \,|\, mT \,\rangle$, $m, m' = +1,\, 0, -1$, wieder durch Gl. (6.24-2), (6.24-3) gegeben. Da außerdem der R-Apparat gegen den T-Apparat um denselben Winkel ($\beta = \frac{\pi}{4}$) verdreht ist wie dieser gegen den S-Apparat, gilt weiter

$$\langle\, m'T \,|\, mR \,\rangle = \langle\, m'S \,|\, mT \,\rangle\,, \qquad \forall\, m, m'. \tag{6.25-1}$$

Aufgabe 3.8:
Für die in Aufgabe 3.8 gefragte Intensität (s. Gl. (3.8-1)) folgt

$$N_{1,2} = \frac{11 - 6\sqrt{2}}{32}\, N = 0{,}0786\, N\,. \tag{6.25-2}$$

Aufgabe 3.9:
Hier benötigen wir noch zusätzlich die Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$\langle\, m'S \,|\, mR \,\rangle = D^{(1)}_{m'm}(0, \tfrac{\pi}{2}, 0)\,. \tag{6.25-3}$$

Nach Gl. (A.2-54) von Anhang A.2 gilt

$$\langle +1, S \,|\, \pm 1, R \,\rangle = \langle -1, S \,|\, \pm 1, R \,\rangle = \frac{1}{2}\,, \tag{6.25-4a}$$

$$\langle \pm 1, S \,|\, 0, R \,\rangle = \langle 0, S \,|\, \mp 1, R \,\rangle = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\,, \tag{6.25-4b}$$

$$\langle\, 0, S \,|\, 0, R \,\rangle = 0\,. \tag{6.25-4c}$$

Damit erhält man aus Gl. (3.9-4) für die auf eins normierten Gemischzustände und die zugehörigen statistischen Gewichte

$$|\, \chi_1 \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\, |+1, R\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\, |\, 0, R\,\rangle\,, \qquad p_1 = \frac{3}{5}\,, \tag{6.25-5a}$$

$$|\, \chi_2 \,\rangle = |+1, R\rangle\,, \qquad p_2 = \frac{2}{5}\,; \tag{6.25-5b}$$

$$\langle\, \chi_1 \,|\, \chi_2 \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \neq 0\,. \tag{6.25-5c}$$

Mit den Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle\, m'T \,|\, mR \,\rangle$ Gl. (6.25-1), (6.24-3) und den Gemischzuständen $|\, \chi_1 \,\rangle$, $|\, \chi_2 \,\rangle$ und ihren statistischen Gewichten p_1, p_2 von Gl. (6.25-5a), (6.25-5b) ergibt sich dann aus Gl. (3.9-7) für die gesuchte Intensität $N_{1,2}$

$$N_{1,2} = \frac{59 - 34\sqrt{2}}{160}\, N = 0{,}0682\, N\,. \tag{6.25-6}$$

Bemerkungen

Der Dichteoperator der durch (6.25-5a), (6.25-5b) beschriebenen gemischten Gesamtheit,

$$\begin{aligned}\rho &= |\, \chi_1 \,\rangle\, \frac{3}{5}\, \langle\, \chi_1 \,| + |\, \chi_2 \,\rangle\, \frac{2}{5}\, \langle\, \chi_2 \,| \\ &= |{+1}, R\,\rangle\, \frac{3}{5}\, \langle {+1}, R\,| - |{+1}, R\,\rangle\, \frac{\sqrt{2}}{5}\, \langle\, 0, R\,| - |\, 0, R\,\rangle\, \frac{\sqrt{2}}{5}\, \langle {+1}, R\,| + |\, 0, R\,\rangle\, \frac{2}{5}\, \langle\, 0, R\,|\,,\end{aligned} \tag{6.25-7}$$

ist durch die in der Abbildung von Aufgabe 3.9 dargestellte Art der Präparation eindeutig bestimmt. Umgekehrt aber kann eine Gesamtheit mit demselben Dichteoperator (und damit mit denselben statistischen Eigenschaften bzgl. *beliebiger* Spinmessungen) auch auf andere Arten hergestellt werden. Der Leser löse das Eigenwertproblem von ρ Gl. (6.25-7) in der $\{mR\}$-Darstellung (Basissystem $\{\,|\, mR \,\rangle,\ m = +1,\ 0, -1\,\}$) und zeige, dass die Spektraldarstellung von ρ durch

$$\rho = |\, u_1 \,\rangle\, \frac{4}{5}\, \langle\, u_1 \,| + |\, u_2 \,\rangle\, \frac{1}{5}\, \langle\, u_2 \,| \tag{6.25-8a}$$

gegeben ist, wobei

$$|\, u_1 \,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\, |{+1}, R\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\, |\, 0, R\,\rangle\,, \tag{6.25-8b}$$

$$|\, u_2 \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\, |{+1}, R\,\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\, |\, 0, R\,\rangle\,, \tag{6.25-8c}$$

$$|\, u_3 \,\rangle = |{-1}, R\,\rangle \tag{6.25-8d}$$

die (bis auf unimodulare Faktoren eindeutig bestimmten) auf eins normierten Eigenvektoren von ρ sind ($|\, u_3 \,\rangle$ Eigenvektor zum Eigenwert null). Da der Operator ρ selbstadjungiert ist, gilt $\langle\, u_j \,|\, u_k \,\rangle = 0$, $j \neq k$. Der Leser überlege, wie man die Präparation durchführen müsste, damit die Gemischzustände durch die orthogonalen Vektoren $|\, u_1 \,\rangle$, $|\, u_2 \,\rangle$ und die zugehörigen statistischen Gewichte durch $\lambda_1 = \frac{4}{5}$, $\lambda_2 = \frac{1}{5}$ gegeben sind.

Dieselben Intensitäten ergeben sich auch für Versuche, bei denen die Feldgradientenrichtung des T-Apparates den Winkel zwischen positiver z-Achse und negativer x-Achse halbiert, und die Feldgradientenrichtung des R-Apparates mit der negativen x-Richtung zusammenfällt.

6.26 Bezeichne ich den gemeinsamen Eigenvektor von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $S_x^{(1)}$ zum Eigenwert $+\hbar$ von $S_x^{(1)}$ mit $|\, u_{1x} \,\rangle^{(1)}$ und den gemeinsamen Eigenvektor von $(\vec{S}^{(2)})^2$, $S_x^{(2)}$ zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ von $S_x^{(2)}$ mit $|\, u_{+x} \,\rangle^{(2)}$, so gilt für die gesuchte Wahrscheinlichkeit

$$W = \Big|{}^{(1)}\langle\, u_{1x} \,|\, {}^{(2)}\langle\, u_{+x} \,|\, \chi \,\rangle\Big|^2\,. \tag{6.26-1}$$

Um diese Wahrscheinlichkeit berechnen zu können, drücke ich alle beteiligten Vektoren durch Eigenvektoren der entsprechenden z-Komponenten aus. Mit den gemeinsamen Eigenvektoren $|\,m\,\rangle^{(1)}$, $m = 0, \pm 1$, von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $S_z^{(1)}$ zu den Eigenwerten $m\hbar$ von $S_z^{(1)}$ und den gemeinsamen Eigenvektoren $|\pm\rangle^{(2)}$ von $(\vec{S}^{(2)})^2$, $S_z^{(2)}$ zu den Eigenwerten $\pm\frac{\hbar}{2}$ von $S_z^{(2)}$ gilt zunächst einmal aufgrund der Gesetze für die Addition von Drehimpulsen (siehe Anhang A.7, Gl. (A.7-26) und Tabelle A.7-3)

$$|\,\chi\,\rangle = |\,\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,0\,\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}\,. \tag{6.26-2}$$

Um den Vektor $|\,u_{1x}\,\rangle^{(1)}$ durch die Vektoren $|\,m\,\rangle^{(1)}$, $m = 0, \pm 1$, und den Vektor $|\,u_{+x}\,\rangle^{(2)}$ durch die Vektoren $|\pm\rangle^{(2)}$ auszudrücken, benütze ich das Transformationsgesetz von Drehimpuls-Eigenvektoren bei räumlichen Drehungen. Für die spezielle Drehung, bei der die z'-Achse (wie gewünscht) mit der x-Achse zusammenfällt, und bei der außerdem $y' = y$ gilt, hat man die Eulerwinkel $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = \frac{\pi}{2}$ (siehe Abb. 6.4-1 von Aufgabe 6.4), und aus Anhang A.7, Gl. (A.7-14) und Anhang A.2, Gl. (A.2-43) folgt

$$\left.\begin{aligned} |\,u_{1x}\,\rangle^{(1)} &= |\,1\,\rangle^{(1)\prime} = \sum_{m'=0,\pm1} d^{(1)}_{m'1}(\tfrac{\pi}{2})\,|\,m'\,\rangle^{(1)} \\ |\,u_{+x}\,\rangle^{(2)} &= |+\rangle^{(2)\prime} = \sum_{m=\pm1/2} d^{(1/2)}_{m\,1/2}(\tfrac{\pi}{2})\,|\,m\,\rangle^{(2)} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \tag{6.26-3}$$

$$|\,u_{1x}\,\rangle^{(1)}|\,u_{+x}\,\rangle^{(2)} = \sum_{m'm} d^{(1)}_{m'1}(\tfrac{\pi}{2})\,d^{(1/2)}_{m\,1/2}(\tfrac{\pi}{2})\,|\,m'\,\rangle^{(1)}|\,m\,\rangle^{(2)}\,. \tag{6.26-4}$$

Setzen wir (6.26-2) und (6.26-4) in die Beziehung (6.26-1) ein und verwenden wir die Drehmatrixelemente von Gl. (A.2-53), (A.2-54), so erhalten wir

$$\begin{aligned} W &= \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\,d^{(1)}_{11}(\tfrac{\pi}{2})\,d^{(1/2)}_{-1/2,1/2}(\tfrac{\pi}{2}) + \sqrt{\frac{2}{3}}\,d^{(1)}_{01}(\tfrac{\pi}{2})\,d^{(1/2)}_{1/2,1/2}(\tfrac{\pi}{2})\right|^2 \\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\,\frac{1}{2}\big(1+\cos\frac{\pi}{2}\big)\sin\frac{\pi}{4} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\frac{\pi}{2}\cos\frac{\pi}{4}\right|^2 = \frac{3}{8}\,. \end{aligned} \tag{6.26-5}$$

6.27

(a) Um zu überprüfen, ob die durch

$$R^{(1)}_{\pm1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\,(X_1 \pm iX_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{1,\pm1}(\Theta,\Phi)\,, \qquad R^{(1)}_0 = X_3 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{10}(\Theta,\Phi) \tag{6.27-1}$$

definierten Operatoren mit $L_\pm = L_1 \pm iL_2$, L_3 die Vertauschungsbeziehungen

$$[L_\pm, R^{(1)}_q] = \sqrt{(1\mp q)(2\pm q)}\,\hbar\,R^{(1)}_{q\pm1}\,, \qquad [L_3, R^{(1)}_q] = q\hbar\,R^{(1)}_q\,, \qquad q = 0, \pm1 \tag{6.27-2}$$

erfüllen, leite ich zuerst die Vertauschungsbeziehungen zwischen den L_j und X_k ab:

$$\begin{aligned}[L_j, X_k] &= [\sum_{lm} \epsilon_{jlm} X_l P_m, X_k] = \sum_{lm} \epsilon_{jlm} X_l \underbrace{[P_m, X_k]}_{-i\hbar\,\delta_{mk}\mathbb{1}} \\ &= -i\hbar \sum_l \epsilon_{jlk} X_l = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} X_l \,.\end{aligned} \tag{6.27-3}$$

Nach Anhang A.7, Gl. (A.7-20), (A.7-21) sind diese Vertauschungsbeziehungen zu (6.27-2) gleichwertig. Dass dies tatsächlich der Fall ist, lässt sich leicht zeigen:

$$[L_3, X_3] = \mathbb{0} \quad \Leftrightarrow \quad \text{zweite Beziehung in (6.27-2) für } \; q = 0,$$

$$\left.\begin{aligned}[L_3, X_1] &= +i\hbar X_2 \\ [L_3, X_2] &= -i\hbar X_1\end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; \begin{aligned}&[L_3, \mp\tfrac{1}{\sqrt{2}}(X_1 \pm iX_2)] = -\tfrac{\hbar}{\sqrt{2}}(X_1 \pm iX_2) \;\Leftrightarrow \\ &\text{zweite Beziehung in (6.27-2) für } \; q = \pm 1,\end{aligned}$$

$$\left.\begin{aligned}[L_1, X_3] &= -i\hbar X_2 \\ [L_2, X_3] &= +i\hbar X_1\end{aligned}\right\} \;\Rightarrow\; \begin{aligned}&[L_1 \pm iL_2, X_3] = \mp\hbar\,(X_1 \pm iX_2) \;\Leftrightarrow \\ &\text{erste Beziehung in (6.27-2) für } \; q = 0; \text{ usf.}\end{aligned}$$

(b) Verwendung des Ergebnisses von (6.27-3):

$$\begin{aligned}[L_j, \vec{R}^2] &= \sum_k [L_j, X_k X_k] = \sum_k \Big\{[L_j, X_k] X_k + X_k [L_j, X_k]\Big\} \\ &= i\hbar \sum_{kl} \epsilon_{jkl} (X_l X_k + X_k X_l) = \mathbb{0}\,, \quad j = 1, 2, 3\,.\end{aligned} \tag{6.27-4}$$

(Überschieben einer in k, l antisymmetrischen mit einer in k, l symmetrischen Größe.)

Bemerkungen

Für die Komponenten des Impulsoperators $\vec{P}$ eines Teilchens gelten die zu (6.27-3), (6.27-4) analogen Vertauschungsbeziehungen

$$[L_j, P_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} P_l\,, \quad [L_j, \vec{P}^2] = \mathbb{0}\,, \quad j = 1, 2, 3\,. \tag{6.27-5}$$

Die Operatoren $\vec{R}$ und $\vec{P}$ stellen die Prototypen von *Vektoroperatoren* (d. h. von irreduziblen Tensoroperatoren des Ranges 1 in Bezug auf Drehungen) dar.

S. auch Aufgabe 6.28.

6.28

(a) Nach Aufgabe 6.27 bilden die drei Operatoren

$$R_q^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, R\, Y_{1q}(\Theta, \Phi)\,, \quad q = 0, \pm 1 \tag{6.28-1}$$

die sphärischen Standardkomponenten eines irreduziblen Tensoroperators in Bezug auf Drehungen im Bahnhilbertraum eines Teilchens mit den räumlichen Freiheitsgraden

$\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$. Da diese Drehungen durch die Komponenten des Bahndrehimpulsoperators $\vec{L}$ „erzeugt“ werden (s. Gl. (6.21-8)), sagt man auch $\mathsf{R}^{(1)}$ bzw. $\vec{R}$ sei Tensoroperator bezüglich $\vec{L}$. Aufgrund dieser Eigenschaft von $\mathsf{R}^{(1)}$ kann für die Matrixelemente der sphärischen Komponenten (6.28-1) in einer Standardbasis von Eigenvektoren von $\vec{L}^2$ und L_z (wie der gegebenen) das Wigner-Eckart-Theorem angewendet werden (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-24)):

$$\langle\, n'l'm' \,|\, R_q^{(1)} \,|\, nlm \,\rangle = \langle\, l\,1\,m\,q \,|\, l'm' \,\rangle \langle\, n'l' \,\|\, \mathsf{R}^{(1)} \,\|\, nl \,\rangle\,. \tag{6.28-2}$$

Das reduzierte Matrixelement hängt von den magnetischen Quantenzahlen nicht ab, und man kann es somit angeben, wenn man das Matrixelement auf der linken Seite von (6.28-2) für *irgendeinen* Satz von Quantenzahlen m', q, m berechnet hat, für den $m' = m + q$ gilt. Da es bei der vorliegenden Aufgabe jedoch keine Arbeitsersparnis bedeutet, wenn man beispielsweise $m' = m = q = 0$ setzt, berechne ich die Matrixelemente ganz allgemein.

Einsetzen der Spektraldarstellung von $R_q^{(1)}$ gibt

$$\langle\, n'l'm' \,|\, R_q^{(1)} \,|\, nlm \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, \langle\, n'l'm' \,|\, \vec{r} \,\rangle\, r_q^{(1)}\, \langle\, \vec{r} \,|\, nlm \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\, r_q^{(1)}\, u^*_{n'l'm'}(\vec{r})\, u_{nlm}(\vec{r}) \tag{6.28-3}$$

mit

$$r_q^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, r\, Y_{1q}(\Omega)\,, \tag{6.28-4}$$

also

$$\langle\, n'l'm' \,|\, R_q^{(1)} \,|\, nlm \,\rangle = \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^3 R^*_{n'l'}(r)\, R_{nl}(r) \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\Omega)\, Y_{1q}(\Omega)\, Y_{lm}(\Omega)\,. \tag{6.28-5}$$

Die Integration über den Raumwinkel lässt sich mithilfe der Clebsch-Gordan-Reihe (A.2-11) und der Orthogonalitätsbeziehungen (A.2-9) ausführen. Mit

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, Y_{1q}(\Omega)\, Y_{lm}(\Omega) = \sum_{L=|l-1|}^{l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2L+1}}\, \langle\, l\,1\,m\,q \,|\, L, m+q \,\rangle \langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, L\,0 \,\rangle\, Y_{L,m+q}(\Omega) \tag{6.28-6}$$

ergibt sich wegen

$$\langle\, l\,1\,m\,q \,|\, l', m+q \,\rangle\, \delta_{m',\,m+q} = \langle\, l\,1\,m\,q \,|\, l'm' \,\rangle \tag{6.28-7}$$

unmittelbar ein Ausdruck der Form (6.28-2) mit dem reduzierten Matrixelement

$$\langle\, n'l' \,\|\, \mathsf{R}^{(1)} \,\|\, nl \,\rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}}\, \langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, l'\,0 \,\rangle \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^3 R^*_{n'l'}(r)\, R_{nl}(r)\,. \tag{6.28-8}$$

(b) Das reduzierte Matrixelement kann nur dann von null verschieden sein, falls der Clebsch-Gordan-Koeffizient $\langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, l'\,0 \,\rangle$ von null verschieden ist. Aufgrund der „Dreiecksungleichung“ (A.7-27) muss also jedenfalls $|l-1| \le l' \le l+1$ und somit

$$\Delta l \equiv l' - l = 0, \pm 1 \;\text{ für }\; l \neq 0, \qquad l' = 1 \;\text{ für }\; l = 0 \tag{6.28-9}$$

gelten. Aus der Symmetriebeziehung (A.7-32a) für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten ergibt sich aber eine weitere Einschränkung:

$$\begin{aligned} &\langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, l'\,0 \,\rangle = (-1)^{l+1-l'} \langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, l'\,0 \,\rangle \quad \Rightarrow \\ &\langle\, l\,1\,0\,0 \,|\, l'\,0 \,\rangle = 0 \;\text{ für }\; \Delta l \;\text{ gerade.} \end{aligned} \tag{6.28-10}$$

Zusammen mit (6.28-9) erhält man somit die *Auswahlregel*

$$\Delta l \equiv l' - l = \pm 1 \;\text{ für }\; l \neq 0, \qquad l' = 1 \;\text{ für }\; l = 0. \tag{6.28-11}$$

Bemerkungen

Die Faktorisierung der Matrixelemente der Operatoren $R_q^{(1)}$ in Bezug auf Eigenvektoren von $\vec{L}^2$ und L_z nach dem Wigner-Eckart-Theorem ist eine Folge des Transformationsverhaltens (s. (A.7-15))

$$R_q^{(1)\prime} \equiv D(\alpha\beta\gamma)\, R_q^{(1)} D^\dagger(\alpha\beta\gamma) = \sum_{q'} D^{(1)}_{q'q}(\alpha\beta\gamma)\, R_{q'}^{(1)} \tag{6.28-12}$$

der Operatoren $R_q^{(1)}$ und des Transformationsverhaltens (s. (A.7-14))

$$|\, nlm \,\rangle' \equiv D(\alpha\beta\gamma)\,|\, nlm \,\rangle = \sum_{m'} D^{(l)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)\,|\, nlm' \,\rangle \tag{6.28-13}$$

der Bahndrehimpuls-Eigenvektoren $|\, nlm \,\rangle$ bei räumlichen Drehungen $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)\,\vec{r}$ des physikalischen Systems. Die im reduzierten Matrixelement „versteckte“ Auswahlregel, dass Δl ungerade sein muss, ist hingegen eine Folge des Transformationsverhaltens (s. Gl. (2.3-3))

$$R_q^{(1)\prime} \equiv \Pi\, R_q^{(1)} \Pi^\dagger = -R_q^{(1)} \tag{6.28-14}$$

der Operatoren $R_q^{(1)}$ und des Transformationsverhaltens (s. (A.2-12))

$$|\, nlm \,\rangle' \equiv \Pi\,|\, nlm \,\rangle = (-1)^l\,|\, nlm \,\rangle \tag{6.28-15}$$

der Bahndrehimpuls-Eigenvektoren bei räumlicher Inversion $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{P}\vec{r} = -\vec{r}$ (siehe Aufgabe 2.2 (c)).

S. auch Aufgabe 9.4.

6.29 Wigner-Eckart-Theorem (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-24)):

$$\langle\, \tau jm \,|\, T_0^{(2)} \,|\, \tau jm \,\rangle = \langle\, j\,2\,m\,0 \,|\, jm \,\rangle \langle\, \tau j \,\|\, \mathsf{T}^{(2)} \,\|\, \tau j \,\rangle\,. \tag{6.29-1}$$

Für $j = 0$ und $j = \frac{1}{2}$ ist der Erwartungswert null, da dann die „Dreiecksungleichung“ $|j-2| \le j \le j+2$ verletzt ist, und deshalb der Clebsch-Gordan-Koeffizient null ist.

Bemerkungen

S. auch Aufgabe 9.7.

6.30 Die Drehimpuls-Vertauschungsbeziehungen (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-1)) stellen einen Sonderfall der für einen irreduziblen Tensoroperator vom Rang 1 gültigen Vertauschungsbeziehungen (A.7-21) dar. Die Operatoren

$$J^{(1)}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\, J_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\, (J_x \pm i J_y)\,, \qquad J^{(1)}_0 = J_z \tag{6.30-1}$$

sind somit die sphärischen Komponenten eines irreduziblen Tensoroperators bezüglich Drehungen, die von $\vec{J}$ selbst gemäß (A.7-12) „erzeugt“ werden. Für die Matrixelemente $\langle\, \tau' j' m' \,|\, J^{(1)}_q \,|\, \tau j m \,\rangle$ ist daher das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24) gültig:

$$\langle\, \tau' j' m' \,|\, J^{(1)}_q \,|\, \tau j m \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m\, q \,|\, j' m' \,\rangle \langle\, \tau' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \tau j \,\rangle\,. \tag{6.30-2}$$

Ich berechne das reduzierte Matrixelement auf dem Wege über das Matrixelement mit $q = 0,\ m' = m$:

$$\begin{aligned}
\langle\, \tau' j' m \,|\, J^{(1)}_0 \,|\, \tau j m \,\rangle &= \langle\, \tau' j' m \,|\, J_z \,|\, \tau j m \,\rangle = m\hbar\, \delta_{\tau'\tau}\, \delta_{j'j}\,, \\
\langle\, \tau' j' m \,|\, J^{(1)}_0 \,|\, \tau j m \,\rangle &= \langle\, j\, 1\, m\, 0 \,|\, j' m \,\rangle \langle\, \tau' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \tau j \,\rangle \;\Rightarrow \\
\langle\, \tau' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \tau j \,\rangle &= \frac{m\hbar}{\langle\, j\, 1\, m\, 0 \,|\, j m \,\rangle}\, \delta_{\tau'\tau}\, \delta_{j'j}\,.
\end{aligned} \tag{6.30-3}$$

Nach Tab. A.7-2 gilt

$$\langle\, j\, 1\, m\, 0 \,|\, j m \,\rangle = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}} \tag{6.30-4}$$

und somit folgt

$$\langle\, \tau' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \tau j \,\rangle = \sqrt{j(j+1)}\, \hbar\, \delta_{\tau'\tau}\, \delta_{j'j}\,. \tag{6.30-5}$$

6.31* Ich schreibe das innere Produkt in der Form (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-23))

$$\vec{J}\cdot\vec{A} = \sum_{q=-1}^{+1} (-1)^q\, J^{(1)}_{-q}\, A^{(1)}_q \tag{6.31-1}$$

und benütze die Beziehungen (s. Gl. (6.30-1) sowie Gl. (A.7-4) von Anhang A.7)

$$\begin{aligned}
\langle\, \tau j m \,|\, J^{(1)}_{\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\, \langle\, \tau j m \,|\, J_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\, \langle\, \tau j m \,|\, (J_{\mp})^{\dagger} \\
&= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(j \pm m)(j \mp m + 1)}\, \hbar\, \langle\, \tau j, m \mp 1 \,|
\end{aligned} \tag{6.31-2}$$

und

$$\langle\, \tau j m \,|\, J^{(1)}_0 = \langle\, \tau j m \,|\, J_z = \langle\, \tau j m \,|\, J_z^{\dagger} = m\hbar\, \langle\, \tau j m \,|\,. \tag{6.31-3}$$

Damit erhalte ich

$$\begin{aligned}\langle\,\tau jm\,|\,\vec{J}\cdot\vec{A}\,|\,\tau jm\,\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\langle\,\tau j,m-1\,|\,A^{(1)}_{-1}\,|\,\tau jm\,\rangle \\ &\quad + m\hbar\,\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle \\ &\quad - \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\langle\,\tau j,m+1\,|\,A^{(1)}_{1}\,|\,\tau jm\,\rangle\,.\end{aligned} \tag{6.31-4}$$

Aus dem Wigner-Eckart-Theorem (s. (A.7-24)) folgt

$$\langle\,\tau j,m\pm1\,|\,A^{(1)}_{\pm1}\,|\,\tau jm\,\rangle = \langle\,j\,1\,m,\pm1\,|\,j,m\pm1\,\rangle\langle\,\tau j\,\|\,\mathsf{A}^{(1)}\,\|\,\tau j\,\rangle\,, \tag{6.31-5a}$$

$$\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle = \langle\,j\,1\,m\,0\,|\,j\,m\,\rangle\langle\,\tau j\,\|\,\mathsf{A}^{(1)}\,\|\,\tau j\,\rangle\,, \tag{6.31-5b}$$

und ich kann somit die Matrixelemente der Operatoren $A^{(1)}_{\pm1}$ durch den Erwartungswert $\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle$ ausdrücken. Unter Verwendung von Tab. A.7-2 ergibt sich

$$\begin{aligned}\langle\,\tau j,m\pm1\,|\,A^{(1)}_{\pm1}\,|\,\tau jm\,\rangle &= \frac{\langle\,j\,1\,m,\pm1\,|\,j,m\pm1\,\rangle}{\langle\,j\,1\,m\,0\,|\,j\,m\,\rangle}\,\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle \\ &= \mp\sqrt{\frac{(j\mp m)(j\pm m+1)}{2m^2}}\,\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle\,.\end{aligned} \tag{6.31-6}$$

Einsetzen in Gl. (6.31-4) gibt schließlich

$$\begin{aligned}\langle\,\tau jm\,|\,\vec{J}\cdot\vec{A}\,|\,\tau jm\,\rangle = \langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle\,\frac{\hbar}{2m}\Big\{&(j+m)(j-m+1) \\ &+ 2m^2 + (j-m)(j+m+1)\Big\}\end{aligned}$$

bzw.

$$\langle\,\tau jm\,|\,A_z\,|\,\tau jm\,\rangle = \frac{m\hbar}{j(j+1)\hbar^2}\,\langle\,\tau jm\,|\,\vec{J}\cdot\vec{A}\,|\,\tau jm\,\rangle\,. \tag{6.31-7}$$

Bemerkungen

Das Theorem (6.31-7) ist immer dann von Nutzen, wenn sich der Erwartungswert zu $\vec{J}\cdot\vec{A}$ leichter berechnen lässt, als der unmittelbar gesuchte Erwartungswert zu A_z. Dies ist bei der Berechnung des landéschen g-Faktors für Atome mit einem Valenzelektron bzw. für Mehrelektronenatome mit LS-Addition der Fall (s. Aufgabe 6.32).

6.32

(a) Da $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}^{(2)}$ Vektoroperatoren bzgl. $\vec{J}=\vec{J}^{(1)}+\vec{J}^{(2)}$ sind (s. Gl. (A.7-21) von Anhang A.7), gilt dies auch für

$$\vec{A} := g_1\vec{J}^{(1)} + g_2\vec{J}^{(2)}\,, \tag{6.32-1}$$

und man kann für die Matrixelemente der sphärischen Komponenten von $\vec{A}$ und $\vec{J}$ in der gegebenen Standardbasis das Wigner-Eckart-Theorem anwenden:

$$\langle\, \gamma' j_1' j_2' j' m' \,|\, A_q^{(1)} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m\, q \,|\, j' m' \,\rangle \langle\, \gamma' j_1' j_2' j' \,\|\, \mathsf{A}^{(1)} \,\|\, \gamma j_1 j_2 j \,\rangle\,, \tag{6.32-2}$$

$$\langle\, \gamma' j_1' j_2' j' m' \,|\, J_q^{(1)} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m\, q \,|\, j' m' \,\rangle \langle\, \gamma' j_1' j_2' j' \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \gamma j_1 j_2 j \,\rangle\,. \tag{6.32-3}$$

In den $(2j+1)$-dimensionalen Teilräumen zu jeweils festem γ, j_1, j_2 und j folgt somit

$$\langle\, \gamma j_1 j_2 j m' \,|\, A_q^{(1)} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle = \underbrace{\frac{\langle\, \gamma j_1 j_2 j \,\|\, \mathsf{A}^{(1)} \,\|\, \gamma j_1 j_2 j \,\rangle}{\langle\, \gamma j_1 j_2 j \,\|\, \mathsf{J}^{(1)} \,\|\, \gamma j_1 j_2 j \,\rangle}}_{=:\, g(j_1 j_2 j)} \langle\, \gamma j_1 j_2 j m' \,|\, J_q^{(1)} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle$$

bzw.

$$\langle\, \gamma j_1 j_2 j m' \,|\, (g_1 \vec{J}^{(1)} + g_2 \vec{J}^{(2)}) \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle = g(j_1 j_2 j) \,\langle\, \gamma j_1 j_2 j m' \,|\, \vec{J} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle\,. \tag{6.32-4}$$

Dass der Proportionalitätsfaktor g für gegebenes g_1, g_2 nur von j_1, j_2 und j, nicht aber von den etwaigen weiteren Quantenzahlen γ abhängt, wird im Punkt (b) gezeigt.

(b)* Für die Berechnung von $g(j_1 j_2 j)$ wählt man am zweckmäßigsten $q = 0$, $m' = m$. Wegen $J_0^{(1)} = J_z$, $A_0^{(1)} = A_z$ erhält man dann

$$g(j_1 j_2 j) = \frac{1}{m\hbar} \,\langle\, \gamma j_1 j_2 j m \,|\, A_z \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle \tag{6.32-5a}$$

und unter Benützung der Formel (6.31-7)

$$g(j_1 j_2 j) = \frac{1}{j(j+1)\hbar^2} \,\langle\, \gamma j_1 j_2 j m \,|\, \vec{J}\cdot\vec{A} \,|\, \gamma j_1 j_2 j m \,\rangle\,. \tag{6.32-5b}$$

Den Erwartungswert in dieser Gleichung kann man unmittelbar angeben, da $\vec{J}\cdot\vec{A}$ durch die Operatoren $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$ und $\vec{J}^2$ ausgedrückt werden kann:

$$\begin{aligned}
\vec{J}\cdot\vec{A} &= (\vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)})\cdot(g_1\vec{J}^{(1)} + g_2\vec{J}^{(2)}) \\
&= g_1(\vec{J}^{(1)})^2 + g_2(\vec{J}^{(2)})^2 + (g_1+g_2)\,\vec{J}^{(1)}\cdot\vec{J}^{(2)} \\
&= g_1(\vec{J}^{(1)})^2 + g_2(\vec{J}^{(2)})^2 + (g_1+g_2)\,\frac{1}{2}\Big[\vec{J}^2 - (\vec{J}^{(1)})^2 - (\vec{J}^{(2)})^2\Big] \\
&= \frac{g_1+g_2}{2}\,\vec{J}^2 + \frac{g_1-g_2}{2}\Big[(\vec{J}^{(1)})^2 - (\vec{J}^{(2)})^2\Big] \quad \Rightarrow
\end{aligned} \tag{6.32-6}$$

$$g(j_1 j_2 j) = \frac{g_1+g_2}{2} + \frac{(g_1-g_2)\Big[j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)\Big]}{2j(j+1)}\,. \tag{6.32-7}$$

Bemerkungen

Da den Operatoren

$$\vec{A} := g_1 \vec{J}^{(1)} + g_2 \vec{J}^{(2)}, \qquad \vec{A}_{\text{eff}} := g(j_1 j_2 j)\, \vec{J} \tag{6.32-8}$$

in den Teilräumen zu jeweils festem γ, j_1, j_2 und j jeweils dieselbe Matrix zugeordnet ist, sind sie in diesen Teilräumen gleich. In Bezug auf den *gesamten* Zustandsraum sind $\vec{A}$ und $\vec{A}_{\text{eff}}$ nicht gleich, außer in dem trivialen Sonderfall $g_1 = g_2$. Man spricht deshalb von *Operatoräquivalenz*.

Die abgeleiteten Beziehungen finden ihre Anwendung bei der Berechnung der magnetischen Momente von Kernen und Atomen sowie beim Zeemaneffekt der Atome mit einem Valenzelektron bzw. mit mehreren Valenzelektronen bei LS-Addition. In diesem Zusammenhang wird $g(j_1 j_2 j)$ als *landéscher g-Faktor des Gesamtdrehimpulses* bezeichnet. Siehe dazu die Aufgaben 9.8, 9.10.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 6.1 bis 6.32 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 6.1 bis 6.32 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T6.1 Der Hamiltonoperator eines Spins $s = \frac{1}{2}$ besitze die Form

$$H_{\mathrm{S}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)\,\hbar\omega$$

(ω vorgegebene Kreisfrequenz, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$).

(a) Bestimme die exakte Grundzustandsenergie E_0 und den zugehörigen auf eins normierten Eigenvektor $|\,u_0\,\rangle$ von H_{S}.

(b) Führe das Variationsverfahren unter Verwendung der Versuchsvektorenschar

$$\Big\{|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = |+\rangle + e^{i\alpha}|-\rangle,\ \alpha \in [0, 2\pi)\Big\}$$

(α Variationsparameter) durch und vergleiche die daraus für E_0 erhaltene niedrigste obere Schranke $\widetilde{E}(\alpha_0)$ mit E_0.

(c) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Energie des Spins den Messwert E_0 findet, falls sich der Spin in dem aus dem Variationsverfahren gemäß (b) bestimmten Zustand befindet, d. h. wenn $|\,\chi\,\rangle = |\,\widetilde{u}(\alpha_0)\,\rangle$ gilt.

(Bemerkung: Ein Spin-Hamiltonoperator der gegebenen Form liegt vor, wenn man es mit dem Spin eines Elektrons in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (B/\sqrt{3})\,(1,1,1)$ zu tun hat. Es gilt dann $\omega = \omega_{\mathrm{L}} = \mu_{\mathrm{B}} B/\hbar$.)

Ergebnis zu (c): $$W = \frac{3+\sqrt{6}}{6} = 0{,}9082\,.$$

T6.2 Ein Spin $s = \frac{1}{2}$ gehöre einer gemischten Gesamtheit an, wobei die Gemischzustände und die zugehörigen statistischen Gewichte durch

$$|\,\chi_1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle + i\,|-\rangle\Big)\,, \qquad p_1 = \frac{3}{10}$$

$$|\,\chi_2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle - i\,|-\rangle\Big)\,, \qquad p_2 = \frac{7}{10}$$

gegeben seien ($|+\rangle$, $|-\rangle$ Eigenvektoren von S_z).

(a) Berechne den Erwartungswert der y-Komponente des Spins.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Spinprojektion auf die Richtung $\vec{e} = (0, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ findet.

Ergebnisse: $\langle S_y \rangle = -\frac{2}{5}\frac{\hbar}{2}$; $W = \frac{5-\sqrt{3}}{10} = 0{,}3268.$

T6.3 Der Hamiltonoperator eines Spins $s = \frac{1}{2}$ besitze die Form

$$H_{\mathrm{S}} = \frac{\hbar\omega}{2}\,\sigma_x$$

(ω vorgegebene Kreisfrequenz, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$; die Eigenvektoren von σ_z zu den Eigenwerten ± 1 werden mit $|\pm\rangle$ bezeichnet).

(a) Berechne die Matrix $\widehat{P_{+\mathrm{H}}}(t)$, welche dem Projektionsoperator $P_+ := |+\rangle\langle +|$ in Heisenbergbild und $\{m_s\}$-Darstellung (Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$) zugeordnet ist.
(Heisenbergbild und Schrödingerbild sollen zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ zusammenfallen.)

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der z-Komponente des Spins zum Zeitpunkt $t > 0$ den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ findet, falls der Spin zum Zeitpunkt $t_0 = 0$

(b1) einer gemischten Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho = |+\rangle\, p\, \langle +| \,+\, |-\rangle (1-p) \langle -|\,, \qquad 0 < p < 1$$

angehört;

(b2) einer reinen Gesamtheit mit dem Zustandsvektor

$$|\,\chi(0)\,\rangle = \sqrt{p}\,|+\rangle + \sqrt{1-p}\; e^{i\delta}|-\rangle\,, \qquad 0 < p < 1,\;\; \delta \in [0, 2\pi)$$

angehört.

(c) Kommentiere die Ergebnisse von (b).

(Bemerkung: Ein Spin-Hamiltonoperator der gegebenen Form liegt vor, wenn man es mit dem Spin eines Elektrons in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\,\vec{e}_x$, $B > 0$, zu tun hat. Es gilt dann $\omega/2 = \omega_{\mathrm{L}} = \mu_{\mathrm{B}} B/\hbar$.)

Ergebnisse zu (b):

$$\text{(b1):}\quad W_+(t) = \frac{1}{2}\big[1 + (2p-1)\cos\omega t\big]\,;$$

$$\text{(b2):}\quad W_+(t) = \frac{1}{2}\big[1 + (2p-1)\cos\omega t + 2\sqrt{p\,(p-1)}\,\sin\delta\,\sin\omega t\big]\,.$$

T6.4 Der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ eines Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens mit den räumlichen Freiheitsgraden ϑ, φ (ϑ, φ räumliche Polarwinkel) besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt in der $\{\vartheta\varphi m_s\}$-Darstellung die Form

$$\widehat{\psi}(\vartheta,\varphi) = \begin{bmatrix} \langle\,\vartheta\varphi+\,|\,\psi\,\rangle \\ \langle\,\vartheta\varphi-\,|\,\psi\,\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{00}(\vartheta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}\,Y_{11}(\vartheta,\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,Y_{10}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix}.$$

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses den Messwert null zu finden.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Observablenpaares $\{$*Bahndrehimpulsquadrat, z-Komponente des Bahndrehimpulses*$\}$ das Messwertpaar $\{2\hbar^2, 0\hbar\}$ zu finden.

(c) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des Observablenpaares $\{$*Bahndrehimpulsquadrat, x-Komponente des Spins*$\}$ das Messwertpaar $\{2\hbar^2, +\frac{\hbar}{2}\}$ zu finden.

T6.5 Zum betrachteten Zeitpunkt liege eine gemischte Gesamtheit von Einelektronatomen mit dem Dichteoperator

$$\rho = \sum_{j=\frac{1}{2},\frac{3}{2}} \sum_{m_j=-j}^{+j} |\,\psi_{jm_j}\,\rangle\,\frac{j+m_j}{7}\,\langle\,\psi_{jm_j}\,|$$

vor, wobei die auf eins normierten Gemischzustände durch $|\,\psi_{jm_j}\,\rangle = |\,n\,l\,\frac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle$ mit $l = 1$ und einem beliebigen festen n ($n \geq 2$) gegeben sind.

Berechne für diesen Zeitpunkt den Erwartungswert der z-Komponente des Spins.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

Ergebnis: $$\langle\,S_z\,\rangle = \frac{3}{7}\,\frac{\hbar}{2}\,.$$

T6.6 Ein Spin $s = 1$ gehöre einer gemischten Gesamtheit an, wobei die Gemischzustände und die zugehörigen statistischen Gewichte durch

$$|\,\chi_1\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|+1\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,0\,\rangle\,, \qquad p_1 = \frac{3}{5}$$

$$|\,\chi_2\,\rangle = |\,0\,\rangle\,, \qquad p_2 = \frac{2}{5}$$

gegeben seien ($|+1\,\rangle$, $|\,0\,\rangle$, $|-1\,\rangle$ Eigenvektoren von S_z zu den Eigenwerten $+\hbar$, 0, $-\hbar$).

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der y-Komponente des Spins den Messwert $-\hbar$ findet.

(b) Eine Gesamtheit mit *demselben* Dichteoperator (und damit mit denselben statistischen Eigenschaften bzgl. beliebiger Spinmessungen) kann auf verschiedene Arten realisiert werden. Stelle die obige gemischte Gesamtheit durch *orthogonale* Gemischzustände (angeschrieben als Linearkombinationen von $|+1\rangle$, $|\,0\,\rangle$ und $|-1\rangle$) und die zugehörigen statistischen Gewichte dar.

(Anleitung zu (a): Verwende die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-54).)

Ergebnis zu (a): $$W = \frac{2}{5}\,;$$

Ergebnis zu (b): $$|\,u_1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|+1\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,0\,\rangle\,, \qquad \lambda_1 = \frac{4}{5}$$
$$|\,u_2\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|+1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,0\,\rangle\,, \qquad \lambda_2 = \frac{1}{5}$$

T6.7 Berechne die Eigenwerte des im Spin-$\frac{3}{2}$-Hilbertraum wirkenden Spin-Hamiltonoperators

$$H_{\mathrm{S}} = \frac{\mu}{\hbar}\,\vec{B}\cdot\vec{S} + \frac{D}{\hbar^2}\Big[S_z^2 - \frac{5}{4}\,\hbar^2\mathbb{1}\Big]\,, \qquad \mu > 0,\quad D > 0$$

$$(\alpha) \quad \text{für den Fall} \quad \vec{B} = (0,0,B),\ \ B > 0\,;$$
$$(\beta)^* \quad \text{für den Fall} \quad \vec{B} = (B,0,0),\ \ B > 0\,.$$

Skizziere das jeweilige Niveauschema für vorgegebenes D in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfeldes für den Bereich $0 < \mu B \lesssim 3D$.

(Anleitung zu (β): Die Säkulardeterminante lässt sich durch Addieren von Spalten und Subtrahieren von Zeilen auf die Form

$$\begin{vmatrix} \widehat{A} & \widehat{B} \\ \widehat{0} & \widehat{C} \end{vmatrix}\,, \qquad \widehat{A},\ \widehat{B},\ \widehat{C}\ \ [2\times 2]\text{-Untermatrizen},\ \ \widehat{0}\ \ [2\times 2]\text{-Nullmatrix}$$

bringen, wodurch die Säkulargleichung in zwei quadratische Gleichungen „zerfällt“.)

(Bemerkung: Die Eigenwerte dieses Spin-Hamiltonoperators sind die störungstheoretischen Energiekorrekturen, welche im Rahmen einer phänomenologischen Behandlung die Aufspaltung der Energieniveaus eines paramagnetischen Ions mit „effektivem“ Spin $\frac{3}{2}$ in einem Kristallfeld mit axialer Symmetrie bezüglich der z-Achse und einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ beschreiben. Für einen „effektiven“ Spin S hat man in H_{S} den Faktor $\frac{5}{4}$ durch den Faktor $\frac{1}{3}S(S+1)$ zu ersetzen, und H_{S} wirkt dann im Spin-S-Hilbertraum.[3])

Ergebnis zu (β): $$E_{1,3} = -\frac{1}{2}\,\mu B \mp \sqrt{D^2 + \mu BD + \mu^2 B^2}\,,$$
$$E_{2,4} = +\frac{1}{2}\,\mu B \mp \sqrt{D^2 - \mu BD + \mu^2 B^2}\,.$$

[3] Bleaney, B., und D. J. E. Ingram: Proc. Roy. Soc. (London) A205, 336 (1951).

T6.8 Der Hamiltonoperator eines Systems mit einem Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen und einem Spin-1-Teilchen in drei Raumdimensionen sei durch

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)},$$
$$H_0^{(i)} = \frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m^{(i)}} + V(R^{(i)})\,, \quad i = 1,2, \qquad W = \lambda\, \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+$$

gegeben. Dabei sei $V(R)$ ein Einteilchenpotential, welches gebundene Einteilchenzustände $|\, nlm_l\,;\mu\,\rangle$ zu bekannten Einteilchenenergien $\epsilon_{nl}(\mu)$ (Parameter μ ... Teilchenmasse) besitzt.

(a) Gib die Grundzustandsenergie E_0^0 von H_0, deren Vielfachheit g_0^0 sowie eine orthonormierte Basis des zugehörigen Eigenraumes $\mathscr{H}(E_0^0)$ an.

(b) Berechne exakt die durch die Wechselwirkung W bedingte Aufspaltung des Energieniveaus E_0^0.

(Siehe auch die Aufgabe T7.7.)

T6.9 Ein System mit einem Spin $s_1 = \frac{3}{2}$ und einem Spin $s_2 = 1$ befinde sich im Gesamtspin-Eigenzustand $|\,\chi\,\rangle = |\,\frac{3}{2}\,1\,S M_S\,\rangle$ mit den Quantenzahlen $S = \frac{1}{2}$, $M_S = -\frac{1}{2}$ ($|\,\chi\,\rangle$ gemeinsamer Eigenvektor von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z).

(a) Berechne die Unbestimmtheit der z-Komponente von Spin 1.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der x-Komponente von Spin 2 den Messwert $+\hbar$ erhält.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sowie die Drehmatrix $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-54).)

Ergebnisse: $$\Delta S_z^{(1)} = \frac{\sqrt{5}}{3}\,\hbar\,; \qquad W = \frac{1}{3}\,.$$

T6.10 Ein System mit einem Spin $s_1 = 1$ und einem Spin $s_2 = \frac{1}{2}$ befinde sich im Gesamtspin-Eigenzustand $|\,\chi\,\rangle = |\,1\,\frac{1}{2}\,S M_S\,\rangle$ mit den Quantenzahlen $S = \frac{1}{2}$, $M_S = -\frac{1}{2}$ ($|\,\chi\,\rangle$ gemeinsamer Eigenvektor von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z).

Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der x-Komponenten der beiden Spins das Messwertpaar $\{0, +\frac{\hbar}{2}\}$ erhält.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sowie die Drehmatrizen $\widehat{D}^{(1/2)}$, $\widehat{D}^{(1)}$ Anhang A.2, Gl. (A.2-53), (A.2-54).)

Ergebnis: $$W = \frac{1}{4}\,.$$

T6.11 Ein System mit einem Spin $s_1 = \frac{3}{2}$ und einem Spin $s_2 = 1$ gehöre einer gemischten Gesamtheit an, wobei die Gemischzustände durch die folgenden gemeinsamen Eigenvektoren $|\,\frac{3}{2}\,1\,S\,M_S\,\rangle$ von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z gegeben sind:

$$|\,\chi_1\,\rangle = |\,\tfrac{3}{2}\,1\,\tfrac{3}{2}\,\tfrac{3}{2}\,\rangle\,, \qquad |\,\chi_2\,\rangle = |\,\tfrac{3}{2}\,1\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\,.$$

Die statistischen Gewichte dieser Gemischzustände seien $p_1 = \frac{4}{5}$, $p_2 = \frac{1}{5}$.

Berechne die Unbestimmtheit der z-Komponente von Spin 2.

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

Ergebnis: $$\Delta S_z^{(2)} = \frac{\sqrt{2189}}{75}\,\hbar = 0{,}6238\,\hbar\,.$$

T6.12 Der Hamiltonoperator eines Systems von zwei Spins $s = \frac{1}{2}$ besitze die Form

$$H_\mathrm{S} = \frac{\hbar\omega_1}{2}\,\sigma_z^{(1)} + \frac{\hbar\omega_2}{2}\,\sigma_z^{(2)}$$

(ω_1, $\omega_2 < \omega_1$ vorgegebene Kreisfrequenzen, $\vec{S}^{(1)} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}^{(1)}$, $\vec{S}^{(2)} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}^{(2)}$).
Der Zustandsvektor des Zwei-Spin-Systems zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ sei

$$|\,\chi(0)\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+-\,\rangle + |\,-+\,\rangle\Big)$$

($|\,\pm\,\pm\,\rangle$, $|\,\pm\,\mp\,\rangle$ gemeinsame Eigenvektoren von $\sigma_z^{(1)}$, $\sigma_z^{(2)}$ zu den Eigenwertpaaren $\{\pm1, \pm1\}$ bzw. $\{\pm1, \mp1\}$).

(a) Berechne den Zustandsvektor $|\,\chi(t)\,\rangle$ des Zwei-Spin-Systems für $t > 0$.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung des Observablenpaares $\{$*Gesamtspinquadrat, z-Komponente des Gesamtspins*$\}$ zu einem Zeitpunkt $t > 0$ ein Messwertpaar $\{S(S+1)\hbar^2, M_S\hbar\}$ mit vorgegebenem S, M_S ($S = 0, 1,$ $M_S = -S, -S+1, \ldots, +S$) findet.

(c) Berechne den Erwartungswert des Gesamtspinquadrates und den Erwartungswert der z-Komponente des Gesamtspins für einen Zeitpunkt $t > 0$.

(Anleitung: Die benötigten Clebsch-Gordan-Koeffizienten können dabei als bekannt angesehen werden.)

T6.13 Aus den kartesischen Komponenten zweier Vektoroperatoren $\vec{A}$, $\vec{B}$ kann man durch

$$S_{ij} := \frac{3}{2}(A_iB_j + A_jB_i) - \delta_{ij}\,\vec{A}\cdot\vec{B}$$

die kartesischen Komponenten eines irreduziblen Tensoroperators vom Rang 2 erhalten.[4] Aus den fünf unabhängigen kartesischen Komponenten[5] $S_{11}, S_{12}, S_{13}, S_{22}$ und S_{23} erhält man dann gemäß

$$S_0^{(2)} = -(S_{11} + S_{22}) = S_{33}\,, \qquad S_{\pm 1}^{(2)} = \mp\sqrt{\frac{2}{3}}\,(S_{13} \pm i\,S_{23})\,,$$

$$S_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}}\,(S_{11} - S_{22} \pm 2i\,S_{12})$$

die *sphärischen Komponenten* $S_\mu^{(2)}$ des irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{S}^{(2)}$.

(a) Berechne für den Spezialfall $\vec{A} = \vec{B} = \vec{L}$ (Bahndrehimpulsoperator eines Teilchens in drei Raumdimensionen) die sphärische Komponente $S_0^{(2)}$ von $\mathsf{S}^{(2)}$.

(b) Berechne für den irreduziblen Tensoroperator $\mathsf{S}^{(2)}$ von (a) das reduzierte Matrixelement $\langle\, n'l' \,\|\, \mathsf{S}^{(2)} \,\|\, nl \,\rangle$ in einer Standardbasis $\{\,|\, nlm \,\rangle\}$.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\langle\, l\,2\,m\,0 \,|\, l\,m \,\rangle = \frac{2\,[3m^2 - l(l+1)]}{\sqrt{(2l+3)(2l+2)2l(2l-1)}}\,.)$$

[4] Siehe z. B. [2].

[5] Es gilt $S_{ji} = S_{ij}$ und $\sum_{i=1}^{3} S_{ii} = \mathbb{0}$.

7. Permutationen. Identische Teilchen

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. die Kapitel 8 und 9.

Angaben

7.1 Betrachtet wird ein System von zwei Teilchen in einer Raumdimension $x \in \mathbb{R}$. Der Operator, der im Produktraum $\mathscr{H}_{\mathrm{B}} = \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(2)}$ der Einteilchen-Bahnhilberträume $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(1)}$, $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(2)}$ der Vertauschung der Bahnzustände der beiden Teilchen zugeordnet ist, kann formal durch seine Wirkung im Basissystem der gemeinsamen Eigenzustände $|\, x_1 x_2 \,\rangle = |\, x_1 \,\rangle^{(1)} |\, x_2 \,\rangle^{(2)}$ der Ortsoperatoren von Teilchen 1 und 2 gemäß

$$P_{(12)}^{\mathrm{B}} |\, x_1 x_2 \,\rangle := |\, x_2 x_1 \,\rangle \,, \qquad \forall\, x_1, x_2 \in \mathbb{R}$$

definiert werden. Der Operator $P_{(12)}^{\mathrm{B}}$ wird als *Permutationsoperator* in $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}$ zur Permutation $p = (12)$ oder als *Bahnaustauschoperator* des Zweiteilchensystems bezeichnet. Zeige, dass für den Operator $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{B}}$

(a) $P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}^{\dagger} = P_{(12)}$ gilt;

(b) $P_{(12)}$ nur die Eigenwerte $c_{(12)} = +1, -1$ besitzen kann;

(c) die Vektoren

$$|\, x\, x \,\rangle_{\mathrm{s}} := |\, x\, x \,\rangle \,,$$

$$|\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{s}} := \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\, x_1 x_2 \,\rangle + |\, x_2 x_1 \,\rangle \Big) \,, \quad x_1 < x_2$$

$$|\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{a}} := \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\, x_1 x_2 \,\rangle - |\, x_2 x_1 \,\rangle \Big) \,, \quad x_1 < x_2$$

Eigenvektoren von $P_{(12)}$ sind.

7.2 Zeige unter Zugrundelegung der in Aufgabe 7.1 gegebenen formalen Definition des Bahnaustauschoperators $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{B}}$, dass für die Operatoren der fundamentalen Observablen Ort und Impuls zweier Teilchen in einer Raumdimension $x \in \mathbb{R}$

$$P_{(12)} X^{(1)} P_{(12)}^{\dagger} = X^{(2)} \,, \qquad P_{(12)} X^{(2)} P_{(12)}^{\dagger} = X^{(1)} \,,$$
$$P_{(12)} P^{(1)} P_{(12)}^{\dagger} = P^{(2)} \,, \qquad P_{(12)} P^{(2)} P_{(12)}^{\dagger} = P^{(1)}$$

gilt.

7.3 Der Hamiltonoperator eines Systems von zwei spinlosen Teilchen gleicher Masse besitze die Form (eindimensionales Problem)

$$H = \frac{(P^{(1)})^2}{2m} + \frac{(P^{(2)})^2}{2m} + V(X^{(1)}, X^{(2)})$$

mit

$$V(X^{(1)}, X^{(2)}) = V(X^{(2)}, X^{(1)})\,.$$

Zeige: Ist $u(x_1, x_2)$ Eigenfunktion von $H^{\{x_1 x_2\}}$ zu einem einfachen Eigenwert E, so gilt entweder $u(x_2, x_1) = +u(x_1, x_2)$ oder $u(x_2, x_1) = -u(x_1, x_2)$.

(Anleitung: Verwende die in den Aufgaben 7.1 und 7.2 bewiesenen Aussagen.)

7.4* Betrachtet wird ein System von zwei Teilchen in einer Raumdimension $x \in \mathbb{R}$. Verifiziere, dass der im Produktraum $\mathscr{H}_{\mathrm{B}} = \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(2)}$ der Einteilchen-Bahnhilberträume $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(1)}$, $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(2)}$ definierte Operator

$$\begin{aligned} P_{(12)}^{\mathrm{B}} &= P_{(12)}^{\mathrm{B}}(X^{(1)}, X^{(2)}, P^{(1)}, P^{(2)}) \\ &= \exp\left\{\frac{i\pi}{2\hbar}\left[\frac{(P^{(1)} - P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}(X^{(1)} - X^{(2)})^2 - \hbar\mathbb{1}\right]\right\} \end{aligned}$$

($\mu \in \mathbb{R}^+$ beliebig) die Eigenschaft $P_{(12)}^{\mathrm{B}} |\, x_1 x_2 \,\rangle = |\, x_2 x_1 \,\rangle$, $\forall\, x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, besitzt und somit den Bahnaustauschoperator darstellt.

(Anleitung: Beachte, dass der Operator

$$\frac{(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}[(X^{(1)})^2 + (X^{(2)})^2]$$

von der Bauart des Hamiltonoperators eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators ist. Definiere analog zu Anhang A.5, Gl. (A.5-1), (A.5-2) Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren und entwickle $|\, x_1 x_2 \,\rangle$ nach den gemeinsamen Eigenzuständen $|\, n_1 n_2 \,\rangle$ von $a^{(1)\dagger}a^{(1)}$ und $a^{(2)\dagger}a^{(2)}$. Stelle dabei $|\, n_1 n_2 \,\rangle$ durch den „Vakuumzustand“ $|\, 0\,0 \,\rangle$ und die Operatoren $a^{(i)\dagger}$ dar.)

7.5 Betrachtet wird ein System von zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen. Der Operator, der im Produktraum $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$ der beiden Spin-$\frac{1}{2}$-Hilberträume $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)}$, $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$ der Vertauschung der Spinzustände der beiden Teilchen zugeordnet ist, kann durch seine Wirkung im Basissystem der gemeinsamen Eigenzustände $|\, m_1 m_2 \,\rangle = |\, m_1 \,\rangle^{(1)} |\, m_2 \,\rangle^{(2)}$ der Spinoperatoren $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ von Spin (1) und Spin (2) gemäß

$$P_{(12)}^{\mathrm{S}} |\, m_1 m_2 \,\rangle := |\, m_2 m_1 \,\rangle\,, \qquad m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2}$$

definiert werden. Der Operator $P_{(12)}^{\mathrm{S}}$ wird als *Permutationsoperator* in $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$ zur Permutation $p = (12)$ oder als *Spinaustauschoperator* des Zweiteilchensystems bezeichnet. Zeige, dass für den Operator $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{S}}$

(a) $P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}^{\dagger} = P_{(12)}$ gilt;

(b) $P_{(12)}$ nur die Eigenwerte $c_{(12)} = +1, -1$ besitzen kann;

(c) die gemeinsamen Eigenvektoren von $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z Eigenvektoren von $P_{(12)}$ sind ($\vec{S} := \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ Operator zum Gesamtspin).

(Die Eigenvektoren zum Gesamtspin können dabei als bekannt angesehen werden; siehe Gl. (6.18-2), (6.18-3).)

7.6 Zeige unter Zugrundelegung der in Aufgabe 7.5 gegebenen Definition des Spinaustauschoperators $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{S}}$, dass für die Spinoperatoren $\vec{S}^{(1)}$, $\vec{S}^{(2)}$ zweier Spins $s = \frac{1}{2}$

$$P_{(12)} \vec{S}^{(1)} P_{(12)}^{\dagger} = \vec{S}^{(2)}\,, \qquad P_{(12)} \vec{S}^{(2)} P_{(12)}^{\dagger} = \vec{S}^{(1)}$$

gilt.

7.7 Betrachtet wird ein System von zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen. Verifiziere, dass der im Produktraum $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$ der beiden Spin-$\frac{1}{2}$-Hilberträume $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)}$, $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$ definierte Operator

$$P_{(12)}^{\mathrm{S}} = P_{(12)}^{\mathrm{S}}(\vec{S}^{(1)}, \vec{S}^{(2)}) = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1} + \frac{4}{\hbar^2}\, \vec{S}^{(1)} . \vec{S}^{(2)}\Big]$$

die Eigenschaft $P_{(12)}^{\mathrm{S}} |\, m_1 m_2 \,\rangle = |\, m_2 m_1 \,\rangle$, $m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2}$, besitzt und somit den Spinaustauschoperator darstellt.

7.8 Betrachtet wird ein System von drei Spins $s = \frac{1}{2}$. Im Produktraum $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(3)}$ der zugehörigen Spin-$\frac{1}{2}$-Hilberträume sei der Vektor

$$|\, u \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\, +-+ \,\rangle - |\, -++ \,\rangle\Big)$$

gegeben ($|\, \pm \,\rangle^{(i)} \equiv |\, m = \pm\frac{1}{2} \,\rangle^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$). Welcher Vektor ergibt sich

(a) durch Symmetrisieren von $|\, u \,\rangle$?

(b) durch Antisymmetrisieren von $|\, u \,\rangle$?

7.9 Betrachtet wird ein System von N Spins $s = \frac{1}{2}$. Zeige, dass der Operator des Betragsquadrats des Gesamtspins $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} + \ldots + \vec{S}^{(N)}$ in der Form

$$\vec{S}^2 = \left[-\frac{N(N-4)}{4}\,\mathbb{1} \;+ \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{N} P_{(jk)}\right]\hbar^2$$

geschrieben werden kann, wobei $P_{(jk)} \equiv P_{(jk)}^{\mathrm{S}}$ der Permutationsoperator ist, welcher der Vertauschung von Spin (j) mit Spin (k) zugeordnet ist.

(Anleitung: Verwende die Aussage von Aufgabe 7.7.)

7.10* Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| \leq a \\ +\infty & \text{für } |x| > a \end{cases} .$$

Da der Hamiltonoperator des betrachteten Zweiteilchensystems nicht vom Spin abhängt, vertauscht er mit den Operatoren $\vec{S}^2$ und S_z, und die Energieeigenzustände können unter anderem durch die Quantenzahlen S, M_S zum Gesamtspin gekennzeichnet werden ($\vec{S} := \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ Operator zum Gesamtspin). Schreibe die entsprechenden auf eins normierten Eigenfunktionen der sechs Zweiteilchenzustände niedrigster Energie in der $\{x_1 x_2 m_1 m_2\}$-Darstellung an. Wie groß sind die zugehörigen Energien des Zweiteilchensystems?

(Die Einteilchenenergien und Einteilchen-Energieeigenfunktionen können dabei als bekannt angesehen werden; s. Gl. (2.10-1), (2.10-2).)

7.11 Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem spinunabhängigen Zentralpotential, welches gebundene Einteilchenzustände $|\, nlm_l \,\rangle$ zu Einteilchenenergien ϵ_{nl} besitzt. Da für das betrachtete Zweiteilchensystem die Operatoren H, $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z und S_z ($\vec{L} := \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)}$ Operator zum Gesamt-Bahndrehimpuls, $\vec{S} := \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ Operator zum Gesamtspin) untereinander und mit dem Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ vertauschen, können die Energieeigenzustände des Systems unter anderem durch die Quantenzahlen L, S, M_L und M_S zum Gesamt-Bahndrehimpuls und Gesamtspin gekennzeichnet werden. Schreibe die entsprechenden Energieeigenzustände („LS-Vektoren“) an, welche zu einer Konfiguration np^2 gehören ($n_1 = n_2 = n$, $l_1 = l_2 = 1$).

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

7.12* Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem spinunabhängigen eindimensionalen Potential $V(x)$, welches gebundene Einteilchenzustände $|\, n-1 \,\rangle$, $n \in \mathbb{N}$, zu Einteilchenenergien ϵ_{n-1} ($\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \ldots$) besitzt. Das Zweiteilchensystem sei

(α) in jenem Energieeigenzustand, in dem die beiden Einteilchenzustände $|\, 0+ \,\rangle = |\, 0 \,\rangle_{\mathrm{B}} |+\rangle_{\mathrm{S}}$ und $|\, 1- \,\rangle = |\, 1 \,\rangle_{\mathrm{B}} |-\rangle_{\mathrm{S}}$ besetzt sind;

(β) in seinem ersten angeregten Singulettzustand;

(γ) in seinem energetisch tiefsten Triplettzustand mit $M_S = m_1 + m_2 = 0$.

(a) Wie lautet der jeweilige auf eins normierte Zustandsvektor $|\, \psi \,\rangle$ des Zweiteilchensystems und wie schreibt sich dieser als Slaterdeterminante bzw. als Linearkombination von Slaterdeterminanten der Einteilchenzustände $|\, 0\pm \,\rangle$, $|\, 1\pm \,\rangle$?

(b) Berechne die jeweilige Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, eines der beiden Teilchen am Ort x_1 mit „Spin auf“ und zugleich das andere am Ort x_2 mit „Spin ab“ anzutreffen. Welche Ergebnisse erhält man speziell für $x_1 = x_2$?

(Die Einteilchen-Energieeigenfunktionen können dabei als bekannt angesehen werden.)

7.13 Drei nichtwechselwirkende identische Teilchen mit Spin $s = 0$ befinden sich in einem unendlich tiefen eindimensionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| \le a \\ +\infty & \text{für } |x| > a \end{cases} .$$

Schreibe die auf eins normierten Energieeigenfunktionen für den Grundzustand und die zwei energetisch niedrigsten Anregungszustände des Dreiteilchensystems an. Wie groß sind die zugehörigen Energien des Dreiteilchensystems?

(Die Einteilchenenergien und Einteilchen-Energieeigenfunktionen können dabei als bekannt angesehen werden; s. Gl. (2.10-1), (2.10-2).)

7.14* Der Hamiltonoperator eines Systems von zwei wechselwirkenden identischen Teilchen mit Spin $s = 0$ und Masse μ sei durch

$$H = \frac{(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu\Omega^2}{2}\left[(X^{(1)})^2 + (X^{(2)})^2\right] + \frac{\mu\lambda^2}{2}(X^{(1)} - X^{(2)})^2$$

gegeben (eindimensionales Problem). Löse das Eigenwertproblem von H exakt und schreibe die auf eins normierten Energieeigenfunktionen in der $\{x_1 x_2\}$-Darstellung an.

(Die Energieeigenfunktionen und Energieeigenwerte des linearen harmonischen Oszillators können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.5.)

(Anleitung: Transformiere von den Operatoren $X^{(1)}$, $X^{(2)}$, $P^{(1)}$, $P^{(2)}$ auf die Operatoren X_0, X, P_0, P, welche die Schwerpunktskoordinate, die Relativkoordinate, den Schwerpunktsimpuls und den Relativimpuls repräsentieren.)

7.15* Der Operator zu einer Observablen eines Systems von N identischen Fermiteilchen besitze die Form

$$C = \sum_{i=1}^{N} C^{(i)}, \qquad C^{(i)} = f(\vec{R}^{(i)}, \vec{P}^{(i)}, \vec{S}^{(i)}) .$$

Weiter werden zwei N-Teilchen-Slaterdeterminanten $|\, u \,\rangle$, $|\, w \,\rangle$ von orthonormierten Einteilchenzuständen $|\, v_\lambda \,\rangle$, $\lambda \in \mathbb{N}$, betrachtet:

$$|\, u \,\rangle \equiv |\, v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \ldots v_{\alpha_N} \,\rangle_{\mathrm{a}} , \qquad \alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_N , \tag{7.32-1}$$

$$|\, w \,\rangle \equiv |\, v_{\beta_1} v_{\beta_2} \ldots v_{\beta_N} \,\rangle_{\mathrm{a}} , \qquad \beta_1 < \beta_2 < \ldots < \beta_N . \tag{7.32-2}$$

Beweise die folgenden Aussagen für die Größe $\langle\, w \,|\, C \,|\, u \,\rangle$:

(a) Unterscheiden sich die Vektoren $|\,w\,\rangle$, $|\,u\,\rangle$ hinsichtlich mehrerer Einteilchenzustände, so folgt $\langle\, w\,|\,C\,|\,u\,\rangle = 0$.

(b) Unterscheiden sich die Vektoren $|\,w\,\rangle$, $|\,u\,\rangle$ hinsichtlich eines einzigen Einteilchenzustandes, d. h. stimmt der Satz $\{\,|\,v_{\beta_i}\,\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, j-1, j+1, \ldots, N\,\}$ mit dem Satz $\{\,|\,v_{\alpha_i}\,\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, k-1, k+1, \ldots, N\,\}$ überein, während $|\,v_{\beta_j}\,\rangle \neq |\,v_{\alpha_k}\,\rangle$ gilt, so folgt

$$\langle\, w\,|\,C\,|\,u\,\rangle = (-1)^{k-j}\ {}^{(1)}\langle\, v_{\beta_j}\,|\,C^{(1)}\,|\,v_{\alpha_k}\,\rangle^{(1)}\,.$$

(c) Gilt $|\,w\,\rangle = |\,u\,\rangle$, so erhält man

$$\langle\, u\,|\,C\,|\,u\,\rangle = \sum_{i=1}^{N} {}^{(1)}\langle\, v_{\alpha_i}\,|\,C^{(1)}\,|\,v_{\alpha_i}\,\rangle^{(1)}\,.$$

(Anleitung: Beachte, dass der Operator C mit dem Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ vertauscht.)

Lösungen

7.1

(a)
$$P_{(12)}^2 |\, x_1 x_2 \,\rangle = P_{(12)} |\, x_2 x_1 \,\rangle = |\, x_1 x_2 \,\rangle\,, \quad \forall |\, x_1 x_2 \,\rangle \quad \Rightarrow$$
$$P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}\,; \tag{7.1-1}$$
$$\langle\, x_1' x_2' \,|\, P_{(12)} |\, x_1 x_2 \,\rangle = \langle\, x_1' x_2' \,|\, x_2 x_1 \,\rangle = {}^{(1)}\langle\, x_1' \,|\, x_2 \,\rangle^{(1)}\, {}^{(2)}\langle\, x_2' \,|\, x_1 \,\rangle^{(2)}$$
$$= \delta(x_1' - x_2)\,\delta(x_2' - x_1) = {}^{(1)}\langle\, x_2' \,|\, x_1 \,\rangle^{(1)}\, {}^{(2)}\langle\, x_1' \,|\, x_2 \,\rangle^{(2)} = \langle\, x_2' x_1' \,|\, x_1 x_2 \,\rangle$$
$$= \Big[\langle\, x_1 x_2 \,|\, x_2' x_1' \,\rangle\Big]^* = \Big[\langle\, x_1 x_2 \,|\, P_{(12)} |\, x_1' x_2' \,\rangle\Big]^*, \quad \forall |\, x_1 x_2 \,\rangle, |\, x_1' x_2' \,\rangle \quad \Rightarrow$$
$$P_{(12)}^\dagger = P_{(12)}\,; \tag{7.1-2}$$

(b)
$$\left.\begin{array}{l} |\, u \,\rangle \in \mathscr{H}_{\mathrm{B}} = \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(2)} \\ P_{(12)} |\, u \,\rangle = c_{(12)} |\, u \,\rangle \\ |\, u \,\rangle \neq \emptyset \\ P_{(12)}^2 = \mathbb{1} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad P_{(12)}^2 |\, u \,\rangle = c_{(12)}^2 |\, u \,\rangle = |\, u \,\rangle \quad \Rightarrow$$
$$c_{(12)} = +1, -1\,; \tag{7.1-3}$$

(c)
$$P_{(12)} |\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{s}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(P_{(12)} |\, x_1 x_2 \,\rangle + P_{(12)} |\, x_2 x_1 \,\rangle \Big)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\, x_2 x_1 \,\rangle + |\, x_1 x_2 \,\rangle \Big) = + |\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{s}}\,, \qquad x_1 < x_2\,; \tag{7.1-4a}$$
$$P_{(12)} |\, x\, x \,\rangle_{\mathrm{s}} = P_{(12)} |\, x\, x \,\rangle = |\, x\, x \,\rangle = |\, x\, x \,\rangle_{\mathrm{s}}\,; \tag{7.1-4b}$$
$$P_{(12)} |\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(P_{(12)} |\, x_1 x_2 \,\rangle - P_{(12)} |\, x_2 x_1 \,\rangle \Big)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|\, x_2 x_1 \,\rangle - |\, x_1 x_2 \,\rangle \Big) = - |\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{a}}\,, \qquad x_1 < x_2\,. \tag{7.1-4c}$$

Bemerkungen

Die Vektoren ($\mathscr{S}$ Symmetrisierungsoperator in $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}$; s. Anhang A.8, Gl. (A.8-7), (A.8-15))

$$|\, x_1 x_2 \,\rangle_{\mathrm{s}} := \sqrt{2}\,\mathscr{S} |\, x_1 x_2 \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} + P_{(12)}) |\, x_1 x_2 \,\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\, x_1 x_2 \,\rangle + |\, x_2 x_1 \,\rangle), \qquad x_1 < x_2 \tag{7.1-5a}$$
$$|\, x\, x \,\rangle_{\mathrm{s}} := |\, x\, x \,\rangle \tag{7.1-5b}$$

bilden ein Basissystem im Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ der symmetrischen Zustände von $\mathscr{H}_\mathrm{B} = \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}$. Handelt es sich bei den beiden Teilchen um *identische* Spin-0-Teilchen, so ist $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ der Zustandsraum des Systems (Symmetrisierungsprinzip für Systeme identischer Boseteilchen).

Die Verallgemeinerung auf Teilchen mit drei räumlichen Freiheitsgraden erfolgt analog wie beim Paritätsoperator in Aufgabe 2.2.

Siehe auch die dortigen Bemerkungen über Diracschreibweise und Ortseigenkets.

7.2 Ich gehe von der in Aufgabe 7.1 gegebenen formalen Definition des Bahnaustauschoperators $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^\mathrm{B}$ aus und verwende die aus dieser Definition gefolgerten Beziehungen (7.1-1), (7.1-2):

$$\left.\begin{aligned} &P_{(12)}\,|\,x_1x_2\,\rangle = |\,x_2x_1\,\rangle \\ &P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}^\dagger = P_{(12)} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} P_{(12)}X^{(1)}P_{(12)}^\dagger\,|\,x_1x_2\,\rangle &= P_{(12)}X^{(1)}\,|\,x_2x_1\,\rangle \\ &= x_2\,P_{(12)}\,|\,x_2x_1\,\rangle = x_2\,|\,x_1x_2\,\rangle \\ &= X^{(2)}\,|\,x_1x_2\,\rangle\,,\ \forall\,|\,x_1x_2\,\rangle \ \Rightarrow \end{aligned}$$

$$P_{(12)}X^{(1)}P_{(12)}^\dagger = X^{(2)}\,, \qquad P_{(12)}X^{(2)}P_{(12)}^\dagger = X^{(1)}\,. \tag{7.2-1a}$$

Für den Beweis von

$$P_{(12)}P^{(1)}P_{(12)}^\dagger = P^{(2)}\,, \qquad P_{(12)}P^{(2)}P_{(12)}^\dagger = P^{(1)} \tag{7.2-1b}$$

verwende ich außerdem die Vollständigkeitsbeziehung der Ortseigenzustände sowie die Beziehung $\langle\,x_1x_2\,|\,p_1p_2\,\rangle = \langle\,x_2x_1\,|\,p_2p_1\,\rangle$. Der erste Beweisschritt lautet

$$P_{(12)}\,|\,p_1p_2\,\rangle = \int\limits_\mathbb{R}\int\limits_\mathbb{R} dx_1\,dx_2\,\underbrace{P_{(12)}\,|\,x_1x_2\,\rangle}_{|\,x_2x_1\,\rangle}\,\underbrace{\langle\,x_1x_2\,|\,p_1p_2\,\rangle}_{\langle\,x_2x_1\,|\,p_2p_1\,\rangle} = |\,p_2p_1\,\rangle\,,$$

die übrigen Schritte sind analog wie oben.

Bemerkungen

Siehe die analoge Aufgabe 2.3 und die Bemerkungen dazu.

7.3 Mit den Formeln von Aufgabe 7.1 und Aufgabe 7.2 und der Spektraldarstellung des Operators V (der keine Potenzreihenentwicklung besitzen muss)

$$V(X^{(1)}, X^{(2)}) = \int\limits_\mathbb{R}\int\limits_\mathbb{R} dx_1\,dx_2\,|\,x_1x_2\,\rangle\,V(x_1,x_2)\,\langle\,x_1x_2\,| \tag{7.3-1}$$

zeigt man leicht, dass für den gegebenen Hamiltonoperator

$$P_{(12)}HP_{(12)}^\dagger = H \quad \Rightarrow \quad [P_{(12)}, H] = \mathbb{0} \tag{7.3-2}$$

gilt. (S. die ähnlichen Rechnungen in Aufgabe 2.4.) Einen Hamiltonoperator mit der Eigenschaft (7.3-2) nennt man *symmetrisch* bzgl. Teilchenvertauschung. Aus (7.3-2) folgt, dass ein Eigenvektor $|\,u\,\rangle$ von H zu einem nichtentarteten Eigenwert E auch Eigenvektor von $P_{(12)}$ zu einem der möglichen Eigenwerte $+1, -1$ sein muss:

$$P_{(12)}|\,u\,\rangle = \pm\,|\,u\,\rangle \quad \Rightarrow \tag{7.3-3}$$

$$\langle\,x_1x_2\,|\,P_{(12)}|\,u\,\rangle = \langle\,x_2x_1\,|\,u\,\rangle = \pm\,\langle\,x_1x_2\,|\,u\,\rangle \tag{7.3-4}$$

bzw.

$$P_{(12)}^{\{x_1x_2\}}u(x_1,x_2) = u(x_2,x_1) = \pm\,u(x_1,x_2)\,. \tag{7.3-5}$$

Bemerkungen

Handelt es sich bei den zwei spinlosen (d. h. Spin-0-)Teilchen um *identische* Teilchen, so ist der Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ der symmetrischen Zustände von $\mathscr{H}_\mathrm{B} = \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}$ Zustandsraum (s. Anhang A.8), und das Eigenwertproblem von H ist in $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ zu lösen. Der betrachtete (durch Lösen des Eigenwertproblems von H in $\mathscr{H}_\mathrm{B}$ erhaltene) Eigenvektor $|\,u\,\rangle$ ist in diesem Fall nur dann ein möglicher Zustand des Systems, falls in Gl. (7.3-3) das positive Vorzeichen gilt. Andernfalls ist die Lösung auszuscheiden, da sie das Symmetrisierungsprinzip für Systeme identischer Boseteilchen verletzt.

7.4* Ich definiere (s. die ähnliche Aufgabe 2.5, insbesondere Gl. (2.5-1))

$$a^{(k)} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\Big(\sqrt{\mu}\,X^{(k)} - \frac{1}{i\sqrt{\mu}}\,P^{(k)}\Big)\,, \quad a^{(k)\dagger} := (a^{(k)})^\dagger\,, \quad k = 1,2 \quad \Rightarrow \tag{7.4-1}$$

$$S^{(12)} := \frac{1}{\hbar}\Big[\frac{(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}\Big\{(X^{(1)})^2 + (X^{(2)})^2\Big\} - \hbar\mathbb{1}\Big] = a^{(1)\dagger}a^{(1)} + a^{(2)\dagger}a^{(2)}\,, \tag{7.4-2}$$

$$R^{(12)} := \frac{1}{\hbar}\Big[\mu\,X^{(1)}X^{(2)} + \frac{1}{\mu}\,P^{(1)}P^{(2)}\Big] = a^{(1)\dagger}a^{(2)} + a^{(1)}a^{(2)\dagger}\,; \tag{7.4-3}$$

$$[a^{(j)}, a^{(k)}] = [a^{(j)\dagger}, a^{(k)\dagger}] = \mathbb{0}\,, \quad [a^{(j)}, a^{(k)\dagger}] = \delta_{jk}\mathbb{1}\,, \quad j,k = 1,2\,; \tag{7.4-4}$$

$$a^{(k)\dagger}a^{(k)}\,|\,n_1n_2\,\rangle = n_k\,|\,n_1n_2\,\rangle\,, \quad k = 1,2\,; \quad n_1,n_2 \in \mathbb{N}_0\,; \tag{7.4-5}$$

$$\langle\,n_1'n_2'\,|\,n_1n_2\,\rangle = \delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}\,, \quad \sum_{n_1n_2}|\,n_1n_2\,\rangle\langle\,n_1n_2\,| = \mathbb{1} \quad \text{in} \quad \mathscr{H}_\mathrm{B} = \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}\,; \tag{7.4-6}$$

$$|\,n_1n_2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}\left(a^{(1)\dagger}\right)^{n_1}\left(a^{(2)\dagger}\right)^{n_2}|\,0\,0\,\rangle\,; \tag{7.4-7}$$

$$[R^{(12)}, S^{(12)}] = \mathbb{0} \quad \Rightarrow \quad P_{(12)} = e^{(i\pi/2)(S^{(12)} - R^{(12)})} = e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\,e^{(i\pi/2)S^{(12)}}\,. \tag{7.4-8}$$

Nun entwickle ich $|\,x_1x_2\,\rangle$ im Basissystem $\{\,|\,n_1n_2\,\rangle,\ n_1,n_2 \in \mathbb{N}_0\}$ und erhalte

$$P_{(12)}|\,x_1x_2\,\rangle = \sum_{n_1n_2} P_{(12)}|\,n_1n_2\,\rangle\langle\,n_1n_2\,|\,x_1x_2\,\rangle\,. \tag{7.4-9}$$

Als nächstes zeige ich, dass

$$P_{(12)}\,|\,n_1n_2\,\rangle = |\,n_2n_1\,\rangle \tag{7.4-10}$$

gilt. Mit dieser Beziehung folgt dann unmittelbar

$$P_{(12)}\,|\,x_1x_2\,\rangle = \sum_{n_1n_2} |\,n_2n_1\,\rangle \underbrace{\langle\, n_1n_2\,|\,x_1x_2\,\rangle}_{\langle\, n_2n_1\,|\,x_2x_1\,\rangle} = |\,x_2x_1\,\rangle\,, \quad \forall\, x_1, x_2 \in \mathbb{R}\,. \tag{7.4-11}$$

Für den Beweis von (7.4-10) benütze ich zuerst (7.4-8), (7.4-2) und (7.4-5), dann setze ich für $|\,n_1n_2\,\rangle$ (7.4-7) ein:

$$\begin{aligned} P_{(12)}\,|\,n_1n_2\,\rangle &= e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\, e^{(i\pi/2)S^{(12)}}\,|\,n_1n_2\,\rangle = e^{-(i\pi/2)R^{(12)}} \underbrace{e^{(i\pi/2)(n_1+n_2)}}_{i^{n_1+n_2}}\,|\,n_1n_2\,\rangle \\ &= \frac{i^{n_1+n_2}}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}\, e^{-(i\pi/2)R^{(12)}} \Big(a^{(1)\dagger}\Big)^{n_1} \Big(a^{(2)\dagger}\Big)^{n_2}\,|\,0\,0\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{7.4-12}$$

Das erforderliche „Durchkommutieren“ des Operators $e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}$ kann mithilfe der Formel (1.20-1a) bzw. (1.20-6) erfolgen. Durch wiederholtes Einschieben von

$$e^{(i\pi/2)R^{(12)}}\, e^{-(i\pi/2)R^{(12)}} = \mathbb{1}$$

erhalte ich

$$\begin{aligned} &e^{-(i\pi/2)R^{(12)}} \Big(a^{(1)\dagger}\Big)^{n_1} \Big(a^{(2)\dagger}\Big)^{n_2} \\ &\quad = \Big(e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\, a^{(1)\dagger}\, e^{(i\pi/2)R^{(12)}}\Big)^{n_1} \Big(e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\, a^{(2)\dagger}\, e^{(i\pi/2)R^{(12)}}\Big)^{n_2} e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\,. \end{aligned} \tag{7.4-13}$$

Wegen

$$\begin{aligned} &[R^{(12)}, a^{(1)\dagger}] = a^{(2)\dagger}\,, && [R^{(12)}, a^{(2)\dagger}] = a^{(1)\dagger} && \Rightarrow \\ &[R^{(12)}, a^{(1)\dagger}]_{(2k+1)} = a^{(2)\dagger}\,, && [R^{(12)}, a^{(1)\dagger}]_{(2k)} = a^{(1)\dagger}\,, && k \in \mathbb{N}_0 \end{aligned} \tag{7.4-14}$$

ergibt die Anwendung der Formel (1.20-6)

$$e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\, a^{(1)\dagger}\, e^{(i\pi/2)R^{(12)}} = a^{(1)\dagger} \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i\pi/2)^{2k}}{(2k)!}}_{\cos\frac{\pi}{2} = 0} + a^{(2)\dagger} \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i\pi/2)^{2k+1}}{(2k+1)!}}_{-i\sin\frac{\pi}{2} = -i} = -i a^{(2)\dagger}\,, \tag{7.4-15}$$

und wegen $R^{(12)} = R^{(21)}$ folgt analog

$$e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\, a^{(2)\dagger}\, e^{(i\pi/2)R^{(12)}} = -i a^{(1)\dagger}\,. \tag{7.4-16}$$

Nun setze ich (7.4-15) und (7.4-16) in (7.4-13) ein und substituiere den auf diese Weise erhaltenen Ausdruck in Gl. (7.4-12). Wegen $R^{(12)}|\,0\,0\,\rangle = \emptyset$ folgt dann

$$P_{(12)}|\,n_1 n_2\,\rangle = \underbrace{i^{n_1+n_2}\,(-i)^{n_1+n_2}}_{1}\,\underbrace{\frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}\left(a^{(2)\dagger}\right)^{n_1}\left(a^{(1)\dagger}\right)^{n_2}\overbrace{e^{-(i\pi/2)R^{(12)}}\,|\,0\,0\,\rangle}^{|\,0\,0\,\rangle}}_{|\,n_2 n_1\,\rangle}\,. \tag{7.4-17}$$

Bemerkungen

Die Verallgemeinerung auf Teilchen mit drei räumlichen Freiheitsgraden erfolgt analog wie beim Paritätsoperator in Aufgabe 2.5.

Da sich jede Permutation als Produkt von Transpositionen schreiben lässt, kann man auf diese Weise im Bahnhilbertraum eines N-Teilchensystems alle Permutationsoperatoren als Funktionen der Operatoren $\vec{R}^{(i)}, \vec{P}^{(i)}$, $i = 1, 2, \ldots, N$, der fundamentalen Observablen ausdrücken. Damit ist auch bewiesen, dass man lineare Operatoren P_p finden kann, welche die in der formalen Definition von Anhang A.8 verlangten Vektorabbildungen vermitteln. – In den Anwendungen (siehe z. B. die Aufgaben 7.10 bis 7.14) benützt man dann zweckmäßigerweise wieder die *formale Definition*, da die explizite Verwendung der in der Angabe angeschriebenen Operatorfunktion $P_{(12)}(X^{(1)}, X^{(2)}, P^{(1)}, P^{(2)})$ die Rechnungen unnötig komplizieren würde. Analoges gilt für die Permutationsoperatoren im Spinhilbertraum (s. Aufgabe 7.7).

Dem einen oder anderen Leser wird die Ähnlichkeit zwischen dem Austauschoperator im Bahnhilbertraum eines Systems von zwei Teilchen (in einer Raumdimension)

$$P_{(12)} = \exp\Big\{\frac{i\pi}{2\hbar}\Big[\frac{(P^{(1)} - P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}(X^{(1)} - X^{(2)})^2 - \hbar\mathbb{1}\Big]\Big\} \tag{7.4-18}$$

und dem Paritätsoperator im Bahnhilbertraum eines Einteilchensystems (in einer Raumdimension)

$$\Pi = \exp\Big\{\frac{i\pi}{\hbar}\Big[\frac{P^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}X^2 - \frac{1}{2}\hbar\mathbb{1}\Big]\Big\} \tag{7.4-19}$$

von Aufgabe 2.5 aufgefallen sein. Diese Ähnlichkeit hat einen ganz einfachen Grund. Führt man in den Ausdruck (7.4-18) die Operatoren

$$X := X^{(1)} - X^{(2)}\,, \qquad P := \frac{1}{2}(P^{(1)} - P^{(2)}) \tag{7.4-20}$$

ein, welche die kanonische Vertauschungsbeziehung

$$[X, P] = i\hbar\mathbb{1} \tag{7.4-21}$$

erfüllen, so nimmt dieser die Form

$$P_{(12)} = \exp\Big\{\frac{i\pi}{2\hbar}\Big[\frac{2}{\mu}P^2 + \frac{\mu}{2}X^2 - \hbar\mathbb{1}\Big]\Big\} = \exp\Big\{\frac{i\pi}{\hbar}\Big[\frac{P^2}{\mu} + \frac{\mu}{4}X^2 - \frac{1}{2}\hbar\mathbb{1}\Big]\Big\} \tag{7.4-22}$$

an. Aus den Eigenschaften (7.2-1) von $P_{(12)}$ folgt dann, dass

$$P_{(12)}X\,P_{(12)}^\dagger = -X\,, \qquad P_{(12)}P\,P_{(12)}^\dagger = -P \tag{7.4-23}$$

gilt. Damit ist gezeigt, dass Π vom Typ (7.4-22) sein muss. Der Operator (7.4-19) erfüllt dies, es ist dort lediglich der freie Parameter anders bezeichnet (2μ statt μ).

7.5 **(a), (b)** Lösungsmethode formal vollkommen analog zu Aufgabe 7.1 (a), (b), es treten lediglich die auf eins normierten Spineigenzustände $|\,m_1 m_2\,\rangle = |\,m_1\,\rangle^{(1)} |\,m_2\,\rangle^{(2)}$, die eine Basis des Produktraumes $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(2)}$ bilden, an die Stelle der auf δ-Funktionen normierten Ortseigenzustände $|\,x_1 x_2\,\rangle$.

(c) Die gemeinsamen Eigenvektoren der Operatoren $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$ und S_z sind durch die Gleichungen (6.18-2), (6.18-3) gegeben. Es gilt

$$P_{(12)}|\,0\,0\,\rangle = -\,|\,0\,0\,\rangle\,; \qquad P_{(12)}|\,1 M_S\,\rangle = |\,1 M_S\,\rangle\,, \quad M_S = 0, \pm 1. \tag{7.5-1}$$

Bemerkungen

In Aufgabe 6.18 wurden die Vektoren $|\,S M_S\,\rangle$ als Eigenvektoren zum Gesamtspin gefunden (Addition der Spins: $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$). Wie (7.5-1) zeigt, kann man diese Vektoren auch durch Symmetrisieren bzw. Antisymmetrisieren der Produktzustände $|\,m_1 m_2\,\rangle = |\,m_1\,\rangle^{(1)} |\,m_2\,\rangle^{(2)}$ gemäß Anhang A.8, Gl. (A.8-15) bzw. (A.8-16) erhalten:

$$|\,1, \pm 1\,\rangle = \mathscr{S}\,|\,\pm\,\pm\,\rangle\,, \quad |\,1\,0\,\rangle = \sqrt{2}\,\mathscr{S}\,|\,+\,-\,\rangle\,, \quad |\,0\,0\,\rangle = \sqrt{2}\,\mathscr{A}\,|\,+\,-\,\rangle\,.$$

Addiert man *drei* Spins $s = \frac{1}{2}$, etwa gemäß $\vec{S} = (\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}) + \vec{S}^{(3)}$ (d. h. mit der Zwischensumme $\vec{S}^{(12)} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$; s. Aufgabe 6.19), so sind nicht mehr alle Eigenvektoren von $\vec{S}^2$ und S_z symmetrisch oder antisymmetrisch. So gilt beispielsweise für den Vektor von Gl. (6.19-6) zu den Quantenzahlen $s_{12} = 0$, $S = M_S = \frac{1}{2}$

$$P_{(23)}|\,0\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|\,+\,+\,-\,\rangle - |\,-\,+\,+\,\rangle) \neq \pm\,|\,0\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\,.$$

(Siehe dazu auch Aufgabe 7.8.)

7.6 Ich gehe von der in Aufgabe 7.5 gegebenen Definition des Spinaustauschoperators $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{S}}$ aus und verwende die aus dieser Definition in Aufgabe 7.5 gefolgerten Beziehungen $P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}$, $P_{(12)}^{\dagger} = P_{(12)}$.

Für die z-Komponenten der Spinoperatoren gilt

$$\begin{aligned} P_{(12)} S_z^{(1)} P_{(12)}^{\dagger}\,|\,m_1 m_2\,\rangle &= P_{(12)} S_z^{(1)}\,|\,m_2 m_1\,\rangle = m_2 \hbar\, P_{(12)}\,|\,m_2 m_1\,\rangle = m_2 \hbar\,|\,m_1 m_2\,\rangle \\ &= S_z^{(2)}\,|\,m_1 m_2\,\rangle\,, \quad \forall\,|\,m_1 m_2\,\rangle \quad \Rightarrow \\ P_{(12)} S_z^{(1)} P_{(12)}^{\dagger} &= S_z^{(2)}\,, \qquad P_{(12)} S_z^{(2)} P_{(12)}^{\dagger} = S_z^{(1)}\,. \end{aligned} \tag{7.6-1}$$

Der Beweis für die x-Komponenten und die y-Komponenten bzw. (gleichwertig dazu) für

$S_\pm^{(k)} := S_x^{(k)} \pm i S_y^{(k)}$, $k = 1, 2$, erfolgt analog:

$$\begin{aligned} P_{(12)} S_\pm^{(1)} P_{(12)}^\dagger \,|\, m_1 m_2 \,\rangle &= P_{(12)} S_\pm^{(1)} \,|\, m_2 m_1 \,\rangle \\ &= \sqrt{(\tfrac{1}{2} \mp m_2)(\tfrac{1}{2} \pm m_2 + 1)}\, \hbar\, P_{(12)} \,|\, m_2 \pm 1, m_1 \,\rangle \\ &= \sqrt{(\tfrac{1}{2} \mp m_2)(\tfrac{1}{2} \pm m_2 + 1)}\, \hbar \,|\, m_1, m_2 \pm 1 \,\rangle \\ &= S_\pm^{(2)} \,|\, m_1 m_2 \,\rangle\,, \quad \forall \,|\, m_1 m_2 \,\rangle \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$P_{(12)} S_\pm^{(1)} P_{(12)}^\dagger = S_\pm^{(2)}\,, \qquad P_{(12)} S_\pm^{(2)} P_{(12)}^\dagger = S_\pm^{(1)}\,. \tag{7.6-2}$$

Damit ist gezeigt, dass

$$P_{(12)} \vec{S}^{(1)} P_{(12)}^\dagger = \vec{S}^{(2)}\,, \qquad P_{(12)} \vec{S}^{(2)} P_{(12)}^\dagger = \vec{S}^{(1)} \tag{7.6-3}$$

gilt.

7.7 Mit den Beziehungen (A.7-6), (A.7-22) und (A.7-23) von Anhang A.7 kann man den gegebenen Operator $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^{\mathrm{S}}$ in der Form

$$P_{(12)} = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1} + \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)}\Big] = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1} + \frac{1}{2}\Big(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(2)} + \sigma_-^{(1)}\sigma_+^{(2)}\Big) + \sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}\Big] \tag{7.7-1}$$

schreiben. Mit den Formeln (A.7-7) und (A.7-8) folgt dann

$$\begin{aligned} P_{(12)}\,|\,{+}{+}\,\rangle = \frac{1}{2}\Big[\,|\,{+}{+}\,\rangle + \frac{1}{2}\underbrace{\sigma_+^{(1)}\,|\,{+}\,\rangle^{(1)}}_{\emptyset}\,\sigma_-^{(2)}\,|\,{+}\,\rangle^{(2)} + \frac{1}{2}\,\sigma_-^{(1)}\,|\,{+}\,\rangle^{(1)}\,\underbrace{\sigma_+^{(2)}\,|\,{+}\,\rangle^{(2)}}_{\emptyset} \\ + \underbrace{\sigma_z^{(1)}\,|\,{+}\,\rangle^{(1)}}_{|\,{+}\,\rangle^{(1)}}\,\underbrace{\sigma_z^{(2)}\,|\,{+}\,\rangle^{(2)}}_{|\,{+}\,\rangle^{(2)}}\Big] = |\,{+}{+}\,\rangle \end{aligned}$$

und analog

$$\begin{aligned} P_{(12)}\,|\,{-}{-}\,\rangle &= \frac{1}{2}\Big[\,|\,{-}{-}\,\rangle + \emptyset + \emptyset + (-1)(-1)\,|\,{-}{-}\,\rangle\Big] = |\,{-}{-}\,\rangle\,, \\ P_{(12)}\,|\,{+}{-}\,\rangle &= \frac{1}{2}\Big[\,|\,{+}{-}\,\rangle + \emptyset + 2\,|\,{-}{+}\,\rangle - |\,{+}{-}\,\rangle\Big] = |\,{-}{+}\,\rangle\,, \\ P_{(12)}\,|\,{-}{+}\,\rangle &= \frac{1}{2}\Big[\,|\,{-}{+}\,\rangle + 2\,|\,{+}{-}\,\rangle + \emptyset - |\,{-}{+}\,\rangle\Big] = |\,{+}{-}\,\rangle\,. \end{aligned}$$

Zusammengefasst lauten diese Beziehungen

$$P_{(12)}\,|\,m_1 m_2\,\rangle = |\,m_2 m_1\,\rangle\,, \qquad m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2}\,. \tag{7.7-2}$$

Bemerkungen

Im Zustandsraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}_\mathrm{B} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}$, $\mathscr{H}_\mathrm{B} = \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}$, $\mathscr{H}_\mathrm{S} = \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(2)}$ eines Systems von zwei nicht identischen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen ist der Austauschoperator $P_{(12)}$ durch

$$P_{(12)} = P_{(12)}^\mathrm{B} \otimes P_{(12)}^\mathrm{S} \tag{7.7-3}$$

gegeben. Dabei ist $P_{(12)}^\mathrm{B}$ der Bahnaustauschoperator (in Aufgabe 7.4 für Teilchen mit einem räumlichen Freiheitsgrad angeschrieben) und $P_{(12)}^\mathrm{S}$ ist der obige Spinaustauschoperator. Im Zustandsraum $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H}$ eines Systems zweier *identischer* Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen gilt (siehe Anhang A.8, Gl. (A.8-11) bzw. (A.8-13)) $P_{(12)} = -\mathbb{1}$.

7.8 Mit den Bezeichnungen von Anhang A.8 schreiben sich die Permutationsoperatoren zu den $3! = 6$ Permutationen der drei Spins in der Form

$$P_p\colon \quad \mathbb{1}, \quad P_{(12)}, \quad P_{(23)}, \quad P_{(31)}, \quad P_{\binom{123}{231}}, \quad P_{\binom{123}{312}}. \tag{7.8-1}$$

Die zugehörigen Paritäten η_p sind der Reihe nach $+1, -1, -1, -1, +1$ und $+1$.

Der Symmetrisierungsoperator $\mathscr{S}$ und der Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ sind nach Gl. (A.8-7) durch

$$\mathscr{S} = \frac{1}{6}\Big[\mathbb{1} + P_{(12)} + P_{(23)} + P_{(31)} + P_{\binom{123}{231}} + P_{\binom{123}{312}}\Big], \tag{7.8-2}$$

$$\mathscr{A} = \frac{1}{6}\Big[\mathbb{1} - P_{(12)} - P_{(23)} - P_{(31)} + P_{\binom{123}{231}} + P_{\binom{123}{312}}\Big] \tag{7.8-3}$$

gegeben, und man erhält unter Beachtung der in Anhang A.8 definierten Wirkung der Permutationsoperatoren (s. das Beispiel (A.8-4))

$$\textbf{(a)} \qquad \mathscr{S}\,|\,u\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathscr{S}\Big[\,|\,+-+\,\rangle - |\,-++\,\rangle\Big] = \emptyset\,, \tag{7.8-4}$$

$$\textbf{(b)} \qquad \mathscr{A}\,|\,u\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathscr{A}\Big[\,|\,+-+\,\rangle - |\,-++\,\rangle\Big] = \emptyset\,. \tag{7.8-5}$$

Bemerkungen

Das Ergebnis (7.8-5) ist nicht verwunderlich: Für beliebige m_1, m_2, m_3 gilt $\mathscr{A}\,|\,m_1 m_2 m_3\,\rangle = \emptyset$ (da mindestens zwei m_i-Werte gleich sind), was $\mathscr{A} = \mathbb{0}$ in $\mathscr{H}_\mathrm{S} = \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(2)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(3)}$ bedeutet.

Weiter kann man zeigen, dass ($s_{12} = 1,\ S = \frac{3}{2},\ M_S = \pm\frac{3}{2}$; s. Gl. (6.19-10))

$$\mathscr{S}\,|\,\pm\pm\pm\,\rangle = |\,\pm\pm\pm\,\rangle = |\,1\,\tfrac{3}{2}, \pm\tfrac{3}{2}\,\rangle \tag{7.8-6a}$$

und ($s_{12} = 1,\ S = \frac{3}{2},\ M_S = \pm\frac{1}{2}$; s. Gl. (6.19-11), (6.19-12))

$$\begin{aligned}\sqrt{3}\,\mathscr{S}\,|\,\pm\pm\mp\,\rangle &= \sqrt{3}\,\mathscr{S}\,|\,\pm\mp\pm\,\rangle = \sqrt{3}\,\mathscr{S}\,|\,\mp\pm\pm\,\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\big(|\,\pm\pm\mp\,\rangle + |\,\pm\mp\pm\,\rangle + |\,\mp\pm\pm\,\rangle\big) = |\,1\,\tfrac{3}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\,\rangle\end{aligned} \tag{7.8-6b}$$

gilt. Der Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ der symmetrischen Vektoren des 8dimensionalen Produktraumes $\mathscr{H}_\mathrm{S}$ ist also 4dimensional, und die Gesamtspin-Eigenvektoren zur Quantenzahl $S = \frac{3}{2}$ (Quartett) bilden eine orthonormierte Basis in diesem Teilraum. Der in den Bemerkungen zu Aufgabe 7.5 sowie in der obigen Aufgabe betrachtete Ketvektor $|\,u\,\rangle$ ist Gesamtspin-Eigenvektor zu den Quantenzahlen $s_{12} = 0,\ S = \frac{1}{2},\ M_S = \frac{1}{2}$ (s. Gl. (6.19-6)) und ist daher orthogonal zu allen Vektoren von $\mathscr{H}_\mathrm{s}$, deshalb das Ergebnis (7.8-4).

7.9 Mit

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\left(\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)} + \ldots + \vec{\sigma}^{(N)}\right) \tag{7.9-1}$$

und (s. Gl. (7.7-1))

$$P_{(jk)} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{\sigma}^{(j)} \cdot \vec{\sigma}^{(k)}\right) \tag{7.9-2}$$

folgt

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left[\sum_{i=1}^{N} \overbrace{(\vec{\sigma}^{(i)})^2}^{3\cdot\mathbb{1}} + 2\sum_{\substack{j,k=1\\ j<k}}^{N} \overbrace{\vec{\sigma}^{(j)} \cdot \vec{\sigma}^{(k)}}^{2P_{(jk)}-\mathbb{1}}\right]$$

und wegen

$$\sum_{i=1}^{N} \mathbb{1} = N\mathbb{1}\,, \qquad \sum_{\substack{j,k=1\\ j<k}}^{N} \mathbb{1} = \frac{N(N-1)}{2}\,\mathbb{1}$$

ergibt sich

$$\vec{S}^2 = \left[-\frac{N(N-4)}{4}\,\mathbb{1} + \sum_{\substack{j,k=1\\ j<k}}^{N} P_{(jk)}\right]\hbar^2\,. \tag{7.9-3}$$

7.10* Orthonormierte Einteilchenbasis (Bezeichnung der Bahnzustände wie in Aufgabe 2.10 [s. (2.10-2)]; Bezeichnung der Spinzustände: $|\,\frac{1}{2}, m = \pm\frac{1}{2}\,\rangle \equiv |\,m = \pm\frac{1}{2}\,\rangle \equiv |\,\pm\rangle$):

$$|\,n{-}1, m\,\rangle = |\,n{-}1\,\rangle_\mathrm{B}\,|\,m\,\rangle_\mathrm{S}\,, \qquad n \in \mathbb{N}; \quad m = \pm\frac{1}{2}\,; \tag{7.10-1a}$$

$${}_\mathrm{B}\langle\, x\,|\,n{-}1\,\rangle_\mathrm{B} \equiv u_{n-1}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für} \quad n = 1, 3, 5, \ldots \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für} \quad n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}. \tag{7.10-1b}$$

Die zugehörigen Einteilchenenergien (s. Gl. (2.10-1)) bezeichne ich hier mit $\epsilon_{n-1},\ n \in \mathbb{N}$, um sie von den Zweiteilchenenergien $E_{N-1},\ N \in \mathbb{N}$, zu unterscheiden:

$$\epsilon_{n-1} = n^2\,\epsilon\,, \quad n \in \mathbb{N}; \qquad \epsilon := \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,. \tag{7.10-2}$$

Da es sich um identische Fermiteilchen handeln soll, ist der Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ der antisymmetrischen Zustände von $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ Zustandsraum des Zweiteilchensystems (Antisymmetrisierungsprinzip). Die Teilchen sollen außerdem nicht wechselwirken, sodass der Hamiltonoperator des Zweiteilchensystems durch $H = H^{(1)} + H^{(2)}$ gegeben ist.

Lösungsweg 1: Zuerst Addition der Spins, dann Antisymmetrisierung
Ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren von $H^{(1)}$, $H^{(2)}$, $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$, S_z im Produktraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} = \mathscr{H}_\mathrm{B} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}$ ist durch

$$|\, n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S \,\rangle = \underbrace{|\, n_1{-}1, n_2{-}1 \,\rangle_\mathrm{B}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}} \underbrace{|\, SM_S \,\rangle_\mathrm{S}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{S}}\,, \tag{7.10-3a}$$

$$|\, n_1{-}1, n_2{-}1 \,\rangle_\mathrm{B} = \underbrace{|\, n_1{-}1 \,\rangle_\mathrm{B}^{(1)}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)}} \underbrace{|\, n_2{-}1 \,\rangle_\mathrm{B}^{(2)}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}}, \tag{7.10-3b}$$

$$|\, SM_S \,\rangle_\mathrm{S} \quad \text{s. Gl. (6.18-2), (6.18-3);} \tag{7.10-3c}$$

$$n_1, n_2 \in \mathbb{N}; \quad S = 0, 1; \quad M_S = S, S-1, \ldots, -S \tag{7.10-3d}$$

gegeben. Wegen $H = H^{(1)} + H^{(2)}$ gilt

$$H\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S \,\rangle = (\epsilon_{n_1-1} + \epsilon_{n_2-1})\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S \,\rangle\,. \tag{7.10-4}$$

Da der Antisymmetrisierungsoperator

$$\mathscr{A} = \frac{1}{2}\big[\mathbb{1} - P_{(12)}\big] = \frac{1}{2}\big[\mathbb{1}_\mathrm{B} \otimes \mathbb{1}_\mathrm{S} - P_{(12)}^\mathrm{B} \otimes P_{(12)}^\mathrm{S}\big] \tag{7.10-5}$$

mit den Operatoren H, $\vec{S}^2$ und S_z vertauscht, ist mit $|\, u \,\rangle := |\, n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S \,\rangle$ im Fall $\mathscr{A}\,|\, u \,\rangle \neq \emptyset$ auch $\mathscr{A}\,|\, u \,\rangle$ Eigenvektor von H, $\vec{S}^2$ und S_z zum Eigenwert $\epsilon_{n_1-1} + \epsilon_{n_2-1}$ von H. Die linear unabhängigen Vektoren, die sich durch Antisymmetrisieren des Vektorsystems (7.10-3) ergeben, bilden somit ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren von H, $\vec{S}^2$ und S_z in $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H}$.

Wegen (s. Gl. (7.5-1))

$$P_{(12)}^\mathrm{S}\,|\, SM_S \,\rangle_\mathrm{S} = (-1)^{1-S}\,|\, SM_S \,\rangle_\mathrm{S} \tag{7.10-6}$$

folgt

$$\mathscr{A}\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S \,\rangle = \frac{1}{2}\Big[|\, n_1{-}1, n_2{-}1 \,\rangle_\mathrm{B} - (-1)^{1-S}|\, n_2{-}1, n_1{-}1 \,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,|\, SM_S \,\rangle_\mathrm{S}\,. \tag{7.10-7}$$

In Worten ausgedrückt: „Multipliziert“ man einen antisymmetrischen „Spinteil“ ($S = 0$) mit einem symmetrischen „Bahnteil“ oder einen symmetrischen „Spinteil“ ($S = 1$) mit einem antisymmetrischen „Bahnteil“, so erhält man jeweils einen antisymmetrischen Vektor aus $\mathscr{H}$, d. h. einen Vektor aus $\mathscr{H}_\mathrm{a}$.

Der Vektor (7.10-7) ist gleich dem Nullvektor, falls $n_1 = n_2$ und $S = 1$ ist. Es gibt also in $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ keine Triplettzustände mit $n_1 = n_2 = n$. Ferner gilt für $n_1 \neq n_2$ die Beziehung $\mathscr{A}\,|\,n_2{-}1, n_1{-}1, SM_S\,\rangle = (-1)^S\,\mathscr{A}\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S\,\rangle$, somit bilden die Vektoren

$$|\,n{-}1, n{-}1, 0\,0\,\rangle_\mathrm{a} := |\,n{-}1, n{-}1\,\rangle_\mathrm{B}\,|\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S}\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,; \tag{7.10-8}$$

$$|\,n_1{-}1, n_2{-}1, SM_S\,\rangle_\mathrm{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\,n_1{-}1, n_2{-}1\,\rangle_\mathrm{B} - (-1)^{1-S}|\,n_2{-}1, n_1{-}1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,|\,SM_S\,\rangle_\mathrm{S}\,, \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}, \quad n_1 < n_2\,; \quad S = 0, 1\,; \quad M_S = S, S-1, \ldots, -S \tag{7.10-9}$$

ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren von H, $\vec{S}^2$ und S_z im Zustandsraum $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H}$ des Zwei-Fermionen-Systems.

Die niedrigsten drei Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren (7.10-8), (7.10-9) bzw. die auf eins normierten Eigenfunktionen lauten:

$E_0 = 2\epsilon_0 = 2\epsilon$:

$$|\,E_0\,\rangle \equiv |\,0\,0\,0\,0\,\rangle_\mathrm{a} = |\,0\,0\,\rangle_\mathrm{B}\,|\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S} = |\,0\,0\,\rangle_\mathrm{B}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,{+}\,{-}\,\rangle_\mathrm{S} - |\,{-}\,{+}\,\rangle_\mathrm{S}\Big) \tag{7.10-10a}$$

(Singulettzustand),

$$\widehat{u}_0(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}\,a}\,\cos\frac{\pi x_1}{2a}\,\cos\frac{\pi x_2}{2a}\begin{bmatrix}1\\1\\-1\\0\end{bmatrix}. \tag{7.10-10b}$$

Die Zeilen des Spinors beziehen sich dabei der Reihe nach auf $\{m_1, m_2\} \mathrel{\widehat{=}} \{{+}{+}\}$, $\{{+}{-}\}$, $\{{-}{+}\}$ und $\{{-}{-}\}$. Bezüglich der Normierung der Eigenfunktionen in der $\{x_1 x_2 m_1 m_2\}$-Darstellung s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

Während der Eigenwert E_0 in Bezug auf den Produktraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ die Vielfachheit vier besitzt (s. Gl. (7.10-3), (7.10-4)), ist er in Bezug auf den Zustandsraum $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H}$ *nicht entartet*.

$E_1 = \epsilon_0 + \epsilon_1 = 5\epsilon$:

$$|\,E_1 1\,\rangle \equiv |\,0\,1\,1\,1\,\rangle_\mathrm{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_\mathrm{B} - |\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B}\Big)\,|\,1, {+}1\,\rangle_\mathrm{S} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_\mathrm{B} - |\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B}\Big)\,|\,{+}\,{+}\,\rangle_\mathrm{S} \tag{7.10-11a}$$

(Triplettzustand mit $M_S = +1$),

$$\widehat{u}_{1,1}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}\,a}\left(\cos\frac{\pi x_1}{2a}\,\sin\frac{\pi x_2}{a} - \sin\frac{\pi x_1}{a}\,\cos\frac{\pi x_2}{2a}\right)\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}; \tag{7.10-11b}$$

$$|\,E_1 2\,\rangle \equiv |\,0\,1\,1,-1\,\rangle_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,|\,1,-1\,\rangle_{\mathrm{S}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,|\,-\,-\,\rangle_{\mathrm{S}} \tag{7.10-12a}$$

(Triplettzustand mit $M_S = -1$),

$$\widehat{u}_{1,2}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}\,a}\Big(\cos\frac{\pi x_1}{2a}\,\sin\frac{\pi x_2}{a} - \sin\frac{\pi x_1}{a}\,\cos\frac{\pi x_2}{2a}\Big)\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}; \tag{7.10-12b}$$

$$\begin{aligned}|\,E_1 3\,\rangle \equiv |\,0\,1\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{a}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,|\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{S}}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\rangle_{\mathrm{S}} + |\,-\,+\,\rangle_{\mathrm{S}}\Big)\end{aligned} \tag{7.10-13a}$$

(Triplettzustand mit $M_S = 0$),

$$\widehat{u}_{1,3}(x_1,x_2) = \frac{1}{2a}\Big(\cos\frac{\pi x_1}{2a}\,\sin\frac{\pi x_2}{a} - \sin\frac{\pi x_1}{a}\,\cos\frac{\pi x_2}{2a}\Big)\begin{bmatrix}0\\1\\1\\0\end{bmatrix}; \tag{7.10-13b}$$

$$\begin{aligned}|\,E_1 4\,\rangle \equiv |\,0\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{a}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} + |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,|\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} + |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\rangle_{\mathrm{S}} - |\,-\,+\,\rangle_{\mathrm{S}}\Big)\end{aligned} \tag{7.10-14a}$$

(Singulettzustand),

$$\widehat{u}_{1,4}(x_1,x_2) = \frac{1}{2a}\Big(\cos\frac{\pi x_1}{2a}\,\sin\frac{\pi x_2}{a} + \sin\frac{\pi x_1}{a}\,\cos\frac{\pi x_2}{2a}\Big)\begin{bmatrix}0\\1\\-1\\0\end{bmatrix}. \tag{7.10-14b}$$

Der Energieeigenwert E_1 des Systems ist also 4fach. (In Bezug auf den Produktraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ ist dieser Eigenwert 8fach; s. Gl. (7.10-3), (7.10-4).)

$E_2 = 2\epsilon_1 = 8\epsilon$: Vollkommen analoge Situation wie beim Grundzustand.

$$|\,E_2\,\rangle \equiv |\,1\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{a}} = |\,1\,1\,\rangle_{\mathrm{B}}|\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}} = |\,1\,1\,\rangle_{\mathrm{B}}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,+\,-\,\rangle_{\mathrm{S}} - |\,-\,+\,\rangle_{\mathrm{S}}\Big) \tag{7.10-15a}$$

(Singulettzustand),

$$\widehat{u}_2(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}\,a}\,\sin\frac{\pi x_1}{a}\,\sin\frac{\pi x_2}{a}\begin{bmatrix}0\\1\\-1\\0\end{bmatrix}. \tag{7.10-15b}$$

Damit sind die auf eins normierten Eigenfunktionen zu den sechs Zweiteilchenzuständen niedrigster Energie, welche gemeinsame Eigenzustände von H, $\vec{S}^2$ und S_z sind, gefunden. (Der nächsthöhere Energieeigenwert ist der 4fache Eigenwert $E_3 = 10\epsilon$.)

Lösungsweg 2: Zuerst Antisymmetrisierung der Vektoren $|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle = |\,n_1{-}1, m_1\,\rangle^{(1)}|\,n_2{-}1, m_2\,\rangle^{(2)}$, dann Konstruktion von Eigenzuständen zum Gesamtspin

Ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren von $H^{(1)}$, $H^{(2)}$, $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$, $\vec{S}^2$, S_z im Produktraum $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)} = \mathscr{H}_\mathrm{B}\otimes\mathscr{H}_\mathrm{S}$ ist durch

$$|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle = \underbrace{|\,n_1{-}1, m_1\,\rangle^{(1)}}_{\in\,\mathscr{H}^{(1)}}\underbrace{|\,n_2{-}1, m_2\,\rangle^{(2)}}_{\in\,\mathscr{H}^{(2)}} = \underbrace{|\,n_1{-}1, n_2{-}1\,\rangle_\mathrm{B}}_{\in\,\mathscr{H}_\mathrm{B}}\underbrace{|\,m_1m_2\,\rangle_\mathrm{S}}_{\in\,\mathscr{H}_\mathrm{S}}, \tag{7.10-16a}$$

$$|\,n_1{-}1, n_2{-}1\,\rangle_\mathrm{B} \quad \text{s. Gl. (7.10-3b)}, \qquad |\,m_1m_2\,\rangle_\mathrm{S} = \underbrace{|\,m_1\,\rangle_\mathrm{S}^{(1)}}_{\in\,\mathscr{H}_\mathrm{S}^{(1)}}\underbrace{|\,m_2\,\rangle_\mathrm{S}^{(2)}}_{\in\,\mathscr{H}_\mathrm{S}^{(2)}}; \tag{7.10-16b}$$

$$n_1, n_2 \in \mathbb{N}; \quad m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2} \tag{7.10-16c}$$

gegeben. Wegen $H = H^{(1)} + H^{(2)}$ gilt

$$H\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle = (\epsilon_{n_1-1} + \epsilon_{n_2-1})\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle\,. \tag{7.10-17}$$

Ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren der Operatoren H, $(\vec{S}^{(1)})^2$, $(\vec{S}^{(2)})^2$ (welche für $m_1 \neq m_2$ jedoch nicht mehr Eigenvektoren von $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ sind) ist im Zustandsraum $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H}$ des Zwei-Fermionen-Systems durch die Slaterdeterminanten

$$\begin{aligned}|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle_\mathrm{a} &:= \sqrt{2}\,\mathscr{A}\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, m_1m_2\,\rangle\\ &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}|\,n_1{-}1, m_1\,\rangle^{(1)} & |\,n_1{-}1, m_1\,\rangle^{(2)}\\ |\,n_2{-}1, m_2\,\rangle^{(1)} & |\,n_2{-}1, m_2\,\rangle^{(2)}\end{vmatrix},\end{aligned} \tag{7.10-18a}$$

$$\text{(I)} \quad n_1 = n_2 = n\,, \;\; n \in \mathbb{N}\,; \;\; m_1 = +\frac{1}{2}\,, \;\; m_2 = -\frac{1}{2}\,; \tag{7.10-18b}$$

$$\text{(II)} \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}\,, \;\; n_1 < n_2\,; \;\; m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2} \tag{7.10-18c}$$

gegeben. Für $n_1 = n_2 = n$ (n fest) gibt es nur *eine* zugehörige Slaterdeterminante (der betreffende Eigenwert $2\epsilon_{n-1}$ von H ist in Bezug auf $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ nicht entartet, wofern

nicht zufällige Entartung vorliegt), diese Slaterdeterminante muss daher *automatisch* ein gemeinsamer Eigenvektor von H, $\vec{S}^2$ und S_z sein. Wie man durch Ausrechnen sieht, handelt es sich um einen Singulettzustand ($S = 0$). Für $n_1 < n_2$ (n_1, n_2 fest) gibt es *vier* zugehörige Slaterdeterminanten, d. h. der betreffende Eigenwert $\epsilon_{n_1-1} + \epsilon_{n_2-1}$ von H ist in Bezug auf $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ 4fach, wofern nicht zufällige Entartung vorliegt, und die gesuchten gemeinsamen Eigenvektoren von H, $\vec{S}^2$ und S_z in $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ müssen sich als Linearkombinationen dieser vier Slaterdeterminanten schreiben lassen.

Der niedrigste Energieeigenwert des Zwei-Fermionen-Systems, bei welchem *zufällige Entartung* auftritt, ist $65\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_7 = \epsilon_3 + \epsilon_6$. Für die hier gesuchten sechs Zweiteilchenzustände niedrigster Energie spielt die zufällige Entartung daher keine Rolle.

Da $M_S = m_1 + m_2$ gilt, ist offensichtlich, dass die zwei Slaterdeterminanten mit $m_1 = m_2 = \pm\frac{1}{2}$ bereits die Triplettzustände mit $M_S = \pm 1$ darstellen, und die noch fehlenden zwei Vektoren mit $S = 0$, $M_S = 0$ bzw. $S = 1$, $M_S = 0$ nur Linearkombinationen der Slaterdeterminanten mit $m_1 = +\frac{1}{2}$, $m_2 = -\frac{1}{2}$ und $m_1 = -\frac{1}{2}$, $m_2 = +\frac{1}{2}$ sein können. Um die Frage zu beantworten, um welche Linearkombinationen es sich handelt, lasse ich die Operatoren $\vec{S}^2$ und S_z auf diese beiden Slaterdeterminanten, d. h. auf die Vektoren (7.10-18a) mit $n_1 < n_2$ (n_1, n_2 fest) und $m_1 \neq m_2$, wirken. Dabei ist es zweckmäßig, für den Operator $\vec{S}^2$ die Form (7.9-3) zu benützen:

$$\begin{aligned}
\vec{S}^2 \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} &= \Big[\mathbb{1}_\mathrm{B} \otimes \mathbb{1}_\mathrm{S} + \mathbb{1}_\mathrm{B} \otimes P^\mathrm{S}_{(12)}\Big]\hbar^2 \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} \\
&= \hbar^2\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} + \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big]\,, \\
S_z \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} &= (m_1 + m_2)\hbar \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} \quad \Rightarrow \\
\vec{S}^2\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} + \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big] \\
&= 2\hbar^2\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} + \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big]\,, \qquad \text{(7.10-19)} \\
S_z\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} + \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big] \\
&= (m_1 + m_2)\hbar\,\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} + \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big]\,; \qquad \text{(7.10-20)} \\
\vec{S}^2\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} - \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big] &= \emptyset\,, \qquad \text{(7.10-21)} \\
S_z\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_1 m_2 \,\rangle_\mathrm{a} - \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, m_2 m_1 \,\rangle_\mathrm{a}\Big] &= \emptyset\,. \qquad \text{(7.10-22)}
\end{aligned}$$

Zusammenfassung: Die Vektoren

$$|\, n{-}1, n{-}1, 0\,0 \,\rangle_\mathrm{a} = |\, n{-}1, n{-}1, +- \,\rangle_\mathrm{a} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\, n{-}1, + \,\rangle^{(1)} & |\, n{-}1, + \,\rangle^{(2)} \\ |\, n{-}1, - \,\rangle^{(1)} & |\, n{-}1, - \,\rangle^{(2)} \end{vmatrix} \qquad \text{(7.10-23a)}$$

$n \in \mathbb{N}$, bilden mit den Vektoren

$$\begin{aligned}
|\, n_1{-}1, n_2{-}1, 0\,0 \,\rangle_\mathrm{a} &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, +- \,\rangle_\mathrm{a} - \,|\, n_1{-}1, n_2{-}1, -+ \,\rangle_\mathrm{a}\Big] \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\, n_1{-}1, + \,\rangle^{(1)} & |\, n_1{-}1, + \,\rangle^{(2)} \\ |\, n_2{-}1, - \,\rangle^{(1)} & |\, n_2{-}1, - \,\rangle^{(2)} \end{vmatrix} - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\, n_1{-}1, - \,\rangle^{(1)} & |\, n_1{-}1, - \,\rangle^{(2)} \\ |\, n_2{-}1, + \,\rangle^{(1)} & |\, n_2{-}1, + \,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}\right],
\end{aligned} \qquad \text{(7.10-23b)}$$

$$|\,n_1{-}1,n_2{-}1,1,\pm1\,\rangle_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,n_1{-}1,\pm\,\rangle^{(1)} & |\,n_1{-}1,\pm\,\rangle^{(2)} \\ |\,n_2{-}1,\pm\,\rangle^{(1)} & |\,n_2{-}1,\pm\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}, \tag{7.10-23c}$$

$$\begin{aligned} |\,n_1{-}1,n_2{-}1,1\,0\,\rangle_{\mathrm{a}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\,|\,n_1{-}1,n_2{-}1,+-\,\rangle_{\mathrm{a}} + |\,n_1{-}1,n_2{-}1,-+\,\rangle_{\mathrm{a}}\Big] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,n_1{-}1,+\,\rangle^{(1)} & |\,n_1{-}1,+\,\rangle^{(2)} \\ |\,n_2{-}1,-\,\rangle^{(1)} & |\,n_2{-}1,-\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,n_1{-}1,-\,\rangle^{(1)} & |\,n_1{-}1,-\,\rangle^{(2)} \\ |\,n_2{-}1,+\,\rangle^{(1)} & |\,n_2{-}1,+\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}\right], \end{aligned} \tag{7.10-23d}$$

$n_1, n_2 \in \mathbb{N}$, $n_1 < n_2$, ein vollständiges Orthonormalsystem gemeinsamer Eigenvektoren von H, $\vec{S}^2$ und S_z im Zustandsraum $\mathscr{H}_{\mathrm{a}} \subset \mathscr{H}$ des Zwei-Fermionen-Systems. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass die Vektoren (7.10-23) mit den Vektoren (7.10-8), (7.10-9) übereinstimmen. Aus Gl. (7.10-23) ergeben sich im Speziellen wieder die Eigenfunktionen (7.10-10b) bis (7.10-15b).

Bemerkungen

Da $\mathscr{A}$ mit $\vec{S}^2$ und S_z vertauscht, kann man entweder *zuerst* die Spins zum Gesamtspin addieren und *dann* antisymmetrisieren oder umgekehrt. Als Koeffizienten der Linearkombinationen der Vektoren $|\,n_1{-}1,n_2{-}1,+-\,\rangle_{\mathrm{a}}$, $|\,n_1{-}1,n_2{-}1,-+\,\rangle_{\mathrm{a}}$, welche *nicht* Eigenvektoren von $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ sind, ergaben sich deshalb beim Lösungsweg 2 wieder die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,m_1,-m_1\,|\,S\,0\,\rangle$ von Tab. A.7-3.

Ein Vektor $|\,v\,\rangle \in \mathscr{H}_{\mathrm{a}} \subset \mathscr{H}$ kann wahlweise in einer Basis von $\mathscr{H}$ oder von $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}$ entwickelt werden. Es ist üblich, die „Entwicklungskoeffizienten“ in der „Basis“ $\{\,|\,x_1x_2m_1m_2\,\rangle$, $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$; $m_1, m_2 = \pm\frac{1}{2}\,\}$ von $\mathscr{H}$ als Elemente der $\{x_1x_2m_1m_2\}$-Darstellung des Vektors $|\,v\,\rangle$ zu bezeichnen und $v(x_1,x_2,m_1,m_2) \equiv \langle\,x_1x_2m_1m_2\,|\,v\,\rangle$ zu setzen. Beachte, dass dann für die Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $W(x_1,x_2,m_1,m_2)$ des Systems identischer Teilchen im Zustand $|\,\psi\,\rangle$ mit $\mathscr{A}^\dagger = \mathscr{A}$ und $\mathscr{A}\,|\,\psi\,\rangle = |\,\psi\,\rangle$

$$\begin{aligned} W(x_1,x_2,m_1,m_2) &= |{}_{\mathrm{a}}\langle\,x_1x_2m_1m_2\,|\,\psi\,\rangle|^2 = |\langle\,x_1x_2m_1m_2\,|\,\sqrt{2}\,\mathscr{A}^\dagger\,|\,\psi\,\rangle|^2 \\ &= |\sqrt{2}\,\langle\,x_1x_2m_1m_2\,|\,\psi\,\rangle|^2 = 2\,|\psi(x_1,x_2,m_1,m_2)|^2 \end{aligned} \tag{7.10-24}$$

folgt. Siehe dazu Aufgabe 7.12.

7.11 Aufgrund des Antisymmetrisierungsprinzips ist der Teilraum $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}$ der antisymmetrischen Zustände von $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ Zustandsraum des Zweiteilchensystems. Da der Antisymmetrisierungsoperator

$$\mathscr{A} = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1} - P_{(12)}\Big] = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1}_{\mathrm{B}} \otimes \mathbb{1}_{\mathrm{S}} - P^{\mathrm{B}}_{(12)} \otimes P^{\mathrm{S}}_{(12)}\Big] \tag{7.11-1}$$

mit den Operatoren $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z und S_z vertauscht, kann man entweder *zuerst* die Bahndrehimpulse zum Gesamt-Bahndrehimpuls und die Spins zum Gesamtspin addieren und *dann* antisymmetrisieren oder umgekehrt. Ich wähle den ersteren Lösungsweg, da er kürzer und übersichtlicher ist.

Ich betrachte zunächst die Bahnzustände in $\mathscr{H}_\mathrm{B} = \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}$ zur Konfiguration np^2 ($n_1 = n_2 = n,\ l_1 = l_2 = 1$). Ein orthonormiertes Basissystem in dem zu dieser Konfiguration gehörigen Teilraum von $\mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}$ ist durch die Vektoren

$$\underbrace{|\,n\,1\,m_{l1}\,n\,1\,m_{l2}\,\rangle_\mathrm{B}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}} = \underbrace{|\,n\,1\,m_{l1}\,\rangle_\mathrm{B}^{(1)}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(1)}} \underbrace{|\,n\,1\,m_{l2}\,\rangle_\mathrm{B}^{(2)}}_{\in \mathscr{H}_\mathrm{B}^{(2)}}, \qquad m_{l1}, m_{l2} = +1, 0, -1 \tag{7.11-2}$$

gegeben, welche gemeinsame Eigenvektoren von $H^{(1)}$, $H^{(2)}$, $(\vec{L}^{(1)})^2$, $(\vec{L}^{(2)})^2$, $L_z^{(1)}$ und $L_z^{(2)}$ sind, wobei

$$H^{(i)} = \frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m} + V(R^{(i)})\,, \quad i = 1, 2 \tag{7.11-3}$$

gilt.

Ein anderes orthonormiertes Basissystem in diesem Teilraum erhält man daraus durch Addition der Bahndrehimpulse zum Gesamt-Bahndrehimpuls. Mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten von Tabelle A.7-3 folgt für die gemeinsamen Eigenvektoren $|\,(np^2)\,L M_L\,\rangle_\mathrm{B}$ von $H = H^{(1)} + H^{(2)}$, $(\vec{L}^{(1)})^2$, $(\vec{L}^{(2)})^2$, $\vec{L}^2$ und L_z zum Eigenwert $E(np^2) = 2\,\epsilon_{n1}$ von H

$$|\,(np^2)\,0\,0\,\rangle_\mathrm{B} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big[|\,n\,1\,1\,n\,1, -1\,\rangle_\mathrm{B} - |\,n\,1\,0\,n\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B} + |\,n\,1, -1, n\,1\,1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,, \tag{7.11-4a}$$

$$|\,(np^2)\,1, \pm 1\,\rangle_\mathrm{B} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\,n\,1, \pm 1, n\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B} - |\,n\,1\,0\,n\,1, \pm 1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,, \tag{7.11-4b}$$

$$|\,(np^2)\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\,n\,1\,1\,n\,1, -1\,\rangle_\mathrm{B} - |\,n\,1, -1, n\,1\,1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,, \tag{7.11-4c}$$

$$|\,(np^2)\,2, \pm 2\,\rangle_\mathrm{B} = |\,n\,1, \pm 1, n\,1, \pm 1\,\rangle_\mathrm{B}\,, \tag{7.11-4d}$$

$$|\,(np^2)\,2, \pm 1\,\rangle_\mathrm{B} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|\,n\,1, \pm 1, n\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B} + |\,n\,1\,0\,n\,1, \pm 1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,, \tag{7.11-4e}$$

$$|\,(np^2)\,2\,0\,\rangle_\mathrm{B} = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[|\,n\,1\,1\,n\,1, -1\,\rangle_\mathrm{B} + 2\,|\,n\,1\,0\,n\,1\,0\,\rangle_\mathrm{B} + |\,n\,1, -1, n\,1\,1\,\rangle_\mathrm{B}\Big]\,. \tag{7.11-4f}$$

Ferner verwende ich die bekannten Gesamtspin-Eigenzustände in $\mathscr{H}_\mathrm{S} = \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(1)} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(2)}$:

$$|\,S M_S\,\rangle_\mathrm{S} \text{ s. Gl. (6.18-2), (6.18-3)}, \quad S = 0, 1;\ \ M_S = S, S-1, \ldots, -S\,. \tag{7.11-5}$$

Der zum Eigenwert $E(np^2) = 2\,\epsilon_{n1}$ von H gehörige Teilraum des Produktraumes $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} = \mathscr{H}_\mathrm{B} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}$ wird von den sechsunddreißig Vektoren

$$|\,(np^2)\,L S M_L M_S\,\rangle = |\,(np^2)\,L M_L\,\rangle_\mathrm{B}\,|\,S M_S\,\rangle_\mathrm{S}\,, \tag{7.11-6a}$$

$$L = 0, 1, 2;\ \ M_L = L, L-1, \ldots, -L\,; \tag{7.11-6b}$$

$$S = 0, 1;\ \ M_S = S, S-1, \ldots, -S \tag{7.11-6c}$$

aufgespannt. (Die Vielfachheit von $E(np^2)$ bzgl. des Produktraumes $\mathscr{H}$ ist also 36.) Die gesuchten „LS-Vektoren“, welche den zur Konfiguration np^2 gehörigen Teilraum $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}(np^2)$ des Zustandsraumes $\mathscr{H}_{\mathrm{a}} \subset \mathscr{H}$ des Zwei-Fermionen-Systems aufspannen, erhalten wir aus den Vektoren (7.11-6) durch Anwendung des Antisymmetrisierungsoperators. Wegen (s. Gl. (7.11-4))

$$P^{\mathrm{B}}_{(12)} |\,(np^2)LM_L\,\rangle_{\mathrm{B}} = (-1)^L |\,(np^2)LM_L\,\rangle_{\mathrm{B}} \tag{7.11-7}$$

und (s. Gl. (7.5-1))

$$P^{\mathrm{S}}_{(12)} |\,SM_S\,\rangle_{\mathrm{S}} = (-1)^{1-S} |\,SM_S\,\rangle_{\mathrm{S}} \tag{7.11-8}$$

ergibt die Anwendung des Antisymmetrisierungsoperators $\mathscr{A}$ Gl. (7.11-1) auf einen Vektor $|\,(np^2)LSM_LM_S\,\rangle$ im Fall $L+S = 1, 3$ den Nullvektor und im Fall $L+S = 0, 2$ wieder den Vektor $|\,(np^2)LSM_LM_S\,\rangle$. Der zum Eigenwert $E(np^2)$ gehörige Teilraum $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}(np^2)$ von $\mathscr{H}_{\mathrm{a}} \subset \mathscr{H}$ wird entsprechend von den fünfzehn LS-Vektoren

$$|\,(np^2)LSM_LM_S\,\rangle_{\mathrm{a}} = |\,(np^2)LSM_LM_S\,\rangle\,, \tag{7.11-9a}$$

$$\text{(a)}\quad L = 0, 2\,;\quad M_L = L, L-1, \ldots, -L\,;\quad S = M_S = 0\,; \tag{7.11-9b}$$

$$\text{(b)}\quad L = 1;\quad M_L = +1, 0, -1;\quad S = 1;\quad M_S = +1, 0, -1 \tag{7.11-9c}$$

aufgespannt. Die Vielfachheit des Eigenwertes $E(np^2)$ bzgl. des Zustandsraumes $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}$ des Zwei-Fermionen-Systems ist entsprechend $g(np^2) = 15$.

Bemerkungen

Die obigen Überlegungen spielen in der Atomphysik bei der näherungsweisen Berechnung der niedrigsten Energieniveaus nicht zu schwerer Atome oder Ionen mit einer Valenzelektronenkonfiguration np^2 eine Rolle ($2p^2$: Grundzustands-Valenzelektronenkonfiguration des Kohlenstoffatoms und kohlenstoffähnlicher Ionen wie N^+, O^{++} usf.; $3p^2$: Grundzustands-Valenzelektronenkonfiguration des Siliziumatoms und siliziumähnlicher Ionen wie P^+, S^{++} usf.). Die LS-Vektoren von Gl. (7.11-9) stellen für solche Atome bzw. Ionen im Rahmen einer störungstheoretischen Behandlung der Elektron-Elektron-Restwechselwirkung näherungsweise Energieeigenvektoren zu den niedrigsten Energieniveaus dar, wenn als Einteilchenzustände $|\,n1m_l\,\rangle_{\mathrm{B}}$ jene gewählt werden, die sich aus der Zentralfeldnäherung ergeben. Die niedrigsten Energieniveaus sind also bei den genannten Atomen und Ionen Terme $np^2\ {}^{2S+1}L$ mit $\{L, S\} = \{0, 0\}, \{2, 0\}, \{1, 1\}$, d. h. $np^2\ {}^1S$-, $np^2\ {}^1D$- und $np^2\ {}^3P$-Terme, für deren energetische Reihenfolge $E(np^2\ {}^3P) < E(np^2\ {}^1D) < E(np^2\ {}^1S)$ gilt (*hundsche Regel*). Näheres findet der Leser dazu beispielsweise in [3] oder [7]. Siehe auch die Aufgaben 9.12, 9.13, in denen das analoge Zweielektronenproblem für die Konfigurationen $1s^2$, $1s\,2s$ und $1s\,2p$ des Heliumatoms ausführlich behandelt wird.

7.12*

(a) Zustandsvektoren (s. die ausführliche Diskussion in Aufgabe 7.10):

(α)
$$|\,\psi\,\rangle = |\,0\,1+-\,\rangle_{\mathrm{a}} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0+\,\rangle^{(1)} & |\,0+\,\rangle^{(2)} \\ |\,1-\,\rangle^{(1)} & |\,1-\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}$$
$$= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|+-\rangle_{\mathrm{S}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|-+\rangle_{\mathrm{S}}\Big)\,; \tag{7.12-1}$$

(β) (s. Gl. (7.10-23b) und (7.10-14a))
$$|\,\psi\,\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1+-\,\rangle_{\mathrm{a}} - |\,0\,1-+\,\rangle_{\mathrm{a}}\Big)$$
$$= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0+\,\rangle^{(1)} & |\,0+\,\rangle^{(2)} \\ |\,1-\,\rangle^{(1)} & |\,1-\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix} - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0-\,\rangle^{(1)} & |\,0-\,\rangle^{(2)} \\ |\,1+\,\rangle^{(1)} & |\,1+\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}\Big]$$
$$= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} + |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+-\rangle_{\mathrm{S}} - |-+\rangle_{\mathrm{S}}\Big)\,; \tag{7.12-2}$$

(γ) (s. Gl. (7.10-23d) und (7.10-13a))
$$|\,\psi\,\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1+-\,\rangle_{\mathrm{a}} + |\,0\,1-+\,\rangle_{\mathrm{a}}\Big)$$
$$= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0+\,\rangle^{(1)} & |\,0+\,\rangle^{(2)} \\ |\,1-\,\rangle^{(1)} & |\,1-\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix} + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0-\,\rangle^{(1)} & |\,0-\,\rangle^{(2)} \\ |\,1+\,\rangle^{(1)} & |\,1+\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}\Big]$$
$$= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - |\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+-\rangle_{\mathrm{S}} + |-+\rangle_{\mathrm{S}}\Big)\,. \tag{7.12-3}$$

(b) Die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, bei einer Messung im Zustand $|\,\psi\,\rangle$ des Zweiteilchensystems eines der identischen Teilchen am Ort x_1 mit „Spin auf“ und das andere am Ort x_2 mit „Spin ab“ anzutreffen, ist nach Gl. (7.10-24) durch
$$W(x_1,x_2,+,-) = 2\,|\langle\, x_1x_2\,+-\,|\,\psi\,\rangle|^2 \equiv 2\,|\psi(x_1,x_2,+,-)|^2 \tag{7.12-4}$$
gegeben. Einsetzen der Zustandsvektoren (7.12-1) bis (7.12-3) gibt

(α)
$$W(x_1,x_2,+,-) = 2\,\Big|\tfrac{1}{\sqrt{2}}\,{}_{\mathrm{B}}\langle\, x_1x_2\,|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big|^2 = |u_0(x_1)|^2\,|u_1(x_2)|^2\,; \tag{7.12-5}$$

(β)
$$W(x_1,x_2,+,-) = 2\,\Big|\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big({}_{\mathrm{B}}\langle\, x_1x_2\,|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} + {}_{\mathrm{B}}\langle\, x_1x_2\,|\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\Big)\,\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big|^2$$
$$= \frac{1}{2}\Big|u_0(x_1)\,u_1(x_2) + u_1(x_1)\,u_0(x_2)\Big|^2\,,$$
$$W(x_1,x_2,+,-) = \frac{1}{2}\Big\{|u_0(x_1)|^2\,|u_1(x_2)|^2 + |u_1(x_1)|^2\,|u_0(x_2)|^2$$
$$+ 2\,\mathrm{Re}\Big[u_0(x_1)\,u_1^*(x_1)\,u_1(x_2)\,u_0^*(x_2)\Big]\Big\}\,; \tag{7.12-6}$$

$$(\gamma)\qquad W(x_1,x_2,+,-) = 2\left|\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left({}_{\mathrm{B}}\langle\, x_1x_2\,|\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{B}} - {}_{\mathrm{B}}\langle\, x_1x_2\,|\,1\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}\right)\tfrac{1}{\sqrt{2}}\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left|u_0(x_1)\,u_1(x_2) - u_1(x_1)\,u_0(x_2)\right|^2,$$

$$W(x_1,x_2,+,-) = \frac{1}{2}\Big\{|u_0(x_1)|^2\,|u_1(x_2)|^2 + |u_1(x_1)|^2\,|u_0(x_2)|^2$$

$$- 2\,\mathrm{Re}\Big[u_0(x_1)\,u_1^*(x_1)\,u_1(x_2)\,u_0^*(x_2)\Big]\Big\}. \tag{7.12-7}$$

Im Spezialfall $x_1 = x_2 = x$ gilt

$$(\alpha)\qquad W(x,x,+,-) = |u_0(x)|^2\,|u_1(x)|^2\,; \tag{7.12-8}$$

$$(\beta)\qquad W(x,x,+,-) = 2\,|u_0(x)|^2\,|u_1(x)|^2\,; \tag{7.12-9}$$

$$(\gamma)\qquad W(x,x,+,-) = 0\,. \tag{7.12-10}$$

7.13 Orthonormierte Einteilchenbasis (Bezeichnungen s. Aufgabe 2.10, Gl. (2.10-2)):

$$|\,n{-}1\,\rangle\,,\qquad n\in\mathbb{N}\,; \tag{7.13-1a}$$

$$\langle\, x\,|\,n{-}1\,\rangle \equiv u_{n-1}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für}\quad n=1,3,5,\ldots \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{2a} & \text{für}\quad n=2,4,6,\ldots \end{cases}. \tag{7.13-1b}$$

Die zugehörigen Einteilchenenergien sind in Gl. (7.10-2) angeschrieben.

Da es sich voraussetzungsgemäß um identische Boseteilchen handeln soll, ist der Teilraum $\mathscr{H}_{\mathrm{s}}$ der symmetrischen Zustände von $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)}\otimes\mathscr{H}^{(3)}$ Zustandsraum des Dreiteilchensystems (Symmetrisierungsprinzip). Die Teilchen sollen außerdem nicht wechselwirken, sodass der Hamiltonoperator des Dreiteilchensystems durch $H = H^{(1)} + H^{(2)} + H^{(3)}$ gegeben ist.

Ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenvektoren von H im Zustandsraum $\mathscr{H}_{\mathrm{s}} \subset \mathscr{H}$ erhält man durch Symmetrisieren der Produktzustände $|\,n_1{-}1, n_2{-}1, n_3{-}1\,\rangle = |\,n_1{-}1\,\rangle^{(1)}|\,n_2{-}1\,\rangle^{(2)}|\,n_3{-}1\,\rangle^{(3)}$ (s. Anhang A.8, insbesondere (A.8-14), (A.8-15) und die Erläuterungen dazu):

$$|\,n_1{-}1, n_2{-}1, n_3{-}1\,\rangle_{\mathrm{s}} := c_{n_1n_2n_3}\,\mathscr{S}\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, n_3{-}1\,\rangle \tag{7.13-2a}$$

mit

$$\left.\begin{array}{ll} n_1,n_2,n_3\in\mathbb{N}, & n_1\le n_2\le n_3 \\ c_{n_1n_2n_3} = 1 & \text{für}\quad n_1=n_2=n_3 \\ c_{n_1n_2n_3} = \sqrt{3} & \text{falls zwei } n_i\text{-Werte gleich sind} \\ c_{n_1n_2n_3} = \sqrt{6} & \text{für}\quad n_1<n_2<n_3 \end{array}\right\}. \tag{7.13-2b}$$

Dabei gilt

$$H\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, n_3{-}1\,\rangle_{\mathrm{s}} = (\epsilon_{n_1-1} + \epsilon_{n_2-1} + \epsilon_{n_3-1})\,|\,n_1{-}1, n_2{-}1, n_3{-}1\,\rangle_{\mathrm{s}}\,. \tag{7.13-3}$$

Die niedrigsten drei Energieeigenwerte des Drei-Bosonen-Systems, $E_0 = 3\epsilon_0 = 3\epsilon$, $E_1 = 2\epsilon_0 + \epsilon_1 = 6\epsilon$, $E_2 = \epsilon_0 + 2\epsilon_1 = 9\epsilon$, sind in Bezug auf den Zustandsraum $\mathscr{H}_{\mathrm{s}}$ nicht entartet. Zu den niedrigsten drei Niveaus gehören also nur drei Zustände. (Während die Eigenwerte von H in Bezug auf $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} \otimes \mathscr{H}^{(3)}$ im Falle $n_1 \neq n_2 \neq n_3 \neq n_1$ mindestens 6fach und im Falle, dass zwei der drei n_i-Werte gleich sind, mindestens 3fach sind, bleiben in Bezug auf $\mathscr{H}_{\mathrm{s}} \subset \mathscr{H}$ lediglich die zufälligen Entartungen wie etwa $2\epsilon_0 + \epsilon_7 = \epsilon_0 + \epsilon_3 + \epsilon_6 = 66\epsilon$ übrig.)

Mit dem Symmetrisierungsoperator $\mathscr{S}$ (s. Anhang A.8, Gl. (A.8-7) bzw. Aufgabe 7.8, Gl. (7.8-2)) folgt für diese drei Eigenzustände:

$E_0 = 3\epsilon_0 = 3\epsilon$:

$$|\,E_0\,\rangle \equiv |\,0\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{s}} = \mathscr{S}\,|\,0\,0\,0\,\rangle = |\,0\,0\,0\,\rangle\,, \tag{7.13-4a}$$

$$u_0(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{a^3}} \cos\frac{\pi x_1}{2a} \cos\frac{\pi x_2}{2a} \cos\frac{\pi x_3}{2a}\,. \tag{7.13-4b}$$

(Bzgl. der Normierung der Eigenfunktionen in der $\{x_1x_2x_3\}$-Darstellung s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.)

$E_1 = 2\epsilon_0 + \epsilon_1 = 6\epsilon$:

$$\begin{aligned} |\,E_1\,\rangle \equiv |\,0\,0\,1\,\rangle_{\mathrm{s}} &= \sqrt{3}\,\mathscr{S}\,|\,0\,0\,1\,\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}}\Big[\mathbb{1} + P_{(12)} + P_{(23)} + P_{(31)} + P_{\binom{123}{231}} + P_{\binom{123}{312}}\Big]\,|\,0\,0\,1\,\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|\,0\,0\,1\,\rangle + |\,0\,1\,0\,\rangle + |\,1\,0\,0\,\rangle\Big)\,, \end{aligned} \tag{7.13-5a}$$

$$\begin{aligned} u_1(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3a^3}}\Big(&\cos\frac{\pi x_1}{2a} \cos\frac{\pi x_2}{2a} \sin\frac{\pi x_3}{a} + \cos\frac{\pi x_1}{2a} \sin\frac{\pi x_2}{a} \cos\frac{\pi x_3}{2a} \\ &+ \sin\frac{\pi x_1}{a} \cos\frac{\pi x_2}{2a} \cos\frac{\pi x_3}{2a}\Big)\,; \end{aligned} \tag{7.13-5b}$$

$E_2 = \epsilon_0 + 2\epsilon_1 = 9\epsilon$:

$$\begin{aligned} |\,E_2\,\rangle \equiv |\,0\,1\,1\,\rangle_{\mathrm{s}} &= \sqrt{3}\,\mathscr{S}\,|\,0\,1\,1\,\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|\,0\,1\,1\,\rangle + |\,1\,0\,1\,\rangle + |\,1\,1\,0\,\rangle\Big)\,, \end{aligned} \tag{7.13-6a}$$

$$\begin{aligned} u_2(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3a^3}}\Big(&\cos\frac{\pi x_1}{2a} \sin\frac{\pi x_2}{a} \sin\frac{\pi x_3}{a} + \sin\frac{\pi x_1}{a} \cos\frac{\pi x_2}{2a} \sin\frac{\pi x_3}{a} \\ &+ \sin\frac{\pi x_1}{a} \sin\frac{\pi x_2}{a} \cos\frac{\pi x_3}{2a}\Big)\,. \end{aligned} \tag{7.13-6b}$$

Bemerkungen

Ein Vektor $|\,v\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{s} \subset \mathscr{H}$ kann wahlweise in einer Basis von $\mathscr{H}$ oder von $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ entwickelt werden. Es ist üblich, die Funktion v mit den Funktionswerten $v(x_1, x_2, x_3) \equiv \langle\, x_1 x_2 x_3 \,|\, v\,\rangle$, welche sich auf die Entwicklung von $|\,v\,\rangle$ in der „Basis“ $\{\,|\,x_1 x_2 x_3\,\rangle,\ x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}\}$ von $\mathscr{H}$ bezieht, als $\{x_1 x_2 x_3\}$-Darstellung von $|\,v\,\rangle$ zu bezeichnen. Siehe die analogen Bemerkungen zu Aufgabe 7.10.

7.14* Da es sich voraussetzungsgemäß um identische Boseteilchen handeln soll, ist der Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ der symmetrischen Zustände von $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ Zustandsraum des Zweiteilchensystems (Symmetrisierungsprinzip).

Um die exakte Lösung des Eigenwertproblems des Hamiltonoperators

$$H = \frac{(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2}{2\mu} + \frac{\mu\Omega^2}{2}\Big[(X^{(1)})^2 + (X^{(2)})^2\Big] + \frac{\mu\lambda^2}{2}(X^{(1)} - X^{(2)})^2 \tag{7.14-1}$$

bzgl. $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ zu finden, lösen wir zuerst das Eigenwertproblem von H bzgl. des Produktraumes $\mathscr{H}$ und gehen anschließend durch Anwenden des Symmetrisierungsoperators

$$\mathscr{S} = \frac{1}{2}\Big[\mathbb{1} + P_{(12)}\Big] \tag{7.14-2}$$

zu $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ über. Die Form des Hamiltonoperators legt es nahe, von den Operatoren $X^{(1)}$, $X^{(2)}$, $P^{(1)}$, $P^{(2)}$ zu den Operatoren X_0, X, P_0, P überzugehen, welche die Schwerpunktskoordinate, die Relativkoordinate, den Schwerpunktsimpuls und den Relativimpuls repräsentieren:

$$P_0 = P^{(1)} + P^{(2)}\,, \qquad X_0 = \frac{1}{2}\Big[X^{(1)} + X^{(2)}\Big]\,, \tag{7.14-3a}$$

$$P = \frac{1}{2}\Big[P^{(1)} - P^{(2)}\Big]\,, \qquad X = X^{(1)} - X^{(2)}\,. \tag{7.14-3b}$$

Wie man leicht verifizieren kann, handelt es sich dabei um eine kanonische Transformation, d. h. die neuen Operatoren erfüllen ebenfalls kanonische Vertauschungsbeziehungen. Da mit den Beziehungen (7.14-3)

$$(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2 = \frac{1}{2}P_0^2 + 2P^2\,, \qquad (X^{(1)})^2 + (X^{(2)})^2 = 2X_0^2 + \frac{1}{2}X^2 \tag{7.14-4}$$

folgt, nimmt der Hamiltonoperator als Funktion der neuen Orts- und Impulsoperatoren die Form

$$H = \frac{P_0^2}{4\mu} + \frac{P^2}{\mu} + \mu\Omega^2 X_0^2 + \frac{\mu(\Omega^2 + 2\lambda^2)}{4}X^2 \tag{7.14-5}$$

an. Führen wir hier noch

$$m_0 := 2\mu \ \text{(Gesamtmasse)}, \quad m := \frac{\mu}{2} \ \text{(reduzierte Masse)}, \tag{7.14-6a}$$

$$\omega_0 \equiv \Omega\,, \quad \omega := \sqrt{\Omega^2 + 2\lambda^2} \tag{7.14-6b}$$

ein, so erhalten wir

$$H = \frac{P_0^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega_0^2}{2}\,X_0^2 + \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\,X^2\,. \tag{7.14-7}$$

Das behandelte Problem ist also bzgl. $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ zum Problem zweier nicht gekoppelter linearer harmonischer Oszillatoren äquivalent, und wir können die Lösung bzgl. $\mathscr{H}$ unter Verwendung der Formeln von Anhang A.5 unmittelbar anschreiben:

$$H\,|\,n_0 n\,\rangle = E_{n_0 n}\,|\,n_0 n\,\rangle\,, \qquad E_{n_0 n} = \Big(n_0 + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega_0 + \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega\,, \tag{7.14-8a}$$

$$\begin{aligned} u_{n_0 n}(x_1, x_2) &\equiv \langle\, x_1 x_2\,|\,n_0 n\,\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\alpha_0\,\alpha}{2^{n_0+n}\,n_0!\,n!\,\pi}}\,\exp\Big\{-\Big[\frac{\alpha_0^2}{2}\,\frac{(x_1+x_2)^2}{4} + \frac{\alpha^2}{2}\,(x_1-x_2)^2\Big]\Big\} \\ &\qquad \times H_{n_0}\Big(\alpha_0\,\frac{x_1+x_2}{2}\Big)\,H_n\Big(\alpha\,(x_1-x_2)\Big)\,, \end{aligned} \tag{7.14-8b}$$

$$\alpha_0 := \sqrt{\frac{m_0\omega_0}{\hbar}}\,, \quad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,; \quad m_0, m, \omega_0, \omega \text{ s. Gl. (7.14-6)}, \quad n_0, n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{7.14-8c}$$

Aus Gl. (7.14-8b) und $H_\nu(-\xi) = (-1)^\nu\,H_\nu(\xi)$ können wir das Transformationsverhalten der Eigenvektoren $|\,n_0 n\,\rangle$ bei Teilchenvertauschung ablesen:

$$P_{(12)}\,|\,n_0 n\,\rangle = (-1)^n\,|\,n_0 n\,\rangle\,. \tag{7.14-9}$$

Anwenden des Symmetrisierungsoperators $\mathscr{S}$ Gl. (7.14-2) auf $|\,n_0 n\,\rangle$ gibt somit für ungerades n den Nullvektor und für gerades n wieder den Vektor $|\,n_0 n\,\rangle$. Man erhält also für die gesuchte Lösung des Eigenwertproblems von H bzgl. $\mathscr{H}_\mathrm{s} \subset \mathscr{H}$ die Gleichungen (7.14-8a) bis (7.14-8c), es ist lediglich n auf die Werte

$$n = 0, 2, 4, \ldots \tag{7.14-10}$$

einzuschränken.

Bemerkungen

Ein Vektor $|\,v\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{s} \subset \mathscr{H}$ kann wahlweise in einer Basis von $\mathscr{H}$ oder von $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ entwickelt werden. Meist bezeichnet man die Funktion v mit den Funktionswerten $v(x_1, x_2) \equiv \langle\, x_1 x_2\,|\,v\,\rangle$, welche sich auf die Entwicklung von $|\,v\,\rangle$ in der „Basis“ $\{\,|\,x_1 x_2\,\rangle,\ x_1, x_2 \in \mathbb{R}\,\}$ von $\mathscr{H}$ bezieht, als $\{x_1 x_2\}$-Darstellung von $|\,v\,\rangle$. Siehe die analogen Bemerkungen zu Aufgabe 7.10.

7.15* Da der Operator

$$C = \sum_{i=1}^{N} C^{(i)}\,, \qquad C^{(i)} = f(\vec{R}^{(i)}, \vec{P}^{(i)}, \vec{S}^{(i)}) \tag{7.15-1}$$

mit den $N!$ Permutationsoperatoren P_p und somit auch mit dem Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ vertauscht, und da $\mathscr{A}$ Projektionsoperator ist, gilt

$$\begin{aligned}\langle\, w \,|\, C \,|\, u \,\rangle &= N! \,\langle\, v_{\beta_1} v_{\beta_2} \ldots v_{\beta_N} \,|\, \underbrace{\mathscr{A}^\dagger C \mathscr{A}}_{C\mathscr{A}} \,|\, v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \ldots v_{\alpha_N} \,\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{N} {}^{(1)}\langle\, v_{\beta_1} \,|\, {}^{(2)}\langle\, v_{\beta_2} \,|\, \ldots\, {}^{(N)}\langle\, v_{\beta_N} \,|\, C^{(i)} \sum_p \eta_p P_p \,|\, v_{\alpha_1} \,\rangle^{(1)} |\, v_{\alpha_2} \,\rangle^{(2)} \ldots |\, v_{\alpha_N} \,\rangle^{(N)} .\end{aligned} \tag{7.15-2}$$

Der Operator $C^{(i)}$ besitzt nur im i-ten Faktorraum eine vom Einheitsoperator verschiedene Wirkung. Daraus ergeben sich wegen der Orthonormiertheit der Einteilchenzustände $|\, v_{\lambda_i} \,\rangle$ die zu beweisenden Aussagen:

(a) Unterscheiden sich $|\, w \,\rangle$ und $|\, u \,\rangle$ hinsichtlich *mehrerer* Einteilchenzustände, so enthält jeder der Summanden in (7.15-2) mindestens einen Faktor null, und somit folgt $\langle\, w \,|\, C \,|\, u \,\rangle = 0$.

(b) Unterscheiden sich $|\, w \,\rangle$ und $|\, u \,\rangle$ nur hinsichtlich *eines* Einteilchenzustandes $|\, v_{\beta_j} \,\rangle \leftrightarrow |\, v_{\alpha_k} \,\rangle$, während der Satz $\{\, |\, v_{\beta_i} \,\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, j-1, j+1, \ldots, N \,\}$ mit dem Satz $\{\, |\, v_{\alpha_i} \,\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, k-1, k+1, \ldots, N \,\}$ übereinstimmt (für $\beta_j < \alpha_k$ angeschrieben: $|\, v_{\beta_1} \,\rangle = |\, v_{\alpha_1} \,\rangle$, $|\, v_{\beta_2} \,\rangle = |\, v_{\alpha_2} \,\rangle$, $\ldots$, $|\, v_{\beta_{j-1}} \,\rangle = |\, v_{\alpha_{j-1}} \,\rangle$, $|\, v_{\beta_{j+1}} \,\rangle = |\, v_{\alpha_j} \,\rangle$, $\ldots$, $|\, v_{\beta_k} \,\rangle = |\, v_{\alpha_{k-1}} \,\rangle$, $|\, v_{\beta_{k+1}} \,\rangle = |\, v_{\alpha_{k+1}} \,\rangle$, $\ldots$, $|\, v_{\beta_N} \,\rangle = |\, v_{\alpha_N} \,\rangle$), so liefert nur jener Term in der Summe (7.15-2) einen von null verschiedenen Beitrag, bei welchem $i = j$ ist, und die Permutation p den Einteilchenzustand $|\, v_{\alpha_k} \,\rangle$ aus dem k-ten in den j-ten Faktorraum „schafft“, wozu $k - j$ Transpositionen nötig sind, sodass $\eta_p = (-1)^{k-j}$ gilt. Es folgt also

$$\langle\, w \,|\, C \,|\, u \,\rangle = (-1)^{k-j}\ {}^{(j)}\langle\, v_{\beta_j} \,|\, C^{(j)} \,|\, v_{\alpha_k} \,\rangle^{(j)} ,$$

was man wegen

$${}^{(1)}\langle\, v_{\gamma_i} \,|\, C^{(1)} \,|\, v_{\delta_l} \,\rangle^{(1)} = {}^{(2)}\langle\, v_{\gamma_i} \,|\, C^{(2)} \,|\, v_{\delta_l} \,\rangle^{(2)} = \ldots = {}^{(N)}\langle\, v_{\gamma_i} \,|\, C^{(N)} \,|\, v_{\delta_l} \,\rangle^{(N)} \tag{7.15-3}$$

auch

$$\langle\, w \,|\, C \,|\, u \,\rangle = (-1)^{k-j}\ {}^{(1)}\langle\, v_{\beta_j} \,|\, C^{(1)} \,|\, v_{\alpha_k} \,\rangle^{(1)} \tag{7.15-4}$$

schreiben kann.

(c) Gilt $|\, w \,\rangle = |\, u \,\rangle$, so hat man $|\, v_{\beta_i} \,\rangle = |\, v_{\alpha_i} \,\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, N$. In

$$\begin{aligned}&\langle\, u \,|\, C \,|\, u \,\rangle \\ &\quad = \sum_{i=1}^{N} {}^{(1)}\langle\, v_{\alpha_1} \,|\, {}^{(2)}\langle\, v_{\alpha_2} \,|\, \ldots\, {}^{(N)}\langle\, v_{\alpha_N} \,|\, C^{(i)} \sum_p \eta_p P_p \,|\, v_{\alpha_1} \,\rangle^{(1)} |\, v_{\alpha_2} \,\rangle^{(2)} \ldots |\, v_{\alpha_N} \,\rangle^{(N)}\end{aligned} \tag{7.15-5}$$

liefert aber aufgrund der Orthogonalität der Einteilchenzustände nur die identische Permutation einen von null verschiedenen Beitrag, und es ergibt sich

$$\langle\, u \,|\, C \,|\, u \,\rangle = \sum_{i=1}^{N} {}^{(i)}\langle\, v_{\alpha_i} \,|\, C^{(i)} \,|\, v_{\alpha_i} \,\rangle^{(i)} .$$

Wegen Gl. (7.15-3) kann man dies auch in der Form

$$\langle\, u \,|\, C \,|\, u \,\rangle = \sum_{i=1}^{N} {}^{(1)}\langle\, v_{\alpha_i} \,|\, C^{(1)} \,|\, v_{\alpha_i} \,\rangle^{(1)} \tag{7.15-6}$$

schreiben.

Bemerkungen

Ein Operator der Form (7.15-1) wird oft als *Einteilchenoperator* bezeichnet, doch wird diese Bezeichnung gelegentlich auch für die einzelnen Summanden verwendet (z. B. in [5]). Da der Index (1) in Gl. (7.15-4), (7.15-6) ebenso gut durch (2) oder durch (3) etc. ersetzt werden kann, lässt man ihn häufig einfach weg („dummy“ Index) und schreibt zugleich den Operator mit Kleinbuchstaben, $c = f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s})$, um ihn von der Operatorsumme $\sum_i C^{(i)}$ zu unterscheiden: $\langle\, v_{\gamma_i} \,|\, c \,|\, v_{\delta_l} \,\rangle$. Da auch dies zu Missverständnissen führen kann, werde ich durchwegs die Schreibweise (7.15-4), (7.15-6) verwenden.

S. auch die Aufgaben 9.8, 9.9.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 7.1 bis 7.15 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 7.1 bis 7.15 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T7.1 Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$.

(a) Wodurch sind die niedrigsten drei Energieeigenwerte E_0, E_1, E_2 des Zweiteilchensystems gegeben und wie groß sind deren Vielfachheiten g_0, g_1, g_2?

(b) Gib für jeden der Eigenräume $\mathscr{H}(E_0)$, $\mathscr{H}(E_1)$, $\mathscr{H}(E_2)$ in Ketschreibweise ein orthonormiertes Basissystem an.

(c) Schreibe für irgendeinen der Ketvektoren von (b) die zugehörige Energieeigenfunktion in der $\{x_1 x_2 m_1 m_2\}$-Darstellung an.

(d) Das Zweiteilchensystem sei im energetisch tiefsten Energieeigenzustand mit Spin „auf“ für beide Teilchen. Wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Ortsmessung *ein* Teilchen im Intervall $(-\infty, 0)$ und *ein* Teilchen im Intervall $(0, +\infty)$ antrifft?

(Anleitung: Die Einteilchenenergien und Einteilchen-Energieeigenfunktionen können dabei als bekannt angesehen werden. Bezüglich der Normierung der Energieeigenfunktionen des *Zweiteilchensystems* in der $\{x_1 x_2 m_1 m_2\}$-Darstellung s. die Bemerkungen zu Aufgabe 7.10.)

Ergebnis zu (d): $W = \frac{1}{2} + 2\Big[\int_0^{+\infty} dx\, u_0(x)\, u_1(x)\Big]^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} = 0{,}8183\,.$

(Vergleiche mit dem Ergebnis von Aufgabe T7.3.)

T7.2

(a) Drei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$.

(a1) Gib die Grundzustandsenergie E_0 des Dreiteilchensystems sowie die Vielfachheit g_0 von E_0 an.

(a2) Gib für den Eigenraum $\mathscr{H}(E_0)$ in Ketschreibweise ein orthonormiertes Basissystem an.

(b) Was lässt sich allgemein über die Vielfachheit g_0 von E_0 aussagen, wenn es sich um ein System von N nichtwechselwirkenden identischen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen in einem beliebigen eindimensionalen Potential V handelt, für das der Einteilchen-Hamiltonoperator $H = P^2/2m + V(X)$ hinreichend viele diskrete Eigenwerte besitzt?

T7.3 Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem eindimensionalen inversionssymmetrischen Potential $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$, welches gebundene Einteilchenzustände $|\,n\,\rangle$, $n = 0, 1$, besitzt. Zu einem bestimmten Zeitpunkt sei der Zustandsvektor des Zweiteilchensystems

$$|\,\psi\,\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big[\tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0+\rangle^{(1)} & |\,0+\rangle^{(2)} \\ |\,1-\rangle^{(1)} & |\,1-\rangle^{(2)} \end{vmatrix} - \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} |\,0-\rangle^{(1)} & |\,0-\rangle^{(2)} \\ |\,1+\rangle^{(1)} & |\,1+\rangle^{(2)} \end{vmatrix}\Big].$$

(a) Leite einen Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit ab, dass man bei einer Ortsmessung zum betreffenden Zeitpunkt *ein* Teilchen im Intervall $(-\infty, 0)$ und *ein* Teilchen im Intervall $(0, +\infty)$ antrifft, und vereinfache diesen Ausdruck so weit wie möglich.

(b) Berechne diese Wahrscheinlichkeit speziell für den Fall, dass $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ gilt.

(Anleitung: Die zu den Einteilchen-Bahnzuständen $|\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}$, $|\,1\,\rangle_{\mathrm{B}}$ des Problems gehörigen auf eins normierten Einteilchen-Wellenfunktionen sollen dabei als bekannt angesehen werden.)

Ergebnis zu (a): $$W = \frac{1}{2} - 2\Big[\int_0^{+\infty} dx\, u_0(x)\, u_1(x)\Big]^2;$$

Ergebnis zu (b): $$W = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} = 0{,}1817.$$

(Vergleiche mit dem Ergebnis von Aufgabe T7.1 (d).)

T7.4 Zwei nichtwechselwirkende identische Teilchen

(α) mit Spin $s = \frac{1}{2}$

(β) mit Spin $s = 1$

befinden sich in einem dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillatorpotential. Wodurch sind die niedrigsten drei Energieeigenwerte E_0, E_1, E_2 des Zweiteilchensystems gegeben und wie groß sind deren Vielfachheiten g_0, g_1, g_2 in den Fällen (α), (β)?

(Anleitung: Die Einteilchenenergien können dabei als bekannt angesehen werden. Beachte ferner den jeweiligen Symmetriecharakter der Gesamtspin-Eigenvektoren bzgl. Vertauschung der Teilchenindizes; siehe dazu die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

T7.5 Ist der Zustandsvektor eines Systems von zwei identischen spinlosen Teilchen im Schwerpunktsystem Eigenvektor des Gesamt-Bahndrehimpulsquadrates zur Bahndrehimpulsquantenzahl L, so muss L notwendigerweise null sein oder einen geradzahligen Wert haben.

Benütze dieses Ergebnis, um für einen angeregten Be_4^8-Kern mit „Kernspin“ (innerem Gesamtdrehimpuls) $I = 1$ die Möglichkeit des Zerfalls in zwei α-Teilchen (He_2^4-Kerne mit „Kernspin“ null) zu diskutieren.

(Anleitung: Da der Be_4^8-Kern im Schwerpunktsystem ruht, gilt für die Quantenzahl J des *Gesamtdrehimpulses* vor dem Zerfall $J = I = 1$. Beachte ferner die Erhaltung des Gesamtschwerpunktes und des Gesamtdrehimpulses.)

T7.6 Drei nichtwechselwirkende spinlose Teilchen gleicher Masse m befinden sich in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$. Behandle die folgenden Punkte (a), (b), (c)

(α) für den Fall, dass die Teilchen *unterscheidbar* sind;

(β) für den Fall, dass die Teilchen *ununterscheidbar* sind.

(a) Wodurch sind die niedrigsten drei Energieeigenwerte E_0, E_1, E_2 des Dreiteilchensystems gegeben und wie groß sind deren Vielfachheiten g_0, g_1, g_2?

(b) Gib für jeden der Eigenräume $\mathscr{H}(E_0)$, $\mathscr{H}(E_1)$, $\mathscr{H}(E_2)$ in Ketschreibweise ein orthonormiertes Basissystem an.

(c) Berechne für einen der unter Punkt (b) angeschriebenen Eigenvektoren zum Eigenwert E_1 die Wahrscheinlichkeit dafür, alle drei Teilchen im selben „infinitesimalen“ Intervall $(x, x + \Delta x)$ anzutreffen.

(Anleitung: Die Einteilchenenergien und Einteilchen-Energieeigenfunktionen können dabei als bekannt angesehen werden.)

Ergebnisse zu (c): Fall (α): $W = u_1^2(x)\, u_0^4(x)\, (\Delta x)^3$; Fall ($\beta$): $W = 3\, u_1^2(x)\, u_0^4(x)\, (\Delta x)^3$;

$$u_1^2(x)\, u_0^4(x) = \frac{2\alpha^3}{\pi\sqrt{\pi}}\, (\alpha x)^2 \exp\left[-3(\alpha x)^2\right], \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,.$$

T7.7 Der Hamiltonoperator eines Systems mit zwei identischen Spin-1-Teilchen in drei Raumdimensionen sei durch

$$H = H_0 + W, \qquad H_0 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)},$$
$$H_0^{(i)} = \frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m} + V(R^{(i)})\,, \quad i = 1, 2, \qquad W = \lambda\, \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+$$

gegeben. Dabei sei $V(R)$ ein Einteilchenpotential, welches gebundene Einteilchenzustände $|\, nlm_l \,\rangle$ zu bekannten Einteilchenenergien ϵ_{nl} besitzt.

(a) Gib die Grundzustandsenergie E_0^0 von H_0, deren Vielfachheit g_0^0 sowie eine orthonormierte Basis des zugehörigen Eigenraumes $\mathscr{H}(E_0^0)$ an.

(b) Berechne exakt die durch die Wechselwirkung W bedingte Aufspaltung des Energieniveaus E_0^0.

(Siehe auch die Aufgabe T6.8.)

8. Streuung

Angaben

8.1

(a) Berechne den totalen Wirkungsquerschnitt für die s-Streuung von Teilchen der Masse m am Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}, \qquad V_0 > 0 \;\text{ oder }\; V_0 < 0\,.$$

Im Falle $V_0 < 0$ (abstoßendes Potential) soll dabei $E < |V_0|$ angenommen werden.

(b) Unter welcher Voraussetzung ist die Beschränkung auf s-Streuung möglich?

(c) Zeige, dass im Grenzfall niedriger Energie

$$kr_0 \ll 1, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

für ein „schwaches“ Streupotential, d. h. für

$$k_0 r_0 \ll 1, \qquad k_0 := \sqrt{\frac{2m\,|V_0|}{\hbar^2}}\,,$$

aus dem Ergebnis von (a) für $V_0 > 0$ und $V_0 < 0$

$$\sigma \approx \frac{4\pi r_0^2}{9}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2$$

folgt.

(Anleitung: S. Anhang A.9, Gl. (A.9-10) und verwende die Ergebnisse von Aufgabe 2.26, Gl. (2.26-18), (2.26-19).)

8.2 Für die Streuung von Teilchen an einem sphärisch symmetrischen Potential, welches für $r \to +\infty$ stärker als jede Potenz von $\frac{1}{r}$ gegen null strebt, kann man zeigen, dass die s-Wellenamplitude

$$f_0(k) := \frac{1}{k}\, e^{i\delta_0(k)} \sin\delta_0(k)\,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

für kleine k normalerweise die Form

$$f_0(k) = -a_0 + \mathrm{O}(k)\,, \qquad a_0 \in \mathbb{R}$$

besitzt. Die Größe a_0 wird dabei als *Streulänge* des Potentials bezeichnet.

Enthält ein Potential Parameter, und „erscheint“ bei Überschreiten bestimmter Werte der Parameter ein gebundener s-Zustand mit der Energie $E = 0-$, so gilt für diese speziellen Parameterwerte stattdessen[1]

$$f_0(k) = i\,\frac{b_0}{k} + \mathrm{O}(1)\,, \qquad b_0 \in \mathbb{R}\,.$$

(a) Berechne für das Hartkugelpotential

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r \geq r_0 \end{cases}$$

die Streulänge a_0 sowie den Grenzwert des totalen Streuwirkungsquerschnittes für $k \to 0+$.

(b) Berechne dieselben Größen für das abstoßende Potential

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}\,, \qquad V_0 > 0\,.$$

(c)* Bei Überschreiten welcher Werte von $V_0 r_0^2$ „erscheint“ beim Topfpotential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases}\,, \qquad V_0 > 0$$

ein gebundener s-Zustand mit der Energie $E = 0-$? Wie lautet für diese Werte die Größe b_0 und der führende Term im totalen Streuwirkungsquerschnitt für $k \to 0+$? Berechne ferner die Streulänge a_0 sowie den Grenzwert des totalen Streuwirkungsquerschnittes für $k \to 0+$ unter der Annahme, dass $V_0 r_0^2$ keinen dieser speziellen Werte besitzt.

(Anleitung: Siehe Anhang A.9, Gl. (A.9-8) bis (A.9-13).)

(Anleitung zu (b): Verwende Gl. (2.26-17) von Aufgabe 2.26.)

(Anleitung zu (c): Verwende die Ergebnisse von Aufgabe 2.25 (b) und Gl. (2.26-16) von Aufgabe 2.26.)

[1] Siehe Taylor, J. R.: Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions. Krieger Publishing Company, Malabar 1983. Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2006.

8.3 Berechne in erster bornscher Näherung den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Teilchen der Masse m am Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases} , \qquad V_0 > 0 \;\text{ oder }\; V_0 < 0 \,.$$

Spezialisiere das Ergebnis auf den Grenzfall niedriger Energie (d. h. $kr_0 \ll 1$ mit $k := [2mE/\hbar^2]^{1/2}$) und berechne für diesen Grenzfall den entsprechenden totalen Streuwirkungsquerschnitt.

(Anleitung: Verwende Gl. (A.9-3) von Anhang A.9.)

8.4 Welche Bedingung folgt aus dem Gültigkeitskriterium

$$\left| \frac{m}{\hbar^2 k} \int\limits_0^{+\infty} dr\, V(r) \left[e^{2ikr} - 1 \right] \right| \ll 1 \,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

der ersten bornschen Näherung für das Potential von Aufgabe 8.3 ? Betrachte speziell die Grenzfälle niedriger Energie ($kr_0 \ll 1$) und hoher Energie ($kr_0 \gg 1$).

8.5

(a) Berechne in erster bornscher Näherung den differentiellen und totalen Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Teilchen der Masse m am Yukawapotential

$$V(r) = V_0 \, \frac{r_0}{r} \, e^{-r/r_0} \,.$$

Spezialisiere das Ergebnis auf die Grenzfälle niedriger bzw. hoher Energie (d. h. $kr_0 \ll 1$ bzw. $kr_0 \gg 1$; $k := [2mE/\hbar^2]^{1/2}$).

(b) Zeige, dass der unter (a) erhaltene differentielle Wirkungsquerschnitt bei dem Grenzübergang $V_0 \to 0$, $r_0 \to +\infty$, $V_0 r_0 = Z_1 Z_2 e^2 = \text{konst.}$, welcher auf das Coulombpotential

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

führt, die *rutherfordsche Streuformel*

$$\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right]^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \,, \qquad v := \frac{\hbar k}{m}$$

ergibt.

(Anleitung: Verwende Gl. (A.9-3) von Anhang A.9 und die Formel

$$\int\limits_0^{+\infty} d\rho \, e^{-\rho} \sin \alpha\rho = \frac{\alpha}{1+\alpha^2} \,, \qquad \alpha \in \mathbb{R} \,.$$

Für die Ausführung der Integration über den Raumwinkel ist es zweckmäßig, anstelle von ϑ als Integrationsveränderliche

$$\eta = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$$

einzuführen.)

8.6 Welche Bedingung folgt aus dem Gültigkeitskriterium

$$\left| \frac{m}{\hbar^2 k} \int_0^{+\infty} dr\, V(r) \left[e^{2ikr} - 1 \right] \right| \ll 1\,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

der ersten bornschen Näherung für das Yukawapotential

$$V(r) = V_0 \frac{r_0}{r} e^{-r/r_0} \quad ?$$

Betrachte speziell die Grenzfälle niedriger Energie ($kr_0 \ll 1$) und hoher Energie ($kr_0 \gg 1$).

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi \, \frac{e^{-a\xi} - e^{-b\xi}}{\xi} = \log \frac{b}{a} \quad \text{[Hauptwert]}, \quad a \in \mathbb{C}, \quad b \in \mathbb{C}, \quad \operatorname{Re} a > 0, \quad \operatorname{Re} b > 0.)$$

8.7* Berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt (im Schwerpunktsystem) für die Coulombstreuung von α-Teilchen an α-Teilchen.

(Die exakte Coulombstreuamplitude kann dabei als bekannt angesehen werden; siehe Anhang A.9, Gl. (A.9-16).)

(Hinweis: α-Teilchen besitzen den Spin null.)

8.8* Berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt (im Schwerpunktsystem) für die Elektron-Elektron-Streuung

(a) im Singulett-Spinzustand;

(b) in einem Triplett-Spinzustand;

(c) für unpolarisierte Elektronen.

(Die exakte Coulombstreuamplitude kann dabei als bekannt angesehen werden; siehe Anhang A.9, Gl. (A.9-16).)

8.9* Berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt (im Schwerpunktsystem) für die Deuteron-Deuteron-Streuung unter den folgenden Annahmen: Die Deuteronen seien unpolarisiert, die Wechselwirkung hänge nicht vom Spin ab, und die Streuamplitude $f(\vartheta)$ für das Wechselwirkungspotential sei bekannt.

(Hinweis: Deuteronen besitzen den Spin $s = 1$. Beachte die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

8.10* Wie lautet in den folgenden Fällen (a), (b), (c) und (d) die Formel für den totalen Streuwirkungsquerschnitt, wenn man sich auf s-Streuung beschränkt?

(a) Streuung nichtidentischer Teilchen;

(b) Streuung identischer Teilchen mit Spin null;

(c) Streuung unpolarisierter identischer Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$;

(d) Streuung unpolarisierter identischer Teilchen mit Spin 1.

(Anleitung: Verwende die Formel (A.9-8) von Anhang A.9 sowie $P_0(x) = 1$ und beachte (A.9-9), (A.9-19) bzw. (A.9-10), (A.9-20) und die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.)

8.11 Für die Behandlung der Neutron-Proton-Streuung bei niedrigen Energien kann die Neutron-Proton-Wechselwirkung näherungsweise durch ein spinabhängiges Zentralpotential der Form

$$V(\vec{R}^{(\mathrm{n})}, \vec{R}^{(\mathrm{p})}, \vec{S}^{(\mathrm{n})}, \vec{S}^{(\mathrm{p})}) = \frac{1}{4}\left(3\,{}^3V(R) + {}^1V(R)\right) + \frac{1}{4}\left({}^3V(R) - {}^1V(R)\right)\frac{4}{\hbar^2}\,\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{S}^{(\mathrm{p})}\,,$$

$$R := |\vec{R}^{(\mathrm{n})} - \vec{R}^{(\mathrm{p})}|$$

beschrieben werden.[2] Sind ${}^1a$ und ${}^3a$ die zu den Potentialen ${}^1V(R)$, ${}^3V(R)$ gehörigen Streulängen, so erhält man damit im Grenzfall niedriger Energie für einen Streuvorgang, bei welchem der Spinzustand des Neutron-Proton-Systems *vor* bzw. *nach* dem Stoß durch $|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle$ bzw. $|\,\chi_\mathrm{e}\,\rangle$ gegeben ist, im Schwerpunktsystem die Streuamplitude

$$f(\vartheta) = -\langle\,\chi_\mathrm{e}\,|\,A\,|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle \equiv f \quad \text{(unabhängig von } \vartheta)$$

mit dem auf $\mathscr{H}_\mathrm{S} = \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(\mathrm{n})} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(\mathrm{p})}$ wirkenden *Streulängenoperator*

$$A = \frac{1}{4}\,(3\,{}^3a + {}^1a)\,\mathbb{1} + \frac{1}{4}\,({}^3a - {}^1a)\,\frac{4}{\hbar^2}\,\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{S}^{(\mathrm{p})}\,.$$

[2] Siehe Goldberger, M. L., und K. M. Watson: Collision Theory. Krieger Publishing Company, Huntington 1975. Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2004.

(a) Berechne den zugehörigen totalen Streuwirkungsquerschnitt

(a1) für Singulett-Singulett-Streuung ($|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = |\,\chi_\mathrm{e}\,\rangle = |\,0\,0\,\rangle$);

(a2) für Triplett-Triplett-Streuung ($|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = |\,\chi_\mathrm{e}\,\rangle = |\,1 M_S\,\rangle$);

(a3) für Singulett-Triplett-Streuung ($|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = |\,0\,0\,\rangle$, $|\,\chi_\mathrm{e}\,\rangle = |\,1 M_S\,\rangle$);

(a4)* für einen Streuvorgang, bei welchem für den Spinzustand des Neutron-Proton-Systems vor dem Stoß

$$|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})} |+\rangle^{(\mathrm{p})}$$

gilt, wobei $|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}$ Eigenvektor von $\vec{S}^{(\mathrm{n})} \cdot \vec{e}$, $\vec{e} = (\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{1}{2})$, zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ sein soll, und nach dem Stoß weder der Spin des Neutrons noch der Spin des Protons gemessen wird;

(a5)* für einen Streuvorgang, bei welchem der Spinzustand des Neutrons vor dem Stoß durch den Vektor $|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}$ von (a4) und nach dem Stoß durch $|+\rangle^{(\mathrm{n})}$ gegeben ist, die Streuung an unpolarisierten Protonen erfolgt, und der Spin des Protons nach dem Stoß nicht gemessen wird;

(a6)* für die Streuung unpolarisierter Neutronen an unpolarisierten Protonen, wobei nach dem Stoß weder der Spin des Neutrons noch der Spin des Protons gemessen wird.

(b)* Der Spinzustand des Neutron-Proton-Systems vor dem Stoß sei

$$|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = |+\rangle^{(\mathrm{n})} |-\rangle^{(\mathrm{p})} = |\,+-\,\rangle\,.$$

Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der z-Komponente des Spins des Neutrons nach dem Stoß den Messwert $-\frac{\hbar}{2}$ findet.

Setze in die Ergebnisse von (a) und (b) die experimentellen Werte für die Streulängen ${}^1a$, ${}^3a$ ein, welche durch[3]

$${}^1a = -23{,}680 \cdot 10^{-13}\,\mathrm{cm}\,, \quad {}^3a = 5{,}399 \cdot 10^{-13}\,\mathrm{cm}$$

gegeben sind.

(Verwende: $1\,\mathrm{b} = 10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$.)

(Anleitung zu (a4) bis (a6): Beachte die in Anhang A.10, Tabelle A.10-1 angeführten Gesetze für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden.)

(Hinweis: Der Begriff der zu einem kugelsymmetrischen Potential gehörigen Streulänge ist in der Angabe zu Aufgabe 8.2 erklärt. Erläuterungen zum obigen Neutron-Proton-Wechselwirkungspotential und zum zugehörigen Streulängenoperator findet der Leser in den Bemerkungen im Anschluss an die Lösung der vorliegenden Aufgabe.)

[3] Siehe Eisenberg, J. M., und W. Greiner: Nuclear Theory. Vol. 3: Microscopic Theory of the Nucleus. Elsevier Science Publishers, Amsterdam 1986.

Lösungen

8.1 **(a)** Nach Gl. (A.9-10) von Anhang A.9 gilt für den totalen Wirkungsquerschnitt für s-Streuung ($l = 0$)

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \,. \tag{8.1-1}$$

Mit den Ergebnissen (2.26-18), (2.26-19) folgt für $V_0 > 0$ (s. auch Gl. (8.1-15))

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\Big[\arctan\Big(\frac{k}{K} \tan Kr_0\Big) - kr_0\Big] \,, \tag{8.1-2}$$

$$K := \sqrt{\frac{2m\,(V_0 + E)}{\hbar^2}} \quad (E > 0) \tag{8.1-3}$$

und für $V_0 < 0$ (in Gl. (2.26-7) bedeutet V_0 die Größe $|V_0|$)

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\Big[\arctan\Big(\frac{k}{\kappa} \tanh \kappa r_0\Big) - kr_0\Big] \,, \tag{8.1-4}$$

$$\kappa := \sqrt{\frac{2m\,(|V_0| - E)}{\hbar^2}} \quad (0 < E < |V_0|) \,. \tag{8.1-5}$$

(b) Voraussetzung für die Vernachlässigbarkeit der Phasenverschiebungen δ_l, $l \geq 1$, und damit für die Brauchbarkeit der Näherung $\sigma \approx \sigma_0$ ist hinreichend niedrige Energie E der Teilchen:

$$kr_0 \ll 1 \tag{8.1-6}$$

(s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe).

(c) Für ein „schwaches“ Streupotential

$$k_0 r_0 \ll 1 \,, \qquad k_0 := \sqrt{\frac{2m\,|V_0|}{\hbar^2}} \tag{8.1-7}$$

und niedrige Teilchenenergien ($kr_0 \ll 1$) kann man wegen

$$(Kr_0)^2 = (k_0 r_0)^2 + (kr_0)^2 \ll 1 \,, \quad (\kappa r_0)^2 = (k_0 r_0)^2 - (kr_0)^2 \ll 1 \tag{8.1-8}$$

die auftretenden Funktionen vereinfachen. Da für $|\xi| \ll 1$

$$\tan \xi \approx \xi + \frac{\xi^3}{3} \,, \quad \tanh \xi \approx \xi - \frac{\xi^3}{3} \,, \quad \arctan \xi \approx \xi - \frac{\xi^3}{3}$$

gilt, folgt für $V_0 > 0$ $(E > 0)$

$$\begin{aligned} \delta_0 &= \arctan\Big(\frac{k}{K} \tan Kr_0\Big) - kr_0 \approx \arctan\Big[kr_0\Big(1 + \frac{(Kr_0)^2}{3}\Big)\Big] - kr_0 \\ &\approx kr_0\Big(1 + \frac{(Kr_0)^2}{3}\Big) - \frac{(kr_0)^3}{3} - kr_0 = \frac{kr_0}{3}\,(k_0 r_0)^2 \end{aligned} \tag{8.1-9}$$

und analog für $V_0 < 0$ $(|V_0| > E > 0)$

$$\delta_0 \approx -\frac{kr_0}{3}\,(k_0 r_0)^2\,. \tag{8.1-10}$$

Der totale Streuwirkungsquerschnitt $\sigma \approx \sigma_0$ ist somit in beiden Fällen von der Teilchenenergie unabhängig, und es gilt

$$\sigma \approx \frac{4\pi r_0^2}{9}\,(k_0 r_0)^4 = \frac{4\pi r_0^2}{9}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2. \tag{8.1-11}$$

Bemerkungen

Die Gültigkeit der Näherung (8.1-11) ist lediglich durch die Voraussetzungen (8.1-6) und (8.1-7) eingeschränkt, zwischen E und V_0 kann dabei noch jede beliebige Beziehung bestehen, etwa $E \ll |V_0|$ oder $E \gg |V_0|$. (Für den Fall $V_0 < 0$ wurde die Rechnung zwar unter der Annahme $E < |V_0|$ durchgeführt, man erhält aber im Grenzfall $kr_0 \ll 1$, $k_0 r_0 \ll 1$ auch für $E \geq |V_0|$ die Formel (8.1-11).) Bezüglich der Näherung (8.1-11) s. auch die Aufgaben 8.3, 8.4 sowie die Bemerkungen zu Aufgabe 8.3 und die Bemerkungen zu Aufgabe 8.4.

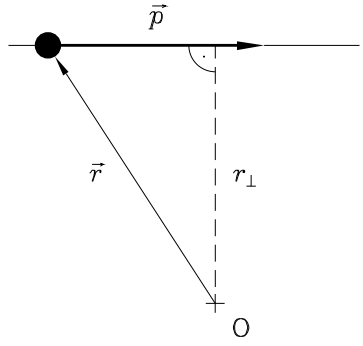


Abb. 8.1-1: Klassischer Stoßparameter eines Teilchens mit Impuls $\vec{p}$ und Bahndrehimpuls $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ bzgl. des Punktes O

Als Merkhilfe zur Bedingung für die Vernachlässigbarkeit der Phasenverschiebungen δ_l mit $l \geq l_0$, welche

$$kr_0 \ll \sqrt{l_0(l_0+1)} \tag{8.1-12}$$

lautet, kann der *klassische Stoßparameter* herangezogen werden (s. Abb. 8.1-1). Ist der klassische Stoßparameter

$$r_\perp = \frac{|\vec{r} \times \vec{p}|}{|\vec{p}|} = \frac{|\vec{l}|}{|\vec{p}|} \tag{8.1-13}$$

eines Massenpunktes in Bezug auf das Zentrum O einer Zielscheibe größer als deren Radius, so gibt es keinen Treffer. Ersetzt man die klassischen Größen $|\vec{l}|$, $|\vec{p}|$ durch $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ bzw. $\hbar k$ und ersetzt man den Radius der Zielscheibe durch die Potentialreichweite r_0, so gelangt man zur Abschätzung (8.1-12). Setzt man in (8.1-12) $l_0 = 1$, so erhält man die Bedingung (8.1-6). Die quasiklassische Betrachtungsweise ist allerdings nur dann gerechtfertigt, wenn die de Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p = 2\pi/k$ der Teilchen sehr klein ist gegen r_0 (d. h. wenn $kr_0 \gg 1$ gilt), und kann somit als Begründung von (8.1-12) nur für l_0-Werte herangezogen werden, für welche $1 \ll kr_0 \ll \sqrt{l_0(l_0+1)}$ gilt. Für kleine l_0-Werte kann das anschauliche klassische Bild

nur im Sinne einer Merkhilfe für die bei beliebigem l_0 richtige Bedingung (8.1-12) benützt werden.

Die Formel (8.1-11) zeigt, dass der totale Streuwirkungsquerschnitt um viele Größenordnungen *kleiner* sein kann als der geometrische Querschnitt πr_0^2 des Wechselwirkungsbereiches. Es ist aber auch das Umgekehrte möglich. Um dies zu zeigen, betrachte ich die niederenergetische Streuung an einem Topfpotential ($V_0 > 0$) mit $k_0 r_0 \simeq \pi/2$. In diesem Fall gilt

$$V_0 > 0, \quad k_0 r_0 \simeq \frac{\pi}{2}, \quad kr_0 \ll 1 \quad \Rightarrow \quad Kr_0 \approx k_0 r_0 \simeq \frac{\pi}{2}, \quad \left|\frac{Kr_0}{\tan Kr_0}\right| \ll 1. \tag{8.1-14}$$

Ich löse zunächst mithilfe der Beziehung

$$\sin^2(\alpha-\beta) = (\sin\alpha\cos\beta - \cos\alpha\sin\beta)^2 = \frac{(\tan\alpha\cos\beta - \sin\beta)^2}{1+\tan^2\alpha}$$

die Schachtelfunktionen in (8.1-2) auf, um eine für die Diskussion des Falles (8.1-14) geeignete Formel für σ_0 zu erhalten:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\,\frac{[(k/K)\tan Kr_0\cos kr_0 - \sin kr_0]^2}{1+(k^2/K^2)\tan^2 Kr_0}\ . \tag{8.1-15}$$

Unter den Voraussetzungen (8.1-14) folgt für den totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma \approx \sigma_0$ die *Wignerformel*

$$\sigma \approx 4\pi r_0^2\left[(kr_0)^2 + \left(\frac{Kr_0}{\tan Kr_0}\right)^2\right]^{-1}, \tag{8.1-16}$$

also ein totaler Streuwirkungsquerschnitt, der um Größenordnungen *größer* sein kann als πr_0^2. Da der totale Streuwirkungsquerschnitt in diesem Fall als Funktion von E bei kleinen Werten von E resonanzartig anwächst, spricht man von *Resonanzstreuung*.

Resonanzstreuung tritt beim Topfpotential bei niedrigen Teilchenenergien allgemein für $k_0 r_0 \simeq (2N-1)(\pi/2)$, $N \in \mathbb{N}$, auf, ist allerdings für $N \sim 1$ am ausgeprägtesten, da dann $Kr_0 \sim 1$ gilt. Von Aufgabe 2.25 wissen wir, dass beim Topfpotential immer dann ein zusätzlicher gebundener s-Zustand mit Energie knapp unterhalb von $E = 0$ „erscheint“, wenn die Größe $k_0 r_0$ mit wachsendem V_0 einen der Werte $(2N-1)(\pi/2)$, $N \in \mathbb{N}$, überschreitet (s. (2.25-15) bzw. Abb. 2.13-2, Kurvenäste (b)). Wir sehen also: Resonanzstreuung bei niedrigen Teilchenenergien tritt für solche Werte von V_0 auf, für die eine kleine Veränderung von V_0 das „Erscheinen“ oder das „Verschwinden“ eines s-Niveaus (gebundenen s-Zustandes) bewirken würde. Im ersteren Falle spricht man von einem *virtuellen Energieniveau*. Es ist zwar in Wirklichkeit kein Niveau nahe bei $E = 0$ vorhanden, eine kleine Erhöhung von V_0 würde aber genügen, um ein solches Niveau „hervorzubringen“, und dieser Umstand manifestiert sich im Resonanzverhalten des Wirkungsquerschnittes.

8.2

(a) Die Lösungen der „radialen“ Schrödingergleichung besitzen für $r \geq r_0$ die Form (s. Gl. (A.9-11), (A.9-12) von Anhang A.9)

$$R_{kl}(r) = B_l\,[\cos\delta_l\, j_l(kr) + \sin\delta_l\, n_l(kr)]\ . \tag{8.2-1}$$

Die Streuphasen $\delta_l = \delta_l(k)$ sind dabei aus der Randbedingung $R_{kl}(r_0) = 0$ zu bestimmen. Dies führt auf

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{j_l(kr_0)}{n_l(kr_0)}\,, \tag{8.2-2}$$

und mit Gl. (A.2-39) von Anhang A.2 folgt

$$\tan\delta_0(k) = -\tan kr_0\,, \tag{8.2-3}$$

$$\sin\delta_0(k) = \mp\sin kr_0\,, \quad \cos\delta_0(k) = \pm\cos kr_0\,. \tag{8.2-4}$$

(Beim Schritt von Gl. (8.2-3) zu Gl. (8.2-4) habe ich berücksichtigt, dass die Phasenverschiebung $\delta_0(k)$ nur bis auf ein ganzzahliges Vielfaches von π bestimmt ist [s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.26]. Analoge Schritte kommen auch bei den Punkten (b) und (c) vor.)

Für die durch

$$f_0(k) := \frac{1}{k}\,e^{i\delta_0(k)}\sin\delta_0(k) \tag{8.2-5}$$

definierte s-Wellenamplitude folgt damit

$$f_0(k) = -\frac{1}{k}\,e^{-ikr_0}\sin kr_0 = -r_0 + \mathrm{O}(k)\,, \tag{8.2-6}$$

es gilt also

$$a_0 = r_0\,. \tag{8.2-7}$$

Da in der Formel für die Streuamplitude für $k \to 0+$ nur der Summand mit $l = 0$ berücksichtigt werden muss (siehe dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 8.1), folgt aus Gl. (A.9-8) von Anhang A.9 mit

$$f_0(k) = -a_0 + \mathrm{O}(k)\,, \qquad a_0 \in \mathbb{R} \tag{8.2-8}$$

ganz allgemein

$$\lim_{k\to 0+} f(\vartheta) = -a_0\,, \qquad \lim_{k\to 0+}\sigma = 4\pi a_0^2\,. \tag{8.2-9}$$

Für das Hartkugelpotential gilt also

$$\lim_{k\to 0+}\sigma = 4\pi r_0^2\,, \tag{8.2-10}$$

was dem Vierfachen des geometrischen Querschnittes der „harten Kugel“ entspricht.

Auch im Grenzfall hoher Teilchenenergien, d. h. für $kr_0 \gg 1$, ergibt sich für σ nicht der geometrische Querschnitt, sondern das Doppelte des geometrischen Querschnittes, da zum klassischen „Reflexionsterm“ noch ein gleich großer „Beugungsterm“ hinzukommt; s. dazu z. B. [3].

(b) Für $0 < E < V_0$, also für $0 < k < k_0$,

$$k_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} > 0\,, \tag{8.2-11}$$

gilt nach Gl. (2.26-15), (2.26-17)

$$kr_0 \cot(kr_0 + \delta_0) = \kappa r_0 \coth \kappa r_0 \,, \tag{8.2-12}$$

$$\kappa = \kappa(k) := \sqrt{k_0^2 - k^2} \,. \tag{8.2-13}$$

Mit der Abkürzung

$$C = C(k) := \frac{\tanh \kappa r_0}{\kappa r_0} \tag{8.2-14}$$

können wir Gl. (8.2-12) in der Form

$$\tan(kr_0 + \delta_0) = \frac{\tan kr_0 + \tan \delta_0}{1 - \tan kr_0 \tan \delta_0} = Ckr_0 \tag{8.2-15}$$

schreiben, woraus

$$\tan \delta_0 = \frac{Ckr_0 - \tan kr_0}{1 + Ckr_0 \tan kr_0} \tag{8.2-16}$$

folgt. Berücksichtigen wir hier

$$\tan kr_0 = kr_0 + \mathrm{O}(k^3) \,, \qquad C(k) = \frac{\tanh k_0 r_0}{k_0 r_0} + \mathrm{O}(k^2) \,, \tag{8.2-17}$$

so erhalten wir

$$\tan \delta_0 = \left(\frac{\tanh k_0 r_0}{k_0 r_0} - 1 \right) kr_0 + \mathrm{O}(k^3) \,, \tag{8.2-18}$$

$$\sin \delta_0 = \pm \tan \delta_0 + \mathrm{O}(k^3) \,, \quad \cos \delta_0 = \pm 1 + \mathrm{O}(k^2) \,, \tag{8.2-19}$$

und es ergibt sich für $f_0(k)$ ein Ausdruck der Form (8.2-8) mit der Streulänge

$$a_0 = \left(1 - \frac{\tanh k_0 r_0}{k_0 r_0} \right) r_0 \,. \tag{8.2-20}$$

Die Streulänge dieses Potentials ist also wie die Streulänge des Hartkugelpotentials positiv. Für

$$k_0 r_0 \ll 1 \,, \tag{8.2-21}$$

d. h. für hinreichend schwaches Potential, folgt

$$a_0 \approx \frac{(k_0 r_0)^2}{3} r_0 \ll r_0 \,, \tag{8.2-22}$$

für

$$k_0 r_0 \gg 1 \,, \tag{8.2-23}$$

d. h. für hinreichend starkes Potential, gilt

$$a_0 \approx r_0 \,. \tag{8.2-24}$$

Dieses Ergebnis überrascht uns nicht, wenn wir uns an das Ergebnis für das Hartkugelpotential erinnern. Für den niederenergetischen Grenzwert des totalen Streuwirkungsquerschnittes folgt mit Gl. (8.2-9), (8.2-20)

$$\lim_{k\to 0+} \sigma = 4\pi r_0^2 \left(1 - \frac{\tanh k_0 r_0}{k_0 r_0}\right)^2 . \tag{8.2-25}$$

Speziell gilt für $k_0 r_0 \ll 1$

$$\lim_{k\to 0+} \sigma \approx 4\pi r_0^2 \, \frac{(k_0 r_0)^4}{9} = \frac{4\pi r_0^2}{9} \left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 \ll \pi r_0^2 \tag{8.2-26}$$

und für $k_0 r_0 \gg 1$

$$\lim_{k\to 0+} \sigma \approx 4\pi r_0^2 . \tag{8.2-27}$$

(c)* Wir wissen von Aufgabe 2.25 (b), dass beim Topfpotential bei Variation der Größe $k_0 r_0$, k_0 Gl. (8.2-11), immer dann ein gebundener s-Zustand mit der Energie $E = 0-$ (d. h. mit einer Energie „knapp unterhalb“ von $E = 0$) auftritt, wenn $k_0 r_0$ einen der Werte

$$k_0 r_0 = (2N-1)\frac{\pi}{2} , \qquad N \in \mathbb{N} \tag{8.2-28}$$

überschreitet. Nach dem Satz aus der Angabe muss also die s-Wellenamplitude $f_0(k)$ für diese speziellen Werte von $k_0 r_0$ für kleine k die Form

$$f_0(k) = i\,\frac{b_0}{k} + \mathrm{O}(1) , \qquad b_0 \in \mathbb{R} \tag{8.2-29}$$

besitzen, womit für $k \to 0+$

$$f(\vartheta) \sim i\,\frac{b_0}{k} , \qquad \sigma \sim \frac{4\pi b_0^2}{k^2} \tag{8.2-30}$$

folgt. Wir wollen nun die Größe b_0 für das Topfpotential berechnen.

Nach Gl. (2.26-14), (2.26-16) gilt für das Topfpotential für $0 < E < +\infty$, also für $0 < k < +\infty$,

$$k r_0 \cot(k r_0 + \delta_0) = K r_0 \cot K r_0 , \tag{8.2-31}$$

$$K = K(k) := \sqrt{k_0^2 + k^2} . \tag{8.2-32}$$

Führen wir die neue Abkürzung

$$C(k) := \frac{\tan K r_0}{K r_0} \tag{8.2-33}$$

ein, so gelangen wir nach identischen Schritten wie im Punkt (b) wieder zur Beziehung (8.2-16) für die Streuphase $\delta_0 = \delta_0(k)$. Für kleine k können wir dabei wieder für $\tan k r_0$ die Gleichung (8.2-17) benützen. Bei der Größe $C(k)$ Gl. (8.2-33) müssen wir aber für die

speziellen $k_0 r_0$-Werte von Gl. (8.2-28) Acht geben, da für diese Werte $|\tan k_0 r_0| = +\infty$ gilt. Mit

$$\begin{aligned}\tan K r_0 &= \tan\left[(2N-1)\frac{\pi}{2} + \frac{(kr_0)^2}{(2N-1)\pi} + \mathrm{O}(k^4)\right] \\ &= -\cot\left[\frac{(kr_0)^2}{(2N-1)\pi} + \mathrm{O}(k^4)\right] = -\frac{(2N-1)\pi}{(kr_0)^2} + \mathrm{O}(1)\,,\end{aligned}$$

$$C(k) = \frac{\tan K r_0}{K r_0} = -\frac{2}{(kr_0)^2} + \mathrm{O}(1) \tag{8.2-34}$$

und Gl. (8.2-17) folgt aus der Beziehung (8.2-16)

$$\tan\delta_0 = \frac{2}{kr_0} + \mathrm{O}(k)\,, \tag{8.2-35}$$

$$\sin\delta_0 = \pm 1 + \mathrm{O}(k^2)\,, \quad \cos\delta_0 = \pm\frac{kr_0}{2} + \mathrm{O}(k^3) \tag{8.2-36}$$

und es ergibt sich für $f_0(k)$ ein Ausdruck der Form (8.2-29) mit $b_0 = 1$. Für das Verhalten des totalen Wirkungsquerschnittes im Grenzfall $k \to 0+$ gilt somit

$$\sigma \sim \frac{4\pi}{k^2}\,. \tag{8.2-37}$$

Gilt hingegen

$$k_0 r_0 \neq (2N-1)\frac{\pi}{2}\,, \quad N \in \mathbb{N}\,, \tag{8.2-38}$$

so verläuft die Rechnung vollkommen analog wie bei Punkt (b), es ist lediglich der Ausdruck von Gl. (8.2-17) durch

$$C(k) = \frac{\tan k_0 r_0}{k_0 r_0} + \mathrm{O}(k^2) \tag{8.2-39}$$

zu ersetzen. Die s-Wellenamplitude nimmt für kleine k wieder die Form (8.2-8) an, wobei für die Streulänge

$$a_0 = \left(1 - \frac{\tan k_0 r_0}{k_0 r_0}\right) r_0 \tag{8.2-40}$$

gilt. Die Formel für den niederenergetischen Grenzwert des totalen Streuwirkungsquerschnittes lautet damit

$$\lim_{k\to 0+} \sigma = 4\pi r_0^2 \left(1 - \frac{\tan k_0 r_0}{k_0 r_0}\right)^2. \tag{8.2-41}$$

Die Streulänge a_0 Gl. (8.2-40) ist für alle zulässigen $k_0 r_0$-Werte (s. Gl. (8.2-38)) endlich, sie kann aber positiv, negativ oder null sein. Speziell gilt für $k_0 r_0 \ll 1$

$$a_0 \approx -\frac{(k_0 r_0)^2}{3} r_0 < 0\,, \quad |a_0| \ll r_0\,, \tag{8.2-42}$$

$$\lim_{k\to 0+} \sigma \approx 4\pi r_0^2 \frac{(k_0 r_0)^4}{9} = \frac{4\pi r_0^2}{9}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 \ll \pi r_0^2\,. \tag{8.2-43}$$

Für Werte von $k_0 r_0$, welche nahe bei einem der Werte $(2N-1)(\pi/2)$, $N \sim 1$, liegen, gilt $|\tan k_0 r_0|/k_0 r_0 \gg 1$ und

$$a_0 \approx -\frac{\tan k_0 r_0}{k_0 r_0}\, r_0\,, \qquad |a_0| \gg r_0\,, \tag{8.2-44}$$

$$\lim_{k\to 0+} \sigma \approx 4\pi r_0^2 \left(\frac{\tan k_0 r_0}{k_0 r_0}\right)^2 \gg \pi r_0^2\,. \tag{8.2-45}$$

Die Streulänge ist dabei positiv oder negativ, je nachdem, ob $k_0 r_0$ oberhalb oder unterhalb von $(2N-1)(\pi/2)$ liegt.

Bemerkungen

Das Ergebnis (8.2-10) ermöglicht es, den *Betrag* der Streulänge für ein gegebenes Potential als den Radius einer fiktiven „harten Kugel“ zu interpretieren, welche niederenergetische Teilchen auf die gleiche Weise streuen würde wie das betreffende Potential.

Die Streulänge kann ganz allgemein mit der zu kleinen r hin extrapolierten asymptotischen Form der Funktion $r R_{kl}(r)$, $k \to 0+$, in eine anschauliche Verbindung gebracht werden (siehe dazu z. B. [6]).

Die Beziehungen (8.2-26) bzw. (8.2-43) für den niederenergetischen Streuwirkungsquerschnitt bei einem schwach abstoßenden oder schwach anziehenden Potential der gegebenen Form wurde in Aufgabe 8.1 bereits auf einem anderen Weg erhalten (s. Gl. (8.1-11)).

Die Formulierung „gebundener s-Zustand mit der Energie $E = 0-$“ wurde in der Angabe gewählt, weil es für ein Potential der betrachteten Klasse einen gebundenen s-Zustand zu einem Eigenwert $E = 0$ nicht geben kann. (Die „radiale“ Schrödingergleichung kann für derartige Potentiale für $E = 0$ keine normierbare Lösung zu $l = 0$ besitzen.) Es ist lediglich möglich, dass bei der Variation von Potentialparametern bei Überschreiten gewisser Werte ein zusätzlicher gebundener s-Zustand mit einer Energie „knapp unterhalb von $E = 0$ erscheint“, wie dies beim Topfpotential der Fall ist, wenn $k_0 r_0$ einen der Werte von Gl. (8.2-28) überschreitet.

In den Bemerkungen zu Aufgabe 8.1 wurde für das Topfpotential der niederenergetische totale Streuwirkungsquerschnitt für $k_0 r_0 \simeq (2N-1)(\pi/2)$, $N \sim 1$, näherungsweise berechnet und es wurde dafür die Formel (8.1-16) erhalten. Für $k_0 r_0 \neq (2N-1)(\pi/2)$ ergibt sich daraus im Grenzfall $k \to 0+$ unmittelbar wieder die Beziehung (8.2-45), für $k_0 r_0 = (2N-1)(\pi/2)$ folgt im Grenzfall $k \to 0+$ wieder die Beziehung (8.2-37). Die Formeln (8.2-45), (8.2-37) geben nur den jeweils führenden Term in den Entwicklungen nach Potenzen von k an. Will man den totalen Streuwirkungsquerschnitt für kleine k-Werte *quantitativ* berechnen, muss man entweder die Formel (8.1-16) benützen oder eine der Formeln (8.1-2), (8.1-15), aus welchen (8.1-16) hergeleitet wurde.

Für jene speziellen Werte von $k_0 r_0$, für welche $\tan k_0 r_0 = k_0 r_0$ gilt, ist die Streulänge für das Topfpotential null, und der totale Streuwirkungsquerschnitt strebt für $k \to 0+$ gegen null. Falls $\tan k_0 r_0 \neq k_0 r_0$, aber

$$\tan k_0 r_0 \approx k_0 r_0 \tag{8.2-46}$$

gilt, erhält man für

$$k r_0 \ll 1 \tag{8.2-47}$$

wegen

$$C(k) = \frac{\tan Kr_0}{Kr_0} \sim 1 \quad \Rightarrow \quad C(k)\,(kr_0)^2 \ll 1 \tag{8.2-48}$$

und (8.2-17) aus Gl. (8.2-16)

$$\tan\delta_0 \approx \left[C(k) - 1\right] kr_0 \approx \pm \sin\delta_0 \tag{8.2-49}$$

und somit

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \approx 4\pi r_0^2 \Big(\frac{\tan Kr_0}{Kr_0} - 1\Big)^2 . \tag{8.2-50}$$

Der niederenergetische totale Streuwirkungsquerschnitt $\sigma \approx \sigma_0$ wird dann bei einem Energiewert E, welcher durch

$$\tan Kr_0 = Kr_0 \tag{8.2-51}$$

bestimmt ist, näherungsweise null, was man als *Ramsauereffekt* bezeichnet. Streut man Elektronen an Edelgasatomen, so misst man bei $E = 0{,}7\,\mathrm{eV}$ einen extrem niedrigen totalen Streuwirkungsquerschnitt. Dies kann auf der Basis der obigen Überlegungen qualitativ verstanden werden, da das Wechselwirkungspotential zwischen einem Elektron und einem Edelgasatom mit dem Abstand besonders rasch abfällt und deshalb als Topfpotential idealisiert werden kann.

8.3 Nach Gl. (A.9-3) von Anhang A.9 folgt für das Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases} , \quad V_0 > 0 \ \text{ oder } \ V_0 < 0$$

für die Streuamplitude in erster bornscher Näherung

$$f^{\mathrm{B}}(\vartheta) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^{r_0} dr\, r\,\sin qr = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}\left(\sin qr_0 - qr_0\cos qr_0\right) \tag{8.3-1}$$

mit

$$q = 2k\sin\frac{\vartheta}{2} . \tag{8.3-2}$$

Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt gilt also in erster bornscher Näherung

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} = |f^{\mathrm{B}}(\vartheta)|^2 = \left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 r_0^2\,\frac{(\sin qr_0 - qr_0\cos qr_0)^2}{(qr_0)^6} . \tag{8.3-3}$$

Im Grenzfall niedriger Energien ($kr_0 \ll 1$) erhält man wegen

$$\frac{\sin qr_0 - qr_0\cos qr_0}{(qr_0)^3} = \frac{1}{3} + \mathrm{O}((kr_0)^2)$$

einen isotropen und von der Teilchenenergie unabhängigen differentiellen Streuwirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} \approx \frac{r_0^2}{9}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 . \tag{8.3-4}$$

Für den totalen Streuwirkungsquerschnitt gilt somit in erster bornscher Näherung im Grenzfall $kr_0 \ll 1$

$$\sigma^{\mathrm{B}} \approx \frac{4\pi r_0^2}{9}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 . \tag{8.3-5}$$

Bemerkungen

Isotropie des differentiellen Streuwirkungsquerschnittes für niedrige Energien ist ein Charakteristikum aller Potentiale endlicher Reichweite (s. auch Gl. (8.5-6)).

Für hohe Energien ($kr_0 \gg 1$) zeigt sich nach Formel (8.3-3) eine starke Bevorzugung der Vorwärtsstreuung. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist dann nur für einen Kegel vom Öffnungswinkel $\Delta\vartheta \sim 1/kr_0 \ll 1$ merklich von null verschieden. Integriert man (8.3-3) unter Beachtung von $d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = (1/k^2)\, q\, dq\, d\varphi$ über den gesamten Raumwinkel, so erhält man für den Grenzfall $kr_0 \gg 1$

$$\sigma^{\mathrm{B}} \approx \frac{\pi}{2k^2}\left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 \propto \frac{1}{E} . \tag{8.3-6}$$

Die Bedingungen für die Brauchbarkeit der Formeln (8.3-5) bzw. (8.3-6) werden in Aufgabe 8.4 behandelt.

8.4 Für das Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > r_0 \end{cases} , \qquad V_0 > 0 \ \text{ oder } \ V_0 < 0$$

ergibt sich aus dem Gültigkeitskriterium für die erste bornsche Näherung (siehe Anhang A.9, Gl. (A.9-5))

$$\left| \frac{mV_0}{\hbar^2 k} \int_0^{r_0} dr \left[e^{2ikr} - 1 \right] \right| \ll 1 , \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

bzw.

$$\frac{m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{(kr_0)^2} \sqrt{kr_0(kr_0 - \sin 2kr_0) + \frac{1}{2}(1 - \cos 2kr_0)} \ll 1 . \tag{8.4-1}$$

Im Grenzfall niedriger Energien ($kr_0 \ll 1$) vereinfacht sich diese Bedingung zu

$$\frac{m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2} \ll 1 , \tag{8.4-2}$$

im Grenzfall hoher Energien ($kr_0 \gg 1$) zu

$$\frac{m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{kr_0} \ll 1 . \tag{8.4-3}$$

Bemerkungen

Ist das Potential so schwach (anziehend oder abstoßend), dass (8.4-2) gilt, so ist die Bedingung (8.4-1) für *beliebiges* kr_0 erfüllt, insbesondere für $kr_0 \gg 1$, wie man aus (8.4-3) unmittelbar sieht. Ist umgekehrt die Bedingung (8.4-3) erfüllt, so muss (8.4-2) keineswegs erfüllt sein.

Da die Bedingung für die Existenz gebundener Zustände beim Topfpotential ($V_0 > 0$) nach Gl. (2.25-18)

$$\frac{mV_0 r_0^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{8} = 1{,}23$$

lautet, sieht man: Für ein Topfpotential, welches ausreichend tief ist, um gebundene Zustände zuzulassen, ist die erste bornsche Näherung für die Streuung niederenergetischer Teilchen sicher *nicht* brauchbar.

Die Näherung (8.3-5) für den totalen Streuwirkungsquerschnitt wurde in erster bornscher Näherung für $kr_0 \ll 1$ erhalten. Sie ist also brauchbar, wenn neben $kr_0 \ll 1$ die Beziehung (8.4-2) erfüllt ist. In Aufgabe 8.1 wurde dieselbe Näherung mithilfe der Partialwellenmethode erhalten (s. Gl. (8.1-11)), und es haben sich dort dieselben Voraussetzungen für ihre Anwendbarkeit ergeben (s. Gl. (8.1-6), (8.1-7)).

8.5

(a) Nach Gl. (A.9-3) von Anhang A.9 folgt beim Yukawapotential (r_0 „Reichweite“)

$$V(r) = V_0 \frac{r_0}{r} e^{-r/r_0} \tag{8.5-1}$$

für die Streuamplitude in erster bornscher Näherung ($\rho := r/r_0$)

$$f^{\mathrm{B}}(\vartheta) = -\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2 q} \int_0^{+\infty} d\rho\, e^{-\rho} \sin(q r_0 \rho)\,, \qquad q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}\,.$$

Mit der gegebenen Integralformel erhält man

$$f^{\mathrm{B}}(\vartheta) = -\frac{2mV_0 r_0}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2} + (1/r_0^2)}\,. \tag{8.5-2}$$

Für den differentiellen Streuwirkungsquerschnitt gilt also in erster bornscher Näherung

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} = \left[\frac{2mV_0 r_0}{\hbar^2}\right]^2 \frac{1}{\left[4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2} + (1/r_0^2)\right]^2}\,. \tag{8.5-3}$$

Integration über den Raumwinkel unter Verwendung der Integrationsveränderlichen

$$\varphi,\ \eta = 4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2} \tag{8.5-4}$$

gibt wegen

$$d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \frac{1}{2k^2}\, d\eta\, d\varphi$$

$$\sigma^{\mathrm{B}} = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega \, \frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} = \left[\frac{2mV_0 r_0}{\hbar^2}\right]^2 \frac{\pi}{k^2} \int\limits_0^{4k^2} \frac{d\eta}{\left[\eta + (1/r_0^2)\right]^2}$$

den totalen Streuwirkungsquerschnitt

$$\sigma^{\mathrm{B}} = \left[\frac{2mV_0 r_0}{\hbar^2}\right]^2 \frac{4\pi r_0^2}{4k^2 + (1/r_0^2)} \, . \tag{8.5-5}$$

Im Grenzfall niedriger Energien ($kr_0 \ll 1$) erhält man einen isotropen und von der Teilchenenergie unabhängigen differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} \approx r_0^2 \left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 \tag{8.5-6}$$

und für den totalen Streuwirkungsquerschnitt folgt entsprechend

$$\sigma^{\mathrm{B}} \approx 4\pi r_0^2 \left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 . \tag{8.5-7}$$

Im Grenzfall hoher Energien ($kr_0 \gg 1$) erhält man für kleine Streuwinkel ($\vartheta \ll 1/kr_0 \Rightarrow qr_0 \ll 1$) wieder den differentiellen Wirkungsquerschnitt (8.5-6), für hinreichend große Streuwinkel ($\vartheta \gg 1/kr_0 \Rightarrow qr_0 \gg 1$) ergibt sich

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} \approx \left[\frac{V_0 r_0}{4E}\right]^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \, , \tag{8.5-8}$$

also dieselbe Winkelabhängigkeit wie bei der Rutherfordstreuung (s. (A.9-17)). Für den totalen Wirkungsquerschnitt folgt im Grenzfall $kr_0 \gg 1$ aus Gl. (8.5-5)

$$\sigma^{\mathrm{B}} \approx \frac{\pi}{k^2} \left[\frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}\right]^2 \propto \frac{1}{E} \, . \tag{8.5-9}$$

(b) Bei dem Grenzübergang

$$V_0 \to 0 \, , \quad r_0 \to +\infty \, , \quad V_0 r_0 = Z_1 Z_2 e^2 = \text{konst.} \tag{8.5-10}$$

geht das spezielle Yukawapotential (abgeschirmte Coulombpotential)

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \, e^{-r/r_0} \tag{8.5-11}$$

in das Coulombpotential

$$V_{\mathrm{Coul}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \, , \tag{8.5-12}$$

und die Streuamplitude (8.5-2) in

$$f^{\mathrm{B}}_{\mathrm{Coul}}(\vartheta) = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \, \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \, , \qquad v := \frac{\hbar k}{m} \tag{8.5-13}$$

über. Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt folgt dann die rutherfordsche Streuformel

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega} = |f^{\mathrm{B}}_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)|^2 = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2}\right]^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} = \frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega} \,. \tag{8.5-14}$$

Der totale Streuwirkungsquerschnitt (8.5-5) wird im Grenzfall (8.5-10) unendlich.

Bemerkungen

Das Ergebnis (8.5-14) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt wurde hier durch den Grenzübergang (8.5-10) aus der ersten bornschen Näherung für das *abgeschirmte* Coulombpotential (8.5-11) erhalten. Einsetzen des Coulombpotentials (8.5-12) in die Formel (A.9-3) von Anhang A.9 für die erste bornsche Näherung der Streuamplitude liefert ein nicht existierendes Integral. (Für das Coulombpotential ist die Bedingung (A.9-1) nicht erfüllt.)

Der differentielle Wirkungsquerschnitt (8.5-14) stimmt mit dem *exakten* Wirkungsquerschnitt (A.9-17) überein, obwohl die Streuamplitude von Gl. (8.5-13) nur eine *Näherung* für die exakte Coulombstreuamplitude (A.9-16) darstellt. Bemerkenswert ist, dass sich derselbe Wirkungsquerschnitt auch klassisch ergibt. Diese merkwürdigen „Zufälle“ sind für das Coulombpotential typisch. Insbesondere gibt es kein anderes Kraftgesetz, für das quantenmechanischer und klassischer Streuwirkungsquerschnitt übereinstimmen.

Die exakte Coulombstreuamplitude (A.9-16) kann für

$$|Z_1 Z_2|\, e^2 \ll \hbar v \tag{8.5-15}$$

durch die Näherung (8.5-13) ersetzt werden. In Aufgabe 8.6 wird gezeigt, dass dies gerade jene Bedingung ist, die man im Grenzfall schwacher Abschirmung aus dem Gültigkeitskriterium für die erste bornsche Näherung erhält. Dennoch ist die Durchführung des Grenzüberganges (8.5-10) selbst dann bedenklich, wenn (8.5-15) erfüllt ist. Führt man nämlich denselben Grenzübergang für die bornschen Korrekturen zweiter, dritter, ... Ordnung zu $f(\vartheta)$ durch, so erhält man durchwegs divergente Ausdrücke.

Der winkel- und energieabhängige Phasenfaktor, um den sich die exakte Streuamplitude (A.9-16) von der Näherung (8.5-13) unterscheidet, ist zwar für die Rutherfordstreuung bedeutungslos, er geht aber entscheidend in den Wirkungsquerschnitt für die Coulombstreuung *identischer Teilchen* ein (s. die Aufgaben 8.7, 8.8).

8.6 Für das Yukawapotential (8.5-1) ergibt sich aus dem Gültigkeitskriterium für die erste bornsche Näherung (s. Gl. (A.9-5) von Anhang A.9)

$$\left|\frac{mV_0 r_0}{\hbar^2 k}\int_0^{+\infty} dr\,\frac{1}{r}\,e^{-r/r_0}\left[e^{2ikr}-1\right]\right| \ll 1\,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \,.$$

Mit der in der Angabe angeschriebenen Formel folgt daraus

$$\frac{m|V_0|\,r_0}{\hbar^2 k}\,|\log(1-2ikr_0)| \ll 1\,.$$

Da für den Hauptwert des Logarithmus

$$|\log z| = \Big|\log|z| + i\arg z\Big| = \Big|\log|z| + i\arctan\frac{\operatorname{Im} z}{\operatorname{Re} z}\Big| = \sqrt{\Big(\log|z|\Big)^2 + \Big(\arctan\frac{\operatorname{Im} z}{\operatorname{Re} z}\Big)^2}$$

gilt, folgt weiter

$$\frac{2m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2}\,\frac{1}{2kr_0}\,\sqrt{\Big(\log\sqrt{1+(2kr_0)^2}\Big)^2 + \Big(\arctan 2kr_0\Big)^2} \ll 1\,. \tag{8.6-1}$$

Im Grenzfall niedriger Energien ($kr_0 \ll 1$) vereinfacht sich diese Bedingung zu

$$\frac{2m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2} \ll 1 \qquad \text{bzw.} \qquad |V_0|\,r_0 \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0} \tag{8.6-2}$$

und im Grenzfall hoher Energien ($kr_0 \gg 1$) zu

$$\frac{2m\,|V_0|\,r_0^2}{\hbar^2}\,\frac{\log 2kr_0}{2kr_0} \ll 1 \qquad \text{bzw.} \qquad |V_0|\,r_0 \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0}\,\frac{2kr_0}{\log 2kr_0}\,. \tag{8.6-3}$$

Bemerkungen

Analog zu Aufgabe 8.4 gilt auch hier: Ist die Bedingung (8.6-2) erfüllt, so ist die Bedingung (8.6-1) für beliebiges kr_0 erfüllt, insbesondere für $kr_0 \gg 1$, wie man aus (8.6-3) sieht. Die erste bornsche Näherung ist also für *beliebige* Teilchenenergien brauchbar, wenn sie für *niedrige* Energien brauchbar ist. Dies ist der Fall, wenn das Potential hinreichend schwach ist. Ist umgekehrt (8.6-3) erfüllt, so muss (8.6-1) bzw. (8.6-2) aber keineswegs erfüllt sein.

Das abgeschirmte Coulombpotential kann für die näherungsweise Beschreibung der *Streuung von Elektronen an neutralen Atomen* ($Z_1 = -1$, $Z_2 = Z$) herangezogen werden. Für die Reichweite r_0 ist dann der „Atomradius“ einzusetzen, der für nicht zu leichte Atome ($Z \gg 1$, $m \approx m_\mathrm{e}$) durch

$$r_0 \approx \frac{\hbar^2}{me^2 Z^{1/3}} = \frac{a_0}{Z^{1/3}} \tag{8.6-4}$$

gegeben ist (Thomas-Fermi-Radius; s. [31]), und für $V_0 r_0$ ist $-Ze^2$ zu setzen (s. Gl. (8.5-1) und (8.5-11)). Die Bedingung (8.6-2) wird dann zu

$$Ze^2 \ll \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{me^2}{\hbar^2}\,Z^{1/3}\,, \quad \text{d.h.} \quad Z^{2/3} \ll \frac{1}{2}\,. \tag{8.6-5}$$

Die erste bornsche Näherung ist also für die Streuung langsamer Elektronen ($kr_0 \ll 1$) an neutralen Atomen sicher nicht brauchbar. – Die Bedingung (8.6-3) wird zu

$$\frac{Ze^2}{\hbar v}\,\log\frac{2\hbar v}{Z^{1/3}e^2} \ll 1\,, \qquad v := \frac{\hbar k}{m}\,. \tag{8.6-6}$$

Wie man zeigen kann, gilt diese Bedingung im wesentlichen auch für relativistische Geschwindigkeiten. Setzt man die Feinstrukturkonstante $e^2/\hbar c \approx 1/137$ ein, so erhält man

$$\frac{Z}{137(v/c)}\,\log\frac{274\,(v/c)}{Z^{1/3}} \ll 1\,. \tag{8.6-7}$$

Wie man aus dieser groben Abschätzung sieht, wird die erste bornsche Näherung auch für sehr hohe Geschwindigkeiten der Elektronen nur für relativ leichte Atome brauchbar sein.

Für das abgeschirmte Coulombpotential (8.5-11) lautet das für $kr_0 \gg 1$ gültige Kriterium für die Anwendbarkeit der ersten bornschen Näherung

$$|Z_1 Z_2|\, e^2 \ll \hbar v \, \frac{1}{\log 2kr_0} \; . \tag{8.6-8}$$

Ist die Energie des Teilchens so groß, und die Abschirmung so schwach, dass $kr_0 \gg 1$, aber $\log 2kr_0 \sim 1$ ist, dann ergibt sich daraus gerade die Bedingung (8.5-15).

8.7* α-Teilchen sind Boseteilchen mit Spin null, die Streuwellenfunktion muss daher symmetrisch bzgl. der Transformation $\vec{r} \leftrightarrow -\vec{r}$ ($\vec{r}$ Relativkoordinaten) sein (siehe Anhang A.9). Es folgt somit für die Coulombstreuung von α-Teilchen an α-Teilchen nach Gl. (A.9-19) im Schwerpunktsystem (Index 0 bedeutet Spin null, $f(\vartheta) \equiv f_{\text{Coul}}(\vartheta)$)

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_0 = \Big|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)\Big|^2 = \Big|f(\vartheta)\Big|^2+\Big|f(\pi-\vartheta)\Big|^2+2\,\text{Re}\Big[f(\vartheta)f^*(\pi-\vartheta)\Big]. \tag{8.7-1}$$

Einsetzen der exakten Coulombstreuamplitude Gl. (A.9-16) mit $Z_1 Z_2 = 4$, $m = m_\alpha/2$ (m reduzierte Masse, v Relativgeschwindigkeit) gibt

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_0 = \left(\frac{4e^2}{m_\alpha v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{2\cos\left\{(4e^2/\hbar v)\log\left(\tan^2\frac{\vartheta}{2}\right)\right\}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right]. \tag{8.7-2}$$

Bemerkungen

Wie in den Bemerkungen zu Aufgabe 8.5 ausgeführt wurde, liefert die rutherfordsche Streuformel (8.5-14) sowohl klassisch wie quantenmechanisch den exakten Wirkungsquerschnitt (im Schwerpunktsystem) für die Coulombstreuung *nichtidentischer Teilchen*. Für die Coulombstreuung *identischer Teilchen* der Masse m_α und Ladung $Z = 2$ hätte man entsprechend klassisch

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_{\text{kl}} = \left(\frac{4e^2}{m_\alpha v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}}\right], \tag{8.7-3}$$

da der Detektor voraussetzungsgemäß nicht zwischen „gestreuten“ und „Rückstoßteilchen“ unterscheiden kann. (In der klassischen Mechanik stellen die beiden Alternativen von Abb. A.9-2 aufgrund der Anwendbarkeit des Bahnbegriffs *unterscheidbare Möglichkeiten* dar, und man hat somit die Rutherford-Wirkungsquerschnitte für die Winkel ϑ und $\pi - \vartheta$ zu addieren.)

Der dritte Term in Gl. (8.7-2) rührt von der Interferenz der Amplituden in (8.7-1) her („Austauschwechselwirkung“). Der differentielle Wirkungsquerschnitt (8.7-2) kann zufolge dieses Interferenzterms für gegebenes ϑ erheblich vom klassischen Wirkungsquerschnitt (8.7-3) abweichen (s. die Kurven (a), (b) von Abb. 8.8-1). Für $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ ist der Wirkungsquerschnitt (8.7-2) für beliebiges v doppelt so groß wie der klassische Wirkungsquerschnitt (8.7-3). Für $4e^2 \gg \hbar v$ oszilliert der Interferenzterm als Funktion von ϑ sehr stark. Unterschreitet $\hbar v/4e^2$ eine bestimmte (von der Winkelauflösung des Detektors abhängige) Schranke, so können

die entsprechenden Oszillationen im Wirkungsquerschnitt (8.7-2) experimentell nicht mehr aufgelöst werden. Der dann im Experiment gemessene Mittelwert des Wirkungsquerschnittes über einen kleinen Winkelbereich stimmt mit dem klassischen Ergebnis überein. Der Übergang zur klassischen Mechanik erfolgt in diesem Fall also auf sehr eigenartige Weise.

Für $4e^2 \ll \hbar v$ kann man (ausgenommen für einen kleinen Winkelbereich um $\vartheta = \pi$, der mit wachsender Teilchengeschwindigkeit immer enger wird)

$$\cos\Big\{\frac{4e^2}{\hbar v}\,\log\big(\tan^2\frac{\vartheta}{2}\big)\Big\} \approx 1$$

setzen und man erhält

$$\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_0 \approx \Big(\frac{4e^2}{m_\alpha v^2}\Big)^2 \frac{16}{\sin^4\vartheta}\,. \tag{8.7-4}$$

Dieses Ergebnis stellt die „erste bornsche Näherung“ dar, d. h. jene Näherung, die sich bei Einsetzen der Streuamplitude (8.5-13) (mit $Z_1Z_2 = 4$, $m = m_\alpha/2$) in Gl. (8.7-1) ergibt. Praktische Bedeutung besitzt die Formel (8.7-4) allerdings nicht, da für so hohe Teilchenenergien auch die Kernkräfte berücksichtigt werden müssen.

Die Formel (8.7-2) wird in der Literatur meist als *mottsche Streuformel* bezeichnet, doch wird diese Bezeichnung oft auch für die Formel (8.8-6) verwendet.

8.8* Elektronen sind Fermiteilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$. Ist der Spinteil der Streuwellenfunktion der Zweiteilchensysteme antisymmetrisch [symmetrisch], so muss also der Bahnteil symmetrisch [antisymmetrisch] sein (s. Anhang A.9). Nach Gl. (6.18-2), (6.18-3) folgt somit (s. Gl. (A.9-19)):

(a) Im *Singulett-Spinzustand* gilt ($f(\vartheta) \equiv f_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)$)

$${}^1\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} = \big|f(\vartheta) + f(\pi-\vartheta)\big|^2 = \big|f(\vartheta)\big|^2 + \big|f(\pi-\vartheta)\big|^2 + 2\,\mathrm{Re}\big[f(\vartheta)f^*(\pi-\vartheta)\big]\,. \tag{8.8-1}$$

Dieser Ausdruck stimmt mit (8.7-1) überein, es ist also lediglich in der Formel (8.7-2) $Z_1Z_2 = 4$, $m = m_\alpha/2$ durch $Z_1Z_2 = 1$, $m = m_{\mathrm{e}}/2$ zu ersetzen:

$${}^1\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} = \Big(\frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}v^2}\Big)^2 \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{2\cos\{(e^2/\hbar v)\log(\tan^2\frac{\vartheta}{2})\}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right]. \tag{8.8-2}$$

(b) In einem *Triplett-Spinzustand* gilt

$${}^3\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} = \big|f(\vartheta) - f(\pi-\vartheta)\big|^2 = \big|f(\vartheta)\big|^2 + \big|f(\pi-\vartheta)\big|^2 - 2\,\mathrm{Re}\big[f(\vartheta)f^*(\pi-\vartheta)\big]\,, \tag{8.8-3}$$

$${}^3\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} = \Big(\frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}v^2}\Big)^2 \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}} - \frac{2\cos\{(e^2/\hbar v)\log(\tan^2\frac{\vartheta}{2})\}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right]. \tag{8.8-4}$$

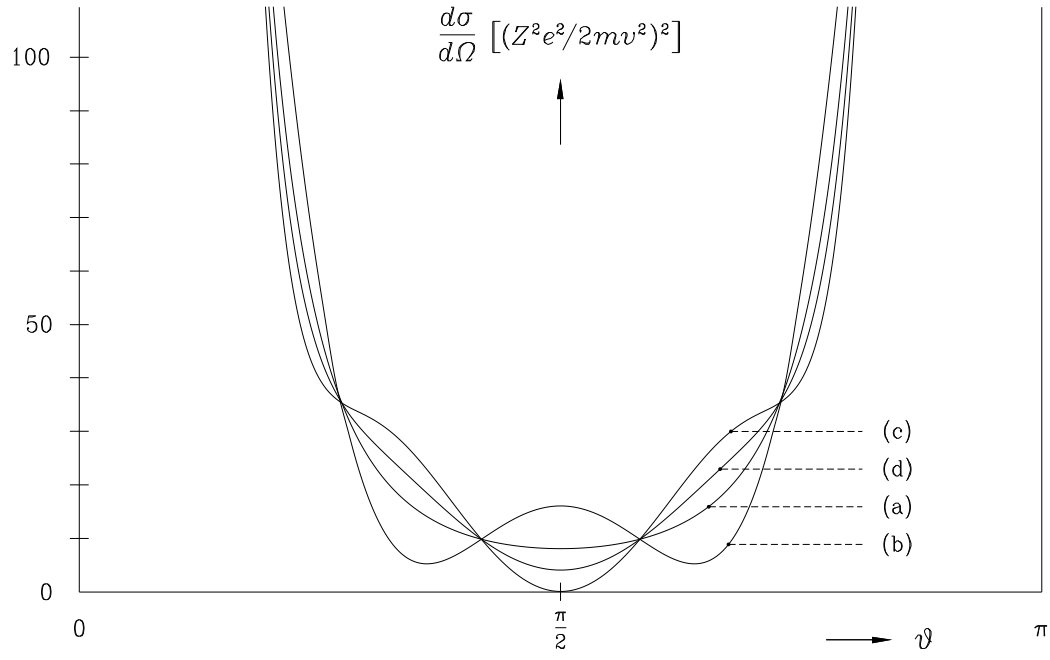


Abb. 8.8-1: Differentieller Wirkungsquerschnitt im Schwerpunktsystem für die Coulombstreuung identischer Teilchen in Einheiten $(Z^2e^2/2mv^2)^2$ für den Fall $Z^2e^2/\hbar v = 3$ (m reduzierte Masse, v Relativgeschwindigkeit)

(a) klassisch;

(b) für Teilchen mit Spin $s = 0$ bzw.
für Teilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ im Singulett-Spinzustand;

(c) für Teilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$ in einem Triplett-Spinzustand;

(d) für unpolarisierte Teilchen mit Spin $s = \frac{1}{2}$

(c) Im Fall von *unpolarisierten Teilchenstrahlen* hat man es in Bezug auf den Spinzustand der Zweiteilchensysteme mit einem statistischen Gemisch zu tun. Man hat dann die Wirkungsquerschnitte (8.8-2) und (8.8-4) mit den statistischen Gewichten $p(S, M_S) = \frac{1}{4}$, $\{S, M_S\} = \{0, 0\}$ (Singulettzustand), $\{1, 1\}$, $\{1, 0\}$, $\{1, -1\}$ (Triplettzustände) zu mitteln. (Siehe den vorletzten Absatz von Anhang A.9.) Man erhält auf diese Weise

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_{1/2} = \frac{1}{4}\,{}^1\!\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_{1/2} + \frac{3}{4}\,{}^3\!\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_{1/2}, \tag{8.8-5}$$

$$\left(\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\right)_{1/2} = \left(\frac{e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}} - \frac{\cos\left\{(e^2/\hbar v)\log\left(\tan^2\frac{\vartheta}{2}\right)\right\}}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right]. \tag{8.8-6}$$

Bemerkungen

Die Diskussion der Grenzfälle $e^2 \gg \hbar v$ und $e^2 \ll \hbar v$ kann wie in Aufgabe 8.7 durchgeführt

werden. Es treten lediglich anstelle von (8.7-3), (8.7-4) die Formeln

$$\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{\mathrm{kl}} = \Big(\frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}v^2}\Big)^2 \Big[\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}}\Big]\,, \tag{8.8-7}$$

$$\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} \approx \Big(\frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}v^2}\Big)^2 \frac{16-12\sin^2\vartheta}{\sin^4\vartheta} \qquad \text{für} \quad e^2 \ll \hbar v\,. \tag{8.8-8}$$

Die Abbildung 8.8-1 zeigt die Winkelabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte (8.8-2), (8.8-4), (8.8-6) und (8.8-7) für $e^2/\hbar v = 3$ ($Z = 1$). Der Triplett-Wirkungsquerschnitt ist für $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für beliebige Relativgeschwindigkeit v null, das Verhältnis Singulett-Wirkungsquerschnitt zu klassischem Wirkungsquerschnitt zu Wirkungsquerschnitt für unpolarisierte Teilchen beträgt für $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für beliebiges v $4 : 2 : 1$. Entsprechend gilt auch für gegebenes Z und gegebene reduzierte Masse m für beliebiges v (Index 0 bedeutet Spin null)

$$\Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_0 : \Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{\mathrm{kl}} : \Big(\frac{d\sigma_{\mathrm{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega}\Big)_{1/2} = 4 : 2 : 1 \quad \text{für} \quad \vartheta = \frac{\pi}{2}\,. \tag{8.8-9}$$

Die Interpretation von Streuexperimenten gestattet somit umgekehrt Aussagen über den Teilchenspin.

Ersetzt man in Gl. (8.8-2), (8.8-4) und (8.8-6) die Elektronmasse m_{e} durch die Protonmasse m_{p}, so erhält man die Wirkungsquerschnitte für die Proton-Proton-Streuung bei niedrigen Energien ($E \lesssim 100\,\mathrm{keV}$). Bei höheren Energien spielen die Kernkräfte eine entscheidende Rolle und diese sind im Singulettzustand und in den Triplettzuständen verschieden. In die Formeln (8.8-1) und (8.8-3) gehen dann *verschiedene Streuamplituden* ${}^1f$ und ${}^3f$ ein. Siehe dazu die Bemerkungen zu Aufgabe 8.11.

8.9* Deuteronen sind Boseteilchen mit Spin $s = 1$. Ist der Spinteil der Streuwellenfunktion der Zweiteilchensysteme antisymmetrisch [symmetrisch], so muss also der Bahnteil antisymmetrisch [symmetrisch] sein (s. Anhang A.9). Im Falle von unpolarisierten Teilchenstrahlen hat man es in Bezug auf den Spinzustand der Zweiteilchensysteme mit einem statistischen Gemisch zu tun. Man hat dann die Wirkungsquerschnitte für die neun reinen Zustände $|\, s_1 s_2\, S M_S \,\rangle$, $s_1 = s_2 = 1$, $S = 0, 1, 2$, $M_S = S, S-1, \ldots, -S$, mit den statistischen Gewichten $p(S, M_S) = \frac{1}{9}$, $\forall\,\{S, M_S\}$, zu mitteln. (Siehe den vorletzten Absatz von Anhang A.9). Wie man aus der Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten zu $(j_1, j_2) = (1, 1)$ sieht, besitzen die Spinteile folgenden Symmetriecharakter bzgl. Teilchenvertauschung:

$S = 0$: Spinteil symmetrisch (ein Zustand);

$S = 2$: Spinteile symmetrisch (fünf Zustände);

$S = 1$: Spinteile antisymmetrisch (drei Zustände).

Da die Wechselwirkung voraussetzungsgemäß nicht vom Spin abhängen soll, folgt aus Gl. (A.9-19) im Schwerpunktsystem

$$\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} = \frac{6}{9}\,\big|f(\vartheta) + f(\pi-\vartheta)\big|^2 + \frac{3}{9}\,\big|f(\vartheta) - f(\pi-\vartheta)\big|^2$$

und somit

$$\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} = \left|f(\vartheta)\right|^2 + \left|f(\pi-\vartheta)\right|^2 + \frac{2}{3}\,\mathrm{Re}\left[f(\vartheta)f^*(\pi-\vartheta)\right]. \tag{8.9-1}$$

8.10* Nach Anhang A.9, Gl. (A.9-8) gilt für s-Streuung ($l=0$)

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k}\,e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \equiv f \quad \text{(unabhängig von } \vartheta) \quad \Rightarrow \tag{8.10-1}$$

$$\left|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)\right|^2 = 4\,|f|^2\,, \quad \left|f(\vartheta)-f(\pi-\vartheta)\right|^2 = 0\,. \tag{8.10-2}$$

(a) Aus Gl. (A.9-9) und Formel (A.9-10) folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2\,, \qquad \sigma = 4\pi\,|f|^2 = \frac{4\pi}{k^2}\,\sin^2\delta_0\,. \tag{8.10-3}$$

(b) Aus Gl. (A.9-19) ($\epsilon=+1$; s. auch Gl. (8.7-1)) und (A.9-20) folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\,|f|^2\,, \qquad \sigma = \frac{1}{2}\,4\pi\,4\,|f|^2 = \frac{8\pi}{k^2}\,\sin^2\delta_0\,. \tag{8.10-4}$$

(c) In Aufgabe 8.8 wurde gezeigt (s. (8.8-1), (8.8-3) und (8.8-5) [ohne „Coul“]), dass

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}\left|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)\right|^2 + \frac{3}{4}\left|f(\vartheta)-f(\pi-\vartheta)\right|^2 \tag{8.10-5}$$

gilt. Daraus folgt mit (8.10-2) und (A.9-20)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}\,4\,|f|^2 = |f|^2\,, \qquad \sigma = \frac{1}{2}\,4\pi\,|f|^2 = \frac{2\pi}{k^2}\,\sin^2\delta_0\,. \tag{8.10-6}$$

(d) In Aufgabe 8.9 wurde gezeigt, dass

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2}{3}\left|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)\right|^2 + \frac{1}{3}\left|f(\vartheta)-f(\pi-\vartheta)\right|^2 \tag{8.10-7}$$

gilt. Daraus folgt mit (8.10-2) und (A.9-20)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2}{3}\,4\,|f|^2 = \frac{8}{3}\,|f|^2\,, \qquad \sigma = \frac{1}{2}\,4\pi\,\frac{8}{3}\,|f|^2 = \frac{16\pi}{3k^2}\,\sin^2\delta_0\,. \tag{8.10-8}$$

8.11 Ich drücke den Streulängenoperator

$$A = \frac{1}{4}\,(3\,{}^3a + {}^1a)\,\mathbb{1} + \frac{1}{4}\,({}^3a - {}^1a)\,\frac{4}{\hbar^2}\,\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{S}^{(\mathrm{p})} \tag{8.11-1}$$

mithilfe von

$$\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{S}^{(\mathrm{p})}=\frac{1}{2}\left[\vec{S}^2-(\vec{S}^{(\mathrm{n})})^2-(\vec{S}^{(\mathrm{p})})^2\right]=\frac{1}{2}\,\vec{S}^2-\frac{3}{4}\,\hbar^2\,\mathbb{1} \tag{8.11-2}$$

durch den Operator des Quadrats des Gesamtspins aus und schreibe den Spinzustand $|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle$ des Neutron-Proton-Systems, auf welchen der Operator A wirkt, jeweils im Basissystem $\{\,|\,SM_S\,\rangle,\ S=0,1\,;\ M_S=S,S-1,\ldots,-S\,\}$ von $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}=\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(\mathrm{n})}\otimes\mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(\mathrm{p})}$ an, da sich dann die Streuamplituden am einfachsten berechnen lassen. Eine andere Möglichkeit wäre, anstelle von (8.11-2) die Beziehung

$$\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{S}^{(\mathrm{p})}=\frac{1}{2}\left(S_+^{(\mathrm{n})}S_-^{(\mathrm{p})}+S_-^{(\mathrm{n})}S_+^{(\mathrm{p})}\right)+S_z^{(\mathrm{n})}S_z^{(\mathrm{p})} \tag{8.11-3}$$

zu benützen und den Spinzustand $|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle$ im Basissystem $\{\,|\,m_1m_2\,\rangle=|\,m_1\,\rangle^{(\mathrm{n})}|\,m_2\,\rangle^{(\mathrm{p})},\ m_1,m_2=\pm\frac{1}{2}\,\}$ anzuschreiben.

Mit Gl. (8.11-2) folgt

$$A={}^1a\,\mathbb{1}+\frac{1}{2}\,({}^3a-{}^1a)\,\frac{1}{\hbar^2}\,\vec{S}^2\,; \tag{8.11-4}$$

$$A\,|\,0\,0\,\rangle={}^1a\,|\,0\,0\,\rangle\,;\qquad A\,|\,1M_S\,\rangle={}^3a\,|\,1M_S\,\rangle\,,\quad M_S=0,\pm1\,. \tag{8.11-5}$$

(a)

(a1) $|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle=|\,\chi_{\mathrm{e}}\,\rangle=|\,0\,0\,\rangle\quad\Rightarrow\ \sigma=4\pi\,|\langle\,0\,0\,|\,A\,|\,0\,0\,\rangle|^2=4\pi\,({}^1a)^2=70{,}46\,\mathrm{b}\,;$ (8.11-6)

(a2) $|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle=|\,\chi_{\mathrm{e}}\,\rangle=|\,1M_S\,\rangle\quad\Rightarrow\ \sigma=4\pi\,|\langle\,1M_S\,|\,A\,|\,1M_S\,\rangle|^2=4\pi\,({}^3a)^2=3{,}66\,\mathrm{b}\,;$ (8.11-7)

(a3) $|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle=|\,0\,0\,\rangle,\ |\,\chi_{\mathrm{e}}\,\rangle=|\,1M_S\,\rangle\ \Rightarrow\ \sigma=4\pi\,|\langle\,1M_S\,|\,A\,|\,0\,0\,\rangle|^2=0\,.$ (8.11-8)

(a4)* Zufolge des Transformationsverhaltens von Vektoroperatoren und Drehimpuls-Eigenzuständen bei räumlichen Drehungen (s. Anhang A.7, insbesondere Gl. (A.7-18) und (A.7-14)) erhält man für den auf eins normierten Eigenvektor $|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}\equiv|\,+\,\rangle^{(\mathrm{n})\prime}$ des Operators $\vec{S}^{(\mathrm{n})}\cdot\vec{e}\equiv S_{z'}^{(\mathrm{n})}$ zum Eigenwert $+\frac{\hbar}{2}$ mit der Drehmatrix (A.2-53) die Beziehung

$$|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}=e^{-i\alpha/2}\,\cos\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2}\,|+\rangle^{(\mathrm{n})}+e^{i\alpha/2}\,\sin\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2}\,|-\rangle^{(\mathrm{n})}\,, \tag{8.11-9}$$

wobei α,β,γ die Eulerwinkel eines $x'y'z'$-Systems mit $\vec{e}_{z'}\equiv\vec{e}$ sind. Mit

$$\vec{e}=(\sin\vartheta\,\cos\varphi,\ \sin\vartheta\,\sin\varphi,\ \cos\vartheta)=(\tfrac{\sqrt{3}}{2},0,\tfrac{1}{2}) \tag{8.11-10}$$

und Gl. (A.11-2) von Anhang A.11 folgt

$$\alpha=\varphi=0\,,\quad\beta=\vartheta=\frac{\pi}{3}\,. \tag{8.11-11}$$

Für γ kann man den Wert null wählen, da in (8.11-9) $\exp(-i\gamma/2)$ ein physikalisch bedeutungsloser Phasenfaktor ist. Damit ergibt sich

$$|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}=\frac{\sqrt{3}}{2}\,|+\rangle^{(\mathrm{n})}+\frac{1}{2}\,|-\rangle^{(\mathrm{n})}\,,\qquad|\,\chi_{\mathrm{a}}\,\rangle=\frac{\sqrt{3}}{2}\,|++\rangle+\frac{1}{2}\,|-+\rangle\,. \tag{8.11-12}$$

Aus Gl. (6.18-2), (6.18-3) folgt

$$|\pm\pm\rangle = |1,\pm1\rangle\,, \quad |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|10\rangle + |00\rangle\Big)\,, \quad |-+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|10\rangle - |00\rangle\Big) \tag{8.11-13}$$

und somit

$$|\chi_\mathrm{a}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,|11\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}\Big(|10\rangle - |00\rangle\Big)\,, \tag{8.11-14}$$

$$A\,|\chi_\mathrm{a}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,{}^3a\,|11\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}\Big({}^3a\,|10\rangle - {}^1a\,|00\rangle\Big)\,. \tag{8.11-15}$$

Ganz allgemein gilt nun aufgrund des Gesetzes (4) der Tabelle A.10-1 von Anhang A.10 folgendes: Für ein Streuexperiment, bei dem vor dem Stoß ein Gesamtspinzustand $|\chi_\mathrm{a}\rangle$ präpariert wurde, nach dem Stoß aber bei Neutron und Proton keine Spinmessung erfolgt, ist der Wirkungsquerschnitt als *Summe von Wirkungsquerschnitten* für Stoßprozesse mit dem gegebenen „Anfangszustand“ $|\chi_\mathrm{a}\rangle$ und „Endzuständen“ $|\chi_\mathrm{e}\rangle$ aus einem vollständigen Orthonormalsystem von $\mathscr{H}_\mathrm{S}^{(\mathrm{n})} \otimes \mathscr{H}_\mathrm{S}^{(\mathrm{p})}$, etwa $\{|m_1m_2\rangle,\ m_1,m_2 = \pm\frac{1}{2}\}$ oder $\{|SM_S\rangle,\ S=0,1\,;\ M_S = S, S-1,\ldots,-S\}$, zu berechnen. Wegen

$$\begin{aligned}\sigma &= 4\pi \sum_{m_1m_2} |\langle m_1m_2\,|\,A\,|\,\chi_\mathrm{a}\rangle|^2 = 4\pi \sum_{SM_S} |\langle SM_S\,|\,A\,|\,\chi_\mathrm{a}\rangle|^2 \\ &= 4\pi\,\langle\,\chi_\mathrm{a}\,|\,A^2\,|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle = 4\pi\,\langle\,\chi_\mathrm{a}\,|\,A^\dagger A\,|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle\end{aligned} \tag{8.11-16}$$

ist dann der totale Streuwirkungsquerschnitt gleich dem 4π-fachen des Normquadrats des Vektors $A\,|\chi_\mathrm{a}\rangle$. Im konkreten Beispiel ist dieser Vektor durch Gl. (8.11-15) gegeben, und es folgt

$$\sigma = \frac{\pi}{2}\Big[7({}^3a)^2 + ({}^1a)^2\Big] = 12{,}01\ \mathrm{b}\,. \tag{8.11-17}$$

(a5)* Erfolgt die Streuung an unpolarisierten Protonen, so hat man es hinsichtlich der Protonen vor dem Stoß mit einer gemischten Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho^{(\mathrm{p})} = \frac{1}{2}\,\mathbb{1}^{(\mathrm{p})} = \frac{1}{2}\sum_m |\,m\,\rangle^{(\mathrm{p})}\,{}^{(\mathrm{p})}\langle\,m\,| \tag{8.11-18}$$

zu tun. Ist der Spinzustand der Neutronen vor dem Stoß durch $|\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}$ Gl. (8.11-12) gegeben, so liegt daher vor dem Stoß bzgl. des Neutron-Proton-Systems eine gemischte Gesamtheit mit den Gemischzuständen

$$\begin{aligned}|\,\chi_{\mathrm{a}1}\,\rangle &= |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}|+\rangle^{(\mathrm{p})} = \frac{\sqrt{3}}{2}\,|++\rangle + \frac{1}{2}\,|-+\rangle \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2}\,|11\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}\Big(|10\rangle - |00\rangle\Big)\,,\end{aligned} \tag{8.11-19}$$

$$\begin{aligned}|\,\chi_{\mathrm{a}2}\,\rangle &= |\,u_{+\vec{e}}\,\rangle^{(\mathrm{n})}|-\rangle^{(\mathrm{p})} = \frac{\sqrt{3}}{2}\,|+-\rangle + \frac{1}{2}\,|--\rangle \\ &= \frac{\sqrt{6}}{4}\Big(|10\rangle + |00\rangle\Big) + \frac{1}{2}\,|1,-1\rangle\end{aligned} \tag{8.11-20}$$

und den statistischen Gewichten $p_{\mathrm{a}1} = p_{\mathrm{a}2} = \frac{1}{2}$ vor. Kennt man die Wirkungsquerschnitte $\sigma_{\mathrm{a}1}$, $\sigma_{\mathrm{a}2}$ für die im Gemisch vertretenen „Anfangszustände“ $|\,\chi_{\mathrm{a}1}\,\rangle$, $|\,\chi_{\mathrm{a}2}\,\rangle$, so ergibt sich für die präparierte gemischte Gesamtheit nach Gesetz (5) von Tabelle A.10-1 der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \sum_{i=1,2} p_{\mathrm{a}i}\,\sigma_{\mathrm{a}i} = \frac{1}{2}\,(\sigma_{\mathrm{a}1} + \sigma_{\mathrm{a}2})\,. \tag{8.11-21}$$

Da nach dem Stoß nur der Spin des Neutrons gemessen wird, wobei Neutronen mit Spin $+\frac{\hbar}{2}$ bzgl. der z-Richtung selektiert werden, müssen wir außerdem noch das Gesetz (4) der Tabelle A.10-1 anwenden: Für ein Streuexperiment, bei dem vor dem Stoß ein „Anfangszustand“ $|\,\chi_{\mathrm{a}i}\,\rangle$ präpariert wurde, und nach dem Stoß Neutronen mit dem Spinzustand $|+\rangle^{(\mathrm{n})}$ selektiert werden, an den Protonen aber keine Spinmessung durchgeführt wird, ist der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\mathrm{a}i}$ als Summe von Wirkungsquerschnitten für Stoßprozesse mit dem gegebenen „Anfangszustand“ $|\,\chi_{\mathrm{a}i}\,\rangle$ und den „Endzuständen“ $|++\rangle$, $|+-\rangle$ zu berechnen:

$$\sigma_{\mathrm{a}i} = 4\pi\left[|\langle ++\,|\,A\,|\,\chi_{\mathrm{a}i}\,\rangle|^2 + |\langle +-\,|\,A\,|\,\chi_{\mathrm{a}i}\,\rangle|^2\right]. \tag{8.11-22}$$

Mit Gl. (8.11-19), (8.11-20) folgt

$$A\,|\,\chi_{\mathrm{a}1}\,\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,{}^3a\,|\,1\,1\,\rangle + \frac{\sqrt{2}}{4}\Big({}^3a\,|\,1\,0\,\rangle - {}^1a\,|\,0\,0\,\rangle\Big)\,, \tag{8.11-23}$$

$$A\,|\,\chi_{\mathrm{a}2}\,\rangle = \frac{\sqrt{6}}{4}\Big({}^3a\,|\,1\,0\,\rangle + {}^1a\,|\,0\,0\,\rangle\Big) + \frac{1}{2}\,{}^3a\,|\,1,-1\,\rangle\,; \tag{8.11-24}$$

$$\sigma_{\mathrm{a}1} = 4\pi\left[\left|\frac{\sqrt{3}}{2}\,{}^3a\right|^2 + \left|\frac{\sqrt{2}}{4}\,{}^3a\,\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}}{4}\,{}^1a\,\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2\right] = \frac{\pi}{4}\left[12\,({}^3a)^2 + ({}^3a - {}^1a)^2\right], \tag{8.11-25}$$

$$\sigma_{\mathrm{a}2} = 4\pi\left[\left|\frac{\sqrt{6}}{4}\,{}^3a\,\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{6}}{4}\,{}^1a\,\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 + 0\right] = \frac{\pi}{4}\,3\,({}^3a + {}^1a)^2 \tag{8.11-26}$$

und mit Gl. (8.11-21) ergibt sich insgesamt

$$\sigma = \frac{\pi}{2}\left[4\,({}^3a)^2 + {}^3a\,{}^1a + ({}^1a)^2\right] = 8{,}63\,\mathrm{b}\,. \tag{8.11-27}$$

Die obigen ausführlichen Erläuterungen richteten sich an jene Leser, welche mit den Gesetzen für die Kombination von quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden noch nicht völlig vertraut sind. Ein bereits mit den höheren Weihen versehener Jünger der Quantentheorie müsste sofort die Endformel

$$\sigma = 4\pi\,\frac{1}{2}\sum_{m'}\sum_{m}|\langle +m\,|\,A\,|\,u_{+\vec{e}}\rangle^{(\mathrm{n})}\,|\,m'\rangle^{(\mathrm{p})}|^2 \tag{8.11-28}$$

anschreiben können.

(a6)* Bei Streuung unpolarisierter Neutronen an unpolarisierten Protonen liegt vor dem Stoß eine gemischte Gesamtheit mit dem Dichteoperator

$$\rho = \frac{1}{4}\mathbb{1} = \frac{1}{4}\sum_{SM_S} |\,SM_S\,\rangle\langle\,SM_S\,| = \frac{1}{4}\sum_{m_1 m_2} |\,m_1 m_2\,\rangle\langle\,m_1 m_2\,| \tag{8.11-29}$$

vor. Wie der Wirkungsquerschnitt für eine solche gemischte Gesamtheit durch Mittelung mit statistischen Gewichten aus „Teilwirkungsquerschnitten“ zu berechnen ist, wurde im Punkt (a5) ausführlich besprochen. Ferner haben wir im Punkt (a4) gesehen, wie der Wirkungsquerschnitt bei *festem* „Anfangszustand“ $|\,\chi_\mathrm{a}\,\rangle$ zu berechnen ist, wenn nach dem Stoß bei Neutron und Proton keine Spinmessung erfolgt. Ich schreibe deshalb hier gleich die Endformel an. Da wir bereits die Wirkung des Streulängenoperators A auf die Zustände $|\,SM_S\,\rangle$ kennen (s. Gl. (8.11-5)), ist es zweckmäßig, diese Zustände sowohl als Gemischzustände wie auch als „Endzustände“ zu wählen (s. Gl. (8.11-29) und den Text nach Gl. (8.11-15)). Es gilt dann

$$\sigma = 4\pi\,\frac{1}{4}\sum_{S'M'_S}\sum_{SM_S} |\langle\,SM_S\,|\,A\,|\,S'M'_S\,\rangle|^2 = \pi\Big[3\,({}^3a)^2 + ({}^1a)^2\Big] = 20{,}36\,\mathrm{b}\,. \tag{8.11-30}$$

(b)* Für die gesuchte Wahrscheinlichkeit gilt

$$W = \frac{1}{\Sigma}\Big[|\langle -+\,|\,A\,|+-\,\rangle|^2 + |\langle --\,|\,A\,|+-\,\rangle|^2\Big]\,, \tag{8.11-31a}$$

$$\Sigma := \sum_{m_1 m_2} |\langle\,m_1 m_2\,|\,A\,|+-\,\rangle|^2 = \langle +-\,|\,A^\dagger A\,|+-\,\rangle\,. \tag{8.11-31b}$$

Mit Gl. (8.11-13) folgt

$$A\,|+-\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big({}^3a\,|\,1\,0\,\rangle + {}^1a\,|\,0\,0\,\rangle\Big) \quad\Rightarrow\quad \Sigma = \langle +-\,|\,A^\dagger A\,|+-\,\rangle = \frac{1}{2}\Big[({}^3a)^2 + ({}^1a)^2\Big]\,, \tag{8.11-32}$$

$$W = \frac{({}^3a - {}^1a)^2}{2\Big[({}^3a)^2 + ({}^1a)^2\Big]} = 0{,}7167\,. \tag{8.11-33}$$

Bemerkungen

Wie die experimentellen Ergebnisse für die Nukleon-Nukleon-Streuung zeigen, besitzen die Kernkräfte nichtzentralen Charakter. Bei hinreichend niedrigen Energien lassen sich die nichtzentralen Kräfte, die so genannten *Tensorkräfte*, näherungsweise durch geeignete *spinabhängige* Zentralkräfte ersetzen. Nähere Details zur Nukleon-Nukleon-Streuung bei höheren Energien findet man in dem in der Fußnote von Seite 377 zitierten Buch von Goldberger und Watson.

Für das Wechselwirkungspotential aus der Angabe gilt

$$V\,|\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S} = {}^1V(R)\,|\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S}\,; \qquad V\,|\,1M_S\,\rangle_\mathrm{S} = {}^3V(R)\,|\,1M_S\,\rangle_\mathrm{S}\,, \quad M_S = 0, \pm 1\,. \tag{8.11-34}$$

Man kann also ${}^1V(R)$ bzw. ${}^3V(R)$ als das (für hinreichend niedrige Energien) im Singulett-Spinzustand bzw. in den Triplett-Spinzuständen „wirksame“ Zentralpotential bezeichnen. Da

die Potentiale ${}^1V(R)$, ${}^3V(R)$ wie alle Kernkraftpotentiale für $r \to +\infty$ stärker als jede Potenz von $\frac{1}{r}$ gegen null streben, gilt für sie der Satz aus der Angabe von Aufgabe 8.2 und es existieren zugehörige Streulängen ${}^1a$, ${}^3a$. Die Verallgemeinerung der für ein spinunabhängiges Potential gültigen Formel (s. Gl. (8.2-9))

$$\lim_{k\to 0+} f(\vartheta) = -a_0 \tag{8.11-35}$$

auf das spinabhängige Potential der vorliegenden Aufgabe lautet dann

$$\lim_{k\to 0+} f(\vartheta) = -{}_{\mathrm{S}}\langle\, \chi_{\mathrm{e}} \,|\, A_{\mathrm{S}} \,|\, \chi_{\mathrm{a}} \,\rangle_{\mathrm{S}} \tag{8.11-36}$$

mit dem im Spinhilbertraum $\mathscr{H}_{\mathrm{S}} = \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(\mathrm{n})} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{S}}^{(\mathrm{p})}$ wirkenden Streulängenoperator $A_{\mathrm{S}} \equiv A$ von Gl. (8.11-1). Der durch Gl. (8.11-36) gegebene Grenzwert der Streuamplitude für $k \to 0+$ stellt für Energien bis ungefähr 100 eV eine brauchbare Näherung für die Streuamplitude dar. Damit ist quantifiziert, was in der Angabe unter „niedriger Energie“ zu verstehen ist.

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 8.1 bis 8.11 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 8.1 bis 8.11 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T8.1 Berechne für die Streuung von Teilchen der Masse m am Hartkugelpotential

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{für} \quad r < r_0 \\ 0 & \text{für} \quad r \geq r_0 \end{cases}$$

den p-Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt, also

$$\sigma_1 := \frac{12\pi}{k^2} \sin^2\delta_1 \,.$$

(Anleitung: Verwende die Formeln (A.2-40) für die sphärischen Besselfunktionen mit $l = 1$.)

T8.2

(a) Berechne für das abstoßende Potential

$$V(r) = V_0 \frac{r_0^2}{r^2} \,, \qquad V_0 > 0$$

die Streuphasen δ_l und zeige, dass für den differentiellen Streuwirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} \propto \frac{1}{E}$$

gilt.

(b) Spezialisiere den Ausdruck für die Streuphasen δ_l für den Fall eines „schwachen“ Streupotentials, d. h. für

$$k_0 r_0 \ll 1 \,, \qquad k_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \,,$$

und berechne den entsprechenden differentiellen Streuwirkungsquerschnitt.

(Anleitung: Für das Lösen der vorliegenden Aufgabe benötigt man sphärische Besselfunktionen mit reellen Indizes $\nu \in \mathbb{R}^+$ [ν nicht ganzzahlig] und reellem Argument $\rho \in \mathbb{R}_0^+$. Formal analog zu Gl. (A.2-34) lautet dann die Differentialgleichung

$$\Big[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{\nu(\nu+1)}{\rho^2}\Big] z_\nu(\rho) = 0$$

mit der Lösungsbasis j_ν, n_ν, wobei n_ν für $\rho = 0$ singulär ist, und für j_ν [analog zur asymptotischen Beziehung (A.2-35)] gilt:

$$j_\nu(\rho \to +\infty) \longrightarrow \frac{\sin(\rho - \nu\pi/2)}{\rho} \,.$$

Verwende ferner die aus der erzeugenden Funktion der Legendrepolynome (Gl. (A.2-7) mit $m = 0$) folgende Beziehung

$$\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2(1-\cos\vartheta)}} = \frac{1}{2\sin\frac{\vartheta}{2}} \,, \qquad \vartheta \neq 0\,.)$$

Ergebnisse zu (b): $\delta_l \approx -\frac{\pi}{2}\,\frac{(k_0 r_0)^2}{2l+1}$, $\quad \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} \approx \frac{\pi^2}{16k^2}\,(k_0 r_0)^4\,\frac{1}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}}$; $\quad \sigma \nexists$.

T8.3 Berechne in erster bornscher Näherung den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Teilchen der Masse m am Potential

$$V(r) = V_0\,\frac{r_0^2}{r^2} \,, \qquad V_0 > 0\,.$$

(Anleitung: Verwende Gl. (A.9-3) von Anhang A.9 und die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho\,\frac{\sin\rho}{\rho} = \frac{\pi}{2}\,.)$$

Ergebnis: $\quad \frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\vartheta)}{d\Omega} = \frac{\pi^2}{16k^2}\,(k_0 r_0)^4\,\frac{1}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}} \quad$ mit $\quad k_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$; $\quad \sigma \nexists$.

(Bemerkung: Das Gültigkeitskriterium (A.9-5) ist für das gegebene Potential nicht anwendbar, da das Integral nicht existiert. Aus dem Vergleich mit den Ergebnissen von Aufgabe T8.2 sieht man jedoch, dass die erste bornsche Näherung für alle Energien und alle Winkel brauchbar ist, wofern das Streupotential hinreichend „schwach“ ist, d. h. $k_0 r_0 \ll 1$ gilt. Wie man zeigen kann [siehe Aufgabe 9.4 von [21] oder Aufgabe 9.5 von [18]], ist die erste bornsche Näherung im „entgegengesetzten“ Grenzfall $k_0 r_0 \gg 1$ nur für Winkel $\vartheta \lesssim 1/(k_0 r_0)^2$ brauchbar.)

T8.4

(a) Berechne in erster bornscher Näherung den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Teilchen der Masse m am „gaußschen“ Potential

$$V(r) = V_0\,\exp\!\left[-\frac{r^2}{r_0^2}\right] , \qquad V_0 > 0\,.$$

(b) Zeige, dass sich daraus mit

$$k_0 := \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \,, \qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

für den totalen Streuwirkungsquerschnitt

$$\sigma^{\mathrm{B}} = \frac{\pi^2}{4}\,(k_0 r_0)^4\, r_0^{\,2}\,\frac{1-\exp\left[-2(kr_0)^2\right]}{2(kr_0)^2}$$

ergibt.

(c) Berechne die zugehörige Streulänge a_0.

(Anleitung: Verwende Gl. (A.9-3) von Anhang A.9 und die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\,\xi\,\sin\alpha\xi\,e^{-\beta^2\xi^2} = \sqrt{\pi}\,\frac{\alpha}{4\beta^3}\,\exp\Big[-\frac{\alpha^2}{4\beta^2}\Big]\,,\quad \alpha\in\mathbb{R}^+,\quad \beta\in\mathbb{R}^+.)$$

(Bezüglich der Brauchbarkeit der ersten bornschen Näherung für das „gaußsche“ Potential siehe die Aufgabe T8.5.)

T8.5 Welche Bedingung folgt aus dem Gültigkeitskriterium

$$\left|\frac{m}{\hbar^2 k}\int_0^{+\infty} dr\,V(r)\left[e^{2ikr}-1\right]\right| \ll 1\,,\qquad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

der ersten bornschen Näherung für das Potential von Aufgabe T8.4? Betrachte speziell die Grenzfälle niedriger Energie ($kr_0 \ll 1$) und hoher Energie ($kr_0 \gg 1$) und kommentiere die Ergebnisse.

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho\,e^{-(\rho-d)^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,,\qquad d\in\mathbb{C}\,.)$$

T8.6 Betrachtet wird die Streuung identischer Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen, deren Wechselwirkungspotential $V(r)$ für $r\to+\infty$ stärker als $\frac{1}{r}$ gegen null geht.

Zeige mithilfe der Partialwellenmethode, dass im Schwerpunktsystem Folgendes gilt:

(a) im Singulett-Spinzustand strebt der differentielle Wirkungsquerschnitt für $E\to 0+$ gegen einen von null verschiedenen winkelunabhängigen Wert;

(b) in einem Triplett-Spinzustand strebt der differentielle Wirkungsquerschnitt für kleine E proportional zu E^2 gegen null und die Winkelabhängigkeit ist näherungsweise durch $\cos^2\vartheta$ gegeben.

(Hinweis: Benütze, dass für niedrige Energien näherungsweise $\delta_l \propto k^{2l+1}$, $k := [2mE/\hbar^2]^{1/2}$, gilt; siehe dazu z. B. [3].)

(Bemerkung: Ein Anwendungsbeispiel dazu ist die Neutron-Neutron-Streuung bei niedrigen Energien, wenn man die Kernkräfte [wie von Yukawa vorgeschlagen] durch ein Yukawapotential beschreibt.)

9. Anwendungsbeispiele aus der Atomphysik

Bezüglich weiterer Aufgaben zu diesem Themenkreis s. die Kapitel 7 und 8.

Angaben

9.1 Betrachtet werden das Wasserstoffatom und die wasserstoffähnlichen Ionen, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen. Berechne für die gebundenen Energieeigenzustände $|\, nlm_l \,\rangle$ den Erwartungswert der durch den Operator $1/R$ repräsentierten Observablen und verifiziere, dass $2\,\langle\, T \,\rangle = -\langle\, V \,\rangle$ gilt (T Operator der kinetischen Energie, V Operator der potentiellen Energie).

(Anleitung: Verwende die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen des Problems; siehe Anhang A.4, Gl. (A.4-31) bis (A.4-36) und Anhang A.2, Gl. (A.2-28).)

9.2 Betrachtet wird das Wasserstoffatom, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen. Berechne für den Grundzustand

(a) den wahrscheinlichsten Wert für den Abstand des Elektrons vom Kern;

(b) den Erwartungswert und die Unbestimmtheit dieses Abstandes;

(c) die Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron in einem Abstand $r > a_{\mathrm{H}}$ anzutreffen;

(d) den wahrscheinlichsten Wert für den Impulsbetrag;

(e) den Erwartungswert und die Unbestimmtheit des Impulsbetrages.

(Anleitung: Verwende die Grundzustands-Eigenfunktion

$$u_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_{\mathrm{H}}^3}} \exp\Big[-\frac{r}{a_{\mathrm{H}}}\Big]\,, \qquad a_{\mathrm{H}} := \frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{e}} e^2}\Big(1 + \frac{m_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{p}}}\Big)$$

sowie die folgenden Formeln:

$$\int_0^{+\infty} d\rho\, \rho^\nu\, e^{-\beta\rho} = \frac{\nu!}{\beta^{\nu+1}}\,, \qquad \nu \in \mathbb{N}_0\,, \quad \beta \in \mathbb{R}^+;$$

$$\int d\rho\, \rho^2\, e^{-\beta\rho} = -\Big[\frac{\rho^2}{\beta} + \frac{2\rho}{\beta^2} + \frac{2}{\beta^3}\Big]\, e^{-\beta\rho} + C\,;$$

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi\, \sin\alpha\xi\, e^{-\beta\xi} = \frac{2\alpha\beta}{(\alpha^2 + \beta^2)^2}\,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}\,, \quad \beta \in \mathbb{R}^+;$$

$$\int_0^{+\infty} d\xi \, \frac{\xi^3}{(\xi^2+\alpha^2)^4} = \frac{1}{12\alpha^4} \,, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+ .)$$

9.3 Wird der Atomkern als homogen geladene Kugel vom Radius R_0 angesehen, so kann der Einfluss der endlichen Kernausdehnung auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms bzw. eines wasserstoffähnlichen Ions durch das wellenmechanische Störpotential

$$W(r) = \begin{cases} \dfrac{Ze^2}{R_0}\left[\dfrac{R_0}{r} - \dfrac{3}{2} + \dfrac{r^2}{2R_0^2}\right] & \text{für} \quad r < R_0 \\ 0 & \text{für} \quad r > R_0 \end{cases}$$

beschrieben werden.

Berechne für das niedrigste Energieniveau die störungstheoretische Energiekorrektur erster Ordnung, und zwar in niedrigster Ordnung in R_0/a (a bohrscher Radius des Atoms bzw. Ions) und unter der Annahme, dass $\alpha Z \ll 1$ gilt (α Feinstrukturkonstante), also Z nicht „zu groß“ ist.

(Hinweis: Da die Energiekorrekturen zufolge der endlichen Ausdehnung des Kerns klein sind gegenüber Feinstruktur- und Hyperfeinstrukturkorrekturen, müssen im ungestörten Hamiltonoperator alle entsprechenden Terme berücksichtigt werden. Falls jedoch [wie in der Angabe vorausgesetzt] $\alpha Z \ll 1$ ist, können die zugehörigen Radialfunktionen $R_{nlj}(r)$ in ausgezeichneter Näherung durch die Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ von Anhang A.4, Gl. (A.4-35b), (A.4-35c) ersetzt werden.)

9.4 Der Hamiltonoperator eines Wasserstoffatoms, welches sich in einem homogenen zeitlich konstanten elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$, $\mathcal{E} > 0$, befindet, sei durch

$$H = H_0 + W \,, \qquad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{R} \,, \qquad W = e\mathcal{E}X_3 = e\mathcal{E}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, R\, Y_{10}(\Theta, \Phi)$$

gegeben. Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Energiekorrekturen für die zwei niedrigsten Energieniveaus des Wasserstoffatoms (*linearer Starkeffekt*). Welche Aufspaltung der zum Übergang $n = 2 \to n = 1$ gehörigen Lyman-Spektrallinie ergibt sich somit in einem schwachen elektrischen Feld?

(Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-36) und Anhang A.2, Gl. (A.2-30). Die Vernachlässigung relativistischer Korrekturen im ungestörten Hamiltonoperator ist natürlich nur dann möglich, wenn die Feldstärke $\mathcal{E}$ hinreichend groß ist, sodass die Energiekorrekturen zufolge des Vorhandenseins des elektrischen Feldes groß sind gegenüber den Niveauverschiebungen und Niveauaufspaltungen zufolge relativistischer Effekte. Andrerseits darf aber $\mathcal{E}$ nicht *zu* groß sein, da sonst die Beschränkung auf erste Ordnung Störungstheorie nicht möglich ist.)

(Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho \, \rho^n \, e^{-\rho} = n! \,, \quad n \in \mathbb{N}_0 .)$$

9.5* Ein wasserstoffähnliches Ion mit der Kernladungszahl Z befinde sich im Grundzustand. Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ ändere sich zufolge β^-- bzw. β^+-Zerfalls des Kerns „plötzlich“ die Kernladungszahl: $Z \to Z+1$ bzw. $Z \to Z-1$. Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das entstehende Ion der Kernladungszahl $Z+1$ bzw. $Z-1$ zum Zeitpunkt $t > 0$ im Energieeigenzustand mit den Quantenzahlen n, l, m_l angetroffen wird.

(Hinweis: Das Problem soll ohne Berücksichtigung des Spins und ohne Einbeziehung relativistischer Korrekturen behandelt werden. Die entsprechenden Energieeigenzustände eines wasserstoffähnlichen Ions können als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-36) und Anhang A.2, Gl. (A.2-30).)

(Anleitung: Siehe Anhang A.6, insbesondere Gl. (A.6-19). Verwende die Formel für die Laplacetransformierte von $\rho^\nu L_p^k(\rho)$, d. i.[1]

$$\int_0^{+\infty} d\rho\, e^{-\eta\rho}\, \rho^\nu\, L_p^k(\rho) \;=\; \frac{\Gamma(\nu+1)\,[\Gamma(p+k+1)]^2}{p!\,\Gamma(k+1)}\,\frac{1}{\eta^{\nu+1}}\,F(-p,\nu+1\,|\,k+1\,|\,\tfrac{1}{\eta}\,)\,,$$
$$\mathrm{Re}\,\nu > -1,\ \mathrm{Re}\,\eta > 0$$

sowie die Formel

$$F(a,b\,|\,c\,|\,\xi) = (1-\xi)^{-a}\,F(a,c-b\,|\,c\,|\,\tfrac{\xi}{\xi-1}\,)\,.$$

Dabei ist $F(a,b\,|\,c\,|\,\xi)$ die *hypergeometrische Funktion*

$$F(a,b\,|\,c\,|\,\xi) = 1 + \frac{ab}{c}\,\frac{\xi}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\,\frac{\xi^2}{2!} + \dots\,)$$

9.6* Das elektrische Dipolmoment eines Z-Elektronenatoms im Zustand $|\,\psi\,\rangle$ ist durch

$$\vec{d} = \langle\,\psi\,|\,\vec{D}\,|\,\psi\,\rangle\,, \qquad \vec{D} = -e\sum_{i=1}^{Z}\vec{R}^{(i)}$$

definiert. Was lässt sich über das elektrische Dipolmoment $\vec{d}$ eines isolierten Atoms in einem gebundenen Energieeigenzustand (das so genannte *permanente elektrische Dipolmoment* des Atoms) aussagen?

(Anleitung: Beachte, dass der Hamiltonoperator eines Atoms aufgrund der Eigenschaften elektromagnetischer Wechselwirkungen mit dem Paritätsoperator vertauscht.)

9.7* Die sphärischen Standardkomponenten des irreduziblen Tensors $\mathsf{q}^{(2)}$ des elektrischen Quadrupolmomentes eines Atoms mit einem Elektron im Zustand $|\,\psi\,\rangle$ sind durch

$$q_\mu^{(2)} = \langle\,\psi\,|\,Q_\mu^{(2)}\,|\,\psi\,\rangle\,, \qquad Q_\mu^{(2)} = -e\,2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,R^2\,Y_{2\mu}(\Theta,\Phi)\,, \qquad \mu = 0,\pm1,\pm2$$

definiert.

[1] Siehe z. B. [36]. Dabei ist zu beachten, dass $[L_p^k(\rho)]_{\text{Gradstein}} = L_p^k(\rho)/\Gamma(p+k+1)$ gilt.

(a) Berechne die Größen $q_\mu^{(2)}$ für die Energieeigenzustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ des Wasserstoffatoms. Der Einfluss relativistischer Effekte auf die Radialfunktionen kann dabei vernachlässigt werden.

(b) Das experimentell gemessene elektrische Quadrupolmoment Q des Atoms ist der Erwartungswert zu $Q_0^{(2)}$ in einem Energieeigenzustand $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ mit $m_j = j$. Drücke die Größe $q_0^{(2)}$ für die Eigenzustände mit $m_j \neq j$ durch Q aus.

(c) Schreibe das reduzierte Matrixelement $\langle\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j \,\|\, \mathsf{Q}^{(2)} \,\|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j \,\rangle$ an.

(d) Welche Ergebnisse erhält man für die Größen Q und $q_\mu^{(2)}$ speziell

(d1) für die Eigenzustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, \frac{1}{2}\, m_j \,\rangle$, $l = 0, 1$; $n \geq l + 1$; $m_j = \pm\frac{1}{2}$;

(d2) für die Eigenzustände $|\, 2\, 1\, \frac{1}{2}\, \frac{3}{2}\, m_j \,\rangle$, $m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$?

(Anleitung: Verwende das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24), die Clebsch-Gordan-Reihe (A.2-11) sowie

$$\langle\, j\, 2\, m\, 0 \,|\, j\, m \,\rangle = \frac{2\,[3m^2 - j(j+1)]}{\sqrt{(2j+3)(2j+2)2j(2j-1)}}$$

und die Clebsch-Gordan-Koeffizienten von Tabelle A.7-1. Verwende ferner die Radialfunktionen (A.4-35b), (A.4-35c) (mit $a \to a_\mathrm{H}$), die Rekursionsformel (A.2-26) und die Orthogonalitätsbeziehungen (A.2-28).)

9.8* Das magnetische Dipolmoment eines Z-Elektronenatoms im Zustand $|\, \psi \,\rangle$ ist durch

$$\vec{\mu} = \langle\, \psi \,|\, \vec{M} \,|\, \psi \,\rangle\,, \qquad \vec{M} = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}c} \sum_{i=1}^{Z} (\vec{L}^{(i)} + 2\,\vec{S}^{(i)})$$

definiert.

(a) Zeige, dass abgeschlossene „Unterschalen“ mit festem n, l und j ($j = l + \frac{1}{2}$ oder $j = l - \frac{1}{2}$) keinen Beitrag zum magnetischen Dipolmoment des Atoms liefern (*Zentralfeldnäherung*).

(b) Berechne das magnetische Dipolmoment für die $3\,{}^2S_{1/2}$-Zustände des Natriumatoms ($_{11}$Na), d. h. für die Eigenzustände mit den Quantenzahlen $n = 3$, $l = 0$ und $j = \frac{1}{2}$.

(Anleitung: Verwende die Beziehung (7.15-6). Nützlich ist es, sich an das in Aufgabe 6.31 bewiesene Theorem und dessen Anwendung in Aufgabe 6.32 zu erinnern.)

9.9* Die Übergangszahl pro Zeiteinheit für den Übergang von Atomen aus dem Energieeigenzustand $|\, a \,\rangle$ in den Energieeigenzustand $|\, b \,\rangle$ unter Emission bzw. Absorption eines Photons mit dem Kreiswellenzahlvektor $\vec{k}$ und dem Polarisationsvektor $\vec{e} \perp \vec{k}$ ist[2]

[2] Siehe z. B. Schwabl, F.: Quantenmechanik. Springer-Verlag, Berlin 2007.

(a) für einen elektrischen Dipolübergang (E1-Übergang) proportional zu $|\langle\, b \,|\, \vec{e}\cdot\vec{D} \,|\, a \,\rangle|^2$;

(b) für einen elektrischen Quadrupolübergang (E2-Übergang) proportional zu $|\langle\, b \,|\, \sum Q_{ij}\, e_i\, k_j \,|\, a \,\rangle|^2$;

(c) für einen magnetischen Dipolübergang (M1-Übergang) proportional zu $|\langle\, b \,|\, (\vec{k}\times\vec{e})\cdot\vec{M} \,|\, a \,\rangle|^2$.

($\vec{D} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{D}^{(1)}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$ und $\vec{M} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{M}^{(1)}$ sind dabei die in den Aufgaben 9.6 bis 9.8 definierten Operatoren der niedrigsten statischen Multipolmomente; s. Gl. (9.6-2), (9.8-2) und (9.8-26b).)

Welche Auswahlregeln ergeben sich für ein Atom mit einem einzigen Valenzelektron in Bezug auf dessen Quantenzahlen n, l, m_l, m_s bzw. n, l, j, m_j, wenn man annimmt, dass nur das Valenzelektron („Leuchtelektron“) angeregt wird? (*Zentralfeldnäherung*)

(Anleitung: Beachte die Aussage von Aufgabe 7.15. Verwende das Wigner-Eckart-Theorem Anhang A.7, Gl. (A.7-24) und berücksichtige das Transformationsverhalten der Operatoren $\vec{D} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{D}^{(1)}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$ und $\vec{M} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{M}^{(1)}$ bei räumlicher Inversion.)

9.10* Die niedrigsten Terme des Natriumatoms sind Terme $3\,^2S$ und $3\,^2P$.

(a) Welche Feinstrukturaufspaltung dieser Terme erhält man bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung des Valenzelektrons?

(b) Welche Aufspaltung der unter (a) erhaltenen Feinstrukturniveaus ergibt sich in einem „schwachen“ Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B),\ B > 0$? (*Zeemaneffekt*)

(c) Zeichne in das unter (a) bzw. unter (b) erhaltene Energieniveauschema ein, welche E1-Strahlungsübergänge möglich sind, und gib an, auf wie viele Spektrallinien diese jeweils führen.

(Allen Rechnungen soll dabei das Modell eines einzelnen Elektrons in einem nicht näher spezifizierten fixen Zentralfeld [abgeschirmten Coulombfeld] zugrunde gelegt werden. Die spektroskopischen Symbole $n\,^2L$ bzw. $n\,^2L_j$ geben die Hauptquantenzahl n, die Bahndrehimpuls-Quantenzahl l [$l = 0, 1, 2, \ldots \leftrightarrow L = S, P, D, \ldots$] und die Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl $j = l \pm \frac{1}{2}$ des Valenzelektrons an. Die Zahl 2 steht für $2s + 1 = 2\cdot\frac{1}{2} + 1$ [*Dublettstruktur des Spektrums*]. – Die Auswahlregeln für E1-Übergänge können als bekannt angenommen werden; siehe (9.9-10), (9.9-14).)

(Anleitung zu (b): Verwende Gl. (9.8-16).)

9.11* Die niedrigsten Terme des Natriumatoms sind Terme $3\,^2S$ und $3\,^2P$.

(a) Welche Aufspaltung dieser Terme erhält man in einem „starken“ Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B),\ B > 0$? (*Paschen-Back-Effekt*)

(b) Welche Aufspaltung bzw. Verschiebung der unter (a) erhaltenen Paschen-BackNiveaus ergibt sich bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung des Valenzelektrons?

(c) Zeichne in das unter (a) bzw. unter (b) erhaltene Energieniveauschema ein, welche E1-Strahlungsübergänge möglich sind, und gib an, auf wie viele Spektrallinien diese jeweils führen.

(S. die Erläuterungen zur Angabe von Aufgabe 9.10.)

9.12

(a) Wie lautet der Hamiltonoperator für das Heliumatom bei Vernachlässigung aller relativistischen Korrekturen und unter der Annahme eines ruhenden Kerns unendlicher Masse?

(b)* In der *Zentralfeldnäherung* können die niedrigsten Energieniveaus des Heliumatoms durch die Konfigurationen $1s\,nl$, $n \in \mathbb{N}$, $l = 0, 1, \ldots, n-1$, gekennzeichnet werden. Bei Berücksichtigung der verbleibenden Wechselwirkung W in erster Ordnung Störungstheorie erhält man eine Aufspaltung dieser ungestörten Energieniveaus in LS-Niveaus. Wie lauten die „LS-Vektoren“ zu den fünf niedrigsten LS-Niveaus und wie lautet die energetische Reihenfolge dieser Niveaus?

(Das der Zentralfeldnäherung zugrunde gelegte Zentralpotential soll dabei nicht näher spezifiziert werden. Beachte, dass nach der *hundschen Regel* bei gegebener Konfiguration der Term mit dem größten S-Wert die niedrigste Energie besitzt.)

9.13* Führe für die Konfigurationen $1s^2$, $1s\,2s$ und $1s\,2p$ des Heliumatoms die in Aufgabe 9.12 beschriebene störungstheoretische Berechnung der Lage der zugehörigen LS-Niveaus für jene spezielle Aufteilung $H = H_0 + W$ des Hamiltonoperators H durch, bei welcher die Coulombabstoßung der beiden Elektronen als „Störung“ W angesehen wird. Vergleiche mit den experimentellen Werten von Abb. 9.12-1.

(Die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen für wasserstoffähnliche Ionen können dabei als bekannt angesehen werden; s. Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-36) und Anhang A.2, Gl. (A.2-30).)

(Anleitung: Für die Berechnung der Matrixelemente der „Störung“ W wird die Verwendung der Formel (A.2-16) empfohlen. Verwende ferner die Integrationsformel

$$\int d\rho\, \rho^\nu\, e^{-p\rho} = -\Big[\frac{\rho^\nu}{p} + \frac{\nu\,\rho^{\nu-1}}{p^2} + \frac{\nu(\nu-1)\,\rho^{\nu-2}}{p^3} + \ldots + \frac{\nu!\,\rho}{p^\nu} + \frac{\nu!}{p^{\nu+1}}\Big]\, e^{-p\rho} + C\,, \quad \nu \in \mathbb{N}_0\,.)$$

9.14*

(a) Führe das Variationsverfahren für das Heliumatom unter Verwendung der Versuchsvektorenschar

$$\left\{ |\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = |\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(1)} |\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(2)} |\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}},\ \ \alpha \in \mathbb{R}^{+} \right\},$$

$$u(\vec{r};\alpha) \equiv {}_{\mathrm{B}}^{(i)}\langle\,\vec{r}\,|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi a_0^3}}\,\exp\!\left[-\alpha\,\frac{r}{a_0}\right], \quad i = 1,2, \quad a_0 := \frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{e}} e^2}$$

durch (α Variationsparameter; $|\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}}$ Eigenvektor zum Gesamtspin mit den Quantenzahlen $S = M_S = 0$).

(b) Begründe, warum diese Versuchsvektoren geeignet sind, eine brauchbare Näherung für die Grundzustandsenergie (experimenteller Wert: $-79{,}01$ eV) zu liefern.

(Relativistische Effekte sollen vernachlässigt werden, der Kern soll als ruhend und die Kernmasse als unendlich groß angenommen werden. Unter diesen Annahmen ist der Hamiltonoperator des Heliumatoms durch Gl. (9.12-1) gegeben.)

(Anleitung: Beachte, dass der im Ansatz für $|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle$ enthaltene Einteilchenzustand $|\,u(\alpha)\,\rangle$ Eigenvektor des Operators

$$\frac{\vec{P}^2}{2m_{\mathrm{e}}} - \frac{\alpha e^2}{R} \qquad \text{zum Eigenwert} \qquad E_1(\alpha) = -\frac{\alpha^2}{2}\,\frac{e^2}{a_0}$$

ist [siehe Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-34)]. Verwende ferner die Entwicklung (A.2-16) von Anhang A.2 und die in der Anleitung zur Aufgabe 9.13 angegebene Integrationsformel.)

Lösungen

9.1 Ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen gilt

$$\left\langle \frac{1}{R} \right\rangle = \left\langle nlm_l \left| \frac{1}{R} \right| nlm_l \right\rangle = \int_0^{+\infty} dr\, \frac{1}{r}\, r^2 \left[R_{nl}(r)\right]^2 =: \left(n\,l \left| \frac{1}{R} \right| n\,l \right) \tag{9.1-1}$$

mit den Radialfunktionen von Anhang A.4, Gl. (A.4-35b), (A.4-35c). Damit folgt (bezüglich a siehe Gl. (A.4-34))

$$\left\langle \frac{1}{R} \right\rangle = \frac{4}{n^4}\, \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}\, \frac{1}{a^3} \left(\frac{na}{2}\right)^2 \underbrace{\int_0^{+\infty} d\rho\, \rho^{2l+1}\, e^{-\rho} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2}_{\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \text{ (s. Gl. (A.2-28))}} = \frac{1}{n^2 a}\,. \tag{9.1-2}$$

Wegen (s. Gl. (A.4-31))

$$\langle H \rangle = \langle nlm_l \,|\, H \,|\, nlm_l \rangle = E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\, \frac{1}{n^2}$$

und $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ sowie

$$\langle V \rangle = \left\langle -\frac{Ze^2}{R} \right\rangle = -\frac{Ze^2}{n^2 a} = -\frac{\hbar^2}{ma^2}\, \frac{1}{n^2} = 2\langle H \rangle$$

gilt

$$2\langle T \rangle = -\langle V \rangle\,. \tag{9.1-3}$$

Bemerkungen

Die Beziehung (9.1-3) stellt einen Spezialfall des quantenmechanischen Virialtheorems dar. (Siehe dazu Aufgabe 4.6.)

Berücksichtigt man den Spin, vernachlässigt man aber weiterhin Spin-Bahn-Wechselwirkung, relativistische Massenkorrektur und Darwinterm, so gilt Gl. (9.1-2) unverändert, da der Operator nur auf den Radialteil der Spinorfunktionen wirkt, welcher nach wie vor durch Gl. (A.4-35b), (A.4-35c) gegeben ist. Berücksichtigt man jedoch diese relativistischen Effekte im Hamiltonoperator, so treten an die Stelle von Spinorfunktionen der Form (9.10-2c) solche der Form (9.7-6), und die radiale Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $r^2[R_{nl}(r)]^2$ muss durch die entsprechende Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $r^2[R_{nlj}(r)]^2$, $j = l \pm \frac{1}{2}$, ersetzt werden. Für das Wasserstoffatom und wasserstoffähnliche Ionen mit $\alpha Z \ll 1$ (α Feinstrukturkonstante) weichen diese Wahrscheinlichkeitsverteilungen allerdings nur äußerst wenig voneinander ab (siehe [32]), sodass sich für $\langle 1/R \rangle$ nur eine winzige Korrektur ergibt. (Siehe auch die Bemerkungen zu Aufgabe 9.3 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.7, wo die relativistisch korrigierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für $n = 1$, $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$ bzw. $n = 2$, $l = 1$, $j = \frac{3}{2}$ angeschrieben sind.) Nur für Zustände mit niedrigem n und j bei schweren Ionen ergeben sich merkliche Abweichungen.

9.2

(a) Die Antreffwahrscheinlichkeit für die Kugelschale mit dem inneren Radius r und dem äußeren Radius $r + dr$ ist durch

$$W_{10}(r)\,dr = r^2 dr \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\,|u_{100}(\vec{r})|^2 = r^2\,[R_{10}(r)]^2\,dr = \frac{4}{a_{\mathrm{H}}^3}\,e^{-2r/a_{\mathrm{H}}}\,r^2 dr \tag{9.2-1}$$

gegeben. Die Abbildung 9.2-1 zeigt den Verlauf der Funktion $W_{10}(r)$.

Die Lage des Maximums der Funktion $W_{10}(r)$, $r \in \mathbb{R}_0^+$, bestimmt den wahrscheinlichsten Abstand des Elektrons vom Kern. Man erhält auf diese Weise

$$r_{\mathrm{w}} = a_{\mathrm{H}}\,. \tag{9.2-2}$$

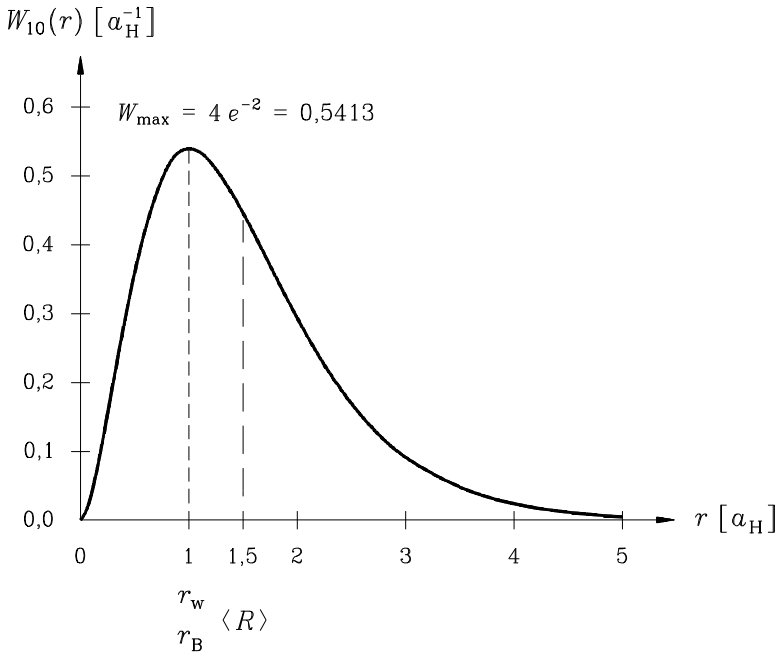


Abb. 9.2-1: Radiale Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $W_{10}(r)$

(b)
$$\langle R^k \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,r^k\,|u_{100}(\vec{r})|^2 = \int\limits_0^{+\infty} dr\,r^k\,W_{10}(r) = 4a_{\mathrm{H}}^k \int\limits_0^{+\infty} d\rho\,\rho^{k+2}\,e^{-2\rho}$$

$$= \frac{(k+2)!}{2^{k+1}}\,a_{\mathrm{H}}^k\,, \qquad k = -2, -1, 0, 1, 2, \ldots \quad \Rightarrow \tag{9.2-3}$$

$$\langle R \rangle = \frac{3}{2}\,a_{\mathrm{H}} = 1{,}5\,a_{\mathrm{H}}\,, \qquad \langle R^2 \rangle = 3a_{\mathrm{H}}^2\,, \tag{9.2-4}$$

$$\Delta r = \left[\langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2\right]^{1/2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\,a_{\mathrm{H}} = 0{,}8660\,a_{\mathrm{H}} = 0{,}5774\,\langle R \rangle\,. \tag{9.2-5}$$

(c)
$$W = \int_{a_\mathrm{H}}^{+\infty} dr\, W_{10}(r) = 4 \int_{1}^{+\infty} d\rho\, \rho^2\, e^{-2\rho} = 5\, e^{-2} = 0{,}6767\,. \tag{9.2-6}$$

(d) Analog zu (a) folgt

$$W_{10}(p)\, dp = p^2 dp \int_{[4\pi]} d\Omega_p\, |\widetilde{u}_{100}(\vec{p}\,)|^2 \tag{9.2-7}$$

mit

$$\widetilde{u}_{100}(\vec{p}\,) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, e^{-(i/\hbar)\vec{p}\cdot\vec{r}}\, u_{100}(\vec{r}\,)\,. \tag{9.2-8}$$

Einsetzen der Eigenfunktion u_{100} und Integration über die Polarwinkel (Richtung von $\vec{p}$ für die Integration als Polarachse gewählt) gibt mit $\xi := \cos\vartheta$

$$\widetilde{u}_{100}(\vec{p}\,) = \frac{1}{2\sqrt{2}\,\pi^2} \frac{1}{(\hbar a_\mathrm{H})^{3/2}} \int_0^{+\infty} dr\, r^2 e^{-r/a_\mathrm{H}} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \underbrace{\int_{-1}^{+1} d\xi\, e^{-(i/\hbar)pr\xi}}_{2\,\frac{\sin(pr/\hbar)}{pr/\hbar}}\,,$$

und Durchführung der r-Integration liefert

$$\widetilde{u}_{100}(\vec{p}\,) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\right)^{5/2} \frac{1}{[\,p^2 + (\hbar/a_\mathrm{H})^2]^2}\,, \tag{9.2-9}$$

$$W_{10}(p)\, dp = \frac{32}{\pi} \left(\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\right)^{5} \frac{p^2}{[\,p^2 + (\hbar/a_\mathrm{H})^2]^4}\, dp\,. \tag{9.2-10}$$

Die Abbildung 9.2-2 zeigt den Verlauf der Funktion $W_{10}(p)$. Für die Lage des Maximums von $W_{10}(p)$, $p \in \mathbb{R}_0^+$, erhält man

$$p_\mathrm{w} = \frac{1}{\sqrt{3}}\, \frac{\hbar}{a_\mathrm{H}} = 0{,}5774\, \frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\,. \tag{9.2-11}$$

(e)
$$\langle\, P \,\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p\, p\, |\widetilde{u}_{100}(\vec{p}\,)|^2 = \int_0^{+\infty} dp\, p\, W_{10}(p)\,,$$

$$\langle\, P \,\rangle = \frac{32}{\pi} \left(\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\right)^{5} \int_0^{+\infty} dp\, \frac{p^3}{[\,p^2 + (\hbar/a_\mathrm{H})^2]^4} = \frac{8}{3\pi}\, \frac{\hbar}{a_\mathrm{H}} = 0{,}8488\, \frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\,. \tag{9.2-12}$$

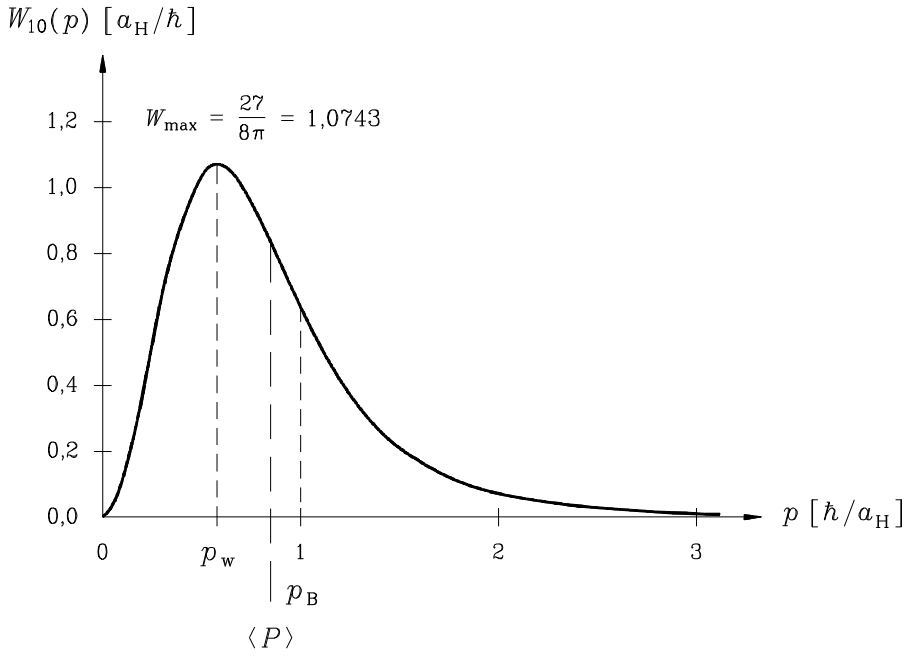


Abb. 9.2-2: Wahrscheinlichkeitsdichte $W_{10}(p)$

Den Erwartungswert zu P^2 können wir am einfachsten mithilfe des Virialtheorems berechnen (s. Aufgabe 4.6 bzw. Aufgabe 5.13), da wir den Erwartungswert der potentiellen Energie unter Verwendung der Formel (9.2-3) unmittelbar anschreiben können:

$$2\,\langle T \rangle = 2\left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = -\langle V \rangle = \left\langle \frac{e^2}{R} \right\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle P^2 \rangle = me^2 \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle = \left(\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\right)^2, \tag{9.2-13}$$

$$\Delta p = \left[\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2\right]^{1/2} = \sqrt{1 - \frac{64}{9\pi^2}}\,\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}} = 0{,}5287\,\frac{\hbar}{a_\mathrm{H}}\,. \tag{9.2-14}$$

Bemerkungen

Alle angeschriebenen Ausdrücke gelten auch für wasserstoffähnliche Ionen, wenn man den bohrschen Radius des Wasserstoffatoms durch den bohrschen Radius des betreffenden Ions (s. Gl. (A.4-34)) ersetzt.

Das bohrsche Atommodell liefert für den Bahnradius und für den Betrag des Impulses des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms $r_\mathrm{B} = a_\mathrm{H}$, $p_\mathrm{B} = \hbar/a_\mathrm{H}$ (Bahndrehimpuls $\hbar$ dividiert durch Bahnradius a_H). Diese Werte wurden in die Abbildungen 9.2-1, 9.2-2 zum Vergleich eingetragen. Der Leser beachte die erhebliche Breite der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen $W_{10}(r)$, $W_{10}(p)$, welche sich u. a. in den relativ großen Standardabweichungen Δr, Δp von den Mittelwerten $\langle R \rangle$, $\langle P \rangle$ bemerkbar macht.

Bezüglich relativistischer Korrekturen zur radialen Antreffwahrscheinlichkeitsdichte s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.1 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.3.

9.3 Bei Einbeziehung der Feinstruktur und der Hyperfeinstruktur ist der niedrigste Energieeigenwert des Wasserstoffatoms bzw. eines wasserstoffähnlichen Ions nicht entartet und durch die Quantenzahlen $n = 1, l = 0, j = \frac{1}{2}$ gekennzeichnet. Das niedrigste Energieniveau ist also ein $1\,^2S_{1/2}$-Niveau. (Zur *vollständigen* Kennzeichnung fehlt noch die Angabe der Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses des Atoms bzw. Ions inklusive Kern; s. dazu die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.) Da das Störpotential nur von $r = |\vec{r}\,|$ abhängt, kommt es auf den Winkel-Spin-Teil der Grundzustands-Spinorfunktion nicht an, und man erhält für die Energiekorrektur zur Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie

$$\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2}) = \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, W(r)\, [R_{10\frac{1}{2}}(r)]^2 \,. \tag{9.3-1}$$

Unter der Voraussetzung $\alpha Z \ll 1$ ($\alpha \approx 1/137$ Feinstrukturkonstante) kann die radiale Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $W_{10\frac{1}{2}}(r) = r^2[R_{10\frac{1}{2}}(r)]^2$ in ausgezeichneter Näherung durch $W_{10}(r) = r^2[R_{10}(r)]^2$ mit der Radialfunktion $R_{10}(r)$ von Gl. (A.4-35b), (A.4-35c) ersetzt werden. (S. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.) Für nicht zu große Z folgt daher (s. Gl. (9.2-1) mit $a_{\mathrm{H}} \to a$)

$$\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2}) \approx \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, W(r)\, [R_{10}(r)]^2 = 8\,|E_1| \int_0^{\delta} d\rho\, \rho^2 \left[\frac{1}{\rho} - \frac{3}{2\delta} + \frac{\rho^2}{2\delta^3}\right] e^{-2\rho} \tag{9.3-2}$$

mit (bzgl. a siehe Gl. (A.4-34))

$$\delta := \frac{R_0}{a}\,, \qquad E_1 = -\frac{Ze^2}{2a} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tag{9.3-3}$$

(E_1 niedrigster Eigenwert von $\vec{P}^2/2m - Ze^2/R$; s. (A.4-30), (A.4-31)). Ist man nur am Beitrag niedrigster Ordnung in δ interessiert, so kann man im Integranden $\exp(-2\rho) \approx 1$ setzen, und es folgt

$$\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2}) \approx \frac{4}{5}\,\delta^2\,|E_1| \,. \tag{9.3-4}$$

Berechnet man das Integral (9.3-2) mithilfe der Formel aus der Angabe zu Aufgabe 9.13 *exakt* und setzt man im Ergebnis für $\exp(-2\delta)$ die Entwicklung nach δ bis einschließlich zur Ordnung δ^5 ein, so ist damit ein erheblich höherer Rechenaufwand verbunden.

Bemerkungen

Das in der Angabe vorgegebene Störpotential $W(r)$ ist die potentielle Energie einer punktförmigen Ladung $-e$ (Elektron) im Feld einer homogen geladenen Kugel[3] mit dem Radius R_0 und

[3] Siehe z. B. Flügge, S.: Lehrbuch der theoretischen Physik. Bd. III: Klassische Physik II. Das maxwellsche Feld. Springer-Verlag, Berlin 1961.

der Gesamtladung $+Ze$

$$U(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{R_0}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{r^2}{2R_0^2}\right) & \text{für} \quad r < R_0 \\ -\dfrac{Ze^2}{r} & \text{für} \quad r > R_0 \end{cases} \tag{9.3-5}$$

vermindert um die bereits in $H_0^{\{\vec{r}\}}$ enthaltene potentielle Energie im Feld einer Punktladung $+Ze$,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \ . \tag{9.3-6}$$

Die Abb. 9.3-1 zeigt den Verlauf der Potentiale $U(r), V(r)$ und $W(r)$.

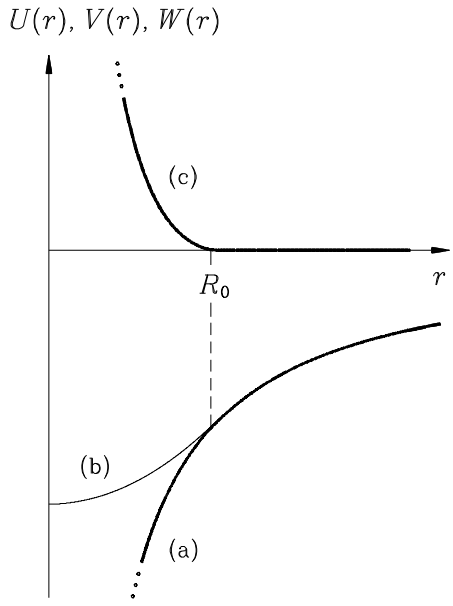


Abb. 9.3-1: Radialabhängigkeit
(a) für das Coulombpotential $V(r)$;
(b) für das Potential $U(r)$ von Gl. (9.3-5);
(c) für die „Störung“ $W(r) = U(r) - V(r)$

Da die „Störung“ W ein positiv definiter selbstadjungierter Operator ist (s. Aufgabe 1.28), musste sich eine positive Energiekorrektur ergeben.

Aus der Kernphysik ist bekannt, dass der Radius R_0 gemäß

$$R_0 = (0{,}39 + 1{,}15\, A^{1/3}) \cdot 10^{-13}\ \text{cm}$$

von der Massenzahl A abhängt.[4] Berücksichtigt man noch

$$a = \frac{5{,}3 \cdot 10^{-9}}{Z}\ \text{cm}\,,$$

so erhält man für das Wasserstoffatom $\delta \approx 3{\cdot}10^{-5}$ und für wasserstoffähnliche Ionen mit $\alpha Z \ll 1$ folgt $\delta \lesssim 10^{-3}$. Damit ist die Vernachlässigung von Beiträgen der Ordnung δ^3 gerechtfertigt.

[4] Siehe z. B. Eder, G.: Kernkräfte. Verlag G. Braun, Karlsruhe 1965.

Weiter sehen wir daraus, dass die Energiekorrektur (9.3-4) extrem klein ist. Sie ist sogar klein gegenüber der Hyperfeinstrukturaufspaltung des niedrigsten Energieniveaus, sodass in H_0 nicht nur alle zur Feinstruktur beitragenden relativistischen Korrekturterme einzubeziehen sind, sondern auch die Wechselwirkung des magnetischen Momentes des Elektrons mit dem magnetischen Moment des Kerns. Aus demselben Grund ist die Beschränkung auf erste Ordnung Störungstheorie gerechtfertigt.

Bei Einbeziehung aller relativistischen Korrekturen (Spin-Bahn-Wechselwirkung, relativistische Massenkorrektur und Darwinterm) ist das niedrigste Energieniveau ein $1\,^2S_{1/2}$-Niveau, welches gegenüber dem Eigenwert E_1 Gl. (9.3-3) um $[(\alpha Z)^2/4]\,|E_1|$ abgesenkt ist (s. z. B. [7]):

$$\epsilon^{(1)}_{\mathrm{FS}}(1\,^2S_{1/2}) = -\frac{(\alpha Z)^2}{4}\,|E_1|\,. \tag{9.3-7}$$

Zufolge der Entartung bzgl. der Richtungen des Gesamtdrehimpulses des Elektrons ist der betreffende Eigenwert $-[1+(\alpha Z)^2/4]\,|E_1|$ zweifach (entsprechend $m_j = \pm\frac{1}{2}$). Berücksichtigt man zusätzlich die Wechselwirkung des magnetischen Momentes des Elektrons mit dem magnetischen Moment des Kerns, so ergibt sich eine Aufspaltung in zwei einfache Eigenwerte, die Hyperfeinstrukturaufspaltung. Sind $\vec{J}$, $\vec{I}$ und $\vec{F} = \vec{J}+\vec{I}$ die Operatoren zum Gesamtdrehimpuls des Elektrons, des Kerns und des Atoms bzw. Ions (inklusive Kern) und $j = \frac{1}{2}$, I und $F = I \pm \frac{1}{2}$ die Quantenzahlen zu $\vec{J}^2$, $\vec{I}^2$ und $\vec{F}^2$, so ergeben sich unter der Voraussetzung $\alpha Z \ll 1$ die Energiekorrekturen (s. z. B. [34])

$$\epsilon^{(1)}_{\mathrm{HFS}}(1\,^2S_{1/2}, F) = \tfrac{1}{2}\left[F(F+1) - I(I+1) - \tfrac{3}{4}\right] A_I\,|E_1|\,, \tag{9.3-8a}$$

$$A_I := g_I\,\frac{8\alpha^2 Z}{3}\,\frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{p}}\,, \qquad F = I \pm \tfrac{1}{2}\,, \tag{9.3-8b}$$

wobei g_I der gyromagnetischer Faktor zum Kerndrehimpuls ist. Die Grundzustandsenergie zu H_0 ist also durch

$$E^0(1\,^2S_{1/2}, F = I - \tfrac{1}{2}) = -\Big[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{4} + \frac{I+1}{2}\,A_I\Big]\,|E_1| \tag{9.3-9a}$$

gegeben, und für das erste Anregungsniveau gilt

$$E^0(1\,^2S_{1/2}, F = I + \tfrac{1}{2}) = -\Big[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{4} - \frac{I}{2}\,A_I\Big]\,|E_1|\,. \tag{9.3-9b}$$

Für das Wasserstoffatom erhält man daraus speziell ($Z = 1$, $I = \frac{1}{2}$, $g_I = g_{s,\mathrm{p}} = 5{,}59$ und $|E_1| = e^2/2a_\mathrm{H}$)

$$E^0(1\,^2S_{1/2}, F = 0) = -\left[1 + \frac{\alpha^2}{4} + \frac{3A_{1/2}}{4}\right]\frac{e^2}{2a_\mathrm{H}}\,, \tag{9.3-10a}$$

$$E^0(1\,^2S_{1/2}, F = 1) = -\left[1 + \frac{\alpha^2}{4} - \frac{A_{1/2}}{4}\right]\frac{e^2}{2a_\mathrm{H}} \tag{9.3-10b}$$

mit

$$A_{1/2} = g_{s,\mathrm{p}}\,\frac{8\alpha^2}{3}\,\frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{p}}\,. \tag{9.3-10c}$$

Berücksichtigt man die endliche Kernausdehnung, so verschieben sich die Niveaus (9.3-9) um den gleichen Betrag, da in (9.3-1) nur die Radialfunktionen eingehen, und man erhält

$$E^{[1]}(1\,^2S_{1/2}, F) = E^0(1\,^2S_{1/2}, F) + \epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2})\,, \qquad F = I \pm \tfrac{1}{2} \tag{9.3-11}$$

mit $\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2})$ Gl. (9.3-4).

Abb. 9.3-2 zeigt (in nicht maßstabsgetreuer Darstellung) die Größenordnungen der einzelnen Beiträge beim Wasserstoffatom. Dabei wurde $\delta = R_0/a_{\mathrm{H}} \approx 3 \cdot 10^{-5}$ gesetzt.

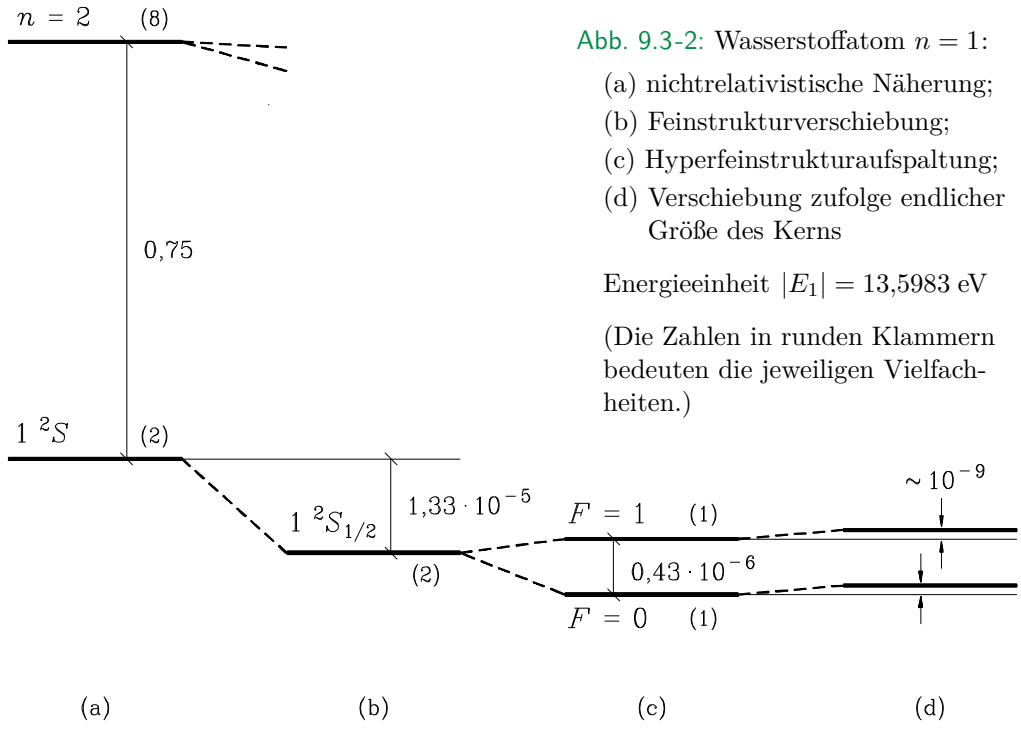


Abb. 9.3-2: Wasserstoffatom $n = 1$:
(a) nichtrelativistische Näherung;
(b) Feinstrukturverschiebung;
(c) Hyperfeinstrukturaufspaltung;
(d) Verschiebung zufolge endlicher Größe des Kerns

Energieeinheit $|E_1| = 13{,}5983$ eV

(Die Zahlen in runden Klammern bedeuten die jeweiligen Vielfachheiten.)

Verwendet man bei der Berechnung von $\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2})$ anstelle von

$$W_{10}(r) = \frac{1}{a}\left(\frac{2r}{a}\right)^2 e^{-2r/a} \tag{9.3-12}$$

die aus der Diracgleichung folgende relativistisch korrekte Antreffwahrscheinlichkeitsdichte (s. z. B. [32])

$$W_{10\frac{1}{2}}(r) = \frac{2}{\Gamma(2\gamma+1)}\,\frac{1}{a}\left(\frac{2r}{a}\right)^{2\gamma} e^{-2r/a}\,, \qquad \gamma := \left[1-(\alpha Z)^2\right]^{1/2}\,, \tag{9.3-13}$$

so erhält man in niedrigster Ordnung in δ

$$\epsilon^{(1)}(1\,^2S_{1/2}) \;\approx\; \frac{2}{\Gamma(2\gamma+1)}\,\frac{2^{2\gamma}}{\gamma}\,\frac{3}{(2\gamma+1)(2\gamma+3)}\,\delta^{2\gamma}\,|E_1|\,. \tag{9.3-14}$$

Unter der Voraussetzung $\alpha Z \ll 1$ gilt $\gamma \approx 1 - (\alpha Z)^2/2$, und man sieht, dass dann (9.3-12) tatsächlich eine gute Näherung für (9.3-13), und (9.3-4) eine gute Näherung für (9.3-14) darstellt. Ist dagegen diese Voraussetzung nicht erfüllt, was für schwere Ionen zutrifft, so muss man (9.3-4) durch (9.3-14) ersetzen. (Beachte, dass für schwere Ionen immer noch $\delta \lesssim 10^{-2}$ gilt.) Es müssen dann aber auch $\epsilon^{(1)}_{\mathrm{FS}}(1\,^2S_{1/2})$ Gl. (9.3-7) und A_I Gl. (9.3-8b) durch Ausdrücke ersetzt werden, welche in höheren Ordnungen von αZ korrekt sind (s. dazu z. B. [34]).

Das den obigen Rechnungen zugrunde gelegte Modell, in welchem der Kern als homogen geladene Kugel idealisiert wird, gestattet natürlich von vornherein nur eine *größenordnungsmäßige Abschätzung* der Energiekorrektur zufolge der endlichen Ausdehnung des Kerns. (Deshalb das Zeichen $\sim$ in Abb. 9.3-2.) Nimmt man beispielsweise an, die Ladung Ze sei gleichmäßig über die *Oberfläche* einer Kugel vom Radius R_0 verteilt, so erhält man anstelle von (9.3-14) eine Formel, in der der Faktor $3/(2\gamma+1)(2\gamma+3)$ durch den Faktor $1/(2\gamma+1)$ ersetzt ist, also eine Energiekorrektur, die um den Faktor $(2\gamma+3)/3$ ($\approx 5/3$ für $\alpha Z \ll 1$) größer ist. Die entsprechenden Formeln für realistischere Modelle findet man in [34].

Trotz ihrer Kleinheit kann man die durch die endliche Kernausdehnung bedingten Energiekorrekturen spektroskopisch feststellen: Für Atome mit gleicher Ordnungszahl Z, aber verschiedener Massenzahl A, fallen die Spektrallinien der $(Z-1)$-fach ionisierten Atome wegen der verschiedenen Kernradien R_0 und der in a enthaltenen verschiedenen Kernmassen m_{K} (s. Gl. (A.4-34)) nicht zusammen (*Isotopieverschiebung*).

9.4 Lösung des Eigenwertproblems des ungestörten Hamiltonoperators (siehe Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-36) und Anhang A.2, Gl. (A.2-30)): Für den Grundzustand und das erste Anregungsniveau des Wasserstoffatoms gilt ohne Berücksichtigung des Spins und ohne Einbeziehung relativistischer Korrekturen

$$H_0\,|\,nlm_l\,\rangle = E^0_n\,|\,nlm_l\,\rangle\,, \quad \begin{array}{l} n=1;\ l=m_l=0\,; \\ n=2;\ l=0,1;\ m_l=l,l-1,\ldots,-l\,; \end{array} \tag{9.4-1}$$

$$\langle\,\vec r\,|\,1\,0\,0\,\rangle = u^0_{100}(\vec r) = \frac{2}{\sqrt{a_{\mathrm{H}}^3}}\,e^{-r/a_{\mathrm{H}}}\,Y_{00}(\Omega)\,, \tag{9.4-2}$$

$$\langle\,\vec r\,|\,2\,0\,0\,\rangle = u^0_{200}(\vec r) = \frac{1}{\sqrt{2a_{\mathrm{H}}^3}}\left(1-\frac{r}{2a_{\mathrm{H}}}\right)e^{-r/2a_{\mathrm{H}}}\,Y_{00}(\Omega)\,, \tag{9.4-3}$$

$$\langle\,\vec r\,|\,2\,1\,m_l\,\rangle = u^0_{21m_l}(\vec r) = \frac{1}{\sqrt{6a_{\mathrm{H}}^3}}\,\frac{r}{2a_{\mathrm{H}}}\,e^{-r/2a_{\mathrm{H}}}\,Y_{1m_l}(\Omega)\,; \tag{9.4-4}$$

$$E^0_1 = -E_{\mathrm{H}}\,,\quad E^0_2 = -\frac{1}{4}\,E_{\mathrm{H}}\,;\quad E_{\mathrm{H}} := \frac{\hbar^2}{2ma_{\mathrm{H}}^2}\,,\quad a_{\mathrm{H}} := \frac{\hbar^2}{me^2}\,,\quad m := \frac{m_{\mathrm{e}}}{1+m_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{p}}}\,. \tag{9.4-5}$$

In Tab. 9.4-1 sind für $n = 1, 2$ nochmals die Eigenwerte, deren Vielfachheiten sowie die linear unabhängigen (orthonormierten) Eigenvektoren zum betreffenden Eigenwert angeführt. Um die Anwendung der Formeln (A.6-5) bis (A.6-13) von Anhang A.6 zu erleichtern, ist dabei für die Eigenvektoren neben der Schreibweise von Gl. (9.4-1) noch jene benützt, welche in Gl. (A.6-2) allgemein eingeführt wurde.

Tab. 9.4-1: Eigenwerte E_n^0, Vielfachheiten g_n^0 und zugehörige orthonormierte Eigenvektoren $|\,u_{n\nu}^0\,\rangle$, $\nu = 1, 2, \ldots, g_n^0$, für die zwei niedrigsten Energieniveaus des Wasserstoffatoms

n	E_n^0	g_n^0	$\lvert\, u_{n\nu}^0\,\rangle,\ \nu = 1, 2, \ldots, g_n^0$
1	$-E_{\mathrm{H}}$	1	$\lvert\, u_{11}^0\,\rangle \equiv \lvert\, u_1^0\,\rangle = \lvert\, 1\,0\,0\,\rangle$
2	$-\frac{1}{4}\,E_{\mathrm{H}}$	4	$\lvert\, u_{21}^0\,\rangle = \lvert\, 2\,0\,0\,\rangle,\quad \lvert\, u_{22}^0\,\rangle = \lvert\, 2\,1\,0\,\rangle,$ $\lvert\, u_{23}^0\,\rangle = \lvert\, 2\,1\,1\,\rangle,\quad \lvert\, u_{24}^0\,\rangle = \lvert\, 2\,1,-1\,\rangle$

Eigenwert E_1^0: $g_1^0 = 1$ (keine Entartung)
In diesem Fall ist die Formel (A.6-7) anwendbar, und es gilt

$$\epsilon_1^{(1)} = \langle\, u_1^0\,|\,W\,|\,u_1^0\,\rangle = \langle\, 1\,0\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,0\,\rangle\,. \tag{9.4-6}$$

Das Matrixelement des Störoperators

$$W = e\mathcal{E}X_3 = e\mathcal{E}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{10}(\Theta,\Phi) = e\mathcal{E}R\cos\Theta \tag{9.4-7}$$

zwischen Eigenzuständen von H_0 ist sicher null, falls $\Delta l \equiv l' - l$ gerade ist, da W ein ungerader Operator bzgl. räumlicher Inversion ist, und die Vektoren $|\,nlm_l\,\rangle$ die Parität $(-1)^l$ besitzen (s. die Aufgaben 2.2, 2.3 und Gl. (A.2-12)):

$$l' - l \ \text{ gerade} \quad \Rightarrow \quad \langle\, n'l'm_l'\,|\,W\,|\,nlm_l\,\rangle = 0\,. \tag{9.4-8}$$

Aus (9.4-8) folgt insbesondere

$$\epsilon_1^{(1)} = 0\,, \qquad E_1^{[1]} = E_1^0 + \epsilon_1^{(1)} = E_1^0 = -E_{\mathrm{H}}\,. \tag{9.4-9}$$

Eigenwert E_2^0: $g_2^0 = 4$ (Entartung)
Nach Anhang A.6 werden die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster Ordnung $\epsilon_{2\nu}^{(1)}$, $\nu = 1, 2, 3, 4$, durch „Diagonalisieren“ der (4×4)-Matrix

$$\widehat{W} = \left[\langle\, u_{2\nu'}^0\,|\,W\,|\,u_{2\nu}^0\,\rangle;\ \nu, \nu' = 1, 2, 3, 4\right] \tag{9.4-10}$$

des Störoperators W im Eigenraum zu E_2^0 erhalten. In dieser selbstadjungierten Matrix ist eine Anzahl von Elementen aus Paritätsgründen null (s. (9.4-8)). Weitere Matrixelemente sind wegen der Drehinvarianz von W bzgl. Drehungen um die z-Achse null. Aus $[W, L_z] = \mathbb{0}$ folgt (s. Aufgabe 1.31), dass für $m_l' \neq m_l$ die Matrixelemente von W sicher null sind:

$$m_l' \neq m_l \quad \Rightarrow \quad \langle\, n'l'm_l'\,|\,W\,|\,nlm_l\,\rangle = 0\,. \tag{9.4-11}$$

Unter Berücksichtigung von Tab. 9.4-1 ergibt sich aus (9.4-8) und (9.4-11), dass nur die Matrixelemente $W_{12} = \langle\, 2\,0\,0 \,|\, W \,|\, 2\,1\,0 \,\rangle$ und $W_{21} = W_{12}^*$ von null verschieden sein können. Mit (9.4-3), (9.4-4) und (9.4-7) erhält man

$$W_{12} = e\mathcal{E}\,\frac{\sqrt{\pi}\,a_{\mathrm{H}}}{6}\underbrace{\int_0^{+\infty} d\rho\,\rho^4\left(1-\frac{\rho}{2}\right)e^{-\rho}}_{-36}\underbrace{\int_{[4\pi]} d\Omega\,\overbrace{Y_{00}^*(\Omega)}^{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\overbrace{Y_{10}^*(\Omega)}^{Y_{10}^*(\Omega)}\,Y_{10}(\Omega)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} = -3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}}\,,$$

und somit folgt

$$\widehat{W} = -3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{9.4-12}$$

Bestimmung der Eigenwerte von $\widehat{W}$: Säkulargleichung

$$\det\left(\widehat{W} - \epsilon_2^{(1)}\,\widehat{\mathbb{1}}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{EW von } \widehat{W}\text{: } \epsilon_{2\nu}^{(1)},\ \nu = 1,2,3,4\,; \tag{9.4-13}$$

$$\left.\begin{aligned} \epsilon_{21}^{(1)} &= -3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}} \\ \epsilon_{22}^{(1)} &= \epsilon_{23}^{(1)} = 0 \\ \epsilon_{24}^{(1)} &= +3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}} \end{aligned}\right\} \quad E_{2\nu}^{[1]} = E_2^0 + \epsilon_{2\nu}^{(1)}\,, \quad \nu = 1,2,3,4\,. \tag{9.4-14}$$

Die Entartung des Eigenwertes E_2^0 von H_0 wird also durch die Störung in erster Ordnung Störungstheorie nur *teilweise* aufgehoben.

Die Abbildung 9.4-1 zeigt die in erster Ordnung Störungstheorie erhaltenen Energien $E_{n\nu}^{[1]}$, $\nu = 1,2,\ldots,g_n^0$, $n = 1,2$, für eine vorgegebene elektrische Feldstärke $\mathcal{E}$. Wie man daraus sieht, spaltet die Lyman-α-Linie (d. i. die Lymanlinie, die zum Übergang $n = 2 \to n = 1$ gehört) für ein schwaches elektrisches Feld in drei Linien auf, wobei die Größe der Aufspaltung zur elektrischen Feldstärke proportional ist (*linearer Starkeffekt*).

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Berechnet man die Eigenvektoren der Matrix $\widehat{W}$ Gl. (9.4-12) zu den Eigenwerten $\epsilon_{2\nu}^{(1)}$, so erhält man die Eigenvektoren nullter Ordnung von H:

$$|\,\chi_{21}^{(0)}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\,2\,0\,0\,\rangle + |\,2\,1\,0\,\rangle\right); \tag{9.4-15a}$$

$$|\,\chi_{22}^{(0)}\,\rangle,\ |\,\chi_{23}^{(0)}\,\rangle \ \text{ zwei orthonormierte Linearkombinationen von } |\,2\,1\,1\,\rangle,\ |\,2\,1,-1\,\rangle\,; \tag{9.4-15b}$$

$$|\,\chi_{24}^{(0)}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\,2\,0\,0\,\rangle - |\,2\,1\,0\,\rangle\right). \tag{9.4-15c}$$

(Da der Eigenwert null von $\widehat{W}$ entartet ist, bleiben $|\,\chi^{(0)}_{22}\,\rangle$, $|\,\chi^{(0)}_{23}\,\rangle$ teilweise unbestimmt, doch besitzen diese Vektoren keine Komponente in dem von $|\,2\,0\,0\,\rangle$, $|\,2\,1\,0\,\rangle$ aufgespannten Teilraum.) Der Hamiltonoperator H des gestörten Systems ist nicht inversionsinvariant, H und Π besitzen somit kein vollständiges System von gemeinsamen Eigenvektoren. Die näherungsweisen Eigenvektoren $|\,\chi^{(0)}_{21}\,\rangle$, $|\,\chi^{(0)}_{24}\,\rangle$ von H sind keine Eigenvektoren von Π, wohl aber die Vektoren (9.4-15b), die zum näherungsweisen Eigenwert $E^{[1]}_{22} = E^{[1]}_{23} = E^0_2$ von H gehören.

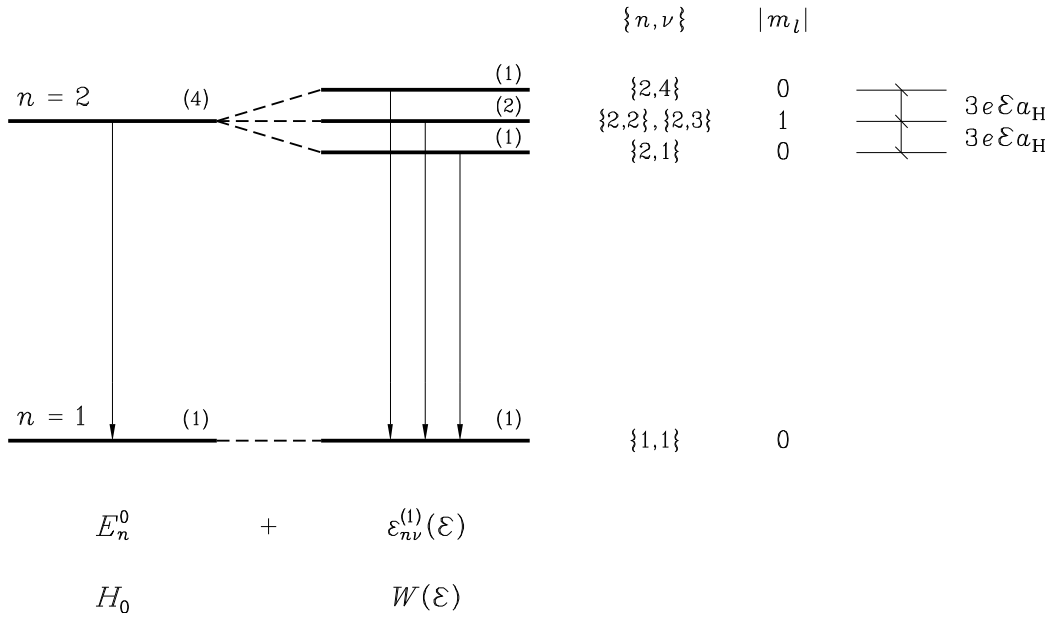


Abb. 9.4-1: Linearer Starkeffekt beim Wasserstoffatom. (Die Zahlen in runden Klammern geben die jeweiligen Vielfachheiten an.)

Das Elektron des Wasserstoffatoms ist einem „inneratomaren“ elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}}_0 = \mathcal{E}_0\vec{r}/r$ der Größenordnung

$$\mathcal{E}_0 = -\Big[\frac{d}{dr}\,\frac{e}{r}\Big]_{r=a_\mathrm{H}} = \frac{e}{a_\mathrm{H}^2} \approx 1{,}7{\cdot}10^7\,\mathrm{erg}^{1/2}\mathrm{cm}^{-3/2} \mathrel{\widehat{=}} 5{,}1{\cdot}10^{11}\,\mathrm{V/m}$$

ausgesetzt. Die Wirkung eines äußeren elektrischen Feldes kann deshalb auch noch für relativ hohe Feldstärken als schwache Störung angesehen werden. Für $\mathcal{E} \lesssim 10^5$ V/m („sehr schwache“ äußere Felder) ist die Stark-Aufspaltung zwar proportional zu $\mathcal{E}$, aber so klein, dass sie kleiner oder von derselben Größenordnung ist wie die Feinstrukturaufspaltung. In diesem Fall sind die oben erhaltenen Ergebnisse, bei deren Berechnung Spin-Bahn-Wechselwirkung, relativistische Massenkorrektur und Darwinterm vernachlässigt wurden, nicht brauchbar (s. [32]). Für 10^6 V/m $\lesssim \mathcal{E} \lesssim 10^7$ V/m („schwache“ äußere Felder) können die relativistischen Korrekturen zu H_0 gegenüber der Wechselwirkung mit dem äußeren Feld vernachlässigt werden. Es gilt dann $1{,}6\cdot10^{-4}$ eV $\lesssim 3e\mathcal{E}a_\mathrm{H} \lesssim 1{,}6\cdot10^{-3}$ eV und somit $3e\mathcal{E}a_\mathrm{H} \ll E^0_2 - E^0_1 = 10{,}2$ eV. Die Stark-Aufspaltung der Lyman-α-Linie ist entsprechend proportional zu $\mathcal{E}$ und durch Gl. (9.4-14)

bestimmt (*linearer Starkeffekt*). Für elektrische Felder $\mathcal{E} \gtrsim 10^7$ V/m treten Effekte der Ordnung $\mathcal{E}^2$ und $\mathcal{E}^3$ hinzu, und man muss dann auch die Energiekorrekturen zweiter bzw. dritter Ordnung berücksichtigen (s. [32]). Für $\mathcal{E} \gtrsim 10^9$ V/m beobachtet man ein allmähliches Schwächerwerden der Spektrallinien und schließlich verschwinden diese ganz. Was ist der Grund für dieses Phänomen? – Betrachten wir das wellenmechanische Potential des gestörten Systems

$$U(\vec{r}) = V(r) + W(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}r\cos\vartheta\,, \tag{9.4-16}$$

so sehen wir, dass es bei beliebigem $\mathcal{E} \neq 0$ stets Richtungen gibt, für welche $U(\vec{r})$ mit $r \to +\infty$ gegen $-\infty$ strebt (s. Abb. 9.4-2).

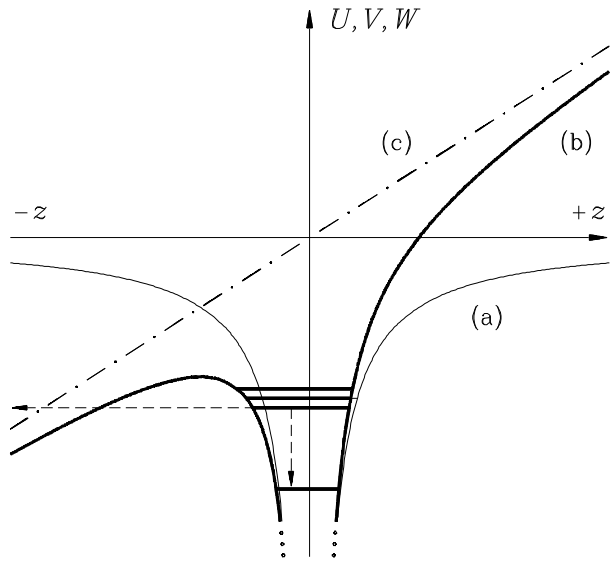


Abb. 9.4-2: Potentialverlauf in Richtung der z-Achse
(a) für das Coulombpotential $V(r) = -e^2/r$;
(b) für das Potential $U(\vec{r})$ von Gl. (9.4-16);
(c) für die „Störung“ $W(\vec{r}) = e\mathcal{E}z$

Man erwartet daher (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13), dass der gestörte Hamiltonoperator überhaupt keine gebundenen Zustände besitzt. Tatsächlich ist das Spektrum von H für beliebiges $\mathcal{E} \neq 0$ rein kontinuierlich ($-\infty < E < +\infty$). (Zum *strengen* Beweis dieser Aussage gehört, dass die Existenz diskreter, im Kontinuum eingebetteter Eigenwerte ausgeschlossen wird.[5])

In den Bemerkungen zu Aufgabe 5.3 wurde bereits für ein ähnliches Beispiel die Bedeutung der von der Störungstheorie gelieferten diskreten Energien $E_{n\nu}$ und der zugehörigen Funktionen $u_{n\nu}(\vec{r})$ besprochen: Es handelt sich bei $u_{n\nu}(\vec{r})\,\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_{n\nu}t\right]$ um stationäre Zustände, welche für hinreichend schwache Störung innerhalb einer beschränkten Zeit eine gute Näherung für die exakten *quasistationären Zustände* darstellen. Mit zunehmender Feldstärke $\mathcal{E}$ wird die Durchlässigkeit der „Schwelle“ in einem derartigen quasistationären Zustand größer, und es wird immer wahrscheinlicher, dass das Elektron das Atom verlässt (*Selbstionisation*), als dass es unter Emission von Strahlung in einen quasistationären Zustand mit niedrigerer Energie übergeht (s. Abb. 9.4-2).

[5] Siehe Reed, M. und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

Die Tatsache, dass es beim Wasserstoffatom (und bei wasserstoffähnlichen Ionen) einen linearen Starkeffekt gibt, ist darauf zurückzuführen, dass es in diesen Fällen Zustände gleicher Energie mit verschiedener Parität gibt (Entartung der Eigenwerte von H_0 bzgl. l für $n \geq 2$). Es gibt daher Energieeigenzustände, die keine definite Parität besitzen, und in denen das Atom (bzw. das Ion) ein *permanentes elektrisches Dipolmoment* besitzt. Bei Mehrelektronenatomen ist Entsprechendes nicht zu erwarten, und man hat experimentell bisher auch nie einen linearen Starkeffekt (im Sinne der Störungstheorie erster Ordnung) gefunden: Mehrelektronenatome zeigen in schwachen Feldern einen *quadratischen Starkeffekt*. Siehe dazu auch die Aufgabe 9.6.

Warum haben wir die Energiekorrekturen beim Wasserstoffatom nur für $n = 1$ und $n = 2$ berechnet? Der Grund dafür ist, dass die analoge Rechnung für allgemeines n äußerst kompliziert ist.[6] Um die Energiekorrekturen für allgemeines n zu berechnen, geht man besser von jenen Eigenfunktionen von $H_0^{\{\vec{r}\}}$ aus, welche man durch Separation der zeitunabhängigen Schrödingergleichung in parabolischen Koordinaten gewinnt (s. z. B. [32]). Das Ergebnis der Störungsrechnung ist

$$\epsilon^{(1)}_{n,k} = 3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}}\frac{nk}{2}\,, \quad n \in \mathbb{N};\;\; k = 0, \pm 1, \ldots, \pm(n-1);\;\; \text{Vielfachheit:}\;\; g_{n,k} = n - |k|\,. \tag{9.4-17}$$

Für $n = 1$ erhält man daraus wieder (9.4-9) und für $n = 2$ folgt wieder (9.4-14). Dabei gilt

$$\epsilon^{(1)}_{1,0} \equiv \epsilon^{(1)}_1\,; \quad \epsilon^{(1)}_{2,-1} \equiv \epsilon^{(1)}_{21}\,, \quad \epsilon^{(1)}_{2,0} \equiv \epsilon^{(1)}_{22} = \epsilon^{(1)}_{23}\,, \quad \epsilon^{(1)}_{2,+1} \equiv \epsilon^{(1)}_{24}\,.$$

Die näherungsweisen Eigenwerte von $H = H_0 + W$ sind für $m_l \neq 0$ bzgl. $\pm m_l$ entartet (s. speziell Abb. 9.4-1). Dies gilt auch für die (unbekannten) *exakten* Eigenwerte von H: Aufgrund der Drehinvarianz bzgl. der z-Achse gilt zunächst einmal $[H, L_z] = \mathbb{0}$, es gibt also ein vollständiges System gemeinsamer Eigenvektoren von H und L_z. Ferner bedeutet Drehinvarianz bzgl. der z-Achse Spiegelungsinvarianz bzgl. einer beliebigen Ebene, welche die z-Achse enthält. Ist $S^{(z)}$ der unitäre Operator zu einer (beliebigen) derartigen Spiegelung (z. B. zu $\vec{r}\,' \equiv \mathscr{S}^{(z)}\vec{r} := (-x, y, z)$), so gilt also auch $[H, S^{(z)}] = \mathbb{0}$, d. h. mit $|\,u\,\rangle$ ist auch $S^{(z)}|\,u\,\rangle$ Eigenvektor von H, und zwar zum selben Eigenwert. Da sich bei einer Spiegelung $\mathscr{S}^{(z)}$ der Umlaufsinn um die z-Achse umkehrt, gilt weiter $L_z S^{(z)} = -S^{(z)} L_z \;\Rightarrow\; [L_z, S^{(z)}] \neq \mathbb{0}$, $[L_z^2, S^{(z)}] = \mathbb{0}$. (Der Leser zeige dies für die obige spezielle Spiegelung $\mathscr{S}^{(z)}$ explizit mittels Operatoralgebra.) Ist also $|\,u\,\rangle$ Eigenvektor von L_z zum Eigenwert $m_l\hbar$, so ist $S^{(z)}|\,u\,\rangle$ Eigenvektor von L_z zum Eigenwert $-m_l\hbar$, und die Eigenwerte von H können somit u. a. durch $|m_l|$ gekennzeichnet werden. Jeder Eigenwert von H zu $|m_l| \neq 0$ besitzt daher mindestens die Vielfachheit 2.

9.5* Die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist nach Anhang A.6, Gl. (A.6-19) durch den (zeitunabhängigen) Ausdruck

$$W_{100(Z)\to nlm_l(Z\pm1)} = |\langle\, u_{nlm_l}(Z \pm 1)\,|\,u_{100}(Z)\,\rangle|^2 \tag{9.5-1}$$

gegeben. Die Argumente Z bzw. $Z \pm 1$ weisen darauf hin, dass es sich beim $1s$-Zustand um einen Eigenzustand von

$$H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{R} \tag{9.5-2}$$

[6] Siehe z. B. Lawden, D. F.: The Mathematical Principles of Quantum Mechanics. Methuen & Co Ltd, London 1967. Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2005.

und beim Zustand mit den Quantenzahlen n, l, m_l um einen Eigenzustand von

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{(Z \pm 1)e^2}{R} \tag{9.5-3}$$

handelt. (Die reduzierte Masse des „Hüllenelektrons“ ändert sich beim β-Zerfall des Kerns nicht.) Mit

$$\tilde{a} := a_0 \Big[1 + \frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{K}}\Big] \quad \Rightarrow \quad a = \frac{\tilde{a}}{Z} \tag{9.5-4}$$

gilt (s. (A.4-35); bzgl. a, a_0 s. Gl. (A.4-34))

$$u_{nlm_l}(\vec{r}\,; Z) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\left(\frac{Z}{\tilde{a}}\right)^{3/2}\left(\frac{2Zr}{n\tilde{a}}\right)^l e^{-Zr/n\tilde{a}}\, L^{2l+1}_{n-l-1}(2Zr/n\tilde{a})\, Y_{lm_l}(\Omega)\,,$$
$$n \in \mathbb{N};\;\; l = 0, 1, 2, \ldots, n-1;\;\; m_l = l, l-1, \ldots, -l \tag{9.5-5}$$

und speziell (s. (A.2-30))

$$u_{100}(\vec{r}\,; Z) = 2\left(\frac{Z}{\tilde{a}}\right)^{3/2} e^{-Zr/\tilde{a}}\, Y_{00}(\Omega)\,. \tag{9.5-6}$$

Nach Einführung der Variablen $\rho = 2(Z \pm 1)r/n\tilde{a}$ folgt unter Verwendung der gegebenen Integralformel

$$\langle\, u_{nlm_l}(Z \pm 1) \,|\, u_{100}(Z)\,\rangle = \delta_{l0}\,\delta_{m_l 0}\,\frac{4}{n^2}\sqrt{\frac{(n-1)!}{(n!)^3}}\,\frac{Z^{3/2}(Z \pm 1)^{3/2}}{\tilde{a}^3}\left(\frac{n\tilde{a}}{2(Z \pm 1)}\right)^3$$
$$\times \underbrace{\int_0^{+\infty} d\rho\, \exp\Big[-\frac{(n+1)Z \pm 1}{2(Z \pm 1)}\,\rho\Big]\,\rho^2\, L^1_{n-1}(\rho)}\,. \tag{9.5-7}$$
$$\frac{2!\,(n!)^2}{(n-1)!\,1!}\Big[\frac{2(Z \pm 1)}{(n+1)Z \pm 1}\Big]^3 F(-n+1, 3\,|\,2\,|\,\frac{2(Z \pm 1)}{(n+1)Z \pm 1})$$

Benützt man noch die angegebene Beziehung für die hypergeometrische Funktion, so erhält man

$$F(-n+1, 3\,|\,2\,|\,\xi) = (1-\xi)^{n-1}\underbrace{F(-n+1, -1\,|\,2\,|\,\frac{\xi}{\xi-1})}_{1 + \frac{(-n+1)(-1)}{2}\,\frac{\xi}{\xi-1}}\,, \tag{9.5-8}$$

und für die gesuchte Wahrscheinlichkeit folgt

$$W_{100(Z)\to nlm_l(Z\pm1)} = 0 \quad \text{für} \quad l \neq 0\,, \tag{9.5-9a}$$

$$W_{100(Z)\to n00(Z\pm1)} = 2^6 Z^3 (Z \pm 1)^3 n^5\,\frac{[(n-1)Z \mp 1]^{2n-4}}{[(n+1)Z \pm 1]^{2n+4}}\,. \tag{9.5-9b}$$

Für $n = 2$ und $Z = 1$ nimmt $[(n-1)Z - 1]^{2n-4}$ die unbestimmte Form 0^0 an. In diesem Fall erhält man aus (9.5-7)

$$\langle\, u_{200}(2)\,|\,u_{100}(1)\,\rangle = \frac{1}{8}\int_0^{+\infty} d\rho\, e^{-\rho}\,\rho^2\,\underbrace{L_1^1(\rho)}_{4-2\rho} = -\frac{1}{2}\,, \tag{9.5-10}$$

sodass sich

$$W_{100\,(1)\,\to\,200\,(2)} = \frac{1}{4} \tag{9.5-11}$$

ergibt. Man kann also die Formel (9.5-9b) auch für diesen Fall verwenden, wenn man den unbestimmten Ausdruck gleich eins setzt.

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Im Folgenden betrachte ich speziell den β^--Zerfall des ${}_1\mathrm{H}_2^3$-Kerns,

$${}_1\mathrm{H}_2^3 \;\to\; {}_2\mathrm{He}_1^3 + e^- + \overline{\nu}_\mathrm{e}\,, \tag{9.5-12}$$

der mit besonders großer Wahrscheinlichkeit eintritt.[7] Die Formel (9.5-9b) ergibt dann die folgenden Wahrscheinlichkeiten dafür, das ${}_2\mathrm{He}_1^3$-Ion in „seinem“ $1s$-, $2s$-, $3s$-, … Zustand anzutreffen, wenn das vor dem β^--Zerfall des ${}_1\mathrm{H}_2^3$-Kerns vorhandene ${}_1\mathrm{H}_2^3$-Atom in „seinem“ $1s$-Zustand war:

$$W_n := W_{100\,(1)\,\to\,n00\,(2)} = 2^9\,n^5\,\frac{(n-2)^{2n-4}}{(n+2)^{2n+4}}\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,. \tag{9.5-13}$$

In Tabelle 9.5-1 sind einige dieser Wahrscheinlichkeiten angeführt. Da die Wahrscheinlichkeiten $W_{100\,(1)\,\to\,nlm_l(2)}$, $l \neq 0$, nach Gl. (9.5-9a) alle null sind, gibt

$$W_\mathrm{I} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} W_n \tag{9.5-14}$$

die *Ionisationswahrscheinlichkeit* an, d. i. die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron des ${}_1\mathrm{H}_2^3$-Atoms beim β^--Zerfall des Kerns in einen Kontinuumszustand des ${}_2\mathrm{He}_1^3$-Ions übergeht, dass also nach dem β^--Zerfall ein ${}_2\mathrm{He}_1^3$-*Kern* sowie *zwei* freie Elektronen und ein Antineutrino vorliegen.

Tab. 9.5-1: Die Wahrscheinlichkeiten W_n Gl. (9.5-13)

n	$W_n \cdot 100\,\%$	n	$W_n \cdot 100\,\%$	n	$W_n \cdot 100\,\%$
1	70,2331962	3	1,2740198	5	0,1719788
2	25,0000000	4	0,3853673	6	0,0926971

[7] Ganz allgemein sind unter den erlaubten β-Übergängen jene zwischen so genannten „Spiegelkernen“ $[Z \to N,\ N \to Z]$ „begünstigt“. Siehe z. B. Eder, G.: Kernkräfte. Verlag G. Braun, Karlsruhe 1965.

Für große n verhalten sich die Reihenglieder in (9.5-14) wie $2^9\,e^{-8}\,(1/n^3)$, d. h. wie die Glieder der Entwicklung von $2^9\,e^{-8}\,\zeta(3)$ ($\zeta(z)$ riemannsche ζ-Funktion). Die Reihe (9.5-14) ist somit konvergent. Allerdings konvergiert sie „nach anfänglich gutem Beginn“ wie die Reihe für $\zeta(3)$ äußerst „langsam“. Um die Ionisationswahrscheinlichkeit W_I auf nur zwei signifikante Stellen genau zu erhalten, muss man in der Entwicklung zwanzig Reihenglieder berücksichtigen. Man erhält $W_\mathrm{I} \approx 0{,}026$, d. h. 2,6 %.

Bei den obigen Rechnungen wurde die Störung des „Hüllenelektrons“ durch das beim β^--Zerfall (9.5-12) emittierte Elektron („β^--Teilchen“) vernachlässigt. Da die Energie des emittierten Elektrons bei den meisten Zerfällen mindestens einige keV beträgt, gilt für seine Geschwindigkeit (von seltenen Ausnahmefällen abgesehen) $v \gtrsim 3\cdot10^9$ cm/s, und die Störung des „Hüllenelektrons“ ist nur für ein Zeitintervall $\tau \sim a_0/v \lesssim 2\cdot10^{-18}$ s wirksam („Flugzeit“ des emittierten Elektrons durch das Atom). Dieses Zeitintervall ist sehr klein gegen die „kleinste Periode“ des ${}_1\mathrm{H}_2^3$-Atoms $T = 2\pi\hbar/(E_\infty^0 - E_1^0) \approx 3\cdot10^{-16}$ s, weshalb die Idealisierung als „plötzliche“ Änderung des Hamiltonoperators gerechtfertigt ist.

9.6* Der Hamiltonoperator H eines isolierten Atoms vertauscht mit dem im betreffenden Zustandsraum definierten Paritätsoperator Π (gleichgültig, welche inneren Wechselwirkungen man einbezieht bzw. welche man vernachlässigt). Es existiert daher ein vollständiges System gemeinsamer Eigenvektoren von H und Π.

Ist $|\,\psi\,\rangle = |\,u\,\rangle$ ein gemeinsamer Eigenvektor von H und Π zu einem diskreten Energieeigenwert, so folgt

$$\vec{d} = \langle\, u\,|\,\vec{D}\,|\,u\,\rangle = \vec{0}\,, \tag{9.6-1}$$

da der Operator

$$\vec{D} = \sum_{i=1}^{Z} \vec{D}^{(i)}, \qquad \vec{D}^{(i)} = -e\vec{R}^{(i)} \tag{9.6-2}$$

ein ungerader Operator bzgl. räumlicher Inversion ist: $\Pi\,\vec{D}\,\Pi^\dagger = -\vec{D}$. (S. Aufgabe 2.2(c) und Aufgabe 2.3.) In einem solchen Zustand ist also das elektrische Dipolmoment des isolierten Atoms null: das Atom besitzt kein *permanentes elektrisches Dipolmoment*.

Ein Eigenvektor $|\,u\,\rangle$ von H zu einem *nicht entarteten* diskreten Eigenwert ist „automatisch“ auch Eigenvektor von Π, und es gilt (9.6-1). Ist ein Eigenwert von H aber entartet, so stellt sich die Frage, ob es vorkommen kann, dass die gemeinsamen Eigenvektoren von H und Π, die den betreffenden Entartungsraum aufspannen, nicht alle die gleiche Parität besitzen.

Wir wissen vom Wasserstoffatom ($Z = 1$), dass dies jedenfalls möglich ist. Bei Vernachlässigung des Spins und aller relativistischen Korrekturen sind die Energieeigenwerte E_n für $n \geq 2$ entartet, und der Entartungsraum zu E_n, $n \geq 2$, wird von den n^2 Vektoren $\{\,|\,nlm_l\,\rangle,\ l = 0, 1, \ldots, n-1;\ m_l = l, l-1, \ldots, -l\,\}$ aufgespannt, wobei die Parität von $|\,nlm_l\,\rangle$ durch $(-1)^l$ gegeben ist (s. Gl. (A.4-30) bis (A.4-35a) und Gl. (A.2-12)). Bei Einbeziehung des Spins und der relativistischen Korrekturen (Spin-Bahn-Wechselwirkung, Darwinterm und relativistische Massenkorrektur) hat man die Feinstrukturniveaus E_{nj} (s. z. B. [7]), welche für alle n, j entartet sind. Für $n = 1 \Rightarrow l = 0$, $j = s = \frac{1}{2}$ gibt es nur die Entartung bzgl. der Richtungen des Gesamtdrehimpulses, der Entartungsraum wird

von Vektoren gleicher Parität, und zwar $\pi = +1$, aufgespannt: $\{\,|\,1\,0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,m_j\,\rangle,\ m_j = \pm\frac{1}{2}\}$. Für $n \geq 2$ dagegen gibt es in den Entartungsräumen zu den Eigenwerten E_{nj} wieder Zustände mit verschiedener Parität: $\{\,|\,n\,l\,\frac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle,\ l = j \mp \frac{1}{2};\ m_j = j, j-1, \ldots, -j\,\}$,

$$\Pi\,|\,n, j \mp \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle = (-1)^{j\mp\frac{1}{2}}\,|\,n, j \mp \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle\,.$$

Gleichgültig, ob man Spin und relativistische Korrekturen einbezieht oder nicht, gibt es also zu allen Eigenwerten mit $n \geq 2$ Eigenvektoren von H, welche keine definite Parität besitzen, und das Wasserstoffatom hat in solchen gebundenen Energieeigenzuständen ein permanentes elektrisches Dipolmoment $\vec{d}$. Weiter unten wird ein Beispiel für einen solchen Zustand und das zugehörige permanente elektrische Dipolmoment angeschrieben (s. Gl. (9.6-4), (9.6-5)).

Weiterführende Diskussion und Bemerkungen

Beim Wasserstoffatom rührt die Tatsache, dass es für $n \geq 2$ Eigenvektoren verschiedener Parität zu ein und demselben diskreten Energieeigenwert gibt, von einer *„verborgenen“ Symmetrie* des Systems her. Ohne Spin und ohne relativistische Korrekturen gibt es neben dem Bahndrehimpuls $\vec{L}$ eine weitere strenge Erhaltungsgröße, nämlich

$$\vec{A} := \frac{1}{2}\,(\vec{P} \times \vec{L}) - \frac{1}{2}\,(\vec{L} \times \vec{P}) - \frac{me^2\vec{R}}{R}\,. \tag{9.6-3}$$

Der Vektoroperator $\vec{A}$ stellt das korrespondenzmäßige Analogon zum klassischen *Runge-Lenz-Vektor* dar. Ausgehend von den sechs Erhaltungsgrößen L_j, A_k lässt sich eine Invarianzalgebra definieren. (S. dazu Anhang 3 von [9].) Die spezielle Symmetrie äußert sich auch darin, dass die zeitunabhängige Schrödingergleichung nicht nur in Kugelkoordinaten, sondern auch in parabolischen Koordinaten separiert werden kann (s. z. B. [32]). Bei Mehrelektronenatomen ($Z \geq 2$) sind solche speziellen „verborgenen“ Symmetrien nicht bekannt, und ihr Vorhandensein ist auch nicht zu erwarten. Daneben ist prinzipiell noch für einzelne Energieniveaus *zufällige Entartung* denkbar, was ebenfalls dazu führen könnte, dass es Eigenvektoren von H gibt, welche keine definite Parität besitzen, doch ist auch das nicht zu erwarten. Liegt keiner dieser Fälle vor, so bleibt nur die von der Drehinvarianz des isolierten Atoms herrührende Entartung bzgl. der Richtungen des Gesamtdrehimpulses übrig. Ein diskreter Energieeigenwert $E_{\tau J}$ ist dann $(2J+1)$-fach, und der zugehörige Eigenraum wird von den Vektoren $\{\,|\,\tau J M_J\,\rangle,\ M_J = J, J-1, \ldots, -J\,\}$ aufgespannt (τ Satz von Quantenzahlen, welche zusammen mit J, M_J einen vollständigen Satz für das Mehrelektronenatom bilden, z. B. $\tau = (n_1, l_1, n_2, l_2, L, S)$ im Falle eines Zweielektronenatoms bei LS-Addition). Wegen $[\Pi, J_z] = \mathbb{0}$, $[\Pi, J_\pm] = \mathbb{0}$ besitzen alle Eigenvektoren von H zu einem Eigenwert $E_{\tau J}$ die gleiche Parität, und das Atom besitzt kein permanentes elektrisches Dipolmoment.

Handelt es sich *nicht* um ein isoliertes Atom, wird also das Atom in ein (nicht sphärisch symmetrisches) äußeres elektrisches Feld gebracht, welches die Inversionssymmetrie zerstört („bricht“), so kann natürlich in jedem stationären Zustand (bzw. quasistationären Zustand; s. Aufgabe 9.4) des Atoms ein von null verschiedenes elektrisches Dipolmoment vorhanden sein (*induziertes elektrisches Dipolmoment*). Bei Molekülen kann die Inversionssymmetrie auch

durch die Anordnung der (ortsfest angenommenen) Kerne zerstört sein, sodass es bei Molekülen sehr wohl ein permanentes elektrisches Dipolmoment geben kann (Beispiel: H_2O-Molekül).

Als spezielles Beispiel für einen gebundenen Energieeigenzustand eines Atoms mit einem permanenten elektrischen Dipolmoment betrachten wir den Zustand

$$|\,u\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|\,200\,\rangle + |\,210\,\rangle) \tag{9.6-4}$$

des Wasserstoffatoms. Der Ket $|\,u\,\rangle$ ist Eigenvektor des Hamiltonoperators H Gl. (A.4-30) (mit $Z = 1$) zum Eigenwert $E_2 = -\hbar^2/8ma_{\mathrm{H}}^2$ und besitzt keine definite Parität. Mit Gl. (6.28-2), (6.28-8), den Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle\,0\,1\,0\,0\,|\,1\,0\,\rangle = 1$ und $\langle\,1\,1\,0\,0\,|\,0\,0\,\rangle = -1/\sqrt{3}$ (s. Tab. A.7-2) sowie dem Radialintegral von Aufgabe 9.4 folgt

$$d_q^{(1)} = \langle\,u\,|\,D_q^{(1)}\,|\,u\,\rangle = -e\,\langle\,u\,|\,R_q^{(1)}\,|\,u\,\rangle = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad q = \pm 1 \\ 3ea_{\mathrm{H}} & \text{für} \quad q = 0 \end{cases},$$

also

$$\vec{d} = (0, 0, 3ea_{\mathrm{H}})\,. \tag{9.6-5}$$

Bringt man das Wasserstoffatom in ein homogenes äußeres elektrisches Feld $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$, so stellt der Eigenvektor $|\,u\,\rangle$ Gl. (9.6-4) des ungestörten Hamiltonoperators einen der Eigenvektoren nullter Ordnung des gestörten Hamiltonoperators dar, wie in Aufgabe 9.4 gezeigt wurde (s. Gl. (9.4-15a)), und die Energieverschiebung ist in niedrigster Näherung durch

$$\epsilon^{(1)} = -\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{d} = -3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}} \tag{9.6-6}$$

gegeben, in Übereinstimmung mit $\epsilon_{21}^{(1)}$ von Gl. (9.4-14). In den höheren Ordnungen der Störungstheorie geht dann die Polarisation des Wasserstoffatoms durch das äußere Feld ein, welche eine Änderung des elektrischen Dipolmomentes bewirkt: zum permanenten tritt noch ein induziertes elektrisches Dipolmoment hinzu.[8]

9.7* Die Operatoren

$$Q_\mu^{(2)} = -e\,2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,R^2\,Y_{2\mu}(\Theta, \Phi)\,, \qquad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \tag{9.7-1}$$

bilden die sphärischen Standardkomponenten eines irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{Q}^{(2)}$ vom Rang 2 in Bezug auf den Bahndrehimpuls, wegen $[S_j, Q_\mu^{(2)}] = \mathbb{0}$, $\forall\, j, \mu$, aber auch in Bezug auf den Gesamtdrehimpuls (s. Anhang A.7, insbesondere Gl. (A.7-16)). Man kann somit auf die gesuchten Erwartungswerte das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24) anwenden:

$$\begin{aligned} q_\mu^{(2)} &= \langle\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,|\,Q_\mu^{(2)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle = \langle\,j\,2\,m_j\,\mu\,|\,j\,m_j\,\rangle\langle\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,\|\,\mathsf{Q}^{(2)}\,\|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,\rangle \\ &= \delta_{\mu 0}\,\frac{2\,[3m_j^2 - j(j+1)]}{\sqrt{(2j+3)(2j+2)2j(2j-1)}}\,\langle\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,\|\,\mathsf{Q}^{(2)}\,\|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{9.7-2}$$

[8] Siehe z. B. Merzbacher, E.: Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, New York 1998.

Die Komponenten $q^{(2)}_{\pm 2}$, $q^{(2)}_{\pm 1}$ sind also in den Energieeigenzuständen $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ null. Für $j = \frac{1}{2}$ ist darüber hinaus auch $q^{(2)}_0$ null, da dann die „Dreiecksungleichung“ $|j-2| \leq j \leq j+2$ verletzt ist, und deshalb der Clebsch-Gordan-Koeffizient null ist. (S. auch Aufgabe 6.29.)

Wir setzen nun vorübergehend $j \neq \frac{1}{2}$ voraus. Mit

$$Q \equiv Q(nlj) := \langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, j \,|\, Q^{(2)}_0 \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, j \,\rangle \tag{9.7-3}$$

gilt aufgrund von Gl. (9.7-2)

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\|\, \mathsf{Q}^{(2)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle = \frac{\sqrt{(2j+3)(2j+2)2j(2j-1)}}{2\,[3m_j^2 - j(j+1)]}\, q^{(2)}_0 = \sqrt{\frac{(2j+3)(2j+2)}{2j(2j-1)}}\, Q \tag{9.7-4}$$

und somit auch

$$q^{(2)}_0 = \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{j(2j-1)}\, Q\,. \tag{9.7-5}$$

Im engeren Sinne wird Q als elektrisches Quadrupolmoment des Atoms bezeichnet.

Die Energieeigenvektoren $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ werden in der $\{\vec{r}\, m_s\}$-Darstellung durch die Spinorfunktionen

$$\widehat{u}_{nl\frac{1}{2}jm_j}(\vec{r}) = R_{nlj}(r)\, \widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}(\Omega) \tag{9.7-6}$$

repräsentiert, wobei die $\widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}$ die so genannten *Kugelspinoren* sind (s. z. B. [7]):

$$\widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}(\Omega) = \begin{bmatrix} \langle\, l\, \frac{1}{2}, m_j - \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \,|\, j\, m_j \,\rangle\, Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}(\Omega) \\ \langle\, l\, \frac{1}{2}, m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \,|\, j\, m_j \,\rangle\, Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}(\Omega) \end{bmatrix}. \tag{9.7-7}$$

Mit (9.7-1), (9.7-6), (9.7-7) und den Abkürzungen

$$(n\, l\, j \,|\, R^2 \,|\, n\, l\, j) := \int_0^{+\infty} dr\, r^4 \Big[R_{nlj}(r)\Big]^2, \tag{9.7-8}$$

$$(l j m_j \,|\, Y_{20} \,|\, l j m_j) := \int_{[4\pi]} d\Omega\, \widehat{Y}^{(j)\dagger}_{lm_j}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, \widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}(\Omega) \tag{9.7-9}$$

folgt für die Größe Q von Gl. (9.7-3)

$$Q = e\,(n\, l\, j \,|\, R^2 \,|\, n\, l\, j) \left(-2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\right) (l j j \,|\, Y_{20} \,|\, l j j)\,. \tag{9.7-10}$$

Ich berechne zuerst die Winkelintegrale. Mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten von Tab. A.7-1 erhalte ich zunächst einmal für $j = l + \frac{1}{2}$

$$\widehat{Y}^{(l+\frac{1}{2})}_{l,l+\frac{1}{2}}(\Omega) = \begin{bmatrix} Y_{ll}(\Omega) \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{9.7-11a}$$

also

$$(l,l+\tfrac{1}{2},l+\tfrac{1}{2}\,|\,Y_{20}\,|\,l,l+\tfrac{1}{2},l+\tfrac{1}{2}) = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{ll}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, Y_{ll}(\Omega)\,, \tag{9.7-11b}$$

und für $j = l - \frac{1}{2}$

$$\widehat{Y}^{(l-\frac{1}{2})}_{l,l-\frac{1}{2}}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} -Y_{l,l-1}(\Omega) \\ \sqrt{2l}\, Y_{ll}(\Omega) \end{bmatrix}, \tag{9.7-11c}$$

also

$$\begin{aligned}(l,l-\tfrac{1}{2},l-\tfrac{1}{2}\,|\,Y_{20}\,|\,l,l-\tfrac{1}{2},l-\tfrac{1}{2}) = {} & \frac{1}{2l+1} \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{l,l-1}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, Y_{l,l-1}(\Omega) \\ & + \frac{2l}{2l+1} \int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{ll}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, Y_{ll}(\Omega)\,.\end{aligned} \tag{9.7-11d}$$

Als nächstes benütze ich die Clebsch-Gordan-Reihe (A.2-11) und die Orthogonalitätsbeziehungen (A.2-9):

$$Y_{20}(\Omega)\, Y_{lm_l}(\Omega) = \sum_{L=|l-2|}^{l+2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}\,\frac{2l+1}{2L+1}}\, \langle\, l\,2\,m_l 0\,|\,L m_l\,\rangle \langle\, l\,2\,0\,0\,|\,L\,0\,\rangle\, Y_{Lm_l}(\Omega) \quad \Rightarrow \tag{9.7-12}$$

$$\int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{lm_l}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, Y_{lm_l}(\Omega) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\, \langle\, l\,2\,m_l 0\,|\,l m_l\,\rangle \langle\, l\,2\,0\,0\,|\,l\,0\,\rangle\,,$$

$$\int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y^*_{lm_l}(\Omega)\, Y_{20}(\Omega)\, Y_{lm_l}(\Omega) = -\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\frac{3m_l^2 - l(l+1)}{(2l+3)(2l-1)} \quad \Rightarrow \tag{9.7-13}$$

$$-\,2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,(l,l+\tfrac{1}{2},l+\tfrac{1}{2}\,|\,Y_{20}\,|\,l,l+\tfrac{1}{2},l+\tfrac{1}{2}) = \frac{2l}{2l+3}\,, \tag{9.7-14}$$

$$-\,2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,(l,l-\tfrac{1}{2},l-\tfrac{1}{2}\,|\,Y_{20}\,|\,l,l-\tfrac{1}{2},l-\tfrac{1}{2}) = \frac{2(l-1)}{2l+1}\,; \tag{9.7-15}$$

zusammengefasst:

$$-\,2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,(ljj\,|\,Y_{20}\,|\,ljj) = \frac{2j-1}{2(j+1)}\,. \tag{9.7-16}$$

Ich komme nun zur Berechnung der Radialintegrale $(n\,l\,j\,|\,R^2\,|\,n\,l\,j)$. Die Bedeutung dieser Größen ist aus

$$\langle\, R^2\,\rangle = \langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,|\,R^2\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle = \int\limits_0^{+\infty} dr\, r^4 \big[R_{nlj}(r)\big]^2 = (n\,l\,j\,|\,R^2\,|\,n\,l\,j) \tag{9.7-17}$$

ersichtlich. Da der Einfluss relativistischer Effekte auf die Radialfunktionen geringfügig ist (siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 9.1), kann man für die Berechnung von $\langle\, R^2\,\rangle$ in sehr

guter Näherung die radialen Antreffwahrscheinlichkeitsdichten $W_{nlj}(r) = r^2[R_{nlj}(r)]^2$, $j = l \pm \frac{1}{2}$, durch die radiale Antreffwahrscheinlichkeitsdichte $W_{nl}(r) = r^2[R_{nl}(r)]^2$ ersetzen. Man ersetzt also in (9.7-10) die Radialintegrale (9.7-17) durch ($\rho = 2r/na_{\mathrm{H}}$; $R_{nl}(r)$ Gl. (A.4-35b), (A.4-35c))

$$(n\,l\,|\,R^2\,|\,n\,l) = \int_0^{+\infty} dr\, r^4 \Big[R_{nl}(r)\Big]^2 = a_{\mathrm{H}}^2\,\frac{n}{8}\,\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}\int_0^{+\infty} d\rho\, \overbrace{\rho^{2l+1}\,e^{-\rho}\,\rho\Big[\rho\,L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\Big]^2}\, \rho^{2l+4}\,e^{-\rho}\Big[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\Big]^2 . \tag{9.7-18}$$

Mithilfe der Rekursionsformel (A.2-26) für die zugeordneten Laguerrepolynome kann man $\rho\Big[\rho\,L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\Big]^2$ als Linearkombination von Produkten $L_p^{2l+1}(\rho)\,L_{p'}^{2l+1}(\rho)$ darstellen. Für (9.7-18) benötigt man dabei nur jene Summanden, bei denen $p' = p$ ist, da die übrigen Summanden aufgrund der Orthogonalitätsbeziehungen (A.2-28) keinen Beitrag liefern. Das Zeichen $\hookrightarrow\ldots$ in den folgenden Beziehungen soll bedeuten, dass Summanden weggelassen werden, welche zum Integral (9.7-18) nichts beitragen:

$$\rho\Big[\rho\,L_{n-l-1}^{2l+1}\Big]^2 = \rho\Big[2nL_{n-l-1}^{2l+1} - \frac{n-l}{n+l+1}\,L_{n-l}^{2l+1} - (n+l)^2\,L_{n-l-2}^{2l+1}\Big]^2,$$

$$\begin{aligned}
\rho\Big[\rho\,L_{n-l-1}^{2l+1}\Big]^2 = {} & 4n^2\,L_{n-l-1}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l-1}^{2l+1}}_{2nL_{n-l-1}^{2l+1}+\hookrightarrow\ldots} + \frac{(n-l)^2}{(n+l+1)^2}\,L_{n-l}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l}^{2l+1}}_{2(n+1)L_{n-l}^{2l+1}+\hookrightarrow\ldots} \\
& + (n+l)^4\,L_{n-l-2}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l-2}^{2l+1}}_{2(n-1)L_{n-l-2}^{2l+1}+\hookrightarrow\ldots} - \frac{4n(n-l)}{n+l+1}\,L_{n-l-1}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l}^{2l+1}}_{-(n+l+1)^2\,L_{n-l-1}^{2l+1}+\hookrightarrow\ldots} \\
& - 4n(n+l)^2\,L_{n-l-1}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l-2}^{2l+1}}_{-\frac{n-l-1}{n+l}\,L_{n-l-1}^{2l+1}+\hookrightarrow\ldots} + \frac{2(n-l)(n+l)^2}{n+l+1}\,L_{n-l}^{2l+1}\underbrace{\rho\,L_{n-l-2}^{2l+1}}_{\hookrightarrow\ldots} .
\end{aligned}$$

Einsetzen in Gl. (9.7-18) und Berücksichtigung des Normierungsintegrals der zugeordneten Laguerrepolynome (s. (A.2-28)) ergibt dann

$$\begin{aligned}
(n\,l\,|\,R^2\,|\,n\,l) = a_{\mathrm{H}}^2\,\frac{n}{8}\,\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}\Bigg\{ & 8n^3\,\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} + \frac{2(n+1)(n-l)^2}{(n+l+1)^2}\,\frac{[(n+l+1)!]^3}{(n-l)!} \\
& + 2(n-1)(n+l)^4\,\frac{[(n+l-1)!]^3}{(n-l-2)!} + 4n(n-l)(n+l+1)\,\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \\
& + 4n(n+l)(n-l-1)\,\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}\Bigg\}
\end{aligned}$$

und nach Zusammenfassen

$$(n\,l\,|\,R^2\,|\,n\,l) = a_{\mathrm{H}}^2\,\frac{n^2}{2}\Big[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\Big]. \tag{9.7-19}$$

Bei Vernachlässigung der äußerst kleinen relativistischen Effekte in $\langle R^2 \rangle$ Gl. (9.7-17) lauten also die Ergebnisse zu den Punkten (a), (b) und (c) der Angabe:

(a) $$q_\mu^{(2)} = 0\,, \quad \mu = \pm 1, \pm 2\,, \tag{9.7-20}$$

$$q_0^{(2)} = e\,\langle R^2 \rangle\, \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{2j(j+1)} = e a_\mathrm{H}^2\, \frac{n^2}{2} \left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{2j(j+1)}\,. \tag{9.7-21}$$

(b) $$Q = e\,\langle R^2 \rangle\, \frac{2j-1}{2(j+1)} = e a_\mathrm{H}^2\, \frac{n^2}{2} \left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \frac{2j-1}{2(j+1)}\,, \tag{9.7-22}$$

$$q_0^{(2)} = \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{j(2j-1)}\, Q\,. \tag{9.7-23}$$

(c) $$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\|\, \mathsf{Q}^{(2)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle = e\,\langle R^2 \rangle \sqrt{\frac{(2j+3)(2j-1)}{(2j+2)2j}} \tag{9.7-24}$$

$$= e a_\mathrm{H}^2\, \frac{n^2}{2} \left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \sqrt{\frac{(2j+3)(2j-1)}{(2j+2)2j}}\,.$$

Die Formeln (9.7-20) bis (9.7-24) gelten für alle möglichen Werte der Quantenzahlen n, l, j und m_j. Spezialisierung auf die Fälle der Punkte (d1) und (d2) der Angabe gibt:

(d) (d1) $$Q = 0\,; \qquad q_\mu^{(2)} = 0\,, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2\,. \tag{9.7-25}$$

(d2) $$\langle R^2 \rangle = (2\,1\,|\,R^2\,|\,2\,1) = 30\, a_\mathrm{H}^2\,; \quad Q = e\,\langle R^2 \rangle\, \frac{2}{5} = 12 e a_\mathrm{H}^2\,; \tag{9.7-26}$$

$$q_\mu^{(2)} = 0\,, \quad \mu = \pm 1, \pm 2\,, \tag{9.7-27}$$

$$q_0^{(2)} = \left(m_j^2 - \frac{5}{4}\right) Q = e\,\langle R^2 \rangle\, \frac{2}{5} \left(m_j^2 - \frac{5}{4}\right) \quad \Rightarrow \tag{9.7-28}$$

$$q_0^{(2)} = +12 e a_\mathrm{H}^2 \quad \text{für} \quad m_j = \pm\frac{3}{2}\,, \qquad q_0^{(2)} = -12 e a_\mathrm{H}^2 \quad \text{für} \quad m_j = \pm\frac{1}{2}\,.$$

Bemerkungen

Um an einem Beispiel quantitativ zu zeigen wie klein die relativistischen Korrekturen zum elektrischen Quadrupolmoment sind, betrachte ich den Fall (d2) noch etwas näher.

Verwendet man für die Berechnung von $\langle R^2 \rangle$ anstelle von (s. Anhang A.4, Gl. (A.4-35b) und (A.4-35c) sowie Anhang A.2, Gl. (A.2-30a))

$$W_{21}(r) = \frac{1}{\Gamma(5)}\, \frac{1}{a_\mathrm{H}} \left(\frac{r}{a_\mathrm{H}}\right)^4 e^{-r/a_\mathrm{H}} \tag{9.7-29}$$

die aus der Diracgleichung folgende relativistisch korrekte radiale Antreffwahrscheinlichkeitsdichte (s. z. B. [32])

$$W_{21\frac{3}{2}}(r) = \frac{1}{\Gamma(2\delta+1)}\, \frac{1}{a_\mathrm{H}} \left(\frac{r}{a_\mathrm{H}}\right)^{2\delta} e^{-r/a_\mathrm{H}}\,, \quad \delta := \sqrt{4 - \alpha^2}\,, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\,, \tag{9.7-30}$$

so erhält man für $\langle R^2 \rangle$ statt des Wertes von Gl. (9.7-26)

$$\langle R^2 \rangle = (2\,1\,\tfrac{3}{2}\,|\,R^2\,|\,2\,1\,\tfrac{3}{2}) = (2\delta+1)(2\delta+2)\,a_{\mathrm{H}}^2 = 29{,}999707\,a_{\mathrm{H}}^2\,. \tag{9.7-31}$$

Die relativistische Korrektur zu $\langle R^2 \rangle$ und damit zum elektrischen Quadrupolmoment Q beträgt also weniger als ein tausendstel Prozent.

Bezüglich des elektrischen Quadrupolmomentes von Mehrelektronenatomen in Zentralfeldnäherung s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.8, insbesondere Gl. (9.8-28).

Der so genannte *Quadrupoltensoroperator* (Tensoroperator des elektrischen Quadrupolmomentes) wird i. Allg. durch seine kartesischen Komponenten ($-e$ Ladung des Elektrons)

$$Q_{ij} = -e\,[3X_iX_j - \delta_{ij}R^2]\,, \qquad i,j = 1,2,3 \tag{9.7-32}$$

definiert. Als symmetrischer Tensoroperator ($Q_{ji} = Q_{ij}$) mit $\sum_{i=1}^{3} Q_{ii} = \mathbb{0}$ besitzt er fünf unabhängige Komponenten, welche sich bei räumlichen Drehungen sämtlich gemäß der irreduziblen Darstellung $D^{(2)}$ transformieren.[9] Der Quadrupoltensoroperator stellt somit einen irreduziblen Tensoroperator $\mathsf{Q}^{(2)}$ vom Rang 2 dar. Die fünf unabhängigen kartesischen Komponenten $Q_{11}, Q_{12}, Q_{13}, Q_{22}$ und Q_{23} können gemäß

$$Q_0^{(2)} = -(Q_{11}+Q_{22}) = Q_{33}\,, \qquad Q_{\pm1}^{(2)} = \mp\sqrt{\frac{2}{3}}\,(Q_{13} \pm iQ_{23})\,, \tag{9.7-33a}$$

$$Q_{\pm2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}}\,(Q_{11} - Q_{22} \pm 2iQ_{12}) \tag{9.7-33b}$$

durch die sphärischen Komponenten $Q_\mu^{(2)}$ von Gl. (9.7-1) ersetzt werden. Die Umkehrung der Formeln (9.7-33) lautet

$$Q_{11} = \sqrt{\frac{3}{8}}\,(Q_2^{(2)} + Q_{-2}^{(2)}) - \frac{1}{2}\,Q_0^{(2)}\,, \qquad Q_{12} = -i\sqrt{\frac{3}{8}}\,(Q_2^{(2)} - Q_{-2}^{(2)})\,, \tag{9.7-34a}$$

$$Q_{22} = -\sqrt{\frac{3}{8}}\,(Q_2^{(2)} + Q_{-2}^{(2)}) - \frac{1}{2}\,Q_0^{(2)}\,, \qquad Q_{13} = -\sqrt{\frac{3}{8}}\,(Q_1^{(2)} - Q_{-1}^{(2)})\,, \tag{9.7-34b}$$

$$Q_{23} = i\sqrt{\frac{3}{8}}\,(Q_1^{(2)} + Q_{-1}^{(2)})\,. \tag{9.7-34c}$$

9.8*

(a) In der Zentralfeldnäherung ist ein Energieeigenvektor $|\,u\,\rangle$ eines Z-Elektronen-Atoms durch eine Slaterdeterminante von Z Einelektronzuständen $|\,v_{\alpha_i}\,\rangle \equiv |\,n_i l_i \tfrac{1}{2} j_i m_{j_i}\,\rangle$ gegeben. Nach Gl. (7.15-1), (7.15-6) gilt daher für das magnetische Dipolmoment des Atoms in einem Energieeigenzustand ($|\,\psi\,\rangle = |\,u\,\rangle$)

$$\vec{\mu} = \langle\,u\,|\,\vec{M}\,|\,u\,\rangle = \sum {}^{(1)}\langle\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,|\,\vec{M}^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle^{(1)} \tag{9.8-1}$$

[9] Siehe z. B. Fano, U., und G. Racah: Irreducible Tensorial Sets. Academic Press, New York 1959.

mit

$$\vec{M} = \sum_{i=1}^{Z} \vec{M}^{(i)}, \qquad \vec{M}^{(i)} = -\frac{e}{2m_e c}\,(\vec{L}^{(i)} + 2\,\vec{S}^{(i)})\,, \tag{9.8-2}$$

wobei die Summe in (9.8-1) über die Z besetzten Einelektronzustände läuft. Diese Summe zerlegen wir in die Summe über alle abgeschlossenen „Unterschalen“ mit jeweils festem n, l, j und die Summe über etwaige nicht abgeschlossene Unterschalen dieser Art. Der Beitrag $\vec{\Sigma}(nlj)$ einer abgeschlossenen (nlj)-Unterschale ergibt sich durch Summation über alle m_j bei gegebenem n, l, j:

$$\vec{\Sigma}(nlj) \;=\; \sum_{m_j=-j}^{+j} {}^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, \vec{M}^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)}\,, \tag{9.8-3a}$$

$$n \in \mathbb{N};\; l = 0,\; j = \tfrac{1}{2};\;\; l = 1, 2, \ldots, n-1,\;\; j = l \pm \tfrac{1}{2}\,. \tag{9.8-3b}$$

Ziel der folgenden Rechnung ist es zu zeigen, dass

$$\vec{\Sigma}(nlj) = \vec{0}\,, \qquad \forall\, n, l, j \tag{9.8-4}$$

gilt. Es folgt dann, dass man in Gl. (9.8-1) nur über etwaige nicht abgeschlossene (nlj)Unterschalen summieren muss.

Um $\vec{\Sigma}(nlj)$ berechnen zu können, benötige ich die Einteilchen-Erwartungswerte

$${}^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, \vec{M}^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)}.$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise lasse ich vorübergehend den „dummy“-Index (1) weg. Bis einschließlich Gl. (9.8-16) beziehen sich alle Operatorsymbole $\vec{L}$, $\vec{S}$, $\vec{J}$, $\vec{M}$ bzw. $\mathsf{M}^{(1)}$ auf *ein* Teilchen. Da $\vec{L}$ und $\vec{S}$ Vektoroperatoren bzgl. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ sind (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-21)), gilt dies auch für

$$\vec{M} = -\frac{e}{2m_e c}\,(\vec{L} + 2\,\vec{S}\,) = -\frac{\mu_B}{\hbar}\,(\vec{L} + 2\,\vec{S}\,)\,, \qquad \mu_B := \frac{e\hbar}{2m_e c}\,. \tag{9.8-5}$$

Man kann deshalb bei Verwendung der sphärischen Komponenten $M^{(1)}_\mu$ des Vektoroperators $\vec{M}$ (des irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{M}^{(1)}$; s. (A.7-22)) bzgl. der Zustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24) anwenden:

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M^{(1)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m_j\, \mu \,|\, j\, m_j \,\rangle \langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\|\, \mathsf{M}^{(1)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle\,. \tag{9.8-6}$$

Daraus folgt sofort

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M^{(1)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = 0 \quad \text{für} \quad \mu = \pm 1. \tag{9.8-7}$$

Berechnung des Erwartungswertes zu $M_0^{(1)} = M_z$:

Lösungsweg 1: Kennt man das Theorem von Aufgabe 6.31 nicht, so schreibt man (9.8-6) für $\mu = 0$ an (s. Tab. A.7-2):

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}} \,\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\|\, \mathsf{M}^{(1)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle\,. \tag{9.8-8}$$

Damit folgt zunächst einmal

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \frac{m_j}{j}\,\mu(lj)\,, \qquad \mu(lj) := \langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, j \,|\, M_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, j \,\rangle\,. \tag{9.8-9}$$

Der wellenmechanische Operator $\widehat{M}_z^{\{\vec{r}\,m_s\}}$, welcher die z-Komponente des magnetischen Momentes des Elektrons in der $\{\vec{r}\,m_s\}$-Darstellung repräsentiert, wirkt nur auf den Winkel-Spin-Teil der Spinorfunktionen. Es ist daher für die Berechnung der Erwartungswerte (9.8-9) gleichgültig, ob man relativistische Korrekturen der Radialfunktionen einbezieht, also j-abhängige Radialfunktionen $R_{nlj}(r)$ wie in Gl. (9.7-6) annimmt, oder „nichtrelativistische“ Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ zugrunde legt. Die Radialfunktionen gehen lediglich in Form ihres Normierungsintegrals ein, welches voraussetzungsgemäß den Wert eins besitzt. Deshalb sind auch die Erwartungswerte (9.8-9) von n unabhängig.

Im Hinblick auf diese Tatsache können wir für die Rechnung Einelektronzustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ verwenden, welche sich in der Form

$$|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \sum_{m_s=\pm 1/2} |\, n\, l, m_j - m_s \,\rangle_{\mathrm{B}}\, |\, \tfrac{1}{2}\, m_s \,\rangle_{\mathrm{S}}\, \langle\, l\, \tfrac{1}{2}, m_j - m_s, m_s \,|\, j m_j \,\rangle\,, \tag{9.8-10a}$$

$$_{\mathrm{B}}\langle\, \vec{r}\,|\, n l m_l \,\rangle_{\mathrm{B}} = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\Omega) \tag{9.8-10b}$$

schreiben lassen. Mit den entsprechenden Vektoren für $m_j = j$ (s. Tab. A.7-1)

$$|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}, l + \tfrac{1}{2}, l + \tfrac{1}{2} \,\rangle = |\, n\, l\, l \,\rangle_{\mathrm{B}} |+\rangle_{\mathrm{S}}\,, \qquad l = 0, 1, \ldots, n-1 \tag{9.8-11}$$

$$|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2} \,\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\, |\, n\, l, l-1 \,\rangle_{\mathrm{B}} |+\rangle_{\mathrm{S}} + \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\, |\, n\, l\, l \,\rangle_{\mathrm{B}} |-\rangle_{\mathrm{S}}\,, \tag{9.8-12}$$

$$l = 1, 2, \ldots, n-1$$

folgt

$$(L_z + 2\,S_z)\, |\, n\, l\, \tfrac{1}{2}, l + \tfrac{1}{2}, l + \tfrac{1}{2} \,\rangle = (l+1)\hbar\, |\, n\, l\, l \,\rangle_{\mathrm{B}} |+\rangle_{\mathrm{S}}\,,$$

$$(L_z + 2\,S_z)\, |\, n\, l\, \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2}, l - \tfrac{1}{2} \,\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\, l\hbar\, |\, n\, l, l-1 \,\rangle_{\mathrm{B}} |+\rangle_{\mathrm{S}} + \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\, (l-1)\hbar\, |\, n\, l\, l \,\rangle_{\mathrm{B}} |-\rangle_{\mathrm{S}}$$

und somit

$$\mu(l, l + \tfrac{1}{2}) = -\mu_{\mathrm{B}}\,(l+1)\,, \tag{9.8-13}$$

$$\mu(l, l - \tfrac{1}{2}) = -\mu_{\mathrm{B}}\,\frac{1}{2l+1}\,\big[l + 2l(l-1)\big] = -\mu_{\mathrm{B}}\,\frac{l(2l-1)}{2l+1}\,. \tag{9.8-14}$$

Dass sich diese beiden Ausdrücke in der Form (9.8-16b) zusammenfassen lassen, ist nicht offensichtlich, ergibt sich jedoch organisch aus dem folgenden Lösungsweg 2.

Man könnte natürlich ebenso gut von

$$\mu(lj) = \underbrace{\int_0^{+\infty} dr\, r^2 \left[R_{nlj}(r)\right]^2}_{1} \int_{[4\pi]} d\Omega\, \widehat{Y}_{lj}^{(j)\dagger}(\Omega) \left(\widehat{M}_z^{\{\vec{r}m_s\}}\, \widehat{Y}_{lj}^{(j)}(\Omega)\right) \tag{9.8-15}$$

ausgehen und

$$\widehat{M}_z^{\{\vec{r}m_s\}} = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\left(\widehat{L}_z^{\{\vec{r}m_s\}} + 2\,\widehat{S}_z^{\{\vec{r}m_s\}}\right) = -\frac{\mu_\mathrm{B}}{\hbar}\left(\widehat{J}_z^{\{\vec{r}m_s\}} + \widehat{S}_z^{\{\vec{r}m_s\}}\right)$$

auf die Kugelspinoren $\widehat{Y}_{lj}^{(j)}(\Omega)$, $j = l \pm \frac{1}{2}$, welche in Gl. (9.7-11a), (9.7-11c) angeschrieben sind, wirken lassen. Der Leser führe die Details dieser Lösungsvariante selbst aus.

Lösungsweg 2: Anwendung des Theorems von Aufgabe 6.31

Die entsprechende Rechnung wurde bereits in Aufgabe 6.32 in allgemeinerer Form durchgeführt. Mit $\vec{J}^{(1)} \equiv \vec{L}$, $\vec{J}^{(2)} \equiv \vec{S}$, $g_1 \equiv g_l = 1$, $g_2 \equiv g_s = 2$ und $g(l\,\frac{1}{2}\,j) \equiv g_j(l)$ ergibt sich aus den Formeln (6.32-1), (6.32-5a), (6.32-7) unmittelbar

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = -\mu_\mathrm{B}\, g_j(l)\, m_j = \frac{m_j}{j}\, \mu(lj)\,, \tag{9.8-16a}$$

$$g_j(l) = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} > 0\,, \qquad \mu(lj) = -\mu_\mathrm{B}\, g_j(l)\, j\,. \tag{9.8-16b}$$

Zusammenfassung:

$$^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_x^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)} = {}^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_y^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)} = 0\,; \tag{9.8-17a}$$

$$^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_z^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)} = -\mu_\mathrm{B}\, g_j(l)\, m_j = \frac{m_j}{j}\, \mu(lj)\,, \tag{9.8-17b}$$

$$g_j(l),\ \mu(lj) \quad \text{s. Gl. (9.8-16b).} \tag{9.8-17c}$$

Wegen $\sum_{m_j=-j}^{+j} m_j = 0$ folgt damit die Beziehung (9.8-4). Einsetzen der Ergebnisse (9.8-17a), (9.8-17b) in Gl. (9.8-1) liefert schließlich für das magnetische Moment des Z-Elektronenatoms in Zentralfeldnäherung

$$\mu_x = \mu_y = 0\,, \qquad \mu_z = -\mu_\mathrm{B} \sum_{nljm_j} g_j(l)\, m_j\,, \tag{9.8-18}$$

wobei lediglich über etwaige nicht abgeschlossene (nlj)-Unterschalen zu summieren ist.

(b) Für ein Atom mit einem einzigen Valenzelektron erhält man aus Gl. (9.8-18)

$$\vec{\mu} = \langle\, u \,|\, \vec{M} \,|\, u \,\rangle = \left(0, 0, -\mu_\mathrm{B}\, g_j(l)\, m_j\right) = \left(0, 0, \frac{m_j}{j}\, \mu(lj)\right), \tag{9.8-19}$$

wobei n, l, j, m_j die Quantenzahlen des Valenzelektrons sind.

Für die $3\,^2S_{1/2}$-Zustände des Natriumatoms, welche die Zustände niedrigster Energie dieses Atoms sind (s. Abb. 9.10-1), lauten die Quantenzahlen $n = 3, l = 0, j = \frac{1}{2}$, $m_j = \pm\frac{1}{2}$. Damit ergibt sich

$$g_j(l) = g_{1/2}(0) = 2\,, \quad \mu(0\,\tfrac{1}{2}) = -\mu_\mathrm{B}\,, \tag{9.8-20a}$$

$$\vec{\mu} = (0, 0, \mp\mu_\mathrm{B}) \quad \text{für} \quad m_j = \pm\frac{1}{2}\,. \tag{9.8-20b}$$

Das gesamte magnetische Moment des Atoms rührt in diesem Fall vom Spinmoment des Valenzelektrons her ($g_j(l) = g_s$ für $l = 0$; s. auch Gl. (9.8-25b)).

Bemerkungen

Im engeren Sinne wird oft $\mu(lj) = \langle\, M_z \,\rangle_{m_j=j}$ als *magnetisches Moment* bezeichnet. Die Größe $g_j(l)$ stellt den *landéschen g-Faktor* (gyromagnetischen Faktor) für den Gesamtdrehimpuls eines Elektrons dar.

Der Ausdruck (9.8-5) für den Operator des magnetischen Momentes eines Atomelektrons gilt streng nur unter der Annahme eines unendlich schweren Kerns. Berücksichtigt man die Endlichkeit der Kernmasse m_K in der Ordnung $m_\mathrm{e}/m_\mathrm{K}$, so hat man stattdessen

$$\vec{M} = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}c}\,[(1 - \frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{K}})\vec{L} + 2\,\vec{S}\,]\,. \tag{9.8-21}$$

(Siehe z. B. [32]. Das magnetische Spinmoment ist also in dieser Ordnung dasselbe wie für ein freies Elektron. Bei Berücksichtigung quantenfeldtheoretischer Korrekturen ergibt sich allerdings $g_{s,\mathrm{e}} = 2{,}00231930436$ statt des Wertes 2.)

Für ein Atom mit Z' Valenzelektronen hat man nach Gl. (9.8-18) im Rahmen der Zentralfeldnäherung die entsprechenden Beiträge (9.8-17) für die Z' Valenzelektronen zu addieren. Berücksichtigt man näherungsweise weitere (im Zentralpotential [„self-consistent-field“] noch nicht enthaltene) Anteile der Wechselwirkung der Valenzelektronen (LS-Addition, jj-Addition oder „Zwischenkoppelung“; s. [34]), so hat man stattdessen den Erwartungswert

$$\vec{\mu} = \langle\, \tau J M_J \,|\, \sum_{i=1}^{Z'} \vec{M}^{(i)} \,|\, \tau J M_J \,\rangle \tag{9.8-22}$$

zu bilden, wobei $|\,\tau J M_J\,\rangle$ der entsprechende antisymmetrische Z'-Elektronenzustand ist (J, M Quantenzahlen zu $\vec{J}^{\,2}$ und J_z, $\vec{J} = \sum_{i=1}^{Z'} \vec{J}^{(i)}$).

Im Rahmen des Schalenmodells der Atomkerne kann man ähnliche Rechnungen durchführen. Die Neutronen besitzen zwar keine elektrische Ladung, als Träger eines magnetischen Spinmomentes können sie jedoch zum magnetischen Dipolmoment des Kerns beitragen. Für ein Nukleon im Zentralfeld lautet der Operator des magnetischen Momentes (μ_K Kernmagneton; $m_\mathrm{n} \approx m_\mathrm{p}$)

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_\mathrm{p}c}\,(g_l\vec{L} + g_s\vec{S}) = \frac{\mu_\mathrm{K}}{\hbar}\,(g_l\vec{L} + g_s\vec{S}) \tag{9.8-23}$$

mit

$$g_l = \begin{cases} 1 & \text{für Proton} \\ 0 & \text{für Neutron} \end{cases}, \qquad g_s = \begin{cases} 5{,}585695 & \text{für Proton} \\ -3{,}826085 & \text{für Neutron} \end{cases}. \tag{9.8-24}$$

Nach Gl. (6.32-7) erhält man dann anstelle von Gl. (9.8-16) für den Beitrag eines Nukleons

$$\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, M_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \mu_{\mathrm{K}}\, g_j(l)\, m_j = \frac{m_j}{j}\, \mu(lj)\,, \tag{9.8-25a}$$

$$g_j(l) = \frac{g_l + g_s}{2} + \frac{g_l - g_s}{2}\, \frac{l(l+1) - 3/4}{j(j+1)}\,, \qquad \mu(lj) = \mu_{\mathrm{K}}\, g_j(l)\, j\,. \tag{9.8-25b}$$

Das *elektrische Quadrupolmoment eines Atoms oder Kerns* kann man auf analoge Art berechnen. Die sphärischen Standardkomponenten des irreduziblen Tensors $\mathsf{q}^{(2)}$ des elektrischen Quadrupolmomentes eines Z-Elektronenatoms im Zustand $|\,\psi\,\rangle = |\,u\,\rangle$ sind durch

$$q_\mu^{(2)} = \langle\, u \,|\, Q_\mu^{(2)} \,|\, u \,\rangle\,, \tag{9.8-26a}$$

$$Q_\mu^{(2)} = -e\, 2 \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{i=1}^{Z} (R^{(i)})^2\, Y_{2\mu}(\Theta^{(i)}, \Phi^{(i)})\,, \qquad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \tag{9.8-26b}$$

definiert. In der Zentralfeldnäherung erhält man analog zu Gl. (9.8-1)

$$q_\mu^{(2)} = \langle\, u \,|\, Q_\mu^{(2)} \,|\, u \,\rangle = \sum {}^{(1)}\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,|\, (Q_\mu^{(2)})^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle^{(1)}\,. \tag{9.8-27}$$

Die Einteilchenbeiträge wurden in Aufgabe 9.7 berechnet. Für $\mu = \pm 1, \pm 2$ sind alle Summanden in (9.8-27) null (s. Gl. (9.7-20)) und für $\mu = 0$ geben abgeschlossene (nlj)-Unterschalen wegen (9.7-3), (9.7-5) und $\sum_{m_j=-j}^{+j} [3m_j^2 - j(j+1)] = 0$ keinen Beitrag. Mit den Ergebnissen von Aufgabe 9.7 folgt dann insgesamt in der Zentralfeldnäherung

$$q_\mu^{(2)} = 0\,, \qquad \mu = \pm 1, \pm 2\,, \tag{9.8-28a}$$

$$q_0^{(2)} = e \sum_{nljm_j} (n\, l\, j \,|\, R^2 \,|\, n\, l\, j)\, \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{2j(j+1)}\,, \tag{9.8-28b}$$

wobei wieder nur über etwaige nicht abgeschlossene (nlj)-Unterschalen zu summieren ist, und $(n\, l\, j \,|\, R^2 \,|\, n\, l\, j)$ durch Gl. (9.7-17) gegeben ist.

Ersetzt man die Elektronladung $-e$ durch die Protonladung $+e$ und interpretiert man $\sum_{nljm_j}$ als Summe über die nicht abgeschlossenen Protonenschalen – die Neutronen tragen als ungeladene Teilchen nichts bei – so erhält man aus den obigen Gleichungen die Schalenmodell-Ausdrücke für die Kernquadrupolmomente.

9.9* Die Matrixelemente $\langle\, b \,|\, \vec{e} \cdot \vec{D} \,|\, a \,\rangle$, $\langle\, b \,|\, \sum Q_{ij}\, e_i\, k_j \,|\, a \,\rangle$ und $\langle\, b \,|\, (\vec{k} \times \vec{e}) \cdot \vec{M} \,|\, a \,\rangle$ lassen sich als Linearkombinationen von Matrixelementen der sphärischen Komponenten der irreduziblen Tensoroperatoren $\mathsf{D}^{(1)} \mathrel{\widehat{=}} \vec{D}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$ und $\mathsf{M}^{(1)} \mathrel{\widehat{=}} \vec{M}$ schreiben, wobei die Koeffizienten dieser Linearkombinationen von $\vec{e}$ bzw. von $\vec{e}$ und $\vec{k}$ abhängen. Für das

E1- und M1-Matrixelement kann man die betreffende Linearkombination unmittelbar anschreiben (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-23)):

$$\langle\, b \,|\, \vec{e}\cdot\vec{D} \,|\, a \,\rangle = \sum_{\mu=-1}^{+1} (-1)^{\mu}\, e^{(1)}_{-\mu}\, \langle\, b \,|\, D^{(1)}_{\mu} \,|\, a \,\rangle\,, \tag{9.9-1}$$

$$\langle\, b \,|\, (\vec{k}\times\vec{e})\cdot\vec{M} \,|\, a \,\rangle = \sum_{\mu=-1}^{+1} (-1)^{\mu}\, (\vec{k}\times\vec{e})^{(1)}_{-\mu}\, \langle\, b \,|\, M^{(1)}_{\mu} \,|\, a \,\rangle\,. \tag{9.9-2}$$

Für das E2-Matrixelement kann man die Koeffizienten $c_\mu(\vec{e},\vec{k}\,)$ in

$$\langle\, b \,|\, \sum Q_{ij}\, e_i\, k_j \,|\, a \,\rangle = \sum_{\mu=-2}^{+2} c_\mu(\vec{e},\vec{k}\,)\, \langle\, b \,|\, Q^{(2)}_{\mu} \,|\, a \,\rangle \tag{9.9-3}$$

durch Einsetzen von (9.7-34a) bis (9.7-34c) in die linke Gleichungsseite erhalten. Wir benötigen jedoch im Folgenden diese Koeffizienten nicht explizit.

In der Zentralfeldnäherung sind die Energieeigenvektoren eines Z-Elektronen-Atoms Slaterdeterminanten von Z Einelektronzuständen

$$|\, v_{\alpha_i} \,\rangle \equiv |\, n_i\, l_i\, \tfrac{1}{2}\, j_i\, m_{j_i} \,\rangle \quad \text{oder} \quad |\, n_i\, l_i\, \tfrac{1}{2}\, m_{l_i}\, m_{s_i} \,\rangle\,.$$

Handelt es sich speziell um ein Atom mit einem einzigen Valenzelektron und um Strahlungsübergänge, bei denen sich nur der Valenzelektronzustand ändert, so unterscheiden sich $|\, a \,\rangle$ und $|\, b \,\rangle$ lediglich in Bezug auf den Einteilchenzustand mit der größten Einteilchenenergie. Indizieren wir die jeweils Z Einteilchenzustände so, dass die zugehörigen Einteilchenenergien mit wachsendem i gleich bleiben oder anwachsen, so gilt:

$$\begin{aligned} |\, a \,\rangle &= \sqrt{Z!}\, \mathscr{A}\left\{ |\, v_{\alpha_1} \,\rangle^{(1)} |\, v_{\alpha_2} \,\rangle^{(2)} \ldots |\, v_{\alpha_{Z-1}} \,\rangle^{(Z-1)} |\, v_{\alpha_Z} \,\rangle^{(Z)} \right\}, \\ |\, b \,\rangle &= \sqrt{Z!}\, \mathscr{A}\left\{ |\, v_{\alpha_1} \,\rangle^{(1)} |\, v_{\alpha_2} \,\rangle^{(2)} \ldots |\, v_{\alpha_{Z-1}} \,\rangle^{(Z-1)} |\, v_{\alpha'_Z} \,\rangle^{(Z)} \right\}, \end{aligned} \qquad \alpha'_Z \neq \alpha_Z\,. \tag{9.9-4}$$

Natürlich muss auch die zum Quantenzahlensatz α'_Z gehörige Einteilchenenergie von der zum Quantenzahlensatz α_Z gehörigen verschieden sein. Der Betrag der Differenz dieser Einteilchenenergien ergibt dann die Energie $\hbar\omega$ des emittierten oder absorbierten Photons.

Die Multipoloperatoren $\mathsf{D}^{(1)} \mathrel{\hat{=}} \vec{D}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$ und $\mathsf{M}^{(1)} \mathrel{\hat{=}} \vec{M}$ eines Z-Elektronenatoms sind Summen gleicher Operatoren für die einzelnen Elektronen (s. Gl. (9.6-2), (9.8-2) und (9.8-26b)). Nach Aufgabe 7.15(b) reduzieren sich daher die Matrixelemente in (9.9-1) bis (9.9-3) auf Einteilchen-Matrixelemente:

$$\langle\, b \,|\, T^{(\lambda)}_{\mu} \,|\, a \,\rangle = {}^{(1)}\langle\, v_{\alpha'_Z} \,|\, \left(T^{(\lambda)}_{\mu}\right)^{(1)} |\, v_{\alpha_Z} \,\rangle^{(1)}\,, \quad \alpha'_Z \neq \alpha_Z\,; \quad T^{(\lambda)}_{\mu}\colon\ D^{(1)}_{\mu},\ Q^{(2)}_{\mu} \text{ oder } M^{(1)}_{\mu}. \tag{9.9-5}$$

Im Folgenden lasse ich den Index (1) weg, da ausschließlich derartige Einteilchen-Matrixelemente betrachtet werden. (Alle Operatorsymbole wie $\vec{L}$, $\vec{S}$, $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$, $\vec{D}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$, $\vec{M}$ etc. beziehen sich also im Folgenden auf *ein* Teilchen.) Da die Herleitung von Auswahlregeln für E1-, E2- und M1-Übergänge weitgehend analog ist, führe ich sie nur in einem Fall in voller Ausführlichkeit vor.

(α) E1-*Übergänge*

(α1) *Valenzelektronzustände* $|\,n\,l\,\frac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle = |\,n\,l\,m_l\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|\,\frac{1}{2}\,m_s\,\rangle_{\mathrm{S}}$

Wegen der Spinunabhängigkeit der Operatoren

$$D^{(1)}_\mu = -e\,R^{(1)}_\mu = -e\,\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{1\mu}(\Theta,\Phi)\,, \qquad \mu = 0,\pm1 \tag{9.9-6}$$

gilt

$$\langle\, n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m'_l\,m'_s\,|\,D^{(1)}_\mu\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle = \delta_{m'_s m_s}\,{}_{\mathrm{B}}\langle\, n'\,l'\,m'_l\,|\,D^{(1)}_\mu\,|\,n\,l\,m_l\,\rangle_{\mathrm{B}}\,. \tag{9.9-7}$$

$\vec{D}$ bzw. $\mathsf{D}^{(1)}$ ist Vektoroperator (irreduzibler Tensoroperator vom Rang 1) in Bezug auf $\vec{L}$ (s. Gl. (6.27-3) und (A.7-21)). Es ist daher das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24) in der Form

$${}_{\mathrm{B}}\langle\, n'\,l'\,m'_l\,|\,D^{(1)}_\mu\,|\,n\,l\,m_l\,\rangle_{\mathrm{B}} = \langle\, l\,1\,m_l\,\mu\,|\,l'\,m'_l\,\rangle\langle\, n'\,l'\,\|\,\mathsf{D}^{(1)}\,\|\,n\,l\,\rangle \tag{9.9-8}$$

anwendbar. Weiter ist $\vec{R}$ und damit $\vec{D}$ ein ungerader Operator bzgl. räumlicher Inversion,

$$\Pi\,D^{(1)}_\mu\,\Pi^\dagger = -D^{(1)}_\mu, \qquad \mu = 0,\pm1, \tag{9.9-9a}$$

und die Zustände $|\,n\,l\,\frac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle$ sind Eigenzustände von Π (s. (A.2-12)):

$$\Pi\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle = (-1)^l\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle\,. \tag{9.9-9b}$$

Das Matrixelement (9.9-7) ist daher sicher null, falls $l'-l$ gerade ist (s. Aufgabe 2.2(c)).

Diese Eigenschaft von (9.9-7), (9.9-8) muss offenbar in irgendeiner Form im reduzierten Matrixelement $\langle\, n'\,l'\,\|\,\mathsf{D}^{(1)}\,\|\,n\,l\,\rangle$ enthalten sein. In Aufgabe 6.28 wurde das reduzierte Matrixelement des Vektoroperators $\vec{R}$ bzw. $\mathsf{R}^{(1)}$ explizit berechnet und es wurde dabei (6.28-8) erhalten. Wegen (6.28-10) ist dieser Ausdruck tatsächlich für gerades $l'-l$ null.

Für die Matrixelemente (9.9-7) von $D^{(1)}_\mu$, μ fest, ergeben sich somit die folgenden Auswahlregeln:

(I) Aus dem Clebsch-Gordan-Koeffizienten in Gl. (9.9-8) folgt $|l-1| \le l' \le l+1 \;\Rightarrow$ $\Delta l \equiv l'-l = 0,\pm1$ und $0 \to 0$ „verboten“ (d. h. $(l',l) \neq (0,0)$). Weiter folgt daraus $\Delta m_l \equiv m'_l - m_l = \mu$.

(II) Aus (9.9-9) (bzw. aus dem reduzierten Matrixelement in (9.9-8)) folgt Δl ungerade.

(III) Aus (9.9-7) folgt $\Delta m_s \equiv m'_s - m_s = 0$.

Sind diese Auswahlregeln für ein Matrixelement des Operators $D^{(1)}_\mu$, μ fest, erfüllt, so sind sie für die Matrixelemente der Operatoren $D^{(1)}_{\mu'}$ mit $\mu' \neq \mu$ wegen Verletzung der

Δm_l-Regel *nicht* erfüllt. In (9.9-1) kann daher höchstens einer der drei Summanden von null verschieden sein. Voraussetzung dafür, dass das Matrixelement $\langle\, b \,|\, \vec{e}\cdot\vec{D} \,|\, a \,\rangle$ und damit die Übergangszahl pro Zeiteinheit von null verschieden sein kann, ist somit die Erfüllung der Auswahlregeln

$$\boxed{\underline{\text{E1}}\colon\ \Delta l = \pm 1;\ \Delta m_l = 0, \pm 1;\ \Delta m_s = 0;\\ \text{(keine Einschränkung bzgl. } \Delta n\text{)}.} \tag{9.9-10}$$

(α2) *Valenzelektronzustände* $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$
Da die Operatoren D_i bzw. $D^{(1)}_\mu$ mit den Komponenten von $\vec{S}$ vertauschen, folgt aus

$$[L_j, D_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} D_l \quad \text{(s. Gl. (6.27-3)) auch} \quad [J_j, D_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} D_l\,. \tag{9.9-11}$$

Der Operator $\vec{D}$ bzw. $\mathsf{D}^{(1)}$ ist somit auch Vektoroperator in Bezug auf $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (s. (A.7-21)), und das Wigner-Eckart-Theorem (A.7-24) ist auch in der Form

$$\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m'_j \,|\, D^{(1)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m_j\, \mu \,|\, j' m'_j \,\rangle \langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' \,\|\, \mathsf{D}^{(1)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle \tag{9.9-12}$$

anwendbar. Weiter gilt wegen (9.7-6), (9.7-7) und (A.2-12) auch

$$\Pi \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = (-1)^l \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle\,. \tag{9.9-13}$$

Aus den Transformationseigenschaften (9.9-9a) und (9.9-13) folgt wieder die Auswahlregel Δl ungerade. (Diese muss offenbar wieder im reduzierten Matrixelement „versteckt“ sein.) Für die Matrixelemente (9.9-12) von $D^{(1)}_\mu$, μ fest, ergeben sich somit die folgenden Auswahlregeln:

(I′) Aus dem Clebsch-Gordan-Koeffizienten in (9.9-12) folgt $\Delta j = 0, \pm 1$ ($0 \to 0$ „verboten“ braucht man nicht anzumerken, da j, j' halbzahlig sind) und $\Delta m_j = \mu$.

(II′) Aus (9.9-9a) und (9.9-13) (bzw. aus dem reduzierten Matrixelement in (9.9-12)) folgt Δl ungerade.

Für die Matrixelemente $\langle\, b \,|\, \vec{e}\cdot\vec{D} \,|\, a \,\rangle$ erhält man also (da wegen der Δm_j-Regel wieder höchstens einer der drei Summanden in Gl. (9.9-1) von null verschieden sein kann) die Auswahlregeln

$$\boxed{\underline{\text{E1}}\colon\ \Delta l = \pm 1;\ \Delta j = 0, \pm 1;\ \Delta m_j = 0, \pm 1;\\ \text{(keine Einschränkung bzgl. } \Delta n\text{)}.} \tag{9.9-14}$$

Die Einschränkung von Δl ungerade auf $\Delta l = \pm 1$ folgt dabei aus $j = l \pm \frac{1}{2} \Rightarrow$ $\Delta l = \Delta j$, $\Delta j \pm 1$ und $\Delta j = 0, \pm 1$.

(β) E2-*Übergänge*

($\beta 1$) *Valenzelektronzustände* $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle = |\, n\, l\, m_l \,\rangle_{\rm B} |\, \frac{1}{2}\, m_s \,\rangle_{\rm S}$

Spinunabhängigkeit von

$$Q^{(2)}_\mu = -e\, 2 \sqrt{\frac{4\pi}{5}}\, R^2\, Y_{2\mu}(\Theta, \Phi)\,, \qquad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \quad \Rightarrow \tag{9.9-15}$$

$$\langle\, n' l'\, \tfrac{1}{2}\, m'_l\, m'_s \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle = \delta_{m'_s m_s}\, {}_{\rm B}\langle\, n' l' m'_l \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, m_l \,\rangle_{\rm B}\,. \tag{9.9-16}$$

$\mathsf{Q}^{(2)}$ irreduzibler Tensoroperator vom Rang 2 in Bezug auf $\vec{L}$ $\Rightarrow$ Wigner-Eckart-Theorem

$${}_{\rm B}\langle\, n' l' m'_l \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, m_l \,\rangle_{\rm B} = \langle\, l\, 2\, m_l\, \mu \,|\, l' m'_l \,\rangle \langle\, n' l' \,\|\, \mathsf{Q}^{(2)} \,\|\, n\, l \,\rangle\,; \tag{9.9-17}$$

$\mathsf{Q}^{(2)}$ gerader Operator bzgl. räumlicher Inversion (s. (A.2-12)), d. h.

$$\Pi\, Q^{(2)}_\mu\, \Pi^\dagger = Q^{(2)}_\mu\,, \qquad \mu = 0, \pm 1, \pm 2\,, \tag{9.9-18}$$

und Zustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle$ Eigenzustände von Π (s. Gl. (9.9-9b)) $\Rightarrow$

$$\langle\, n' l'\, \tfrac{1}{2}\, m'_l\, m'_s \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle = 0\,, \quad \text{falls } \Delta l \text{ ungerade.} \tag{9.9-19}$$

Eine analoge Argumentation wie im Fall ($\alpha 1$) liefert für die Matrixelemente $\langle\, b \,|\, \sum Q_{ij}\, e_i\, k_j \,|\, a \,\rangle$ von Gl. (9.9-3) die Auswahlregeln

$$\boxed{\begin{aligned} &\underline{\text{E2}}\colon\ \Delta l = 0, \pm 2\ \ (0 \to 0\ \text{„verboten“});\\ &\qquad \Delta m_l = 0, \pm 1, \pm 2;\ \ \Delta m_s = 0\,;\\ &\qquad (\text{keine Einschränkung bzgl. } \Delta n). \end{aligned}} \tag{9.9-20}$$

($\beta 2$) *Valenzelektronzustände* $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$

$\mathsf{Q}^{(2)}$ irreduzibler Tensoroperator vom Rang 2 in Bezug auf $\vec{J}$ (s. den ersten Absatz von Aufgabe 9.7 $\Rightarrow$ Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle\, n' l'\, \tfrac{1}{2}\, j' m'_j \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \langle\, j\, 2\, m_j\, \mu \,|\, j' m'_j \,\rangle \langle\, n' l'\, \tfrac{1}{2}\, j' \,\|\, \mathsf{Q}^{(2)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle\,; \tag{9.9-21}$$

(9.9-13), (9.9-18) $\Rightarrow$

$$\langle\, n' l'\, \tfrac{1}{2}\, j' m'_j \,|\, Q^{(2)}_\mu \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = 0\,, \quad \text{falls } \Delta l \text{ ungerade.} \tag{9.9-22}$$

Unter Beachtung von $\Delta l = \Delta j$, $\Delta j \pm 1$ folgen aus diesen Beziehungen für die Matrixelemente $\langle\, b \,|\, \sum Q_{ij}\, e_i\, k_j \,|\, a \,\rangle$ von Gl. (9.9-3) die Auswahlregeln

$$\boxed{\begin{aligned} &\underline{\text{E2}}\colon\ \Delta l = 0, \pm 2\ \ (0 \to 0\ \text{„verboten“});\\ &\qquad \Delta j = 0, \pm 1, \pm 2\ \ (\tfrac{1}{2} \to \tfrac{1}{2}\ \text{„verboten“});\\ &\qquad \Delta m_j = 0, \pm 1, \pm 2;\\ &\qquad (\text{keine Einschränkung bzgl. } \Delta n). \end{aligned}} \tag{9.9-23}$$

(γ) M1-*Übergänge*

(γ1) *Valenzelektronzustände* $|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle = |\,n\,l\,m_l\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|\,\tfrac{1}{2}\,m_s\,\rangle_{\mathrm{S}}$

Lösungsweg 1: Benützung des Wigner-Eckart-Theorems

$\vec{L}$ ist Vektoroperator bzgl. $\vec{L}$ und $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$, nicht aber bzgl. $\vec{S}$, analog ist $\vec{S}$ Vektoroperator bzgl. $\vec{S}$ und $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$, nicht aber bzgl. $\vec{L}$. Es ist daher $\vec{M}$ Vektoroperator bzgl. $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$, *nicht* aber in Bezug auf $\vec{L}$ oder $\vec{S}$. Will man das Wigner-Eckart-Theorem auf die Matrixelemente $\langle\,n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m_l'\,m_s'\,|\,M_\mu^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle$ anwenden, so muss man diese daher zuerst in zwei Summanden aufspalten, indem man $M_\mu^{(1)}=-(\mu_{\mathrm{B}}/\hbar)(L_\mu^{(1)}+2\,S_\mu^{(1)})$ einsetzt:

$$\begin{aligned}\langle\,n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m_l'\,m_s'\,|\,M_\mu^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle \;=\; &-\frac{\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar}\underbrace{\langle\,n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m_l'\,m_s'\,|\,L_\mu^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle}\\ &\qquad \delta_{m_s'm_s}\langle\,l\,1\,m_l\,\mu\,|\,l'm_l'\,\rangle\langle\,n'\,l'\,\|\,\mathsf{L}^{(1)}\,\|\,n\,l\,\rangle\\ &-\frac{\mu_{\mathrm{B}}}{\hbar}\,2\underbrace{\langle\,n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m_l'\,m_s'\,|\,S_\mu^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle}\,.\\ &\qquad \delta_{n'n}\,\delta_{l'l}\,\delta_{m_l'm_l}\langle\,\tfrac{1}{2}\,1\,m_s\,\mu\,|\,\tfrac{1}{2}\,m_s'\,\rangle\langle\,\tfrac{1}{2}\,\|\,\mathsf{S}^{(1)}\,\|\,\tfrac{1}{2}\,\rangle\end{aligned}\tag{9.9-24}$$

Mit dem Ergebnis (6.30-5) von Aufgabe 6.30 gibt dies

$$\begin{aligned}&\langle\,n'\,l'\,\tfrac{1}{2}\,m_l'\,m_s'\,|\,M_\mu^{(1)}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle\\ &\qquad=-\mu_{\mathrm{B}}\,\delta_{n'n}\,\delta_{l'l}\Big\{\delta_{m_l',\,m_l+\mu}\,\delta_{m_s'm_s}\sqrt{l(l+1)}\,\langle\,l\,1\,m_l\,\mu\,|\,l,m_l+\mu\,\rangle\\ &\qquad\qquad+\delta_{m_l'm_l}\,\delta_{m_s',\,m_s+\mu}\,2\sqrt{\tfrac{3}{4}}\,\langle\,\tfrac{1}{2}\,1\,m_s\,\mu\,|\,\tfrac{1}{2},m_s+\mu\,\rangle\Big\}\,.\end{aligned}\tag{9.9-25}$$

Wie man daraus sieht, kann in Gl. (9.9-2) ebenfalls höchstens einer der drei Summanden von null verschieden sein und für das Matrixelement $\langle\,b\,|\,(\vec{k}\times\vec{e}\,)\cdot\vec{M}\,|\,a\,\rangle$ ergeben sich die Auswahlregeln

$$\begin{array}{l}\underline{\mathrm{M1}}\colon\;\; \Delta n=0\,;\;\; \Delta l=0\,;\;\; \Delta m_l=\pm1 \;\;\text{und}\;\; \Delta m_s=0\\ \qquad\qquad\qquad\qquad\quad \text{oder}\;\; \Delta m_l=0 \;\;\;\text{und}\;\; \Delta m_s=\pm1\,.\end{array}\tag{9.9-26}$$

Für $\Delta m_l=0$, $\Delta m_s=0$ kann zwar das Matrixelement des Operators $M_0^{(1)}$ von null verschieden sein, mit $\Delta n=0$, $\Delta l=0$ wäre aber die Voraussetzung $|\,b\,\rangle\neq|\,a\,\rangle$ verletzt (kein Strahlungsübergang).

Eine weitere notwendige Bedingung für einen M1-Übergang ist $E_b\neq E_a$.

Die Auswahlregel $\Delta l=0$ ($\Rightarrow$ kein Paritätswechsel des Atomzustandes) ist mit dem Transformationsverhalten

$$\Pi\,M_\mu^{(1)}\Pi^\dagger=M_\mu^{(1)},\qquad \mu=0,\pm1\tag{9.9-27}$$

der Komponenten von $\vec{M}$ bzw. $\mathsf{M}^{(1)}$ bei räumlicher Inversion im Einklang (gerader Operator).

Aus $\Pi\vec{R}\Pi^\dagger = -\vec{R}$, $\Pi\vec{P}\Pi^\dagger = -\vec{P}$ folgt $\Pi\vec{L}\Pi^\dagger = \Pi(\vec{R}\times\vec{P})\Pi^\dagger = \vec{L}$, und $\Pi\vec{S}\Pi^\dagger = \vec{S}$ gilt definitionsgemäß.

Lösungsweg 2: Explizite Berechnung der Matrixelemente

Da man mithilfe der Beziehungen (A.7-22) und (A.7-4) von Anhang A.7 alle Matrixelemente unmittelbar explizit anschreiben kann, benötigt man bei diesem speziellen Beispiel weder das Wigner-Eckart-Theorem, noch das Transformationsverhalten bei räumlicher Inversion. Aus

$$\begin{aligned}\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, m_l' m_s' \,|\, M_{\pm1}^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle \\ = -\mu_{\mathrm{B}}\Big[\mp\frac{1}{\sqrt{2}}\Big]\,\delta_{n'n}\,\delta_{l'l}\Big\{\delta_{m_l',\,m_l\pm1}\,\delta_{m_s'm_s}\sqrt{(l\mp m_l)(l\pm m_l+1)} \\ + \delta_{m_l'm_l}\,\delta_{m_s',\,m_s\pm1}\,2\sqrt{(\tfrac{1}{2}\mp m_s)(\tfrac{1}{2}\pm m_s+1)}\Big\}\,,\end{aligned} \tag{9.9-28a}$$

$$\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, m_l' m_s' \,|\, M_0^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle = -\mu_{\mathrm{B}}(m_l+2m_s)\,\delta_{n'n}\,\delta_{l'l}\,\delta_{m_l'm_l}\delta_{m_s'm_s} \tag{9.9-28b}$$

erhält man unmittelbar die Auswahlregeln (9.9-26).

Die Beziehungen (9.9-28) kann man auch erhalten, indem man in die Gleichung (9.9-25) die Clebsch-Gordan-Koeffizienten von Tabelle A.7-2 einsetzt.

(γ2) *Valenzelektronzustände* $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$

$\vec{M} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{M}^{(1)}$ ist Vektoroperator bzgl. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ $\Rightarrow$ Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m_j' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \langle\, j\, 1\, m_j\, \mu \,|\, j' m_j' \,\rangle \langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' \,\|\, \mathsf{M}^{(1)} \,\|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j \,\rangle\,; \tag{9.9-29}$$

(9.9-13), (9.9-27) $\Rightarrow$

$$\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m_j' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = 0\,, \quad \text{falls } \Delta l \text{ ungerade.} \tag{9.9-30}$$

Die wellenmechanischen Operatoren $\widehat{M}_\mu^{(1)\{\vec{r}\,m_s\}}$ wirken nur auf den Winkel-Spin-Teil (9.7-7) der Spinorfunktionen (9.7-6). Es ist daher für die Berechnung der Matrixelemente $\langle\, n' l' \frac{1}{2}\, j' m_j' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ gleichgültig, ob man relativistische Korrekturen der Radialfunktionen einbezieht, also j-abhängige Radialfunktionen $R_{nlj}(r)$ wie in (9.7-6) annimmt, oder „nichtrelativistische“ Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ zugrunde legt. Im Hinblick auf diese Tatsache können wir für die Rechnung Einelektronzustände $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ verwenden, welche sich in der Form (9.8-10) schreiben lassen. Da aber die Matrixelemente $\langle\, n' l' \frac{1}{2}\, m_l' m_s' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle$ zu $\delta_{n'n}\,\delta_{l'l}$ proportional sind (s. Gl. (9.9-25) bzw. (9.9-28)), muss

$$\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m_j' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle = \delta_{n'n}\,\delta_{l'l}\,\langle\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j' m_j' \,|\, M_\mu^{(1)} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle \tag{9.9-31}$$

gelten. Es ergeben sich somit für die Matrixelemente $\langle\, b \,|\, (\vec{k}\times\vec{e})\cdot\vec{M} \,|\, a \,\rangle$ die Auswahlregeln

$$\begin{aligned}&\underline{\text{M1}}\colon\ \Delta n = 0\,;\ \ \Delta l = 0\,; \\ &\qquad \Delta j = 0, \pm1\,;\ \Delta m_j = 0, \pm1\,; \\ &\qquad (\Delta j, \Delta m_j) \neq (0,0)\,.\end{aligned} \tag{9.9-32}$$

Bemerkungen

Die hier diskutierten Matrixelemente der Operatoren $\vec{D} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{D}^{(1)}$, $\mathsf{Q}^{(2)}$ und $\vec{M} \mathrel{\widehat{=}} \mathsf{M}^{(1)} \ldots$ der *statischen Multipolmomente* bestimmen nur dann die Übergangszahl, wenn die Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$ der elektromagnetischen Strahlung groß ist gegen die Atomabmessungen (Vernachlässigung von Retardierungseffekten; s. z. B. [34]). Diese Bedingung ist für die hier betrachteten Übergänge erfüllt ($\lambda \gtrsim 10^{-5}$ cm).

In den optischen Spektren der Atome findet man experimentell nur selten Linien, welche von E2- oder M1-Übergängen herrühren. Der Grund dafür ist, dass die Intensität der Spektrallinien zu E2- und M1-Übergängen i. Allg. um sechs bis acht Größenordnungen kleiner ist, als jene zu E1-Übergängen. (Für Röntgenstrahlung ist die intensitätsmäßige Bevorzugung der E1-Strahlung bei weitem nicht so ausgeprägt.)

Die Kennzeichnung der Valenzelektronzustände durch die Quantenzahlen n, l, m_l, m_s ist immer dann möglich, wenn man von der Feinstruktur des Spektrums eines isolierten Atoms absehen kann oder wenn sich das Atom in einem starken äußeren Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$ befindet (Paschen-Back-Niveaus; s. Abb. 9.11-1). Bei Berücksichtigung der Feinstruktur des Spektrums eines isolierten Atoms hat man hingegen die Quantenzahlen n, l, j, m_j zur Kennzeichnung zu verwenden, desgleichen bei Vorliegen eines schwachen äußeren Magnetfeldes $\vec{B} = (0, 0, B)$ (Zeemanniveaus; s. Abb. 9.10-1). Aufgrund der Auswahlregeln (9.9-26), (9.9-32) sind M1-Übergänge überhaupt nur zwischen Feinstrukturniveaus bzw. zwischen Paschen-Back-Niveaus oder zwischen Zeemanniveaus möglich, da für einen Übergang $a \to b$ unter Emission oder Absorption eines Photons $E_b \neq E_a$ Voraussetzung ist. (Siehe dazu die Aufgabe 9.10.)

Die Erfüllung der Auswahlregeln bedeutet noch nicht, dass die betreffende Übergangszahl für *jede* Richtung des Kreiswellenzahlvektors $\vec{k}$ von null verschieden sein muss. (Siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 9.10 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.11.)

Bei Atomen mit mehreren Valenzelektronen ist die Zentralfeldnäherung für die Beschreibung der Spektren nicht brauchbar. Man kann zwar in vielen Fällen den Energieniveaus noch eine einzige Konfiguration zuordnen, muss aber die Wechselwirkung zwischen den Valenzelektronen störungstheoretisch berücksichtigen (Coulombwechselwirkung [vermindert um den bereits im „self-consistent-field“ enthaltenen Anteil], Spin-Bahn-Wechselwirkung, Spin-Spin-Wechselwirkung etc.; s. dazu Aufgabe 9.12). In den einfachsten Fällen führt dies zur LS- bzw. jj-Addition der Drehimpulse der Valenzelektronen. Die Herleitung von Auswahlregeln für die jeweiligen Quantenzahlen kann analog durchgeführt werden. (Benützung des Transformationsverhaltens der Multipoloperatoren und Zustandsvektoren bei räumlichen Drehungen [Wigner-Eckart-Theorem] und bei räumlicher Inversion [Parität]; s. z. B. [34].) Unmittelbar einzusehen ist die Auswahlregel

$$\Delta S = 0 \tag{9.9-33}$$

(„keine Interkombinationslinien“). Für E1- und E2-Strahlung folgt sie aus der Spinunabhängigkeit der Operatoren $\mathsf{D}^{(1)}$ bzw. $\mathsf{Q}^{(2)}$, für M1-Strahlung aus der Wirkung der Operatoren

$$M_0^{(1)} = -\frac{e}{2m_e c}\,(L_z + 2\,S_z)\,, \qquad M_{\pm 1}^{(1)} = -\frac{e}{2m_e c}\left(\mp\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(L_\pm + 2\,S_\pm)$$

auf die LS-Vektoren $|\,\gamma L S M_L M_S\,\rangle$ bzw. $|\,\gamma L S J M_J\,\rangle$.

9.10* Legt man für die Beschreibung der Spektren der Alkaliatome das Modell eines einzelnen Elektrons in einem geeigneten fixen Zentralfeld zugrunde (Valenzelektron in abgeschirmtem Coulombfeld)[10], so lautet der Hamiltonoperator des Problems für den Fall, dass ein äußeres Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$, $B > 0$, vorhanden ist,

$$H = H_0 + W_{\mathrm{FS}} + W_{\mathrm{B}}\,; \qquad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R)\,; \tag{9.10-1a}$$

$$W_{\mathrm{FS}} = \Gamma(R)\,\vec{L}\cdot\vec{S}\,, \qquad \Gamma(R) := \frac{1}{2m_{\mathrm{e}}^2 c^2}\,\frac{1}{R}\,\frac{dV(R)}{dR}\,; \tag{9.10-1b}$$

$$W_{\mathrm{B}} = -\vec{M}\cdot\vec{B} = \frac{\mu_{\mathrm{B}} B}{\hbar}\,(L_z + 2\,S_z)\,, \qquad \mu_{\mathrm{B}} := \frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}\,. \tag{9.10-1c}$$

Bezüglich der relativistischen Massenkorrektur und des Darwinterms s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

Die Elektronenkonfiguration der abgeschlossenen Schalen des Natriumatoms lautet $1s^2\,2s^2\,2p^6$, die niedrigstmöglichen Valenzelektronzustände sind entsprechend der $3s$- und $3p$-Zustand von H_0, und die niedrigsten Energieterme des Natriumatoms sind die Terme $3\,^2S$ und $3\,^2P$. (Die weitere Termfolge lautet $4\,^2S$, $3\,^2D$, $4\,^2P$; s. z. B. [34].)

Im Falle eines hinreichend schwachen Magnetfeldes kann W_{B} als schwache „Störung“ von $H_0 + W_{\mathrm{FS}}$ angesehen werden. (Siehe dazu auch die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.) Man kann dann das Eigenwertproblem von H näherungsweise in den folgenden Schritten (a) und (b) lösen.

(a) Feinstrukturaufspaltung der Terme $\mathsf{n}\,^2\mathsf{L}$: Feinstrukturniveaus $\mathsf{n}\,^2\mathsf{L}_\mathsf{j}$

Berücksichtigt man W_{FS} in erster Ordnung Störungstheorie als „Störung“ von H_0, so hat man gemäß Anhang A.6, Gl. (A.6-10) bis (A.6-13) die Matrix $\widehat{W}_{\mathrm{FS}}$ von W_{FS} im Eigenraum $\mathscr{H}(n\,^2L)$ zum betrachteten Eigenwert E^0_{nl} (Term $n\,^2L$) von H_0 zu „diagonalisieren“. Wählt man in diesem $2(2l+1)$-dimensionalen Teilraum

$$\{\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle,\ j = \tfrac{1}{2} \text{ für } l = 0 \text{ bzw. } j = l \pm \tfrac{1}{2} \text{ für } l = 1, 2, \ldots, n-1;\ m_j = j, j-1, \ldots, -j\,\}$$

als Basissystem, wobei (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-26))

$$|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle \;=\; \sum_{m_s=\pm 1/2} |\,n\,l, m_j - m_s\,\rangle_{\mathrm{B}}\,|\,\tfrac{1}{2}\,m_s\,\rangle_{\mathrm{S}}\,\langle\,l\,\tfrac{1}{2}, m_j - m_s, m_s\,|\,j\,m_j\,\rangle\,, \tag{9.10-2a}$$

$${}_{\mathrm{B}}\langle\,\vec{r}\,|\,n l m_l\,\rangle_{\mathrm{B}} \;=\; R_{nl}(r)\,Y_{lm_l}(\Omega)\,, \tag{9.10-2b}$$

$$\widehat{u}_{nl\frac{1}{2}jm_j}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\,\widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}(\Omega)\,, \qquad \widehat{Y}^{(j)}_{lm_j}(\Omega) \text{ s. Gl. (9.7-7)} \tag{9.10-2c}$$

[10] Bezüglich des Charakters und der Güte dieser Näherung vom Standpunkt des Schalenmodells siehe z. B. [32].

gilt, so ist $\widehat{W}_{\mathrm{FS}}$ wegen $\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$ bereits Diagonalmatrix. Für die Diagonalelemente erhält man

$$\begin{aligned}\epsilon^{(1)}(nlj) &= \langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j \,|\, \Gamma(R)\,\vec{L}\cdot\vec{S} \,|\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j \,\rangle \\ &= \frac{1}{2}\Big[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\Big]\,\hbar^2\,\langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j \,|\, \Gamma(R) \,|\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j \,\rangle \\ &= \frac{1}{2}\Big[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\Big]\,\hbar^2 \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \Gamma(r)\Big[R_{nl}(r)\Big]^2 .\end{aligned}$$

Für die Terme $3\,{}^2S$ und $3\,{}^2P$ folgt damit speziell

$$E^{[1]}(n\,{}^2L_j) = E^0_{nl} + \frac{1}{2}\Big[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\Big]\,\zeta(nl)\,, \tag{9.10-3a}$$

$$\zeta(nl) \equiv \hbar^2\,(n\,l\,|\,\Gamma(R)\,|\,n\,l) := \hbar^2 \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \Gamma(r)\Big[R_{nl}(r)\Big]^2, \tag{9.10-3b}$$

$$l = 0\,,\;\; j = \frac{1}{2}\,;\quad l = 1, 2, \ldots, n-1\,,\;\; j = l \pm \frac{1}{2}\,. \tag{9.10-3c}$$

Für die Feinstrukturniveaus folgt daher in erster Ordnung Störungstheorie

$$E^{[1]}(3\,{}^2S_{1/2}) = E^0_{3,0} + 0\cdot\zeta(3,0) = E^0_{3,0}\,, \tag{9.10-4a}$$

$$E^{[1]}(3\,{}^2P_{1/2}) = E^0_{3,1} - \zeta(3,1)\,, \tag{9.10-4b}$$

$$E^{[1]}(3\,{}^2P_{3/2}) = E^0_{3,1} + \tfrac{1}{2}\,\zeta(3,1)\,. \tag{9.10-4c}$$

Bezüglich $\zeta(3,0)$ s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe.

Abb. 9.10-1 zeigt die erhaltenen Feinstrukturniveaus und die zugehörigen Vielfachheiten. Da die Vielfachheit für gegebenes j durch $2j+1$ gegeben ist, folgt allgemein, dass der „Termschwerpunkt“ bei der Aufspaltung eines $n\,{}^2L$-Terms erhalten bleibt, denn es gilt

$$\sum_{j=l\pm 1/2} (2j+1)\Big[j(j+1) - l(l+1) - \tfrac{3}{4}\Big] = 0\,.$$

(b) Zeemanaufspaltung der Feinstrukturniveaus $\mathsf{n\,{}^2L_j}$

$H_0 + W_{\mathrm{FS}}$ vertauscht mit den Operatoren $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, $\vec{J}^2$ und J_z, es können daher die exakten Eigenvektoren von $H_0 + W_{\mathrm{FS}}$ durch die Quantenzahlen l, $s = \frac{1}{2}$, j und m_j gekennzeichnet werden. Da bei einem isolierten Atom keine Raumrichtung ausgezeichnet ist, sind die exakten Eigenwerte von $H_0 + W_{\mathrm{FS}}$ bzgl. m_j entartet: $E(n\,{}^2L_j)$.

Behandelt man W_{B} in erster Ordnung Störungstheorie als schwache „Störung“ von $H_0 + W_{\mathrm{FS}}$, so hat man die Matrix $\widehat{W}_{\mathrm{B}}$ von W_{B} im $(2j+1)$-dimensionalen Eigenraum $\mathscr{H}(n\,{}^2L_j)$ zu einem gegebenen Feinstrukturniveau $n\,{}^2L_j$ zu „diagonalisieren“. Aufgrund der Vertauschbarkeit von W_{B} mit J_z ist diese Matrix bereits Diagonalmatrix, wenn

man in $\mathscr{H}(n\,^2L_j)$ das Basissystem $\{\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle,\ m_j = j, j-1, \ldots, -j\,\}$ wählt (s. auch Gl. (9.9-29) mit $\mu = 0$), und nach Gl. (9.8-16) gilt

$$\langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j'\,|\,W_\mathrm{B}\,|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle = \delta_{m_j' m_j}\,\mu_\mathrm{B} B\,g_j(l)\,m_j\,, \tag{9.10-5}$$

wobei $g_j(l)$ der *landésche g-Faktor* (gyromagnetische Faktor) für den Gesamtdrehimpuls des Valenzelektrons ist. Somit folgt für die *Zeemanniveaus* zu einem gegebenen Feinstrukturniveau in erster Ordnung Störungstheorie

$$E^{[1]}(n\,^2L_j, m_j) = E(n\,^2L_j) + \mu_\mathrm{B} B\,g_j(l)\,m_j\,, \qquad m_j = j, j-1, \ldots, -j\,; \tag{9.10-6a}$$

$$g_j(l) = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} > 0\,. \tag{9.10-6b}$$

Die Energien von Gl. (9.10-3) stellen störungstheoretische Näherungswerte für die Energieeigenwerte $E(n\,^2L_j)$ in Gl. (9.10-6) dar.

Der Leser beachte, dass es für die Berechnung der *Energiekorrekturen* gemäß Gl. (9.10-5) nicht darauf ankommt, ob man die Vektoren $|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,j\,m_j\,\rangle$ als *exakte* Eigenvektoren von $H_0 + W_\mathrm{FS}$ interpretiert (Spinorfunktionen der Form (9.7-6), (9.7-7)) oder als jene Eigenvektoren von H_0, welche gemäß Punkt (a) W_FS im Eigenraum $\mathscr{H}(n\,^2L)$ „diagonalisieren“ und entsprechend die störungstheoretische Näherung nullter Ordnung für die exakten Eigenvektoren von $H_0 + W_\mathrm{FS}$ bilden (Spinorfunktionen der Form (9.10-2c)). Der Grund dafür ist, dass der wellenmechanische Operator $\widehat{W}_\mathrm{B}^{\{\vec{r} m_s\}}$ nur auf den Winkel-Spin-Teil der Spinorfunktionen wirkt.

Für die Feinstrukturniveaus $3\,^2S_{1/2}$, $3\,^2P_{1/2}$ und $3\,^2P_{3/2}$ erhält man wegen

$$g_{1/2}(0) = 2 = \frac{6}{3}\,, \qquad g_{1/2}(1) = \frac{2}{3}\,, \qquad g_{3/2}(1) = \frac{4}{3} \tag{9.10-7}$$

die Zeemanaufspaltung (s. Abb. 9.10-1)

$$E^{[1]}(3\,^2S_{1/2}, m_j) = E(3\,^2S_{1/2}) + \mu_\mathrm{B} B\,\frac{6}{3}\,m_j\,, \qquad m_j = \pm\frac{1}{2}\,; \tag{9.10-8a}$$

$$E^{[1]}(3\,^2P_{1/2}, m_j) = E(3\,^2P_{1/2}) + \mu_\mathrm{B} B\,\frac{2}{3}\,m_j\,, \qquad m_j = \pm\frac{1}{2}\,; \tag{9.10-8b}$$

$$E^{[1]}(3\,^2P_{3/2}, m_j) = E(3\,^2P_{3/2}) + \mu_\mathrm{B} B\,\frac{4}{3}\,m_j\,, \qquad m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}\,. \tag{9.10-8c}$$

Wie man aus Gl. (9.10-6) sieht, wird die Entartung der Energieniveaus eines Atoms mit einem einzigen Valenzelektron in einem schwachen Magnetfeld gänzlich aufgehoben. Die „Termschwerpunkte“ bleiben auch bei der Zeemanaufspaltung erhalten.

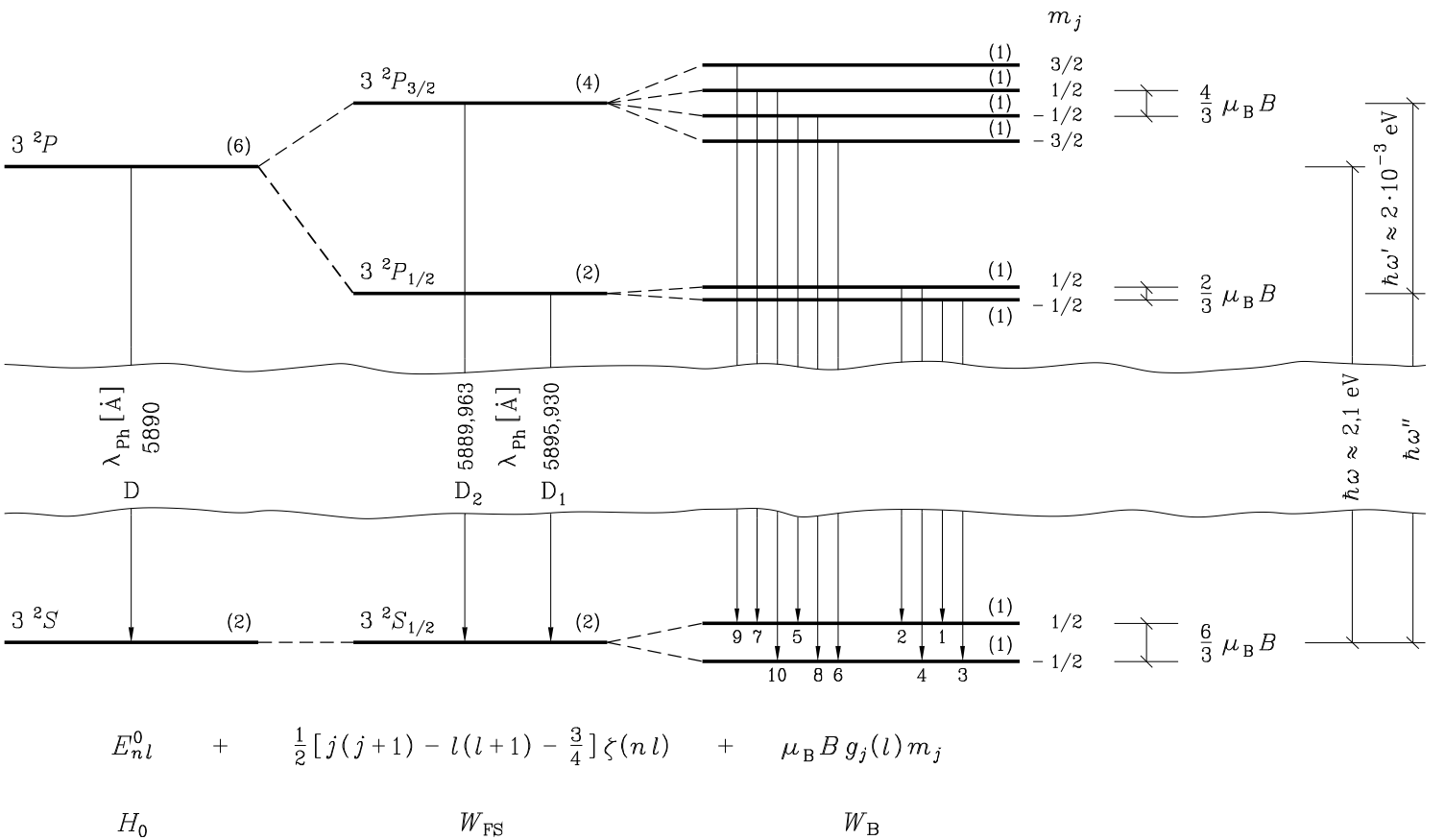


Abb. 9.10-1: Feinstruktur und Zeemanaufspaltung der niedrigsten Energieterme des Natriumatoms. In runden Klammern sind die Vielfachheiten angegeben, die Pfeile geben die aufgrund der Auswahlregeln möglichen E1-Strahlungsübergänge an. Die Ziffern 1 bis 10 bei den Pfeilen beziehen sich auf die Kreisfrequenzen von Gl. (9.10-9).

(c) E1-Strahlungsübergänge

Ohne äußeres Magnetfeld sind die in Abb. 9.10-1 mit D_1 bzw. D_2 bezeichneten E1-Übergänge möglich. In einem schwachen äußeren Magnetfeld gibt es aufgrund der Auswahlregeln (9.9-14) zehn erlaubte E1-Übergänge (s. Abb. 9.10-1), zu denen zehn verschiedene Übergangsfrequenzen gehören (ω', ω''; $\omega''' = \omega' + \omega''$ s. Abb. 9.10-1):

$$\omega_{1,4} = \omega'' \mp \frac{4}{3}\omega_\mathrm{L}\,, \qquad \omega_{2,3} = \omega'' \mp \frac{2}{3}\omega_\mathrm{L}\,; \qquad \omega_{5,10} = \omega''' \mp \frac{5}{3}\omega_\mathrm{L}\,, \tag{9.10-9a}$$

$$\omega_{6,9} = \omega''' \mp \frac{3}{3}\omega_\mathrm{L}\,, \qquad \omega_{7,8} = \omega''' \mp \frac{1}{3}\omega_\mathrm{L}\,; \qquad \omega_\mathrm{L} := \frac{\mu_\mathrm{B} B}{\hbar}\,. \tag{9.10-9b}$$

ω_L heißt Larmorfrequenz (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 6.15). Die Abbildung 9.10-2 zeigt das Na-D-Spektrallinien-Dublett D_1, D_2 und dessen Zeemanaufspaltung.

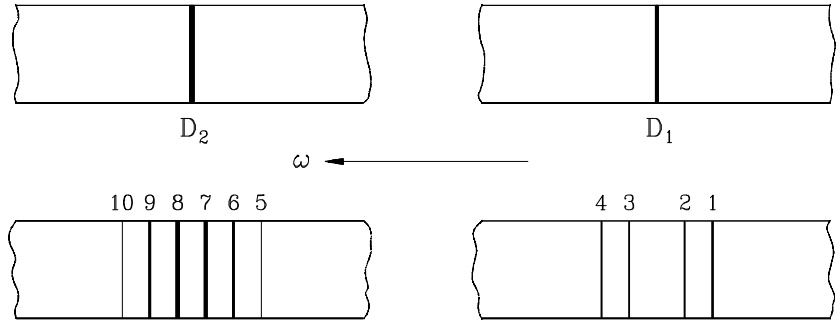


Abb. 9.10-2: Das Na-D-Dublett und seine Aufspaltung im schwachen Magnetfeld (Zeeman-„Komponenten“) für $\vec{k} \perp \vec{B}$ (Beobachtung senkrecht zur Feldrichtung). Die Ziffern 1 bis 10 beziehen sich auf die Kreisfrequenzen ω_1 bis ω_{10} von Gl. (9.10-9). (S. auch Abb. 9.10-3 und die Diskussion des Falles $\vec{k} \parallel \vec{B}$ im Text.)

Bemerkungen

Für ein abgeschirmtes Coulombpotential gilt $V(r \to 0+) \propto r^{-1}$ und aus Gl. (9.10-1b) folgt daher $\Gamma(r \to 0+) \propto r^{-3}$. Damit ergibt sich aber ein divergentes Integral (9.10-3b) für $\zeta(n, 0)$, da sich die Radialfunktionen R_{n0} gemäß $R_{n0}(r \to 0+) \to$ konst. $(\neq 0)$ verhalten. Gl. (9.10-4a) stellt also zumindest eine voreilige Schlussfolgerung dar. Man kann jedoch ausgehend von der Diracgleichung zeigen, dass die $\Gamma(r)$-Formel (9.10-1b) für kleine r nicht korrekt ist, und im vorliegenden Fall $\Gamma(r \to 0+) \propto r^{-1}$ und somit $|\zeta(n, 0)| < +\infty$ gilt (s. z. B. [7]).

Die obige Behandlung der Feinstruktur des Natriumatoms stellt die übliche „Lehrbuchbehandlung“ dieses Problems dar. Der kritische Leser wird sich fragen, warum die anderen relativistischen Effekte, die relativistische Massenkorrektur und die Darwinwechselwirkung, nicht einbezogen wurden, von denen bekannt ist, dass ihr Einfluss von derselben Größenordnung ist wie jener der Spin-Bahn-Wechselwirkung. – Die oben nicht explizit berücksichtigten weiteren relativistischen Effekte werden durch Störoperatoren beschrieben, welche bereits im Basissystem

$\{\,|\,n\,l\,\frac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle,\ m_l = l, l-1, \ldots, -l;\ m_s = \pm\frac{1}{2}\,\}$ des Eigenraumes $\mathscr{H}(n\,^2L)$ „diagonal“ sind, da sie mit allen Komponenten von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ vertauschen. Sie führen zu kleinen von n und l abhängigen Niveauverschiebungen. Diese kleinen Verschiebungen können wir uns „in Gedanken“ bereits in die E^0_{nl} von Abb. 9.10-1 „hineingesteckt“ denken. Dies umso mehr, als wir ja das Einteilchenpotential V in H_0 nicht spezifiziert und entsprechend die Eigenwerte von H_0 nicht berechnet haben.

Beim Wasserstoffatom ist die Situation anders als bei den Alkaliatomen. Erstens geht man von exakt berechneten Eigenwerten von H_0 aus. Zweitens sind diese aufgrund einer *„verborgenen“ Symmetrie* von H_0 (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.6) bzgl. l entartet, sodass eine „Vorneweg-Berücksichtigung“ von relativistischer Massenkorrektur und Darwinterm für $n \geq 2$ bereits *Niveauaufspaltungen* mit sich bringen würde. (Das ungestörte Energieniveau E^0_n würde in n Energieniveaus aufspalten.) Es ist daraus klar, dass man beim Wasserstoffatom alle relativistischen Korrekturen zusammen *in einem Schritt* störungstheoretisch berücksichtigen muss.

Für die Brauchbarkeit der unter (b) durchgeführten störungstheoretischen Behandlung von W_B ist die Kleinheit von $\mu_\mathrm{B}B$ gegen den Abstand benachbarter Feinstrukturniveaus Voraussetzung („schwaches“ Magnetfeld). Im vorliegenden Fall gibt dies mit dem in der Abbildung 9.10-1 angegebenen Zahlenwert für $\hbar\omega'$ die Bedingung

$$\mu_\mathrm{B}B \ll 2{\cdot}10^{-3}\,\mathrm{eV} \ \Rightarrow\ B \ll 4{\cdot}10^{5}\,\mathrm{G} \mathrel{\widehat{=}} 40\,\mathrm{T}. \tag{9.10-10a}$$

Andererseits muss B jedoch hinreichend groß sein, damit man die Hyperfeinstruktur-Aufspaltung gegenüber der Zeemanaufspaltung vernachlässigen kann. Da die Hyperfeinstruktur-Aufspaltung der Na-D-Linien ungefähr um einen Faktor dreihundert kleiner ist als der Abstand D_1–D_2 (s. [18]) folgt daraus die Bedingung

$$\mu_\mathrm{B}B \gg 7{\cdot}10^{-6}\,\mathrm{eV} \ \Rightarrow\ B \gg 10^{3}\,\mathrm{G} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-1}\,\mathrm{T}. \tag{9.10-10b}$$

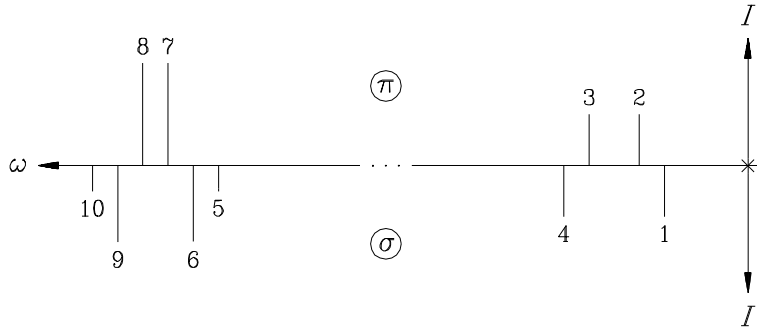


Abb. 9.10-3: Intensität I und Polarisation der Zeeman-„Komponenten“ des Na-D-Dubletts für $\vec{k} \perp \vec{B}$ (Beobachtung senkrecht zur Feldrichtung). Die Ziffern 1 bis 10 beziehen sich auf die Kreisfrequenzen ω_1 bis ω_{10} von Gl. (9.10-9).

Die *Polarisation* der Strahlung hängt vom jeweiligen Δm_j-Wert ab. Man spricht von π-*Komponenten*, wenn $\Delta m_j = 0$ ist, und von σ-*Komponenten*, wenn $\Delta m_j = \pm 1$ gilt. Die Na-D-Linie

ist die intensitätsstärkste Linie der Hauptserie $n\,^2P \to 3\,^2S$, $n = 3, 4, \ldots$ (Die Bezeichnung P für $l = 1$ rührt von dieser historischen Serienbezeichnung her: principal series.) Abb. 9.10-3 zeigt in der üblichen symbolischen Form die *relativen Intensitäten* und die Polarisation der zehn Zeeman-Komponenten von Abb. 9.10-2 für $\vec{k} \perp \vec{B}$ (s. z. B. [34]). Bei Beobachtung *in* Feldrichtung ($\vec{k} \parallel \vec{B}$) „sieht" man nur die σ-Komponenten. Für die π-Komponenten ($\Delta m_j = 0$) ergibt sich in diesem Fall die Intensität null, da für $\vec{k} = (0, 0, k)$ wegen $\vec{e} \perp \vec{k}$ das in Aufgabe 9.9 untersuchte E1-Matrixelement (s. Gl. (9.9-1)) null ist:

$$\begin{aligned}&\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m_j \,|\, \vec{e}\cdot\vec{D} \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle \\ &\qquad = -e^{(1)}_{-1}\cdot 0 + 0\cdot\langle\, n' l' \tfrac{1}{2}\, j' m_j \,|\, D_z \,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle - e^{(1)}_{1}\cdot 0 \;=\; 0\,.\end{aligned} \tag{9.10-11}$$

Mithilfe der *Auswahlregeln* von Aufgabe 9.9 kann man auf analoge Art wie unter (c) die möglichen E2- bzw. M1-Übergänge sowie die zugehörigen Spektrallinien diskutieren. Wegen Δl gerade ($\Delta l = 0, \pm 2$ für E2, $\Delta l = 0$ für M1) sind in Abb. 9.10-1 derartige Übergänge grundsätzlich nur zwischen den Energieniveaus zu ein und demselben $n\,^2L$-Term ($3\,^2S$ bzw. $3\,^2P$) möglich. Die zugehörigen Kreisfrequenzen sind von der Größenordnung ω' oder ω_L, und die zugehörige Strahlung gehört somit nicht zum optischen Bereich, sondern zum Bereich der Mikrowellen.

S. auch Aufgabe 9.11 und die Bemerkungen dazu.

9.11* (Siehe zunächst den Anfang von Aufgabe 9.10.)

(a) Paschen-Back-Aufspaltung der Terme $n\,^2L$

Die Eigenvektoren $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle$ des Operators H_0 Gl. (9.10-1a) sind als Eigenvektoren von L_z und S_z auch Eigenvektoren von W_B Gl. (9.10-1c), und es gilt

$$(H_0 + W_\mathrm{B})\,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle = E(n\,^2L, m_l + 2m_s)\,|\, n\, l\, \tfrac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle \tag{9.11-1a}$$

mit

$$E(n\,^2L, m_l + 2m_s) = E^0_{nl} + \mu_\mathrm{B} B\,(m_l + 2m_s)\,, \tag{9.11-1b}$$

$$m_l = l, l-1, \ldots, -l\,; \quad m_s = \pm\tfrac{1}{2}\,. \tag{9.11-1c}$$

Wegen $\sum m_l = 0$, $\sum m_s = 0$ bleibt der „Termschwerpunkt" bei der Aufspaltung erhalten. Die Entartung wird durch die Aufspaltung verringert, aber nur für S-Terme ($l = m_l = 0$) vollständig aufgehoben.

Abb. 9.11-1 zeigt die Paschen-Back-Niveaus zu den Termen $3\,^2S$ und $3\,^2P$ des Natriumatoms.

(b) Verschiebung der Paschen-Back-Niveaus durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung

Behandelt man W_FS Gl. (9.10-1b) in erster Ordnung Störungstheorie als schwache „Störung" von $H_0 + W_\mathrm{B}$, so hat man die Matrix $\widehat{W}_\mathrm{FS}$ von W_FS im (ein- oder zweidimensionalen) Eigenraum $\mathscr{H}(n\,^2L, m_l + 2m_s)$ zu „diagonalisieren". Aus

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\,(L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z \tag{9.11-2}$$

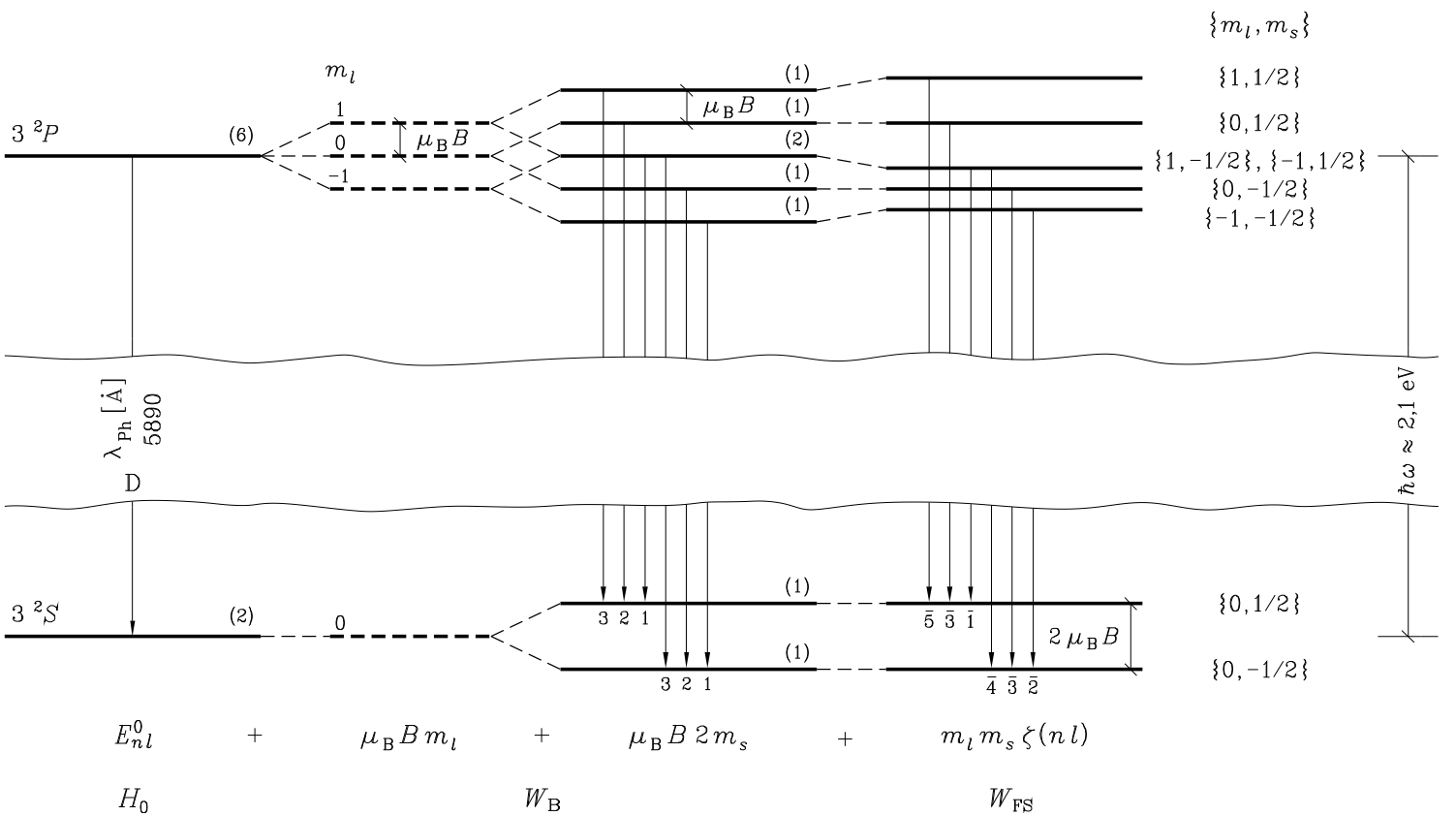


Abb. 9.11-1: Paschen-Back-Aufspaltung und Feinstrukturverschiebung der Paschen-Back-Niveaus für die Terme $3\,^2S$ und $3\,^2P$ des Natriumatoms. In runden Klammern sind die Vielfachheiten angegeben, die Pfeile geben die aufgrund der Auswahlregeln möglichen E1-Strahlungsübergänge an. Die Ziffern 1 bis 3 bzw. $\bar{1}$ bis $\bar{5}$ bei den Pfeilen beziehen sich auf die Kreisfrequenzen von Gl. (9.11-5) bzw. (9.11-6).

und der Wirkung der „Leiteroperatoren“ $L_\pm$, $S_\pm$ (siehe Gl. (A.7-4) von Anhang A.7) sieht man unmittelbar, dass W_{FS} im Basissystem der gemeinsamen Eigenvektoren von $H_0 + W_{\mathrm{B}}$, $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z und S_z in diesen Eigenräumen bereits durch Diagonalmatrizen dargestellt wird, und für die Energiekorrekturen

$$\begin{aligned}\epsilon^{(1)}(n\,{}^2L, m_l m_s) &= \langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s \,|\, W_{\mathrm{FS}} \,|\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle \\ &= \langle\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s \,|\, \Gamma(R)\,L_z S_z \,|\, n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l\,m_s\,\rangle \\ &= m_l m_s\,\zeta(nl)\end{aligned} \tag{9.11-3}$$

gilt, wobei $\zeta(nl)$ durch Gl. (9.10-3b) gegeben ist. Bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung in erster Ordnung Störungstheorie erhält man somit

$$E^{[1]}(n\,{}^2L, m_l, m_s) = E^0_{nl} + \mu_{\mathrm{B}} B\,(m_l + 2m_s) + m_l m_s\,\zeta(nl)\,, \tag{9.11-4a}$$

$$\zeta(nl) \equiv \hbar^2\,(n\,l\,|\,\Gamma(R)\,|\,n\,l) := \hbar^2 \int_0^{+\infty} dr\, r^2\,\Gamma(r)\Big[R_{nl}(r)\Big]^2 > 0\,. \tag{9.11-4b}$$

Im Falle eines S-Terms liefert die Spin-Bahn-Wechselwirkung wegen $m_l = 0$ keine Zusatzenergie. Bei P-Termen kommt es zur Verschiebung der Paschen-Back-Niveaus mit $m_l \neq 0$, die Entartung des Niveaus mit $m_l = +1$, $m_s = -\frac{1}{2}$ und $m_l' = -1$, $m_s' = +\frac{1}{2}$ wird dabei wegen $m_l m_s = m_l' m_s'$ *nicht* aufgehoben (s. Abb. 9.11-1). Der „Termschwerpunkt“ bleibt wegen $\sum m_l = 0$, $\sum m_s = 0$ erhalten.

Für $l \geq 2$, d. h. für D-Terme, F-Terme, ..., werden alle entarteten Paschen-Back-Niveaus mit $m_l + 2m_s \neq 0$ aufgespalten. Es bleibt somit ganz allgemein nur die Entartung der Niveaus mit $m_l + 2m_s = 0$ bestehen.

(c) E1-Strahlungsübergänge

Ohne äußeres Magnetfeld sind die niedrigsten Energieniveaus durch die in Abb. 9.10-1 dargestellten Feinstrukturniveaus $3\,{}^2S_{1/2}$, $3\,{}^2P_{1/2}$ und $3\,{}^2P_{3/2}$ gegeben, und man erhält das Na-D-Dublett D_1, D_2 von Abb. 9.10-2. In einem „starken“ Magnetfeld gibt es aufgrund der Auswahlregeln (9.9-10) sechs erlaubte E1-Übergänge (s. Abb. 9.11-1) und diese führen bei Nichtberücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf drei Spektrallinien (s. Abb. 9.11-2):

$$\omega_{1,3} = \omega \mp \omega_{\mathrm{L}}\,, \qquad \omega_2 = \omega\,; \qquad \omega_{\mathrm{L}} := \frac{\mu_{\mathrm{B}} B}{\hbar}\,; \qquad \omega \text{ s. Abb. 9.11-1.} \tag{9.11-5}$$

Berücksichtigt man die Verschiebungen $m_l m_s\,\zeta(nl)$ (s. Abb. 9.11-1), so ergibt sich eine *Feinstrukturaufspaltung* von zwei der drei Paschen-Back-„Komponenten“, d. h. man erhält fünf Spektrallinien (s. Abb. 9.11-2):

$$\overline{\omega}_{1,2} = \omega - \omega_{\mathrm{L}} \mp \omega_0\,, \qquad \overline{\omega}_3 = \omega\,, \qquad \overline{\omega}_{4,5} = \omega + \omega_{\mathrm{L}} \mp \omega_0\,; \tag{9.11-6a}$$

$$\omega_{\mathrm{L}} \text{ s. Gl. (9.11-5)}; \qquad \omega_0 := \frac{\zeta(3,1)}{2\hbar}\,. \tag{9.11-6b}$$

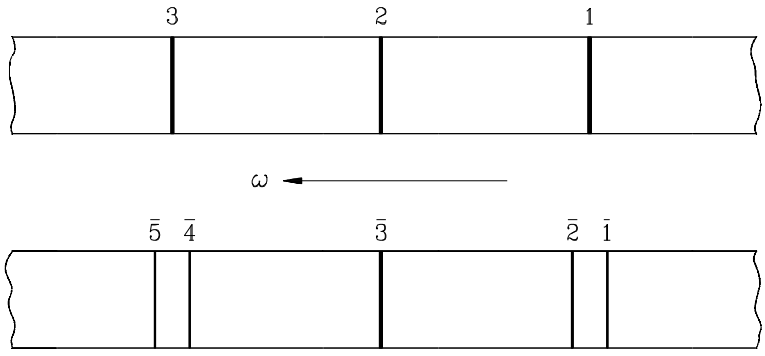


Abb. 9.11-2: Paschen-Back-„Komponenten“ der Na-D-Linie und deren Feinstruktur für $\vec{k} \perp \vec{B}$ (Beobachtung senkrecht zur Feldrichtung). Die Ziffern $1, 2, 3$ und $\bar{1}$ bis $\bar{5}$ beziehen sich auf die Kreisfrequenzen von Gl. (9.11-5) bzw. Gl. (9.11-6). (S. auch Abb. 9.11-3 und die Diskussion des Falles $\vec{k} \parallel \vec{B}$ im Text.)

Bemerkungen

Bezüglich $|\zeta(n,0)| < +\infty$ (woraus für S-Terme $m_l m_s\, \zeta(nl) = 0$ folgt) siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 9.10. Siehe auch die dortigen Erläuterungen bzgl. der relativistischen Massenkorrektur und des Darwinterms.

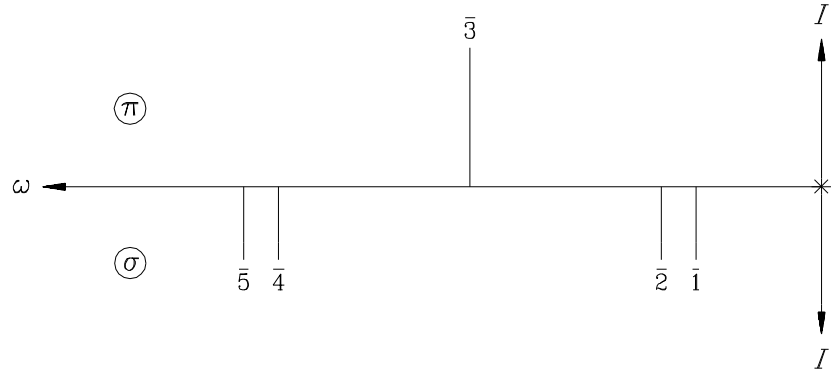


Abb. 9.11-3: Intensität I und Polarisation der Paschen-Back-„Komponenten“ der Na-D-Linie für $\vec{k} \perp \vec{B}$ (Beobachtung senkrecht zur Feldrichtung). Die Ziffern $\bar{1}$ bis $\bar{5}$ beziehen sich auf die Kreisfrequenzen von Gl. (9.11-6).

Für die Brauchbarkeit der unter (a) und (b) abgeleiteten Ergebnisse ist die Kleinheit von $\zeta(nl)$ gegen $\mu_B B$ Voraussetzung („starkes“ Magnetfeld). Im vorliegenden Fall bedeutet dies (s. Abb. 9.10-1, Abb. 9.11-1 und Gl. (9.10-10a))

$$\mu_B B \gg 2{\cdot}10^{-3}\,\text{eV} \;\Rightarrow\; B \gg 4{\cdot}10^{5}\,\text{G} \mathrel{\hat{=}} 40\,\text{T}, \tag{9.11-7}$$

die erforderlichen Feldstärken sind also extrem hoch. Bei Lithium lauten die niedrigsten Energieterme $2\,^2S$, $2\,^2P$, und der Abstand der Feinstrukturniveaus $2\,^2P_{1/2}$, $2\,^2P_{3/2}$ ist nur ein Fünfzigstel so groß wie jener der Niveaus $3\,^2P_{1/2}$, $3\,^2P_{3/2}$ des Natriumatoms. Das Aufspaltungsbild der Abb. 9.11-2 kann deshalb bei Lithium in einem Feld von ein paar Tesla nachgewiesen werden.

Zeichnet man analog zu Abb. 9.10-3 ein Bild, welches Intensität und Polarisation der Strahlung wiedergibt, so erhält man Abb. 9.11-3 (s. z. B. [32]). Bei Beobachtung *in* Feldrichtung fällt die π-Komponente ($\Delta m_l = \Delta m_s = 0$) aus, und man erhält statt drei bzw. fünf nur zwei bzw. vier Spektrallinien (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.10). Zu beachten ist, dass in Abb. 9.11-1 bis 9.11-3 ein anderer Energie- bzw. Frequenzmaßstab gewählt wurde als in Abb. 9.10-1 bis 9.10-3. Die Größenordnung der Feinstrukturaufspaltung bzw. -verschiebung der Niveaus zu $n = 3$, $l = 1$ ist in beiden Fällen durch $\zeta(3,1)$ gegeben.

Wir haben in den Aufgaben 9.10, 9.11 nur die Grenzfälle „schwacher“ bzw. „starker“ Magnetfelder untersucht (s. Gl. (9.10-10a) und Gl. (9.11-7)). Für den weiten und experimentell interessanten Bereich „mittlerer“ Feldstärken kann man W_{FS} und W_{B} nicht mehr in zwei getrennten Schritten nacheinander einbeziehen. Die entsprechende störungstheoretische Behandlung des Problems kann der Leser in [22] oder [33] nachlesen.

Bezüglich der möglichen E2- und M1-Übergänge s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.10.

9.12

(a)

$$H = \sum_{i=1}^{2}\left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_{\mathrm{e}}} - \frac{2e^2}{R^{(i)}}\right] + \frac{e^2}{\left|\vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)}\right|}\,. \tag{9.12-1}$$

(b)* Den Hamiltonoperator (9.12-1) kann man mit einem geeigneten (hier nicht näher spezifizierten) Zentralpotential $V_{\mathrm{c}}(R)$ in der Form

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \sum_{i=1}^{2}\left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_{\mathrm{e}}} + V_{\mathrm{c}}(R^{(i)})\right], \tag{9.12-2a}$$

$$W = \frac{e^2}{\left|\vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)}\right|} - \sum_{i=1}^{2}\left[V_{\mathrm{c}}(R^{(i)}) + \frac{2e^2}{R^{(i)}}\right] \tag{9.12-2b}$$

schreiben.

Zentralfeldnäherung. Gemeinsame Eigenvektoren von H_0, $\vec{\mathsf{L}}^2$, $\vec{\mathsf{S}}^2$, L_z und S_z

In der Zentralfeldnäherung (Vernachlässigung von W) können die Energieniveaus des Atoms durch die *Konfiguration* $n_1 l_1\, n_2 l_2$ gekennzeichnet werden. Für das Spektrum des Heliumatoms sind in erster Linie die Konfigurationen $1s\,nl$, $n \in \mathbb{N}$, $l = 0, 1, \ldots, n-1$, von Bedeutung (s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe). Die zugehörigen ungestörten Energieeigenwerte sind

$$E^0(1s\,nl) = E^0_{10} + E^0_{nl} \tag{9.12-3}$$

mit

$$\left[\frac{\vec{P}^2}{2m_{\mathrm{e}}} + V_{\mathrm{c}}(R)\right] |\, nlm_l \,\rangle = E^0_{nl}\, |\, nlm_l \,\rangle\,, \tag{9.12-4}$$

$$n \in \mathbb{N};\quad l = 0, 1, \ldots, n-1;\quad m_l = l, l-1, \ldots, -l\,.$$

Da es sich um ein System identischer Fermiteilchen handelt, ist der Teilraum $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ der antisymmetrischen Zustände von $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ Zustandsraum. In Bezug auf $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ ist der Eigenwert $E^0(1s^2)$ *nicht entartet*, und die Vielfachheit eines Eigenwertes $E^0(1s\,nl)$ mit $n > 1$ ist $g^0(1s\,nl) = 4\,(2l+1)$.

Dabei habe ich angenommen, dass für $V_\mathrm{c}(R)$ ein „realistisches“ Potential gewählt wurde. Benützt man die einfache Näherung $V_\mathrm{c}(R) = -Z_\mathrm{eff}e^2/R$ [s. die Bemerkungen am Ende der Aufgabe sowie die Aufgaben 9.13, 9.14], so sind die entsprechenden Einteilchenenergien bzgl. l entartet, und die Vielfachheit von $E^0(1s,n) = E_1^0 + E_n^0,\ n > 1$, ist $\sum 4\,(2l+1) = 4n^2$.

Da der Operator H_0 mit $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$ und L_z, S_z bzw. $\vec{J}^2$, J_z vertauscht, und die Operatoren H_0, $\vec{L} = \vec{L}^{(1)} + \vec{L}^{(2)}$, $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ mit dem Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ vertauschen, gibt es je ein vollständiges System gemeinsamer Eigenvektoren von H_0, $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$ und L_z, S_z bzw. $\vec{J}^2$, J_z in $\mathscr{H}_\mathrm{a}$. Der Eigenvektor von H_0 zum Eigenwert $E^0(1s^2)$ ist als Eigenvektor zu einem nicht entarteten Eigenwert sowohl Eigenvektor von L_z, S_z als auch Eigenvektor von $\vec{J}^2$, J_z:

$$
\begin{aligned}
|\,(1s^2)\overbrace{0\,0\,0\,0}^{L\,S\,M_L\,M_S}\rangle_\mathrm{a} &= |\,(1s^2)\,{}^1S_0, M_J = 0\,\rangle_\mathrm{a} = |\,(1s^2)\overbrace{0\,0}^{m_{l1}\,m_{l2}}+-\,\rangle_\mathrm{a} \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |\,1\,0\,0+\rangle^{(1)} & |\,1\,0\,0+\rangle^{(2)} \\ |\,1\,0\,0-\rangle^{(1)} & |\,1\,0\,0-\rangle^{(2)} \end{vmatrix} \\
&= |\,1\,0\,0\,\rangle_\mathrm{B}^{(1)} |\,1\,0\,0\,\rangle_\mathrm{B}^{(2)} |\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S} \quad \text{(Singulettzustand);}
\end{aligned}
\tag{9.12-5}
$$

$$
|\,n\,l\,\tfrac{1}{2}\,m_l, m_s = \pm\tfrac{1}{2}\,\rangle^{(i)} \equiv |\,nlm_l\pm\,\rangle^{(i)} = |\,nlm_l\,\rangle_\mathrm{B}^{(i)} |\pm\rangle_\mathrm{S}^{(i)}, \quad i = 1,2;
$$

$|\,0\,0\,\rangle_\mathrm{S}$ s. Gl. (6.18-2).

Kennzeichnet man die $4(2l+1)$ linear unabhängigen Eigenvektoren von H_0 in $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ zu einem Eigenwert $E^0(1s\,nl)$, $n > 1$, durch die Quantenzahlen $n_1 = 1$, $l_1 = 0$, $m_{l1} = 0$, m_{s1}, $n_2 = n$, $l_2 = l = L$, $m_{l2} = m_l = M_L$ und m_{s2}, so hat man

$$
|\,(1s\,nl)\,0\,m_l\,m_{s1}m_{s2}\,\rangle_\mathrm{a} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |\,1\,0\,0\,m_{s1}\,\rangle^{(1)} & |\,1\,0\,0\,m_{s1}\,\rangle^{(2)} \\ |\,nlm_lm_{s2}\,\rangle^{(1)} & |\,nlm_lm_{s2}\,\rangle^{(2)} \end{vmatrix}, \tag{9.12-6a}
$$

$$
m_l = l, l-1, \ldots, -l; \quad m_{s1} = \pm\tfrac{1}{2}; \quad m_{s2} = \pm\tfrac{1}{2}\,. \tag{9.12-6b}
$$

Durch Bildung geeigneter Linearkombinationen dieser $4(2l+1)$ Slaterdeterminanten kann man die gesuchten $4(2l+1)$ gemeinsamen Eigenvektoren von H_0, $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z und S_z zum Eigenwert $E^0(1s\,nl)$ erhalten. Da die entsprechenden Überlegungen in Aufgabe 7.10 für einen analogen, aber einfacheren und daher übersichtlicheren Fall in allen Einzelheiten erklärt wurden, schreibe ich hier sofort die Ergebnisse an (s. Gl. (7.10-9)

und Gl. (7.10-23b) bis (7.10-23d)), wobei ich n, l nun wieder alle in Frage kommenden Werte durchlaufen lasse:

$$|\,(1s\,nl)LSM_LM_S\,\rangle_{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\,|\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(1)}\,|\,nlm_l\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(2)} - (-1)^{1-S}\,|\,nlm_l\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(1)}\,|\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(2)}\Big]\,|\,SM_S\,\rangle_{\mathrm{S}}\,, \tag{9.12-7a}$$

$$\begin{aligned} &n = 2, 3, 4, \ldots\,; \\ &L = l = 0, 1, \ldots, n-1; \quad M_L = m_l = l, l-1, \ldots, -l\,; \\ &S = 0, 1; \quad M_S = S, S-1, \ldots, -S\,; \\ &|\,SM_S\,\rangle_{\mathrm{S}} \text{ s. Gl. (6.18-2), (6.18-3)}; \\ &(S = 0 \text{ Singulettzustände}, S = 1 \text{ Triplettzustände}). \end{aligned} \tag{9.12-7b}$$

An sich ist es überflüssig, die Quantenzahl L in die Ketvektoren zu schreiben, da sie bereits durch die Konfiguration $1s\,nl$ festgelegt ist [$l_1 = 0$, $L = l_2 = l$]. Da jedoch der Operator $\vec{L}^2$ zum vollständigen Operatorensatz gehört, behält man die Quantenzahl L in den Ketvektoren bei. – Im Falle der Singulettzustände und der Triplettzustände mit $L = 0$ sind die Vektoren (9.12-7) zugleich Eigenvektoren von $\vec{J}^2$ und J_z zu den Quantenzahlen $J = L = l$ und $M_J = M_L = m_l$ bzw. $J = S$ und $M_J = M_S$. Für Triplettzustände mit $L > 0$ hingegen wären die $LSJM_J$-Vektoren erst gemäß Gl. (A.7-26) von Anhang A.7 zu bilden.

Berücksichtigung von W in erster Ordnung Störungstheorie. LS-Niveaus

Behandelt man W Gl. (9.12-2b) in erster Ordnung Störungstheorie als „Störung“ von H_0, was bei geeigneter Wahl von $V_{\mathrm{c}}(R)$ zu einer brauchbaren Näherungslösung führen wird, so erhält man zur Grundzustandsenergie $E^0(1s^2)$ von H_0 die Energiekorrektur

$$\begin{aligned} \epsilon^{(1)}(1s^2) &= {}_{\mathrm{a}}\langle\,(1s^2)\,0\,0\,0\,0\,|\,W\,|\,(1s^2)\,0\,0\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{a}} \\ &= {}_{\mathrm{B}}^{(2)}\langle\,1\,0\,0\,|\,{}_{\mathrm{B}}^{(1)}\langle\,1\,0\,0\,|\,W\,|\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(1)}\,|\,1\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(2)} = J(1s^2) \end{aligned} \tag{9.12-8}$$

mit

$$J(1s^2) := \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_1 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_2\,|u_{100}(\vec{r}_1)|^2\,W(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,|u_{100}(\vec{r}_2)|^2\,, \tag{9.12-9}$$

$$W(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \sum_{i=1}^{2}\left[V_{\mathrm{c}}(r_i) + \frac{2e^2}{r_i}\right] = W(\vec{r}_2,\vec{r}_1)\,, \tag{9.12-10}$$

und es folgt

$$E^{[1]}(1s^2\,{}^1S) = E^0(1s^2) + J(1s^2)\,. \tag{9.12-11}$$

Um die Aufspaltung bzw. Verschiebung eines Energieniveaus $E^0(1s\,nl)$, $n > 1$, zufolge der Störung in erster Ordnung Störungstheorie zu erhalten, muss die Matrix des Störoperators W in dem zugehörigen $4(2l+1)$-dimensionalen Eigenraum $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}(1s\,nl)$ „diagonalisiert“ werden. Welches Basissystem man hierbei in diesem Eigenraum verwendet, ist im Prinzip gleichgültig. Insbesondere kann man die zum gegebenen Wertepaar n, l gehörigen Slaterdeterminanten (9.12-6) oder die entsprechenden LSM_LM_S-Vektoren

(9.12-7) oder die nicht explizit angeschriebenen $LSJM_J$-Vektoren benützen. Wegen der Vertauschbarkeit von W mit den Operatoren $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z und S_z bzw. mit $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, $\vec{J}^2$ und J_z ist es jedoch zweckmäßig, eines dieser LS-Basissysteme zu wählen, da dann die Matrix von W im Eigenraum $\mathscr{H}_\mathrm{a}(1s\,nl)$ bereits Diagonalmatrix ist. (S. dazu Aufgabe 1.31. In *ganz* $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ kann die Matrix von W *nicht* Diagonalmatrix sein, da W nicht mit H_0 vertauscht.) Mit Gl. (9.12-7a) folgt somit für die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster Ordnung zu $E^0(1s\,nl)$, $n > 1$,

$$\begin{aligned}\epsilon^{(1)}(1s\,nl, S) &= {}_\mathrm{a}\langle\,(1s\,nl)LSM_LM_S\,|\,W\,|\,(1s\,nl)LSM_LM_S\,\rangle_\mathrm{a}\\ &= J(1s\,nl) - (-1)^{1-S}K(1s\,nl)\end{aligned} \tag{9.12-12}$$

mit

$$J(1s\,nl) := \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_1 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_2\,|u_{100}(\vec{r}_1)|^2\,W(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,|u_{nlm_l}(\vec{r}_2)|^2\,, \tag{9.12-13}$$

direkte Integrale

$$K(1s\,nl) := \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_1 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_2\,u^*_{100}(\vec{r}_1)\,u_{nlm_l}(\vec{r}_1)\,W(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,u_{100}(\vec{r}_2)\,u^*_{nlm_l}(\vec{r}_2)\,. \tag{9.12-14}$$

Austauschintegrale

Dabei wurde nach Einsetzen von (9.12-7a) die Vertauschbarkeit von W mit $P^\mathrm{B}_{(12)}$, d. h. die Eigenschaft $W(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = W(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$ benützt. Dass $\epsilon^{(1)}$ von M_S unabhängig ist, ergibt sich unmittelbar aus Gl. (9.12-7a) und der Spinunabhängigkeit von W.

Solange man relativistische Korrekturen wie Spin-Bahn- und Spin-Spin-Wechselwirkung vernachlässigt, ist der Hamiltonoperator spinunabhängig. Der Spinteil der Eigenvektoren tritt entsprechend nur als „angeklebtes Etikett“[11] in Erscheinung, welches die Symmetrie bzw. Antisymmetrie des jeweiligen Bahnteils bedingt.

Dass $\epsilon^{(1)}$ auch von $M_L = m_l$ unabhängig ist, folgt aus den Beziehungen $[W, L_\pm] = \mathbb{0}$, $(L_\pm)^\dagger = L_\mp$.

Nachdem wir vorübergehend n, l festgehalten haben, lassen wir n, l nun wieder alle in Frage kommenden Werte durchlaufen, und zu (9.12-12) bis (9.12-14) ist entsprechend wieder (9.12-7b) hinzuzunehmen. Für die LS-Niveaus ergibt sich damit in erster Ordnung Störungstheorie ($L = l$)

$$E^{[1]}(1s\,nl\;{}^{2S+1}L) = E^0(1s\,nl) + J(1s\,nl) - (-1)^{1-S}\,K(1s\,nl)\,. \tag{9.12-15}$$

Dieses Ergebnis ist auch richtig, wenn man für $V_\mathrm{c}(R)$ ein Coulombpotential wählt. Der Eigenraum zu $E^0(1s, n)$ besitzt dann zwar wegen der Entartung der Einteilchenenergien bzgl. l eine höhere Dimension, wegen der Vertauschbarkeit von W mit $\vec{L}^2$ und wegen $L = l$ sind jedoch die Matrixelemente zwischen Konfigurationen $1s\,nl'$, $1s\,nl$, $l' \neq l$, null.

Zieht man die *hundsche Regel* heran, so erhält man für die energetische Reihenfolge

[11] Dieser treffende Ausdruck stammt von H. Mitter (s. [9]).

der fünf niedrigsten LS-Niveaus

$$1s^2\,{}^1S,\ \ 1s\,2s\,{}^3S,\ \ 1s\,2s\,{}^1S,\ \ 1s\,2p\,{}^3P,\ \ 1s\,2p\,{}^1P. \tag{9.12-16}$$

Diese Reihenfolge ist offenbar dann korrekt, wenn die Austauschintegrale positiv sind.

Zugehörige Eigenvektoren nullter Ordnung von $H = H_0 + W$ sind die LSM_LM_S-Vektoren (9.12-5) und (9.12-7a) ($n = 2$; $l = 0, 1$; $L = l$; $S = 0, 1$) bzw. die entsprechenden $LSJM_J$-Vektoren. (Da der Eigenwert von Gl. (9.12-15) $(2l + 1)(2S + 1)$-fach ist, sind die Eigenvektoren nullter Ordnung für $(l, S) \neq (0, 0)$ nicht eindeutig bestimmt.)

Bemerkungen

Wie Abb. 9.12-1 zeigt[12], liegt das Triplettniveau tatsächlich jeweils unterhalb des zur selben Konfiguration gehörigen Singulettniveaus. Der Austauschterm ist für alle Konfigurationen positiv, die hundsche Regel ist erfüllt. (Bzgl. $K(1s\,nl)$ s. auch Aufgabe 9.13.) Die Feinstruktur der LS-Niveaus kann *qualitativ* richtig durch Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkungen $\Gamma(R^{(i)})\,\vec{L}^{(i)}\cdot\vec{S}^{(i)}$, $i = 1, 2$, erhalten werden (Aufspaltung der Triplettniveaus mit $L = l \geq 1$ in je drei Feinstrukturniveaus mit $J = l - 1, l$ und $l + 1$). Für eine *quantitativ* richtige Beschreibung müssen allerdings beim Heliumatom noch andere relativistische Korrekturen einbezogen werden (Spin-Spin-Wechselwirkung, relativistische Massenkorrektur etc.; s. [32]). Die Feinstrukturaufspaltung ist jedoch beim Heliumatom äußerst klein und kann nur bei spektroskopischen Messungen mit sehr hohem Auflösungsvermögen festgestellt werden. (Während der für die Aufspaltung der Natrium-D-Linie verantwortliche Niveauabstand $3\,{}^2P_{1/2} - 3\,{}^2P_{3/2}$ ungefähr $2{\cdot}10^{-3}$ eV beträgt [s. Abb. 9.10-1] ist der Abstand der $1s\,2p\,{}^3P_{0,1,2}$-Niveaus des Heliumatoms von der Größenordnung 10^{-4} eV bzw. 10^{-5} eV.)

Aufgrund der für E1-, E2- und M1-Übergänge zwischen LS-Zuständen gültigen Auswahlregel $\Delta S = 0$ (s. Gl. (9.9-33)) sind Strahlungsübergänge von einem Singulettzustand zu einem Triplettzustand oder umgekehrt „verboten“. Dieses „Übergangsverbot“ gilt allerdings nicht streng, sondern nur im Rahmen der Störungstheorie erster Ordnung. „Fallen“ Heliumatome durch Strahlungsübergänge auf das tiefste Triplettniveau, das $1s\,2s\,{}^3S$-Niveau, „zurück“, so können sie lange Zeit im betreffenden Zustand „bleiben“ (metastabiler Zustand mit der Lebensdauer $\tau = 10^4$ s, „Grundzustand von Orthohelium“).

Bisher wurde noch nichts über die Wahl des Zentralpotentials $V_c(R)$ gesagt. Wählt man für $V_c(R)$ das Kernpotential $-2e^2/R$, so stellt die zugehörige „Störung“ W (s. Gl. (9.13-1)) *keine* „schwache“ Störung des entsprechenden ungestörten Hamiltonoperators H_0 im Sinne der Störungstheorie dar, und die Ergebnisse der ersten Ordnung Störungstheorie sind unbrauchbar (s. Aufgabe 9.13). Trägt man der teilweisen Abschirmung der Kernladung dadurch Rechnung, dass man ein Coulombpotential mit einer „effektiven“ Kernladungszahl (σ *Abschirmkonstante*)

$$Z_{\text{eff}} = 2 - \sigma\,, \qquad 0 < \sigma < 1 \tag{9.12-17a}$$

ansetzt,

[12] Experimentelle Daten zu den stationären und quasistationären Zuständen des He-Atoms findet man bei Martin, W. C.: J. Phys. Chem. Ref. Data 2, 257 (1973); Phys. Rev. A29, 1883 (1984); A36, 3575 (1987).

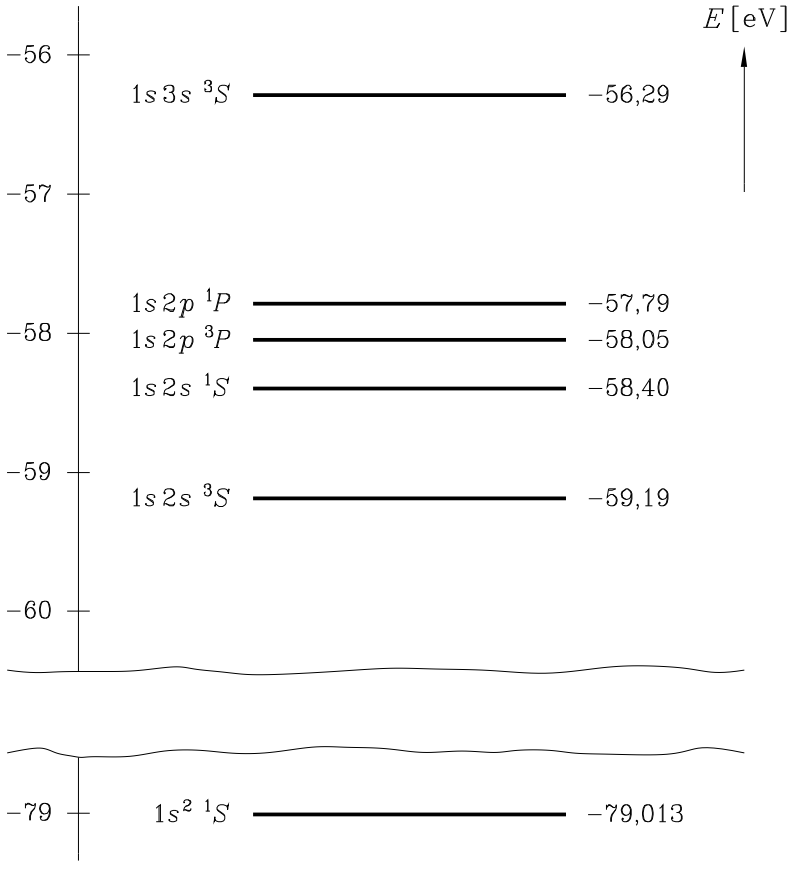


Abb. 9.12-1: Die niedrigsten Energieniveaus des Heliumatoms (experimentelle Werte). Singulettzustände ≙ „Parahelium“, Triplettzustände ≙ „Orthohelium“

$$V_{\mathrm{c}}(R) = -\frac{Z_{\mathrm{eff}}\,e^2}{R} = -\frac{(2-\sigma)\,e^2}{R}\ , \tag{9.12-17b}$$

so kann man die Güte der Näherung wesentlich verbessern (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.14). Sehr genaue Ergebnisse kann man allerdings nur dann erhalten, wenn man die Abschirmkonstante σ durch eine mit dem Abstand vom Kern monoton wachsende *Abschirmfunktion* ersetzt. Ein einfaches Modellpotential dieser Form wurde von W. Heisenberg bereits 1927 für die Behandlung der Anregungszustände verwendet. Dieses Modellpotential sowie andere Näherungen für $V_{\mathrm{c}}(R)$ („self-consistent-field“ von Hartree bzw. von Hartree und Fock) sind in [32] besprochen.

Zu den „doppelt angeregten“ Konfigurationen $n_1 l_1\, n_2 l_2$, $n_1 \geq 2$, $n_2 \geq n_1$, gehören Energien, die bereits im Kontinuum liegen, da sie größer sind als die Grundzustandsenergie des Systems He^+-Ion + freies Elektron, welche $-54{,}42\,\mathrm{eV}$ beträgt (Grenzwert der Energien zu den Konfigurationen $1s\,nl$ für $n \to +\infty$). Großteils handelt es sich um *quasistationäre Zustände* (s. die Bemerkungen zu Aufgabe 5.3 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.4), zum Teil aber auch um

echte gebundene stationäre Zustände bzgl. $H = H_0 + W$, also um Zustände, die zu diskreten im Kontinuum eingebetteten Eigenwerten gehören[13] (s. auch [13] sowie die Bemerkungen zu Aufgabe 2.13). Die quasistationären Zustände „zerfallen“ mit wesentlich größerer Wahrscheinlichkeit durch Dissoziation des Atoms gemäß $\mathrm{He} \to \mathrm{He}^+ + \mathrm{e}^-$ („Selbstionisation“, Augereffekt) als durch einen Strahlungsübergang in einen stationären Zustand des Heliumatoms. Man nennt sie deshalb auch *selbstionisierende Zustände*. Bei der Streuung von Elektronen an He^+-Ionen machen sie sich als Resonanzen im Wirkungsquerschnitt bemerkbar. Experimentell wurde eine große Anzahl von Spektrallinien gefunden und klassifiziert, welche Strahlungsübergängen aus Zuständen mit „doppelt angeregten“ Konfigurationen entsprechen. Die Spektrallinien, die zu Übergängen aus selbstionisierenden Zuständen gehören, zeigen entsprechend der kurzen „Lebensdauer“ dieser Zustände eine sehr starke Verbreiterung.

Siehe auch die Aufgaben 9.13, 9.14 sowie die Bemerkungen zu Aufgabe 9.13 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.14.

9.13* (Siehe zunächst die Aufgabe 9.12.)
Verwendet man für die Zentralfeldnäherung als Zentralpotential $V_\mathrm{c}(R)$ das unabgeschirmte Kernpotential $-2e^2/R$, behandelt man also die „volle“ Coulombabstoßung der beiden Elektronen als Störung,

$$H = H_0 + W\,, \quad H_0 = \sum_{i=1}^{2} \left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_\mathrm{e}} - \frac{2e^2}{R^{(i)}} \right], \quad W = \frac{e^2}{\left| \vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)} \right|}\,, \tag{9.13-1}$$

so kann man die Lösung der Einteilchengleichung (9.12-4) und die Energieeigenwerte der Zentralfeldnäherung unmittelbar anschreiben. Nach Anhang A.4, Gl. (A.4-30) bis (A.4-35) und Anhang A.2, Gl. (A.2-30) gilt

$$u_{nlm_l}(\vec{r}) = \langle\, \vec{r}\,|\, nlm_l \,\rangle = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\Omega)\,; \tag{9.13-2a}$$

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}}\, e^{-r/a}\,, \qquad R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}\,, \tag{9.13-2b}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6a^3}}\, \frac{r}{2a}\, e^{-r/2a}\,; \tag{9.13-2c}$$

$$E_n^0 = -\frac{e^2}{a}\, \frac{1}{n^2}\,, \qquad a = \frac{a_0}{2} = \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}e^2}\,; \tag{9.13-3a}$$

$$E^0(1s, n) = -2\left[1 + \frac{1}{n^2}\right] \frac{e^2}{a_0}\,, \quad n \in \mathbb{N}\,; \tag{9.13-3b}$$

$$\frac{e^2}{a_0} = 4{,}35974 \cdot 10^{-11}\ \mathrm{erg} = 27{,}2114\ \mathrm{eV}. \tag{9.13-3c}$$

[13] Siehe dazu Reed, M., und B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics. Bd. IV: Analysis of Operators. Academic Press, New York 1978.

Die Energie von Gl. (9.13-3c) wird als 1 *atomare Energieeinheit* bzw. als 1 *hartree* bezeichnet. Beachte, dass in der Angabe die idealisierende Annahme eines ruhenden Kerns unendlicher Masse getroffen wurde.

Setzt man in die Definitionsgleichung (9.12-13) der direkten Integrale $J(1s\,nl)$ die Entwicklung (s. die Formel (A.2-16) von Anhang A.2)

$$W(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} = e^2\sum_{\lambda=0}^{\infty}\sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda}\frac{4\pi}{2\lambda+1}\,\frac{r_<^{\lambda}}{r_>^{\lambda+1}}\,Y^*_{\lambda\mu}(\Omega_1)\,Y_{\lambda\mu}(\Omega_2) \tag{9.13-4}$$

ein, so kann man die Raumwinkelintegrationen für Einteilchen-Eigenfunktionen der Form (9.13-2a) allgemein durchführen:

$$\begin{aligned}
J(1s\,nl) &= e^2\sum_{\lambda\mu}\int_0^{+\infty}dr_1\,r_1^2\left[R_{10}(r_1)\right]^2\int_0^{+\infty}dr_2\,r_2^2\,\frac{r_<^{\lambda}}{r_>^{\lambda+1}}\left[R_{nl}(r_2)\right]^2\\
&\quad\times\frac{4\pi}{2\lambda+1}\underbrace{\int_{[4\pi]}d\Omega_1\,\overbrace{Y^*_{00}(\Omega_1)}^{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}\,Y_{00}(\Omega_1)\,Y^*_{\lambda\mu}(\Omega_1)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,\delta_{\lambda0}\,\delta_{\mu0}}\underbrace{\int_{[4\pi]}d\Omega_2\,Y_{\lambda\mu}(\Omega_2)\,Y^*_{lm_l}(\Omega_2)\,Y_{lm_l}(\Omega_2)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\ \text{für}\ \lambda=\mu=0},\\
J(1s\,nl) &= e^2\int_0^{+\infty}dr_1\,r_1^2\left[R_{10}(r_1)\right]^2\int_0^{+\infty}dr_2\,r_2^2\,\frac{1}{r_>}\left[R_{nl}(r_2)\right]^2\\
&= e^2\int_0^{+\infty}dr_1\,r_1^2\left[R_{10}(r_1)\right]^2\left\{\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}dr_2\,r_2^2\left[R_{nl}(r_2)\right]^2+\int_{r_1}^{+\infty}dr_2\,r_2\left[R_{nl}(r_2)\right]^2\right\}.
\end{aligned} \tag{9.13-5}$$

Analog folgt aus Gl. (9.12-14)

$$\begin{aligned}
K(1s\,nl) &= \frac{e^2}{2l+1}\int_0^{+\infty}dr_1\,r_1^2\,R_{10}(r_1)\,R_{nl}(r_1)\int_0^{+\infty}dr_2\,r_2^2\,\frac{r_<^{l}}{r_>^{l+1}}\,R_{10}(r_2)\,R_{nl}(r_2)\\
&= \frac{e^2}{2l+1}\int_0^{+\infty}dr_1\,r_1^2\,R_{10}(r_1)\,R_{nl}(r_1)\left\{\frac{1}{r_1^{l+1}}\int_0^{r_1}dr_2\,r_2^{l+2}\,R_{10}(r_2)\,R_{nl}(r_2)\right.\\
&\qquad\left.+\,r_1^{l}\int_{r_1}^{+\infty}dr_2\,r_2^{-l+1}\,R_{10}(r_2)\,R_{nl}(r_2)\right\}.
\end{aligned} \tag{9.13-6}$$

Die Berechnung der Integrale $J(1s^2)$, $J(1s\,2s)$, $J(1s\,2p)$ und $K(1s\,2s)$, $K(1s\,2p)$ ist nun vollkommen elementar durchführbar, aber etwas langwierig (Einsetzen der Radialfunktio-

nen (9.13-2b), (9.13-2c) und Verwendung des in der Anleitung angegebenen unbestimmten Integrals). Die Ergebnisse lauten (s. auch Gl. (9.13-3c)):

$$J(1s^2) = \frac{5}{4}\frac{e^2}{a_0} = 34{,}014\,\text{eV}, \tag{9.13-7a}$$

$$J(1s\,2s) = \frac{34}{81}\frac{e^2}{a_0} = 11{,}422\,\text{eV}, \qquad J(1s\,2p) = \frac{118}{243}\frac{e^2}{a_0} = 13{,}214\,\text{eV}, \tag{9.13-7b}$$

$$K(1s\,2s) = \frac{2^5}{3^6}\frac{e^2}{a_0} = 1{,}194\,\text{eV}, \qquad K(1s\,2p) = \frac{7\cdot 2^5}{3^8}\frac{e^2}{a_0} = 0{,}929\,\text{eV}. \tag{9.13-7c}$$

Da die Austauschintegrale tatsächlich (wie in Aufgabe 9.12 angenommen) positiv sind, liegt bei gegebener Konfiguration das Triplettniveau jeweils tiefer als das Singulettniveau. Mit den ungestörten Energien

$$E^0(1s^2) = -4\,\frac{e^2}{a_0} = -108{,}846\,\text{eV}, \qquad E^0(1s,2) = -\frac{5}{2}\,\frac{e^2}{a_0} = -68{,}028\,\text{eV} \tag{9.13-8}$$

erhält man für die LS-Niveaus die Energien

$$E^{[1]}(1s^2\,{}^1S) = -74{,}83\,\text{eV}, \tag{9.13-9a}$$

$$E^{[1]}(1s\,2s\,{}^3S) = -57{,}80\,\text{eV}, \qquad E^{[1]}(1s\,2s\,{}^1S) = -55{,}41\,\text{eV}, \tag{9.13-9b}$$

$$E^{[1]}(1s\,2p\,{}^3P) = -55{,}74\,\text{eV}, \qquad E^{[1]}(1s\,2p\,{}^1P) = -53{,}89\,\text{eV}. \tag{9.13-9c}$$

Wie der Vergleich mit den experimentellen Werten von Abb. 9.12-1 zeigt, sind diese Energiewerte „nur“ um ein paar Prozent zu hoch (5,3 % beim Grundzustand). Da die LS-Niveaus zu den Konfigurationen $1s\,2s$ und $1s\,2p$ jedoch nahe beisammen liegen, sind mit diesen an sich nicht sehr großen Fehlern der Absolutwerte erhebliche Fehler (einige *hundert* Prozent) der Singulett-Triplett-Niveauabstände und sogar eine falsche energetische Reihenfolge der Terme $1s\,2s\,{}^1S$ und $1s\,2p\,{}^3P$ verbunden (s. Abb. 9.13-1).

Bemerkungen

Mit der Zerlegung (9.13-1) des Hamiltonoperators ergeben sich in erster Ordnung Störungstheorie Energiekorrekturen, welche von derselben Größenordnung sind wie die Abstände benachbarter ungestörter Niveaus. Dies zeigt, dass die „Störung“ W Gl. (9.13-1) *keine* „schwache“ Störung von H_0 Gl. (9.13-1) im Sinne der Störungstheorie darstellt. Wendet man dennoch eine solche Störungsrechnung an, so darf man sich nicht wundern, wenn man enttäuschende Ergebnisse erhält. Gute Ergebnisse kann man im Rahmen der Störungstheorie in erster Ordnung nur dann erhalten, wenn man den Hamiltonoperator in der Form (9.12-2) zerlegt und dabei im Zentralpotential $V_c(R)$ schon eine „mittlere“ Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigt (Abschirmung). Bezüglich einer geeigneten Wahl von $V_c(R)$ s. die Bemerkungen zu Aufgabe 9.12 und die Bemerkungen zu Aufgabe 9.14.

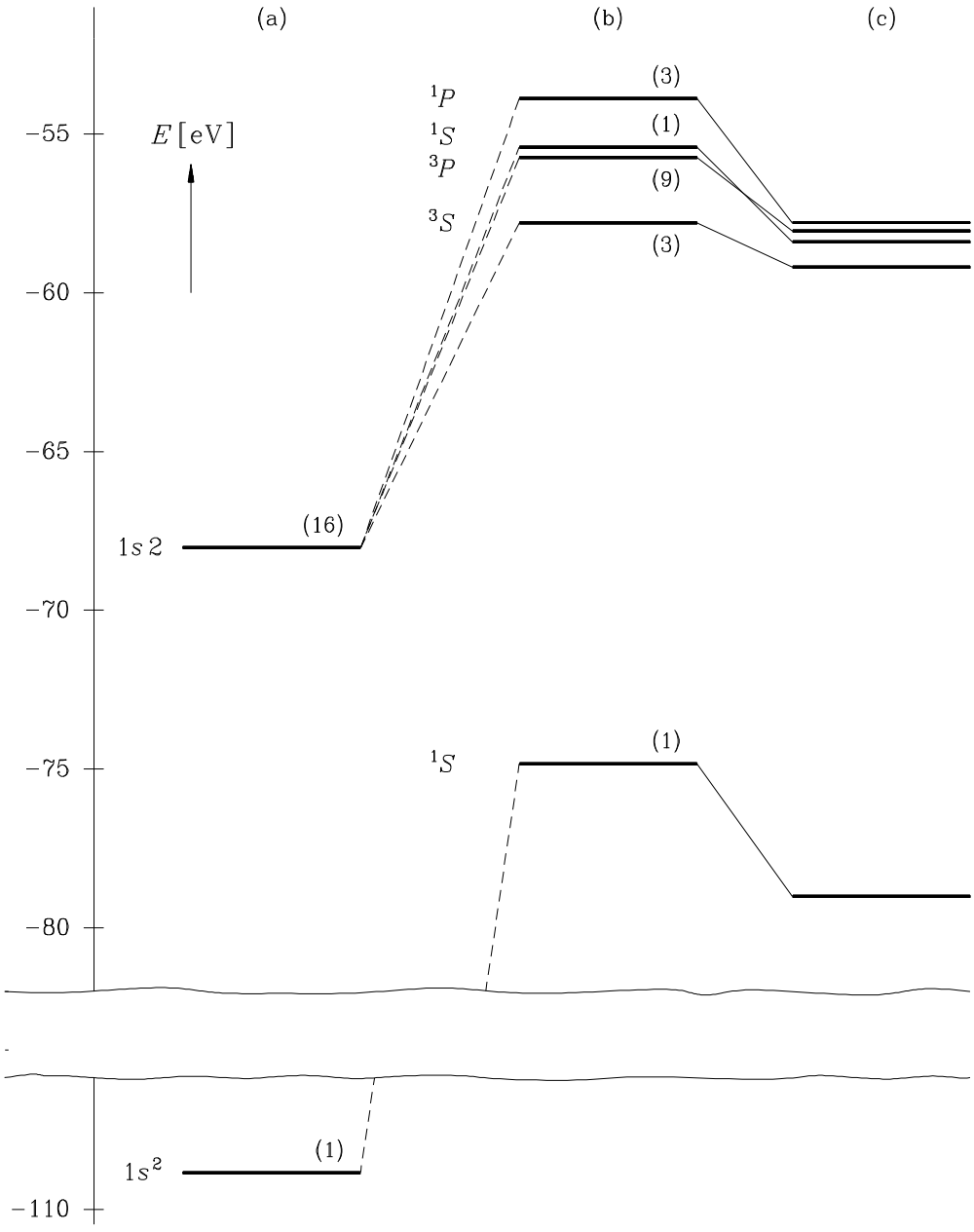


Abb. 9.13-1: Die niedrigsten Energieniveaus des Heliumatoms. (Die Zahlen in runden Klammern bedeuten die jeweiligen Vielfachheiten.)

(a) Zentralfeldnäherung mit H_0 Gl. (9.13-1);

(b) Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung W Gl. (9.13-1) in erster Ordnung Störungstheorie;

(c) experimentelle Werte für die Energieniveaus (s. auch Abb. 9.12-1)

Wir haben oben die Austauschintegrale $K(1s\,nl)$ für $n=2$, $l=0,1$ berechnet und positive Ausdrücke erhalten. Unter Verwendung des „Fourierintegrals“

$$\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3k\,\frac{4\pi}{k^2}\,\exp\left[i\vec{k}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\right] \tag{9.13-10}$$

kann man leicht zeigen, dass *alle* Austauschintegrale $K(1s\,nl)$ positiv sind, wenn

$$W(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \tag{9.13-11}$$

gilt. (Bezüglich der Formel (9.13-10) und des Grundes für die Anführungszeichen beim Wort Fourierintegral s. Aufgabe 3.16, Gl. (3.16-1b) bis Gl. (3.16-5).)

Die zur speziellen „Störung“ W Gl. (9.13-11) gehörigen direkten Integrale bezeichnet man auch als *Coulombintegrale.*

9.14*

(a) Ritzsches Verfahren (α Variationsparameter)

$$\widetilde{E}(\alpha) = \frac{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle}{\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle} \;\to\; \text{stationärer Wert}\,. \tag{9.14-1}$$

Die Einteilchenzustände $|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)}$ sind bezüglich $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}^{(i)}$ auf eins normiert,

$${}_{\mathrm{B}}^{(i)}\langle\,u(\alpha)\,|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)} = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,|u(\vec{r};\alpha)|^2 = \frac{\alpha^3}{\pi a_0^3}\,4\pi\int\limits_0^{+\infty} dr\,r^2\exp\left[-2\alpha\,\frac{r}{a_0}\right] = 1\,, \tag{9.14-2}$$

und somit sind die Versuchsvektoren

$$|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = |\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(1)}\,|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(2)}\,|\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}}\,, \tag{9.14-3a}$$

$$u(\vec{r};\alpha) \equiv {}_{\mathrm{B}}^{(i)}\langle\,\vec{r}\,|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)} = \left(\frac{\alpha^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\exp\left[-\alpha\,\frac{r}{a_0}\right]\,, \qquad i=1,2 \tag{9.14-3b}$$

$$a_0 := \frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{e}}e^2}\,, \quad |\,0\,0\,\rangle_{\mathrm{S}} \text{ s. Gl. (6.18-2)} \tag{9.14-3c}$$

bezüglich $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)}$ bzw. bezüglich $\mathscr{H}_{\mathrm{a}}\subset\mathscr{H}$ auf eins normiert:

$$\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle = 1\,. \tag{9.14-4}$$

Die Berechnung von $\langle\,\widetilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle$ vereinfacht sich beträchtlich, wenn man von der Tatsache Gebrauch macht, dass der Einteilchenzustand $|\,u(\alpha)\,\rangle$ als $1s$-Zustand eines wasserstoffähnlichen Ions mit der Kernladungszahl α interpretiert werden kann:

$$\left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_{\mathrm{e}}} - \frac{\alpha e^2}{R^{(i)}}\right]|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)} = E_1(\alpha)\,|\,u(\alpha)\,\rangle_{\mathrm{B}}^{(i)}\,, \qquad i=1,2 \tag{9.14-5a}$$

$$E_1(\alpha) = -\frac{\alpha^2}{2}\,\frac{e^2}{a_0}\,. \tag{9.14-5b}$$

Lösungsweg 1: Umschreiben des Hamiltonoperators
Schreibt man den Hamiltonoperator von Gl. (9.12-1) gemäß

$$H = \sum_{i=1}^{2}\left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_\mathrm{e}} - \frac{\alpha e^2}{R^{(i)}}\right] + \frac{e^2}{\left|\vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)}\right|} - \sum_{i=1}^{2}\frac{(2-\alpha)\,e^2}{R^{(i)}} \tag{9.14-6}$$

um und berücksichtigt man Gl. (9.14-5), d. h.

$$\sum_{i=1}^{2}\left[\frac{(\vec{P}^{(i)})^2}{2m_\mathrm{e}} - \frac{\alpha e^2}{R^{(i)}}\right] |\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle = 2\,E_1(\alpha)\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle\,, \tag{9.14-7}$$

so folgt wegen (9.14-2), (9.14-4)

$$\tilde{E}(\alpha) = \langle\,\tilde{u}(\alpha)\,|\,H\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle = 2\,E_1(\alpha) + J(\alpha) - 2\,D(\alpha) \tag{9.14-8}$$

mit

$$J(\alpha) := \langle\,\tilde{u}(\alpha)\,|\,\frac{e^2}{\left|\vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)}\right|}\,|\,\tilde{u}(\alpha)\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_1 \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r_2\,|u(\vec{r}_1;\alpha)|^2\,\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\,|u(\vec{r}_2;\alpha)|^2\,, \tag{9.14-9}$$

$$D(\alpha) := {}^{(1)}_{\mathrm{B}}\langle\,u(\alpha)\,|\,\frac{(2-\alpha)\,e^2}{R^{(1)}}\,|\,u(\alpha)\,\rangle^{(1)}_{\mathrm{B}} = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\,\frac{(2-\alpha)\,e^2}{r}\,|u(\vec{r};\alpha)|^2\,. \tag{9.14-10}$$

Der Zweiteilchen-Erwartungswert $J(\alpha)$ kann mithilfe der Entwicklung (9.13-4) berechnet werden. Da er sich von dem in Aufgabe 9.13 auf diese Weise berechneten Integral $J(1s^2)$ nur dadurch unterscheidet, dass die $1s$-Funktion $u(\vec{r};\alpha)$ eines Coulombpotentials $-Ze^2/R$ mit $Z = \alpha$ an die Stelle der $1s$-Funktion $u_{100}(\vec{r})$ für $Z = 2$ tritt [s. Gl. (9.12-13)], führe ich die Rechnung hier nicht nochmals in allen Einzelheiten durch. Ersetzen von $2e^2$ in dem in Gl. (9.13-7a) aufscheinenden Ausdruck $(5/4)(e^2/a_0) = (5/8)(2e^2/a_0)$ durch αe^2 gibt

$$J(\alpha) = \frac{5\alpha}{8}\,\frac{e^2}{a_0}\,. \tag{9.14-11}$$

Für den Einteilchen-Erwartungswert $D(\alpha)$ ergibt sich

$$D(\alpha) = \frac{4\alpha^3}{a_0^3}\,(2-\alpha)\,e^2 \int\limits_0^{+\infty} dr\,r\,\exp\left[-2\alpha\,\frac{r}{a_0}\right] = (2-\alpha)\,\alpha\,\frac{e^2}{a_0}\,, \tag{9.14-12}$$

und man erhält

$$\tilde{E}(\alpha) = \left[\alpha - \frac{27}{8}\right]\alpha\,\frac{e^2}{a_0}\,, \qquad \frac{d\tilde{E}(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_0 = \frac{27}{16} = 2 - \frac{5}{16} = 1{,}6875\,; \tag{9.14-13}$$

$$\tilde{E} \equiv \tilde{E}(\alpha_0) = -\left[2 - \frac{5}{16}\right]^2\,\frac{e^2}{a_0} = -\left(\frac{27}{16}\right)^2\,\frac{e^2}{a_0} = -77{,}49\,\mathrm{eV}\,. \tag{9.14-14}$$

Lösungsweg 2: Anwendung des Virialtheorems auf die Einteilchen-Erwartungswerte
Mit dem Hamiltonoperator (9.12-1) folgt wegen (9.14-2), (9.14-4)

$$\widetilde{E}(\alpha) = 2\,F(\alpha) + J(\alpha) \tag{9.14-15}$$

mit $J(\alpha)$ gemäß Gl. (9.14-9) bzw. (9.14-11) und

$$F(\alpha) := {}^{(1)}_{\mathrm{B}}\langle\, u(\alpha)\,|\left[\frac{(\vec{P}^{(1)})^2}{2m_\mathrm{e}} - \frac{2e^2}{R^{(1)}}\right]|\, u(\alpha)\,\rangle^{(1)}_{\mathrm{B}}\,. \tag{9.14-16}$$

Nach dem Virialtheorem gilt beim Coulombpotential für einen Energieeigenzustand zu einem diskreten Eigenwert E_k die Beziehung (s. Gl. (4.6-7)) $2\,\langle\, T\,\rangle = -\langle\, V\,\rangle$ und somit $\langle\, T\,\rangle = -\langle\, H\,\rangle = -E_k \;\Rightarrow\; \langle\, V\,\rangle = 2\,\langle\, H\,\rangle = 2E_k$. Anwendung auf den $1s$-Zustand beim Coulombpotential $-\alpha e^2/R$ gibt mit (9.14-5)

$${}^{(1)}_{\mathrm{B}}\langle\, u(\alpha)\,|\,\frac{(\vec{P}^{(1)})^2}{2m_\mathrm{e}}\,|\, u(\alpha)\,\rangle^{(1)}_{\mathrm{B}} = \frac{\alpha^2}{2}\,\frac{e^2}{a_0}\,, \tag{9.14-17a}$$

$${}^{(1)}_{\mathrm{B}}\langle\, u(\alpha)\,|\left[-\frac{\alpha e^2}{R^{(1)}}\right]|\, u(\alpha)\,\rangle^{(1)}_{\mathrm{B}} = \frac{\alpha}{2}\;{}^{(1)}_{\mathrm{B}}\langle\, u(\alpha)\,|\left[-\frac{2e^2}{R^{(1)}}\right]|\, u(\alpha)\,\rangle^{(1)}_{\mathrm{B}} = -\alpha^2\,\frac{e^2}{a_0}\,, \tag{9.14-17b}$$

und daraus folgt für den gesuchten Einteilchen-Erwartungswert (9.14-16)

$$F(\alpha) = \left[\frac{\alpha^2}{2} - 2\alpha\right]\frac{e^2}{a_0}\,. \tag{9.14-18}$$

Einsetzen von (9.14-18) und (9.14-11) in (9.14-15) gibt wieder den Ausdruck (9.14-13) für $\widetilde{E}(\alpha)$.

(b) Im Rahmen der Gültigkeit der Russel-Saunders-Zustandsbeschreibung (Zentralfeldnäherung plus LS-Addition) ist der Grundzustand des Heliumatoms als $1s^2\,{}^1S$-Zustand zu klassifizieren. (Siehe Aufgabe 9.12.) Die Versuchsvektoren (9.14-3) sind antisymmetrisch (d. h. $|\,\widetilde{u}(\alpha)\,\rangle$ gehört für beliebiges $\alpha > 0$ dem Zustandsraum $\mathscr{H}_\mathrm{a} \subset \mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$ an) und besitzen $1s^2\,{}^1S$-Charakter. Es war deshalb eine obere Schranke $\widetilde{E}$ für die Grundzustandsenergie E_0 zu erwarten, welche näher bei E_0 als bei einem der Anregungsniveaus liegt.

Bemerkungen

Der Näherungswert (9.14-14) für die Grundzustandsenergie sowie der zugehörige näherungsweise Eigenvektor $|\,\widetilde{u}(\alpha_0)\,\rangle$ können auch im Rahmen einer störungstheoretischen Behandlung erhalten werden wie sie in Aufgabe 9.12(b) allgemein formuliert und in den Bemerkungen dazu erläutert wurde. Setzt man für das Zentralpotential $V_\mathrm{c}(R)$ in Gl. (9.12-2a), (9.12-4) nicht wie in Aufgabe 9.13 das unabgeschirmte Kernpotential, sondern ein Potential der Form (9.12-17b) mit der Abschirmkonstante $\sigma = 5/16$ an, so erhält man in der Zentralfeldnäherung die Grundzustandsenergie

$$E^0(1s^2) = 2\,E_1(\alpha_0) = -\alpha_0^2\,\frac{e^2}{a_0} = -\Big(\frac{27}{16}\Big)^2\,\frac{e^2}{a_0} = \widetilde{E} = -77{,}49\,\mathrm{eV}\,. \tag{9.14-19}$$

(Vergleiche mit dem Wert für $E^0(1s^2)$ von (9.13-8), der sich in der Zentralfeldnäherung mit H_0 gemäß (9.13-1) ergibt.) Berechnet man hierauf die störungstheoretische Energiekorrektur erster Ordnung für die entsprechende „Störung“

$$W = \frac{e^2}{|\vec{R}^{(1)} - \vec{R}^{(2)}|} - \sum_{i=1}^{2} \frac{\sigma e^2}{R^{(i)}} \,, \qquad \sigma = \frac{5}{16} \,, \tag{9.14-20}$$

so erhält man für diese (s. Gl. (9.12-8) bis (9.12-10)) den Wert null:

$$\epsilon^{(1)}(1s^2) = J(1s^2) = J(\alpha_0) - 2\,D(\alpha_0) = 0\,. \tag{9.14-21}$$

Der im Sinne des Variationsverfahrens für den Grundzustand optimale α-Wert ist somit auch im Rahmen der Störungstheorie für den Grundzustand in einem bestimmten Sinne optimal. Für die effektive Kernladungszahl α_0 liefert die entsprechende Störung in erster Ordnung keinen Beitrag zur Grundzustandsenergie, d. h. es gilt

$$E^{[1]}(1s^2\,{}^1S) = E^0(1s^2) = -\alpha_0^2\,\frac{e^2}{a_0} = -77{,}49\,\mathrm{eV}\,. \tag{9.14-22}$$

Während die störungstheoretische Behandlung von Aufgabe 9.13 (H_0, W gemäß (9.13-1)) für $E^{[1]}(1s^2\,{}^1S)$ einen Wert ergibt, welcher um 5,3 % zu hoch ist (s. Gl. (9.13-9a) bzw. Abb. 9.13-1), weicht der Wert (9.14-22) nur um 1,9 % vom experimentellen Wert ab. Viel genauere Werte kann man auch mit noch „besseren“ Zentralpotentialen $V_c(R)$ nicht erhalten. Wählt man für $V_c(R)$ das im Sinne des Variationsprinzips *optimale* „self-consistent-field“, welches man numerisch aus dem Hartree-Fock-Verfahren gewinnt, so erhält man[14] $E(1s^2\,{}^1S) = -77{,}91$ eV, was noch immer 1,4 % vom experimentellen Wert abweicht.

Um noch genauere Näherungswerte für die Grundzustandsenergie zu erhalten, muss man das Konzept der Konfiguration gänzlich aufgeben und für die „Bahnfunktion“ eine symmetrische Linearkombination geeigneter Funktionen von $r_1 = |\vec{r}_1|$, $r_2 = |\vec{r}_2|$ *und* $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ansetzen. C. L. Pekeris erhielt mithilfe eines sehr aufwendigen Ansatzes dieser Art[15] als obere Schranke für die Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators (9.12-1) den Wert $-2{,}903724375$ atomare Einheiten, was mit dem Wert für e^2/a_0 von Gl. (9.13-3c) $\widetilde{E} = -79{,}0144$ eV ergibt. Eine zugehörige *untere Schranke* konnte Pekeris unter Verwendung einer Formel von G. Temple ebenfalls angeben: $-2{,}903726615$ atomare Einheiten. Obere und untere Schranke weichen um weniger als 10^{-4} % voneinander ab. Die wachsende Präzision der Wellenlängenmessungen der optischen Übergänge von Helium machte es aber erforderlich, die Genauigkeit der Berechnungen weiter zu steigern. D. E. Freund *et al.* erhielten mit einem Ansatz mit 230 Variationsparametern für die Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators (9.12-1) den Wert $-2{,}9037243770340$ atomare Einheiten.[16] Die Abweichung dieses Wertes vom (unbekannten) exakten Eigenwert ist nach Abschätzung von Freund *et al.* kleiner als 10^{-11} %.

[14] Siehe z. B. Mizushima, M.: Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure. W. A. Benjamin, Inc., New York 1970.
[15] Pekeris, C. L.: Phys. Rev. 115, 1216 (1959); 126, 1472 (1962).
[16] Freund, D. E., B. D. Huxtable und J. D. Morgan III: Phys. Rev. A29, 980 (1984).

Auf analoge Weise lassen sich auch die *Anregungsniveaus* des Heliumatoms mithilfe des Variationsverfahrens behandeln. Man setzt für die „Bahnfunktion“ für Singulettzustände eine symmetrische und für Triplettzustände eine antisymmetrische Linearkombination geeigneter Funktionen von $r_1 = |\vec{r}_1|$, $r_2 = |\vec{r}_2|$, $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, ϑ_1, φ_1 und ϑ_2, φ_2 an. Mit aufwendigen Ansätzen (teilweise mehr als tausend Variationsparameter) erhält man für die Anregungsenergien Näherungswerte vergleichbarer Genauigkeit wie für die Grundzustandsenergie.[17]

Für den Vergleich mit den experimentellen Daten müssen für die Energieniveaus des Hamiltonoperators (9.12-1) natürlich noch die Korrekturen berechnet werden, welche die Endlichkeit der Kernmasse sowie die relativistischen und quantenfeldtheoretischen Effekte berücksichtigen.[17]

[17] Kono, A., und S. Hattori: Phys. Rev. A29, 2981 (1984); A31, 1199 (1985); A34, 1727 (1986); Drake, G. W. F.: Phys. Rev. Lett. 59, 1549 (1987); Nucl. Instrum. and Meth. B31, 7 (1988); Drake, G. W. F., und A. J. Makowski: J. Opt. Soc. Am. B5, 2207 (1988).

Testaufgaben

Wer die Aufgaben 9.1 bis 9.14 ganz selbständig lösen konnte, kann die folgenden zusätzlichen Aufgaben mit bestem Gewissen überspringen. Studierende, die jedoch i. Allg. den Lösungsteil zu Hilfe nehmen mussten, können anhand der folgenden Testaufgaben überprüfen, wieweit sie beim Durcharbeiten der Musterlösungen zu den Aufgaben 9.1 bis 9.14 gelernt haben, auf eigenen Beinen zu stehen.

T9.1 (Betrachtet wird das Wasserstoffatom, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen.)

Die Zustandsfunktion eines Wasserstoffatoms besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Form ($N \in \mathbb{R}^+$ Normierungskonstante)

$$\psi(\vec{r}) = N \, \frac{r^2}{a_{\mathrm{H}}^2} \, e^{-r/a_{\mathrm{H}}} \,, \qquad r = |\vec{r}| \,.$$

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses zum betreffenden Zeitpunkt den Messwert $+\hbar$ zu erhalten.

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der Energie zum betreffenden Zeitpunkt den Messwert $E_2 = -\hbar^2/8ma_{\mathrm{H}}^2$ zu erhalten.

(c) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron zum betreffenden Zeitpunkt in einem Abstand $r < a_{\mathrm{H}}$ vom Proton anzutreffen.

(Anleitung: Es ist vorteilhaft, wenn man Einheiten mit $\hbar = m = e = 1$ [*atomare Einheiten*] verwendet, also Abstände in Einheiten a_{H} und Energien in Einheiten $\hbar^2/ma_{\mathrm{H}}^2$ angibt, und erst wieder bei den Ergebnissen zu den konventionellen Einheiten übergeht.

Verwende die Energieeigenfunktionen

$$u_{200}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2a_{\mathrm{H}}^3}} \Big(1 - \frac{r}{2a_{\mathrm{H}}}\Big) \, e^{-r/2a_{\mathrm{H}}} \, Y_{00}(\Omega) \,,$$

$$u_{21m_l}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{6a_{\mathrm{H}}^3}} \, \frac{r}{2a_{\mathrm{H}}} \, e^{-r/2a_{\mathrm{H}}} \, Y_{1m_l}(\Omega) \,, \quad m_l = 0, \pm 1$$

und die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho \, \rho^\nu \, e^{-\beta\rho} = \frac{\nu!}{\beta^{\nu+1}} \,, \qquad \nu \in \mathbb{N}_0 \,, \quad \beta \in \mathbb{R}^+ .)$$

Ergebnis zu (b): $W = \dfrac{2^{20}}{5 \cdot 3^{12}} = 0{,}3946$; Ergebnis zu (c): $W = 1 - \dfrac{331}{45} \, e^{-2} = 0{,}00453$.

T9.2 Der Hamiltonoperator eines gestörten Wasserstoffatoms sei durch

$$H = H_0 + W\,, \qquad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{R}\,,$$

$$W = \lambda\,(X^2 - Y^2) = \lambda\,\sqrt{\frac{8\pi}{15}}\,R^2\Big[Y_{22}(\Theta,\Phi) + Y_{2,-2}(\Theta,\Phi)\Big]\,, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+$$

gegeben. Bestimme, welche Aufspaltung sich für das Energieniveau von H_0 mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ in erster Ordnung Störungstheorie *qualitativ* ergibt (Art der Aufspaltung, Vielfachheiten der erhaltenen Niveaus).

(Anleitung: Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann als bekannt angesehen werden; siehe insbesondere Gl. (9.4-1) bis (9.4-5). Die explizite Berechnung der benötigten Matrixelemente des Störoperators W ist nicht verlangt. Es genügt zu untersuchen, welche dieser Matrixelemente null und welche der von null verschiedenen Matrixelemente gleich sind. Für diese Überlegungen ist die Clebsch-Gordan-Reihe (A.2-11) von Anhang A.2 nützlich.)

T9.3 (Betrachtet wird das Wasserstoffatom, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen.)

Ein Wasserstoffatom befinde sich zur Zeit $t_0 = -\infty$ im Grundzustand. Berechne in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, das Wasserstoffatom zur Zeit $t = +\infty$ in einem $2p$-Zustand anzutreffen, wenn es im Zeitintervall $(-\infty, +\infty)$ der Wirkung des zeitabhängigen homogenen elektrischen Feldes $\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathcal{E}(t)\,\vec{e}_z$ mit

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0\,\frac{T^2}{t^2 + T^2}$$

($\mathcal{E}_0, T \in \mathbb{R}^+$) unterworfen ist. Unter welcher Voraussetzung bzgl. der Größe von $\mathcal{E}_0$ und T ist die Beschränkung auf erste Ordnung Störungstheorie möglich?

(Anleitung: Es ist vorteilhaft, wenn man Einheiten mit $\hbar = m = e = 1$ [*atomare Einheiten*] verwendet, also Abstände in Einheiten a_{H} und Energien in Einheiten $\hbar^2/ma_{\mathrm{H}}^2$ angibt, und erst wieder bei den Ergebnissen zu den konventionellen Einheiten übergeht.

Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann als bekannt angesehen werden; siehe insbesondere Gl. (9.4-1) bis (9.4-5). Beachte Gl. (6.27-1) und verwende die Formeln

$$\int_0^{+\infty} d\rho\,\rho^\nu\,e^{-\beta\rho} = \frac{\nu!}{\beta^{\nu+1}}\,, \quad \nu \in \mathbb{N}_0\,, \quad \beta \in \mathbb{R}^+; \qquad \int_{\mathbb{R}} d\tau\,\frac{e^{i\omega\tau}}{\tau^2 + T^2} = \frac{\pi}{T}\,e^{-\omega T}\,, \quad T \in \mathbb{R}^+.)$$

Ergebnis: $$W^{[1]}_{1s\to 2p}(+\infty,-\infty) = \pi^2\,\frac{2^{15}}{3^{10}}\,\mathcal{E}_0^2\,T^2\,\frac{a_{\mathrm{H}}}{m}\,\exp\Big[-\frac{3\hbar T}{4ma_{\mathrm{H}}^2}\Big]\,.$$

T9.4 (Betrachtet wird das Wasserstoffatom, und zwar ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen.)

Ein Wasserstoffatom befinde sich in einem homogenen zeitlich konstanten elektrischen Feld $\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}, 0, 0)$, $\mathcal{E} > 0$, und in einem dazu *senkrechten* homogenen zeitlich konstanten Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$, $B > 0$. Der Einfluss der beiden Felder auf die Energieniveaus des Atoms sei von gleicher Größenordnung. Die Felder seien einerseits so stark, dass die zugehörigen Niveauaufspaltungen groß sind gegenüber der Feinstrukturaufspaltung, andrerseits nicht zu stark, sodass erste Ordnung Störungstheorie brauchbare Ergebnisse liefert (*kombinierter Stark- und Paschen-Back-Effekt*).

(a) Schreibe den Störoperator W an.

(b)* Bestimme, welche Aufspaltung sich für das Energieniveau von H_0 mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ in erster Ordnung Störungstheorie bei Vernachlässigung relativistischer Korrekturen ergibt (Art der Aufspaltung, Abstände und Vielfachheiten der erhaltenen Niveaus).

(Anleitung: Beachte die Beziehung [siehe Gl. (6.27-1)]

$$X = X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(R^{(1)}_{-1} - R^{(1)}_{1})\,, \qquad R^{(1)}_{\pm 1} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,R\,Y_{1,\pm 1}(\Theta, \Phi)\,.$$

Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 kann als bekannt angesehen werden; siehe insbesondere Gl. (9.4-1) bis (9.4-5).)

Ergebnis zu (b):

$$\left.\begin{aligned} \epsilon^{(1)}_{21} &= -\sqrt{(3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}})^2 + (\mu_{\mathrm{B}}B)^2} \\ \epsilon^{(1)}_{22} &= \epsilon^{(1)}_{23} = 0 \\ \epsilon^{(1)}_{24} &= +\sqrt{(3e\mathcal{E}a_{\mathrm{H}})^2 + (\mu_{\mathrm{B}}B)^2} \end{aligned}\right\} \quad E^{[1]}_{2\nu} = E^0_2 + \epsilon^{(1)}_{2\nu}\,, \quad \nu = 1, 2, 3, 4\,.$$

Für $B = 0$ erhält man daraus wieder die Ergebnisse (9.4-14) für den reinen Starkeffekt und für $\mathcal{E} = 0$ erhält man die Ergebnisse für den reinen Paschen-Back-Effekt ohne Berücksichtigung des Spins (Ausdruck (9.11-1b) ohne Spinbeitrag und mit E^0_{nl} ersetzt durch E^0_n).

T9.5 Ein Einelektronatom befinde sich im $n\,^2P_{1/2}$-Zustand mit $m_j = -\frac{1}{2}$, d. h. im Energieeigenzustand $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ mit den Quantenzahlen $l = 1$, $j = \frac{1}{2}$ und $m_j = -\frac{1}{2}$.

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit $W(\Omega)\,d\Omega$ dafür, das Elektron bei einer Ortsmessung an irgendeinem Ort im Raumwinkel $d\Omega$ um $\Omega = (\vartheta, \varphi)$ anzutreffen ($W(\Omega)$ Antreffwahrscheinlichkeitsdichte).

(b) Berechne die Unbestimmtheit der z-Komponente des Bahndrehimpulses.

(c) Berechne den Erwartungswert der durch den Operator $3L_z^2 - \vec{L}^2$ repräsentierten Observablen.

(d) Der Operator $3L_z^2 - \vec{L}^2$ stellt — wie man zeigen kann[18] — die Nullkomponente eines irreduziblen Tensoroperators vom Rang 2 in Bezug auf den Bahndrehimpuls $\vec{L}$ und wegen $[S_j, L_k] = \mathbb{0}$, $\forall\, j, k$, auch in Bezug auf den Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ dar. Auf welche Weise lässt sich das Ergebnis von (c) bei Kenntnis dieser Tatsache unmittelbar folgern?

(Hinweis: Die für die Berechnung der gefragten Größen benötigten Operatoren wirken in der $\{\vec{r}\, m_s\}$-Darstellung *alle* nur auf den Winkel-Spin-Teil der Spinorfunktion, den Kugelspinor. Es ist daher für die Berechnung dieser Größen gleichgültig, ob man relativistische Korrekturen einbezieht, also j-abhängige Radialfunktionen $R_{nlj}(r)$ annimmt, oder „nichtrelativistische" Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ zugrunde legt. Die Radialfunktionen gehen lediglich in Form ihres Normierungsintegrals ein, welches voraussetzungsgemäß den Wert eins besitzt. Man kann also der einfacheren Rechnung halber annehmen, dass der Zustandsvektor $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ Eigenvektor eines Hamiltonoperators der Form $H = \vec{P}^2/2m + V(R)$ ist und sich somit als Linearkombination von Vektoren $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, m_l\, m_s \,\rangle$ schreiben lässt.)

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten und die Formeln für die Kugelflächenfunktionen von Anhang A.2.)

Ergebnis zu (a): $W(\Omega) = \dfrac{1}{4\pi}\,.$

T9.6 Ein Einelektronatom befinde sich im $n\,^2D_{5/2}$-Zustand mit $m_j = \frac{3}{2}$, d. h. im Energieeigenzustand $|\, n\, l\, \frac{1}{2}\, j\, m_j \,\rangle$ mit den Quantenzahlen $l = 2$, $j = \frac{5}{2}$ und $m_j = \frac{3}{2}$.

(a) Berechne die Wahrscheinlichkeit $W_+(\Omega)\, d\Omega$ dafür, das Elektron bei einer Messung des Observablenpaares $\{\,\textit{Teilchenort}, \textit{z-Komponente des Spins}\,\}$ an irgendeinem Ort im Raumwinkel $d\Omega$ um $\Omega = (\vartheta, \varphi)$ mit Spin „auf" anzutreffen ($W_+(\Omega)$ Antreffwahrscheinlichkeitsdichte).

(b) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung des durch den Operatorensatz $\{L_z, S_z\}$ repräsentierten Observablensatzes das Messwertpaar

$$\text{(b1)}\quad \{+\hbar, -\tfrac{\hbar}{2}\}; \qquad \text{(b2)}\quad \{+2\hbar, -\tfrac{\hbar}{2}\}$$

zu finden.

(c) Berechne den Erwartungswert der z-Komponente des Bahndrehimpulses.

(d) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses den Messwert $+\hbar$ zu finden.

(e) Berechne den Erwartungswert der z-Komponente des Spins.

[18] Siehe dazu die Aufgabe T6.13.

(f) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der z-Komponente des Spins den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ zu finden.

(g) Berechne den Erwartungswert der x-Komponente des Spins.

(h) Berechne die Wahrscheinlichkeit dafür, bei einer Messung der x-Komponente des Spins den Messwert $+\frac{\hbar}{2}$ zu finden.

(Siehe den Hinweis zu Aufgabe T9.5.)

(Anleitung: Verwende die Tabelle A.7-3 für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten und die Formeln für die Kugelflächenfunktionen von Anhang A.2.)

Ergebnis zu (a): $$W_+(\Omega) = \frac{3}{8\pi}\sin^2 2\vartheta\,.$$

T9.7 Der Hamiltonoperator eines Einelektronatoms sei

$$H = H_0 + W_{\mathrm{FS}}\,, \qquad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(R)\,, \qquad W_{\mathrm{FS}} = \Gamma(R)\,\vec{L}\cdot\vec{S}\,.$$

Die Lösung des Eigenwertproblems von H_0 sei bekannt, die zugehörigen diskreten Eigenwerte seien bezüglich l nicht entartet: E^0_{nl}.

Berechne die durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung in erster Ordnung Störungstheorie bedingte Feinstrukturaufspaltung eines $n\,^2F$-Termes (f-Niveaus), skizziere das Aufspaltungsbild und gib alle Vielfachheiten an.

(Anleitung: Verwende die Abkürzung [$R_{nl}(r)$ Radialfunktion zu H_0]

$$\zeta(nl) := \hbar^2 \int_0^{+\infty} dr\, r^2\, \Gamma(r)\,[R_{nl}(r)]^2\,.)$$

(Hinweis: Die in erster Ordnung Störungstheorie gefundene Entartung der Feinstrukturniveaus bleibt aufgrund der Drehinvarianz von $H = H_0 + W_{\mathrm{FS}}$ in *allen* Ordnungen der Störungstheorie erhalten.)

T9.8

(a) Berechne die im Fall eines „schwachen“ Magnetfeldes durch die Störung

$$W_{\mathrm{B}} = \frac{\mu_{\mathrm{B}} B}{\hbar}\,(L_z + 2\,S_z)$$

in erster Ordnung Störungstheorie bedingte Zeemanaufspaltung des $n\,^2D_{5/2}$-Feinstrukturniveaus eines Einelektronatoms, skizziere das Aufspaltungsbild und gib alle Vielfachheiten an.

(b) Welche Symmetrieeigenschaft „verbietet“ E1-Strahlungsübergänge zwischen den Zeemanniveaus von Punkt (a)?

(c) Zeichne in das erhaltene Niveauschema die möglichen M1- und E2-Strahlungsübergänge ein. Wie viele Spektrallinien resultieren aus diesen Übergängen und wie lauten die zugehörigen Frequenzen?

(Anleitung: Die Auswahlregeln für M1- und E2-Übergänge können als bekannt angesehen werden; siehe (9.9-26), (9.9-32), (9.9-20) und (9.9-23)).

T9.9

(a) Berechne die im Fall eines „starken“ Magnetfeldes durch die Störung

$$W_{\mathrm{B}} = \frac{\mu_{\mathrm{B}} B}{\hbar} \left(L_z + 2\, S_z\right)$$

in erster Ordnung Störungstheorie bedingte Paschen-Back-Aufspaltung des $n\,^2F$-Termes (f-Niveaus) eines Einelektronatoms, skizziere das Aufspaltungsbild und gib alle Vielfachheiten an.

(b) Welche Symmetrieeigenschaft „verbietet“ E1-Strahlungsübergänge zwischen den Paschen-Back-Niveaus von Punkt (a)?

(c) Zeichne in das erhaltene Niveauschema die möglichen M1- und E2-Strahlungsübergänge ein. Wie viele Spektrallinien resultieren aus diesen Übergängen und wie lauten die zugehörigen Frequenzen?

(Anleitung: Die Auswahlregeln für M1- und E2-Übergänge können als bekannt angesehen werden; siehe (9.9-26), (9.9-32), (9.9-20) und (9.9-23)).

Teil III

Anhänge und Verzeichnisse

Anhang A

Formelsammlung

A.1. Diracsche Deltafunktion

„Limes“-Darstellung (Grenzübergang *nach* x-Integration)

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0+} y(x;\epsilon) \tag{A.1-1}$$

mit

$$y(x;\epsilon) = \frac{1}{\pi}\,\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2} \quad \text{oder} \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\epsilon}\,e^{-x^2/2\epsilon^2} \quad \text{oder} \quad \frac{1}{\pi\epsilon}\,\frac{\sin(x/\epsilon)}{x/\epsilon} \tag{A.1-2a}$$

$$\text{oder} \quad \frac{1}{\pi\epsilon}\Big[\frac{\sin(x/\epsilon)}{x/\epsilon}\Big]^2 \quad \text{oder} \quad \frac{1}{\epsilon}\,[\Theta(x+\frac{\epsilon}{2}) - \Theta(x-\frac{\epsilon}{2})] \quad (\Theta \text{ s. (A.1-3)})\,. \tag{A.1-2b}$$

Darstellung als Ableitung

$$\Theta(x) := \begin{cases} 1 & \text{für } x>0 \\ 0 & \text{für } x<0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \frac{d|x|}{dx} = \Theta(x) - \Theta(-x)\,; \tag{A.1-3}$$

$$\delta(x) = \frac{d\Theta(x)}{dx} = \frac{1}{2}\,\frac{d^2|x|}{dx^2}\,. \tag{A.1-4}$$

Eigenschaften

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, f(x)\,\delta(x-x_0) = f(x_0) \quad (\text{VS: } f \text{ stetig für } x=x_0)\,; \tag{A.1-5}$$

$$\delta(-x) = \delta(x)\,, \qquad x\,\delta(x) = 0\,, \tag{A.1-6}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x) \quad (a\neq 0)\,, \qquad f(x)\,\delta(x-x_0) = f(x_0)\,\delta(x-x_0)\,, \tag{A.1-7}$$

$$\delta[g(x)] = \sum_n \frac{\delta(x-x_n)}{|g'(x_n)|}\,, \quad \text{wobei} \quad g(x_n)=0\,, \quad g'(x_n)\neq 0\,; \tag{A.1-8}$$

$$\delta[(x-a)(x-b)] = \frac{\delta(x-a)+\delta(x-b)}{|a-b|} \quad (a\neq b)\,; \tag{A.1-9}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dy\,\delta(x-y)\,\delta(y-x_0) = \delta(x-x_0)\,. \tag{A.1-10}$$

Ableitungen

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, f(x)\, \delta^{(n)}(x - x_0) \;=\; (-1)^n f^{(n)}(x_0) \quad (\text{VS: } \exists\, f^{(n)}(x_0))\,; \tag{A.1-11}$$

$$\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n\, \delta^{(n)}(x)\,, \qquad x^n\, \delta^{(n)}(x) = (-1)^n\, n!\, \delta(x)\,, \tag{A.1-12}$$

$$\delta^{(n)}(ax) \;=\; \frac{1}{a^n |a|}\, \delta^{(n)}(x) \quad (a \neq 0)\,, \qquad x^{n+1}\, \delta^{(n)}(x) = 0\,; \tag{A.1-13}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dy\, \delta^{(m)}(x - y)\, \delta^{(n)}(y - x_0) = \delta^{(m+n)}(x - x_0)\,. \tag{A.1-14}$$

„Dreidimensionale“ δ-Funktion

(x, y, z kartesische Koordinaten; r, ϑ, φ Kugelkoordinaten)

$$\begin{aligned} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \;&=\; \delta(x - x_0)\, \delta(y - y_0)\, \delta(z - z_0) && \text{(A.1-15)} \\ &= \frac{\delta(r - r_0)}{r^2}\, \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta_0)\, \delta(\varphi - \varphi_0) \\ &= \frac{\delta(r - r_0)}{r^2}\, \frac{\delta(\vartheta - \vartheta_0)}{\sin\vartheta}\, \delta(\varphi - \varphi_0)\,. && \text{(A.1-16)} \end{aligned}$$

Es gilt

$$\Delta\, \frac{1}{r} = -4\pi\, \delta(\vec{r})\,. \tag{A.1-17}$$

„Fourier“-Darstellung (k-Integration *nach* x-Integration)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dk\, e^{ikx}\,, \tag{A.1-18}$$

$$\delta'(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dk\, ik\, e^{ikx}\,. \tag{A.1-19}$$

Summendarstellungen

Siehe die Vollständigkeitsbeziehungen bei den orthogonalen Funktionensystemen. Die Summationen sind jeweils *nach* den Integrationen über die betreffenden Variablen durchzuführen (z. B. (A.2-3): Summation über m *nach* φ-Integration).

A.2. Vollständige Orthonormalsysteme

Bei den *speziellen Funktionen der mathematischen Physik* werden in der Literatur zum Teil verschiedene Definitionen oder (und) Bezeichnungen verwendet. „Mixt“ man unkritisch Formeln aus verschiedenen Quellen, so kann das „ins Auge gehen“. Um festzustellen, ob, und falls ja, welche Unterschiede es zwischen den benützten Quellen gibt, vergleicht man Differentialdarstellungen oder Definitionen mithilfe erzeugender Funktionen oder Reihenentwicklungen.

Der Aufbau der vorliegenden Aufgabensammlung begann um 1970. *Das* Standardwerk der mathematischen Physik war zu dieser Zeit „der Morse-Feshbach“.[1] Die Definitionen und Bezeichnungen der speziellen Funktionen der mathematischen Physik wurden aus diesem Werk u. a. von [3] und [7] übernommen, und da zu dieser Zeit „der Messiah“ allgemein als *das* Standardlehrbuch der Quantentheorie anerkannt war, war es nur natürlich, dass ich mich hinsichtlich dieser Definitionen und Bezeichnungen zur Gänze [3] anschloss.

Beispiele für *abweichende* Definitionen und Bezeichnungen:

Zugeordnete legendresche Kugelfunktionen

Die Funktionen P_l^m von [2] unterscheiden sich (im Einklang mit dem mathematischen Nachschlagewerk [37]) von „unseren“ P_l^m um den Faktor $(-1)^m$.

Sphärische Besselfunktionen

Die Definition der sphärischen Neumannfunktionen von [2] und [6] unterscheidet sich von unserer Definition im Vorzeichen. Während die sphärischen Neumannfunktionen in dieser Aufgabensammlung mit n_l bezeichnet werden, werden sie in [2] (wie in [37]) mit y_l und in [6] mit η_l bezeichnet. Als sphärische Hankelfunktionen werden in [2] statt $h_l^{(\pm)}$ die Funktionen $h_l^{(1)} = -ih_l^{(+)}$, $h_l^{(2)} = +ih_l^{(-)}$ verwendet (ebenfalls im Einklang mit [37]).

Zugeordnete Laguerrepolynome

Bei diesen Funktionen geht es am „buntesten“ zu. Bezeichne ich „unsere“ Funktionen mit L_p^k, so gilt für die Funktionen von [2] (im Einklang mit den mathematischen Nachschlagewerken [36] und [37])

$$[L_p^k(\rho)]_{\text{Galindo}} = \frac{1}{\Gamma(p+k+1)}\, L_p^k(\rho)\,,$$

für die Funktionen von [6]

$$[L_p^k(\rho)]_{\text{Davydov}} = \frac{p!}{\Gamma(p+k+1)}\, L_p^k(\rho)$$

und für die Funktionen von [8] gar

$$[L_p^k(\rho)]_{\text{Grawert}} = (-1)^k\, L_{p-k}^k(\rho)\,.$$

Schwabl[2] verwendet dieselbe Definition wie Grawert.

Trigonometrische Funktionen

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi}\,, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\,; \tag{A.2-1}$$

Orthogonalität

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\, \Phi_m^*(\varphi)\, \Phi_{m'}(\varphi) = \delta_{mm'}\,; \tag{A.2-2}$$

[1] Morse, Ph. M., und H. Feshbach: Methods of Theoretical Physics. 2 Bde., Mc Graw-Hill Book Company, New York 1953. Reprint: Feshbach Publishing, Minneapolis 2009.

[2] Schwabl, F.: Quantenmechanik. Springer-Verlag, Berlin 2007.

Vollständigkeit

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \Phi_m^*(\varphi)\,\Phi_m(\varphi') = \delta(\varphi-\varphi')\,. \tag{A.2-3}$$

Kugelflächenfunktionen

Differentialdarstellung

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; P_l^m(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}\,, \tag{A.2-4}$$

$$l \in \mathbb{N}_0\,,\quad m = l, l-1, \ldots, -l$$

mit den zugeordneten legendreschen Kugelfunktionen

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^l}{2^l\, l!}\,(1-x^2)^{m/2}\,\frac{d^{\,l+m}}{dx^{\,l+m}}\,(1-x^2)^l\,, \tag{A.2-5}$$

$$l \in \mathbb{N}_0\,,\quad m = l, l-1, \ldots, -l\,,$$

deren erzeugende Funktion durch (A.2-6)

$$\frac{(2m)!\,(1-x^2)^{m/2}}{2^m\, m!\,(1-2xt+t^2)^{m+1/2}} \;=\; \sum_{l=0}^{\infty} P_{l+m}^m(x)\, t^l\,, \qquad |t|<1 \tag{A.2-7}$$

gegeben ist. (Für $m=0$ erhält man daraus die erzeugende Funktion der Legendrepolynome $P_l(x) \equiv P_l^0(x)$.)

Differentialgleichung

$$\Big[\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\,(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \;+\; \frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \;+\; l(l+1)\Big] Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \;=\; 0\,; \tag{A.2-8}$$

Orthogonalität

$$\int\limits_{[4\pi]} d\Omega\, Y_{lm}^*(\Omega)\, Y_{l'm'}(\Omega) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,, \qquad \Omega \equiv (\vartheta,\varphi)\,,\quad d\Omega \equiv \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi\,,$$
$$\int\limits_{[4\pi]} d\Omega \ldots \equiv \int\limits_0^{\pi} d\vartheta\,\sin\vartheta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \ldots \tag{A.2-9}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{lm} Y_{lm}^*(\Omega)\, Y_{lm}(\Omega') = \delta(\Omega-\Omega')\,, \qquad \delta(\Omega-\Omega') \equiv \frac{\delta(\vartheta-\vartheta')}{\sin\vartheta}\,\delta(\varphi-\varphi')\,; \tag{A.2-10}$$

Clebsch-Gordan-Reihe (Clebsch-Gordan-Koeffizienten s. Anhang A.7)

$$Y_{\lambda\mu}(\Omega)\, Y_{lm}(\Omega) \;=\; \sum_{L=|l-\lambda|}^{l+\lambda} \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2l+1)}{4\pi(2L+1)}}\;\langle\, l\,\lambda\, m\,\mu \,|\, L, m+\mu\,\rangle\langle\, l\,\lambda\, 0\, 0 \,|\, L\, 0\,\rangle\, Y_{L,\,m+\mu}(\Omega)\,. \tag{A.2-11}$$

Speziell gilt

$$Y^*_{lm}(\Omega) = (-1)^m\, Y_{l,-m}(\Omega)\,, \quad Y_{lm}(\pi-\vartheta,\varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad (\text{„Parität“}); \tag{A.2-12}$$

$$Y_{00}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,; \quad Y_{10}(\Omega) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\vartheta\,, \quad Y_{1,\pm1}(\Omega) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}\,; \tag{A.2-13}$$

$$Y_{20}(\Omega) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\vartheta - 1)\,, \qquad Y_{2,\pm1}(\Omega) = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{\pm i\varphi}\,, \tag{A.2-14}$$

$$Y_{2,\pm2}(\Omega) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\varphi}\,; \tag{A.2-15}$$

Entwicklung der greenschen Funktion des Laplaceoperators (s. Gl. (A.1-17))

$$\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} = \sum_{lm}\frac{4\pi}{2l+1}\,\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\,Y^*_{lm}(\Omega_1)\,Y_{lm}(\Omega_2)\,, \tag{A.2-16}$$

$$r_< = r_1,\ r_> = r_2 \quad \text{für} \quad r_1 < r_2\,;$$
$$r_< = r_2,\ r_> = r_1 \quad \text{für} \quad r_1 > r_2\,.$$

Hermitepolynome

Differentialdarstellung

$$H_n(\xi) = (-1)^n\, e^{\xi^2}\,\frac{d^n}{d\xi^n}\,e^{-\xi^2}\,, \quad n\in\mathbb{N}_0\,; \tag{A.2-17}$$

erzeugende Funktion

$$\exp\left[-t^2+2\xi t\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}\,t^n\,; \tag{A.2-18}$$

Rekursionsformeln

$$2\xi\,H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2n\,H_{n-1}(\xi)\,, \quad H_n'(\xi) = 2n\,H_{n-1}(\xi)\,; \tag{A.2-19}$$

Differentialgleichung

$$\Big[\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\,\frac{d}{d\xi} + 2n\Big]H_n(\xi) = 0\,; \tag{A.2-20}$$

Orthogonalität

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}\,2^n\,n!}\int\limits_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{-\xi^2}\,H_n(\xi)\,H_{n'}(\xi) = \delta_{nn'}\,; \tag{A.2-21}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi}\,2^n\,n!}\,e^{-\xi^2}\,H_n(\xi)\,H_n(\xi') = \delta(\xi-\xi')\,. \tag{A.2-22}$$

Speziell gilt

$$H_0(\xi) = 1\,, \quad H_1(\xi) = 2\xi\,, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2\,, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi\,. \tag{A.2-23}$$

Zugeordnete Laguerrepolynome

Differentialdarstellung

$$L_p^k(\rho) \;=\; \frac{\Gamma(p+k+1)}{p!}\,\frac{e^{\rho}}{\rho^k}\,\frac{d^p}{d\rho^p}\Big[\rho^{p+k}\,e^{-\rho}\Big]\,,\quad p\in\mathbb{N}_0\,,\;\; k\in\mathbb{R}\,; \tag{A.2-24}$$

erzeugende Funktion

$$\frac{e^{-\rho t/(1-t)}}{(1-t)^{k+1}} \;=\; \sum_{p=0}^{\infty}\frac{L_p^k(\rho)}{\Gamma(p+k+1)}\,t^p\,,\qquad |t|<1\,; \tag{A.2-25}$$

Rekursionsformel

$$\rho\,L_p^k(\rho) \;=\; (2p+k+1)\,L_p^k(\rho) \;-\; \frac{p+1}{p+k+1}\,L_{p+1}^k(\rho) \;-\; (p+k)^2\,L_{p-1}^k(\rho)\,; \tag{A.2-26}$$

Differentialgleichung

$$\Big[\rho\,\frac{d^2}{d\rho^2} \;+\; (k+1-\rho)\,\frac{d}{d\rho} \;+\; p\Big]L_p^k(\rho) \;=\; 0\,; \tag{A.2-27}$$

Orthogonalität

$$\frac{p!}{\big[\Gamma(p+k+1)\big]^3}\int_0^{+\infty}\!\!d\rho\,\rho^k\,e^{-\rho}\,L_p^k(\rho)\,L_{p'}^k(\rho) \;=\; \delta_{pp'}\,; \tag{A.2-28}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{p=0}^{\infty}\frac{p!}{\big[\Gamma(p+k+1)\big]^3}\,\rho^k\,e^{-\rho}\,L_p^k(\rho)\,L_p^k(\rho') \;=\; \delta(\rho-\rho')\,. \tag{A.2-29}$$

Speziell gilt

$$L_0^k(\rho)=\Gamma(k+1)\,,\quad L_1^k(\rho)=\Gamma(k+2)\,(k+1-\rho)\,,\quad k\in\mathbb{R}\,; \tag{A.2-30a}$$

$$\big[\,\Gamma(1)=1\,,\quad \Gamma(\tfrac{1}{2})=\sqrt{\pi}\,,\quad \Gamma(k+1)=k\,\Gamma(k)\,\big]$$

$$L_1^0(\rho)=1-\rho\,,\quad L_1^1(\rho)=4-2\rho\,,\quad L_1^2(\rho)=18-6\rho\,,\quad L_1^3(\rho)=96-24\rho\,. \tag{A.2-30b}$$

Sphärische Besselfunktionen

Differentialdarstellung

$$j_l(\rho)=(-\rho)^l\Big[\frac{1}{\rho}\,\frac{d}{d\rho}\Big]^l\Big[\frac{\sin\rho}{\rho}\Big]\,,\qquad n_l(\rho)=(-\rho)^l\Big[\frac{1}{\rho}\,\frac{d}{d\rho}\Big]^l\Big[\frac{\cos\rho}{\rho}\Big]\,, \tag{A.2-31}$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho)=n_l(\rho)\pm i\,j_l(\rho)\,,\quad l\in\mathbb{N}_0\,; \tag{A.2-32}$$

Rekursionsformel (z_l beliebige Linearkombination von j_l und n_l bzw. von $h_l^{(+)}$ und $h_l^{(-)}$)

$$(2l+1)\,z_l(\rho)=\rho\,\big[z_{l+1}(\rho)+z_{l-1}(\rho)\big]\,; \tag{A.2-33}$$

Differentialgleichung

$$\Big[\frac{d^2}{d\rho^2} \;+\; \frac{2}{\rho}\,\frac{d}{d\rho} \;+\; 1 \;-\; \frac{l(l+1)}{\rho^2}\Big]z_l(\rho)=0\,; \tag{A.2-34}$$

Verhalten für kleine bzw. für große Werte des Argumentes

$$j_l(\rho \to 0+) \longrightarrow \frac{\rho^l}{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1)}\,, \qquad j_l(\rho \to +\infty) \longrightarrow \frac{\sin\left(\rho - l\pi/2\right)}{\rho}\,, \tag{A.2-35}$$

$$n_l(\rho \to 0+) \longrightarrow \frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l+1)}{2l+1}\,\frac{1}{\rho^{l+1}}\,, \quad n_l(\rho \to +\infty) \longrightarrow \frac{\cos\left(\rho - l\pi/2\right)}{\rho}\,, \tag{A.2-36}$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho \to +\infty) \longrightarrow \frac{\exp\left[\pm i(\rho - l\pi/2)\right]}{\rho}\,; \tag{A.2-37}$$

Orthogonalität und Vollständigkeit der am Ursprung regulären Funktionen

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} dr\, r^2 j_l(kr)\, j_l(k'r) \;=\; \frac{\delta(k-k')}{k^2}\,, \qquad \frac{2}{\pi}\int_0^{+\infty} dk\, k^2 j_l(kr)\, j_l(kr') \;=\; \frac{\delta(r-r')}{r^2}\,. \tag{A.2-38}$$

Speziell gilt

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}\,, \qquad n_0(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho}\,, \qquad h_0^{(\pm)}(\rho) = \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}\,; \tag{A.2-39}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}\,, \quad n_1(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho^2} + \frac{\sin\rho}{\rho}\,, \quad h_1^{(\pm)}(\rho) = \Big[\frac{1}{\rho^2} \mp \frac{i}{\rho}\Big] e^{\pm i\rho}\,. \tag{A.2-40}$$

Entwicklung der „ebenen Welle“

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \;=\; 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr)\, Y_{lm}^*(\Omega_{\vec{k}})\, Y_{lm}(\Omega_{\vec{r}})\,, \tag{A.2-41}$$

$$e^{ikr\cos\vartheta} \;=\; \sum_l (2l+1)\, i^l j_l(kr)\, P_l(\cos\vartheta) \qquad \left[P_l(x) \equiv P_l^0(x)\right]. \tag{A.2-42}$$

Drehmatrizen

Differentialdarstellung der Drehmatrixelemente

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha m'}\, d_{m'm}^{(j)}(\beta)\, e^{-i\gamma m}\,, \quad \begin{array}{l} j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots\,; \\ m', m = j, j-1, \ldots, -j \end{array} \tag{A.2-43}$$

mit

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m'-m} \sqrt{\frac{(j-m')!\,(j+m')!}{(j-m)!\,(j+m)!}} \Big[\sin\frac{\beta}{2}\Big]^{m'-m} \Big[\cos\frac{\beta}{2}\Big]^{m'+m} P_{j-m'}^{(m'-m,\,m'+m)}(\cos\beta) \tag{A.2-44}$$

und den Jacobipolynomen

$$P_n^{(r,s)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}\,(1-x)^{-r}\,(1+x)^{-s}\,\frac{d^n}{dx^n}\big[(1-x)^{n+r}\,(1+x)^{n+s}\big]\,; \tag{A.2-45}$$

Differentialgleichung

$$\Big[\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\,(\sin\beta\,\frac{\partial}{\partial\beta}) + \frac{1}{\sin^2\beta}\,(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} - 2\cos\beta\,\frac{\partial^2}{\partial\alpha\,\partial\gamma}) + j(j+1)\Big] D_{m'm}^{(j)}(\alpha\beta\gamma) \;=\; 0; \tag{A.2-46}$$

Orthogonalität

$$\frac{2j+1}{16\pi^2}\int\limits_{[16\pi^2]} d\omega\, D^{(j)*}_{m_1m_2}(\omega)\, D^{(j')}_{m_1'm_2'}(\omega) = \delta_{jj'}\,\delta_{m_1m_1'}\,\delta_{m_2m_2'}\,, \quad \omega \equiv (\alpha,\beta,\gamma)\,, \tag{A.2-47}$$

$$d\omega \equiv \sin\beta\, d\alpha\, d\beta\, d\gamma\,, \quad \int\limits_{[16\pi^2]} d\omega \ldots \equiv \int\limits_0^{2\pi} d\alpha \int\limits_0^{\pi} d\beta\, \sin\beta \int\limits_0^{4\pi} d\gamma \ldots \tag{A.2-48}$$

Als Parameter der Drehgruppe SO(3), welche Drehungen im dreidimensionalen euklidischen Raum beschreibt, stellen α, β, γ die *Eulerwinkel* dar, deren Bereiche durch Gl. (A.11-1) von Anhang A.11 gegeben sind. Als Parameter der Gruppe SU(2) kann γ jedoch Werte aus dem Intervall $[0, 4\pi)$ annehmen. In (A.2-47) ist über das gesamte „Gruppenvolumen“ der Gruppe SU(2) zu integrieren, wenn die Formel auch für halbzahliges $j - j'$ gelten soll.

Vollständigkeit

$$\sum_{j m_1 m_2} \frac{2j+1}{16\pi^2}\, D^{(j)*}_{m_1m_2}(\omega)\, D^{(j)}_{m_1m_2}(\omega') \;=\; \delta(\omega-\omega')\,, \tag{A.2-49}$$

$$\delta(\omega-\omega') \;\equiv\; \delta(\alpha-\alpha')\,\frac{\delta(\beta-\beta')}{\sin\beta}\,\delta(\gamma-\gamma')\,;$$

Clebsch-Gordan-Reihe (Clebsch-Gordan-Koeffizienten s. Anhang A.7)

$$D^{(j_1)}_{\mu_1m_1}(\omega)\, D^{(j_2)}_{\mu_2m_2}(\omega) \;=\; \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \langle\, j_1 j_2 \mu_1\mu_2 \,|\, j, \mu_1+\mu_2 \,\rangle \langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j, m_1+m_2 \,\rangle\, D^{(j)}_{\mu_1+\mu_2, m_1+m_2}(\omega)\,. \tag{A.2-50}$$

Speziell gilt

$$D^{(j)*}_{m'm}(\omega) = (-1)^{m'-m}\, D^{(j)}_{-m',-m}(\omega)\,; \quad D^{(l)}_{m0}(\alpha\beta\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y^*_{lm}(\beta,\alpha)\,, \quad l \in \mathbb{N}_0\,; \tag{A.2-51}$$

$$D^{(0)}_{00}(\alpha\beta\gamma) \;=\; 1\,, \tag{A.2-52}$$

$$\widehat{D}^{(\frac{1}{2})}(\alpha\beta\gamma) = \begin{bmatrix} e^{-i\alpha/2}\,\cos\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2} & -e^{-i\alpha/2}\,\sin\frac{\beta}{2}\,e^{i\gamma/2} \\ e^{i\alpha/2}\,\sin\frac{\beta}{2}\,e^{-i\gamma/2} & e^{i\alpha/2}\,\cos\frac{\beta}{2}\,e^{i\gamma/2} \end{bmatrix}, \tag{A.2-53}$$

$$\widehat{D}^{(1)}(\alpha\beta\gamma) \;=\; \begin{bmatrix} e^{-i\alpha}\,\frac{1}{2}(1+\cos\beta)\,e^{-i\gamma} & -e^{-i\alpha}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,\sin\beta & e^{-i\alpha}\,\frac{1}{2}(1-\cos\beta)\,e^{i\gamma} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\,\sin\beta\,e^{-i\gamma} & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\,\sin\beta\,e^{i\gamma} \\ e^{i\alpha}\,\frac{1}{2}(1-\cos\beta)\,e^{-i\gamma} & e^{i\alpha}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,\sin\beta & e^{i\alpha}\,\frac{1}{2}(1+\cos\beta)\,e^{i\gamma} \end{bmatrix}. \tag{A.2-54}$$

Die Zeilen und Spalten sind nach fallenden Werten von m' bzw. m indiziert.

A.3. Diracformalismus

A.3.1. Mathematischer Hintergrund

Lineare Funktionale auf einem komplexen Hilbertraum

Es sei $\mathscr{H} = \{f, g, \dots\}$ ein komplexer Hilbertraum. Eine Abbildung $F\colon \mathscr{H} \to \mathbb{C}$

$$f \in \mathscr{H} \longrightarrow F(f) \in \mathbb{C} \tag{A.3-1}$$

heißt *lineares Funktional* auf $\mathscr{H}$, wenn

$$(1)\quad F(f+g) = F(f) + F(g)\,, \tag{A.3-2a}$$

$$(2)\quad F(\alpha f) = \alpha\, F(f) \tag{A.3-2b}$$

gilt. Gilt außerdem

$$(3)\quad |F(u)| \le a\,\|u\|\,, \quad a \in \mathbb{R}^+, \quad \forall u \in \mathscr{H}, \tag{A.3-2c}$$

so heißt das lineare Funktional *beschränkt*.

Darstellungssatz von Riesz. Der zu einem komplexen Hilbertraum duale Hilbertraum

(a) Es existiert eine eineindeutige Zuordnung zwischen den Vektoren h eines komplexen Hilbertraumes $\mathscr{H}$ und den Elementen F der Menge $\mathscr{H}^\dagger$ der beschränkten linearen Funktionale auf $\mathscr{H}$, geschrieben

$$h \in \mathscr{H} \longleftrightarrow F_h \in \mathscr{H}^\dagger\,, \tag{A.3-3}$$

sodass

$$F_h(u) = (h, u)\,, \quad \forall u \in \mathscr{H} \tag{A.3-4}$$

gilt (*Darstellungssatz von Riesz*).

(b) Die Menge $\mathscr{H}^\dagger$ stellt mit den Abbildungen

$$\mathscr{H}^\dagger \times \mathscr{H}^\dagger \longrightarrow \mathscr{H}^\dagger\colon \qquad F_f + F_g = F_{f+g}\,, \tag{A.3-5a}$$

$$\mathbb{C} \times \mathscr{H}^\dagger \longrightarrow \mathscr{H}^\dagger\colon \qquad \alpha F_f = F_{\alpha^* f}\,, \tag{A.3-5b}$$

$$\mathscr{H}^\dagger \times \mathscr{H}^\dagger \longrightarrow \mathbb{C}\colon \qquad (F_f, F_g)^\dagger = (g, f) \tag{A.3-5c}$$

einen komplexen Hilbertraum dar, welchen man als den zu $\mathscr{H}$ *dualen Hilbertraum* bezeichnet [$(\,.\,,\,.\,) \equiv (\,.\,,\,.\,)_{\mathscr{H}}$, $(\,.\,,\,.\,)^\dagger \equiv (\,.\,,\,.\,)_{\mathscr{H}^\dagger}$ innere Produkte in $\mathscr{H}$ bzw. in $\mathscr{H}^\dagger$].

(c) Die Hilberträume $\mathscr{H}$ und $\mathscr{H}^\dagger$ sind *isomorph* und es gilt $(\mathscr{H}^\dagger)^\dagger = \mathscr{H}$.

A.3.2. Schreibweise in der Mathematik und Diracschreibweise

Im Folgenden steht das Operatorsymbol A für einen *linearen* Operator.

Schreibweise in der Mathematik	Diracschreibweise
$\mathscr{H} = \{f, g, \dots\}$ komplexer Hilbertraum	$\mathscr{H} = \{\lvert f\rangle, \lvert g\rangle, \dots\}$ Ketraum
$f \in \mathscr{H}$	$\lvert f\rangle \in \mathscr{H}$ Ket (Ketvektor)
$f + g$	$\lvert f\rangle + \lvert g\rangle$
αf	$\alpha \lvert f\rangle$
(f, g) inneres Produkt in $\mathscr{H}$	kein „exklusives“ Symbol (s. unten)
$\mathscr{H}^\dagger = \{F_f, F_g, \dots\}$ zu $\mathscr{H}$ dualer Hilbertraum	$\mathscr{H}^\dagger = \{\langle f\rvert, \langle g\rvert, \dots\}$ Braraum
$F_f \in \mathscr{H}^\dagger$	$\langle f\rvert \in \mathscr{H}^\dagger$ Bra (Bravektor)
$F_{f+g} = F_f + F_g$	$\langle f\rvert + \langle g\rvert$
$F_{\alpha f} = \alpha^* F_f$	$\alpha^* \langle f\rvert$
$(F_f, F_g)^\dagger$ inneres Produkt in $\mathscr{H}^\dagger$	kein „exklusives“ Symbol (s. unten)
Darstellungssatz von Riesz: $F_u(f) = (u, f)\,, \quad \forall f \in \mathscr{H}$	Kann man nur „trivial“ anschreiben, da „zu wenig Symbole“ (s. unten).
$(u, f)\,,$ $u, f \in \mathscr{H}$	Problematik:
$F_u(f)\,,$ $F_u \in \mathscr{H}^\dagger,\ f \in \mathscr{H}$	$\exists$ nur <u>ein</u> Symbol, nämlich
$(F_f, F_u)^\dagger,$ $F_f, F_u \in \mathscr{H}^\dagger$	$\langle u \rvert f\rangle$ Bracket
$h = Af$	$\lvert h\rangle = A \lvert f\rangle$
$F_h = F_{Af}$	$\langle h\rvert = \langle f\rvert A^\dagger$
(g, Af) sinnvoll für $f \in \mathscr{D}_A,\ g \in \mathscr{H}$	Problematik:
$(A^\dagger g, f)$ sinnvoll für $f \in \mathscr{H},\ g \in \mathscr{D}_{A^\dagger}$	$\exists$ nur <u>ein</u> Symbol, nämlich
$(g, Af) = (A^\dagger g, f)$ für $f \in \mathscr{D}_A,\ g \in \mathscr{D}_{A^\dagger}$	$\langle g \rvert A \rvert f\rangle$

Bemerkungen:

1) Dirac führte seinen Formalismus rein intuitiv – ohne Kenntnis der mathematischen Theorie der Hilberträume – ein. Ein Formalismus, in dem der Darstellungssatz von Riesz nicht als *Theorem* ableitbar, sondern lediglich in der trivialen Form $\langle u \rvert f\rangle = \langle u \rvert f\rangle$ „eingebaut“ ist, kann zwar (solange nur Vektoren und auf dem ganzen Hilbertraum definierte Operatoren vorkommen) nicht zu Fehlern führen, ist aber für die Mathematik selbst ungeeignet.

2) „Treffen“ bei einer Rechnung ein Bra und ein Ket in der Reihenfolge Bra, Ket „aufeinander“, so ist einer der senkrechten Balken wegzulassen, es entsteht ein Bracket-Ausdruck.

3) In $\langle g | A | f \rangle$ kann man den Operator nach freier Wahl *entweder* nach „links“ *oder* nach „rechts“ wirken lassen:

$$\underbrace{\langle g | A}_{\langle u |} | f \rangle = \langle u | f \rangle = \langle g | \underbrace{A | f \rangle}_{| h \rangle} = \langle g | h \rangle .$$

4) Warum $| h \rangle = A | f \rangle \longleftrightarrow \langle h | = \langle f | A^\dagger$? Damit „stimmt“ *formal* „alles zusammen“:

$$\begin{aligned} h = A f \quad &\Rightarrow \quad (g,h) = (g, A f) = (A^\dagger g, f) \quad = (f, A^\dagger g)^*, \\ | h \rangle = A | f \rangle \quad &\Rightarrow \quad \langle g | h \rangle = \langle g | A | f \rangle = \langle h | g \rangle^* = \langle f | A^\dagger | g \rangle^*. \end{aligned}$$

5) In der Quantenmechanik spielen nicht beschränkte selbstadjungierte Operatoren eine überragende Rolle. Diese Operatoren können prinzipiell nicht auf ganz $\mathscr{H}$ definiert sein. Achtet man nicht auf Definitionsbereichsfragen – und im Diracformalismus ist dies grundsätzlich nicht möglich –, so kann das zum „Schiffbruch“ führen. Konkrete Beispiele dazu findet der Leser in den Bemerkungen zu Aufgabe 3.11.

A.3.3. Diracschreibweise: Formale Rechenregeln

Operator steht im Folgenden ausnahmslos für *linearer* Operator, Zahl steht ausnahmslos für *komplexe* Zahl. Weiters benütze ich für die zu den Größen Zahl, Vektor und Operator dualen Größen synonym zur Bezeichnung *dual* die Bezeichnung *adjungiert* sowie das Symbol †.

Übergang zu den dualen (adjungierten) Größen

$\mathscr{G}$	$\mathscr{G}^\dagger$
α	α^*
$\| f \rangle$	$\langle f \|$
A	$A^\dagger$

(1) $(\mathscr{G}^\dagger)^\dagger = \mathscr{G}$

(2) $(\mathscr{G}_1 + \mathscr{G}_2)^\dagger = \mathscr{G}_1^\dagger + \mathscr{G}_2^\dagger$

(3) $(\mathscr{G}_1 \mathscr{G}_2)^\dagger = \mathscr{G}_2^\dagger \mathscr{G}_1^\dagger$

Daraus folgt für $\mathscr{G} = \beta^*$, $\langle g |$, $B^\dagger$, dass $\mathscr{G}^\dagger = \beta$, $| g \rangle$, B gilt.

Definierte Ausdrücke $\mathscr{G}_1 + \mathscr{G}_2$ (Operation, Ergebnis)

(1) $\alpha + \beta$ (Addition von Zahlen, Ergebnis: Zahl)

(2) $| f \rangle + | g \rangle$ (Addition von Ketvektoren, Ergebnis: Ketvektor)

(3) $\langle u | + \langle v |$ (Addition von Bravektoren, Ergebnis: Bravektor)

(4) $A + B$ (Addition von Operatoren, Ergebnis: Operator)

Additive Verknüpfungen sind grundsätzlich nur für Größen gleichen Typs sinnvoll. *Nicht* sinnvoll sind daher Ausdrücke wie $\alpha + | f \rangle$, $\beta + \langle g |$, $\gamma + A$ (wohl aber $\gamma \mathbb{1} + A$ mit dem Einheitsoperator $\mathbb{1}$, wofür viele „schlampig“ $\gamma + A$ schreiben), $| f \rangle + \langle g |$, $| f \rangle + A$ und $\langle g | + B$.

Der Leser beachte, dass es sich bei den vier definierten additiven Verknüpfungen um begrifflich *verschiedene* Verknüpfungen handelt. Würde man dafür verschiedene Symbole, etwa $+$, $\oplus$, $\boxplus$, $\uplus$ einführen, so würde dies die Notation aber viel zu sehr belasten.

Für alle additiven Verknüpfungen gilt das *kommutative Gesetz*: $\mathscr{G}_1 + \mathscr{G}_2 = \mathscr{G}_2 + \mathscr{G}_1$.

Definierte Ausdrücke $\mathscr{G}_1\mathscr{G}_2$ (Operation, Ergebnis)

(1)	$\alpha\beta = \beta\alpha$	(Multiplikation von Zahlen, Ergebnis: Zahl)
(2)	$\alpha \mid f \rangle = \mid f \rangle \alpha$	(Multiplikation einer Zahl mit einem Ketvektor, Ergebnis: Ketvektor)
(3)	$\langle g \mid \beta = \beta \langle g \mid$	(Multiplikation einer Zahl mit einem Bravektor, Ergebnis: Bravektor)
(4)	$\alpha A = A \alpha$	(Multiplikation einer Zahl mit einem Operator, Ergebnis: Operator)
(5)	$\mid f \rangle\langle g \mid$	(„Multiplikation“ Ketvektor „mal“ Bravektor, Ergebnis: *dyadisches Produkt* = Operator)
(6)	$\langle g \mid f \rangle$	(„Multiplikation“ Bravektor „mal“ Ketvektor, Ergebnis: *inneres Produkt* = Zahl)
(7)	$A \mid f \rangle$	(Operator wirkt auf einen Ketvektor, Ergebnis: Ketvektor)
(8)	$\langle g \mid B$	(Operator wirkt auf einen Bravektor, Ergebnis: Bravektor)
(9)	AB	(Multiplikation von Operatoren, Ergebnis: Operator)

Der Leser beachte, dass es sich begrifflich um *verschiedene* Arten von „multiplikativen Verknüpfungen“ handelt.

Nicht sinnvoll ist $\mid f \rangle \mid g \rangle$ mit $\mid f \rangle, \mid g \rangle \in \mathscr{H}$; wohl aber $\mid f \rangle^{(1)} \otimes \mid g \rangle^{(2)} \in \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$, das direkte Produkt eines Ketvektors aus $\mathscr{H}^{(1)}$ und eines Ketvektors aus $\mathscr{H}^{(2)}$, wofür man meist $\mid f \rangle^{(1)} \mid g \rangle^{(2)}$ oder sogar $\mid f \rangle \mid g \rangle$ schreibt (Reihenfolge der Kets durch Reihenfolge der Faktorräume festgelegt). Analoges gilt für $\langle u \mid \langle v \mid$, ferner sind $A \langle f \mid$, $\mid g \rangle B$ nicht sinnvoll.

Daraus sieht man schon, dass es sinnvolle Ausdrücke $\mathscr{G}_1\mathscr{G}_2$ gibt, für die $\mathscr{G}_2\mathscr{G}_1$ *nicht* sinnvoll ist. Dies trifft in den Fällen (7), (8) zu. In den Fällen (5), (6) sind $\mathscr{G}_1\mathscr{G}_2$ und $\mathscr{G}_2\mathscr{G}_1$ von verschiedenem Typ, nur in den Fällen (1) bis (4) und (9) sind sie vom gleichen Typ. Dabei liegt aber nur in den Fällen (1) bis (4) generelle „Vertauschbarkeit“ $\mathscr{G}_1\mathscr{G}_2 = \mathscr{G}_2\mathscr{G}_1$ vor.

Frage: Ist $\langle u \mid f \rangle \mid g \rangle$ ein sinnvoller Ausdruck?
Antwort: Ja, es handelt sich um einen Ketvektor:

$$\underbrace{\underbrace{\langle u \mid f \rangle}_{\text{Zahl}}\underbrace{\mid g \rangle}_{\text{Ket}}}_{\text{Ket}} = \underbrace{\underbrace{\mid g \rangle}_{\text{Ket}}\underbrace{\langle u \mid f \rangle}_{\text{Zahl}}}_{\text{Ket}} = \underbrace{\underbrace{(\mid g \rangle\langle u \mid)}_{\text{Operator}}\underbrace{\mid f \rangle}_{\text{Ket}}}_{\text{Ket}}, \qquad \text{aber: } \cancel{\langle u \mid (\mid f \rangle \mid g \rangle)}.$$

Bemerkung: Wird bei einer Rechnung ein Bracket-Ausdruck – wie hier für die dritte Form – „auseinander gerissen“, so ist ein zusätzlicher senkrechter Balken einzufügen.

Die Testaufgabe T1.2 gibt dem Leser die Gelegenheit, an weiteren Ausdrücken selbständig zu überprüfen, ob es sich um sinnvolle Ausdrücke handelt, und falls ja, den jeweiligen Typ anzugeben sowie den adjungierten (dualen) Ausdruck anzuschreiben.

A.4. Lösungen quantenmechanischer Eigenwertprobleme

Kräftefreies spinloses Teilchen

Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} \,. \tag{A.4-1}$$

(a) *Gemeinsame Eigenvektoren von* P_x, P_y, P_z (und H)

Die Komponenten von $\vec{P}$ bilden im betreffenden Zustandsraum einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren.

Eigenwertgleichungen

$$H\,|\,\vec{p}\,\rangle = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\,|\,\vec{p}\,\rangle\,, \qquad \vec{P}\,|\,\vec{p}\,\rangle = \vec{p}\,|\,\vec{p}\,\rangle\,. \tag{A.4-2}$$

(α) *Ohne Randbedingungen*

Kontinuierliches Spektrum

$$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)\,, \qquad p_x, p_y, p_z \in \mathbb{R}\,; \tag{A.4-3}$$

Eigenfunktionen

$$u_{\vec{p}}(\vec{r}) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,\vec{p}\,\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{(i/\hbar)\vec{p}\cdot\vec{r}}\,; \tag{A.4-4}$$

Orthogonalität und „Normierung“ (Eigenfunktionen nur auf die δ-Funktion normierbar)

$$\langle\,\vec{p}\,|\,\vec{p}\,'\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; u^*_{\vec{p}}(\vec{r})\, u_{\vec{p}\,'}(\vec{r}) = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\,; \tag{A.4-5}$$

Vollständigkeit (s. Gl. (A.1-18))

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\;|\,\vec{p}\,\rangle\langle\,\vec{p}\,| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3p\; u^*_{\vec{p}}(\vec{r})\, u_{\vec{p}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,. \tag{A.4-6}$$

(β) *Mit „Periodizitätsbedingungen“* (s. Aufgabe 1.14, Fall (IV), und Aufgabe 1.25)

$$u(+\tfrac{L}{2},y,z) = u(-\tfrac{L}{2},y,z)\,, \quad u(x,+\tfrac{L}{2},z) = u(x,-\tfrac{L}{2},z)\,, \quad u(x,y,+\tfrac{L}{2}) = u(x,y,-\tfrac{L}{2})\,. \tag{A.4-7}$$

Diskretes Spektrum

$$\vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}\,(n_x, n_y, n_z)\,, \qquad n_x, n_y, n_z = 0, \pm1, \pm2, \ldots\,; \tag{A.4-8}$$

Eigenfunktionen

$$u_{n_x n_y n_z}(\vec{r}) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,n_x n_y n_z\,\rangle = \frac{1}{L^{3/2}}\,\exp\Big[\frac{2\pi i}{L}\,(n_x x + n_y y + n_z z)\Big]\,; \tag{A.4-9}$$

Orthogonalität

$$\langle\, n_x n_y n_z \,|\, n_x' n_y' n_z' \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{V}} d^3r\; u^*_{n_x n_y n_z}(\vec{r})\, u_{n_x' n_y' n_z'}(\vec{r}) = \delta_{n_x n_x'}\, \delta_{n_y n_y'}\, \delta_{n_z n_z'}\,, \tag{A.4-10}$$

$$\mathbb{V} = \{\, \vec{r} = (x,y,z) \,|\, x,y,z \in [-\tfrac{L}{2}, +\tfrac{L}{2}] \,\}\,;$$

Vollständigkeit

$$\sum_{n_x n_y n_z} |\, n_x n_y n_z \,\rangle\langle\, n_x n_y n_z \,| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \sum_{n_x n_y n_z} u^*_{n_x n_y n_z}(\vec{r})\, u_{n_x n_y n_z}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')\,. \tag{A.4-11}$$

(b) *Gemeinsame Eigenvektoren von $H, \vec{L}^2$ und L_z*

$H, \vec{L}^2$ und L_z bilden im betreffenden Zustandsraum einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren.

Eigenwertgleichungen

$$H\,|\, klm_l \,\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,|\, klm_l \,\rangle\,, \qquad k \in \mathbb{R}_0^+\,; \tag{A.4-12}$$

$$\vec{L}^2\,|\, klm_l \,\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|\, klm_l \,\rangle\,, \qquad l \in \mathbb{N}_0\,; \tag{A.4-13}$$

$$L_z\,|\, klm_l \,\rangle = m_l \hbar\,|\, klm_l \,\rangle\,, \qquad m_l = l, l-1, \ldots, -l\,. \tag{A.4-14}$$

Die Größe $p = |\vec{p}\,| = \hbar k$ stellt den Eigenwert des Operators des Impulsbetrages dar, welcher ein kontinuierliches Spektrum $[0, +\infty)$ besitzt.

Eigenfunktionen

$$u_{klm_l}(\vec{r}) \equiv \langle\, \vec{r}\,|\, klm_l \,\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, j_l(kr)\, Y_{lm_l}(\Omega)\,. \tag{A.4-15}$$

(Bezüglich des Zusammenhanges zwischen den Eigenfunktionen (A.4-15) und den Eigenfunktionen (A.4-4) s. Gl. (A.2-41).)

Orthogonalität

$$\langle\, klm_l \,|\, k'l'm_l' \,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\; u^*_{klm_l}(\vec{r})\, u_{k'l'm_l'}(\vec{r}) = \delta(k-k')\, \delta_{ll'}\, \delta_{m_l m_l'}\,; \tag{A.4-16}$$

Vollständigkeit

$$\int\limits_0^{+\infty} dk \sum_{lm_l} |\, klm_l \,\rangle\langle\, klm_l \,| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \int\limits_0^{+\infty} dk \sum_{lm_l} u^*_{klm_l}(\vec{r})\, u_{klm_l}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')\,. \tag{A.4-17}$$

Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

Hamiltonoperator

$$H = \sum_{k=1}^{3} H_k\,, \qquad H_k = \frac{P_k^2}{2m} + \frac{m\omega_k^2}{2}\, X_k^2\,, \qquad k = 1,2,3\,. \tag{A.4-18}$$

(a) *Gemeinsame Eigenvektoren von* H_1, H_2, H_3 (und H)

H_1, H_2 und H_3 bilden im betreffenden Zustandsraum einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren.

Eigenwertgleichungen

$$H\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle = \sum_{k=1}^{3}(n_k+\frac{1}{2})\hbar\omega_k\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle\,, \qquad n_1,n_2,n_3\in\mathbb{N}_0\,; \tag{A.4-19}$$

$$H_k\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle = (n_k+\frac{1}{2})\hbar\omega_k\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle\,, \qquad k=1,2,3\,; \tag{A.4-20}$$

Eigenfunktionen

$$u_{n_1n_2n_3}(\vec{r}\,) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,n_1n_2n_3\,\rangle = u_{n_1}(x_1)\,u_{n_2}(x_2)\,u_{n_3}(x_3) \tag{A.4-21a}$$

mit

$$u_{n_k}(x_k) = \sqrt{\frac{\alpha_k}{2^{n_k}\,n_k!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{(\alpha_k x_k)^2}{2}\Big]\,H_{n_k}(\alpha_k x_k)\,, \tag{A.4-21b}$$

$$\alpha_k := \sqrt{\frac{m\omega_k}{\hbar}}\,, \quad k=1,2,3\,; \tag{A.4-21c}$$

Orthogonalität

$$\langle\,n_1n_2n_3\,|\,n_1'n_2'n_3'\,\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r\;u^*_{n_1n_2n_3}(\vec{r}\,)\,u_{n_1'n_2'n_3'}(\vec{r}\,) = \delta_{n_1n_1'}\,\delta_{n_2n_2'}\,\delta_{n_3n_3'}\,; \tag{A.4-22}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{n_1n_2n_3}|\,n_1n_2n_3\,\rangle\langle\,n_1n_2n_3\,| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \sum_{n_1n_2n_3} u^*_{n_1n_2n_3}(\vec{r}\,)\,u_{n_1n_2n_3}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,. \tag{A.4-23}$$

(b) *Gemeinsame Eigenvektoren von* $H, \vec{L}^2$ *und* L_z *für den isotropen harmonischen Oszillator* $(\omega_1=\omega_2=\omega_3=:\omega)$

Eigenwertgleichungen

$$H\,|\,nlm_l\,\rangle = (n+\frac{3}{2})\hbar\omega\,|\,nlm_l\,\rangle\,, \qquad n\in\mathbb{N}_0\,; \tag{A.4-24}$$

$$\vec{L}^2\,|\,nlm_l\,\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|\,nlm_l\,\rangle\,, \qquad l=n,n-2,\ldots,1 \text{ oder } 0\,; \tag{A.4-25}$$

$$L_z\,|\,nlm_l\,\rangle = m_l\hbar\,|\,nlm_l\,\rangle\,, \qquad m_l=l,l-1,\ldots,-l\,; \tag{A.4-26}$$

Eigenfunktionen

$$u_{nlm_l}(\vec{r}\,) \equiv \langle\,\vec{r}\,|\,nlm_l\,\rangle = R_{nl}(r)\,Y_{lm_l}(\Omega) \tag{A.4-27a}$$

mit

$$R_{nl}(r) = \Big[\frac{2\,[(n-l)/2]!}{[\Gamma((n+l+3)/2)]^3}\Big]^{1/2}\alpha^{3/2}\,\Lambda_{nl}(\alpha r)\,, \tag{A.4-27b}$$

$$\Lambda_{nl}(\xi) := \xi^l\,e^{-\xi^2/2}\,L^{l+1/2}_{(n-l)/2}(\xi^2)\,, \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,. \tag{A.4-27c}$$

n heißt Hauptquantenzahl, $(n-l)/2$ gibt die Anzahl der radialen Knoten an.

Orthogonalität

$$\langle\, nlm_l \,|\, n'l'm_l' \,\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\; u^*_{nlm_l}(\vec{r})\, u_{n'l'm_l'}(\vec{r}) = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{m_lm_l'}\,; \tag{A.4-28}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{nlm_l} |\, nlm_l \,\rangle\langle\, nlm_l \,| = \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \quad \sum_{nlm_l} u^*_{nlm_l}(\vec{r})\, u_{nlm_l}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,. \tag{A.4-29}$$

Wasserstoffatom und wasserstoffähnliche Ionen ohne Berücksichtigung des Spins und ohne relativistische Korrekturen

Hamiltonoperator (m reduzierte Masse, Z Kernladungszahl; $Z=1$ Wasserstoffatom, $Z=2$ He^+-Ion usf.)

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{R}\,. \tag{A.4-30}$$

$H, \vec{L}^2$ und L_z bilden im betreffenden Zustandsraum einen vollständigen Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren.

Eigenwertgleichungen (Lösung des Eigenwertproblems nur für die *gebundenen Zustände* angeschrieben)

$$H\,|\, nlm_l \,\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{1}{n^2}\,|\, nlm_l \,\rangle\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,; \tag{A.4-31}$$

$$\vec{L}^2\,|\, nlm_l \,\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|\, nlm_l \,\rangle\,, \qquad l = n-1, n-2, \ldots, 0\,; \tag{A.4-32}$$

$$L_z\,|\, nlm_l \,\rangle = m_l\hbar\,|\, nlm_l \,\rangle\,, \qquad m_l = l, l-1, \ldots, -l\,; \tag{A.4-33}$$

$$a := \frac{\hbar^2}{mZe^2} = \frac{a_0}{Z}\Big[1 + \frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{K}}\Big]\,, \qquad a_0 := \frac{\hbar^2}{m_\mathrm{e}e^2} \tag{A.4-34}$$

(a_0 bohrscher Radius für unendliche Kernmasse und $Z=1$, a bohrscher Radius des Atoms bzw. Ions).

Eigenfunktionen für die gebundenen Zustände

$$u_{nlm_l}(\vec{r}) \equiv \langle\, \vec{r}\,|\, nlm_l \,\rangle = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\Omega) \tag{A.4-35a}$$

mit

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\; a^{-3/2}\, F_{nl}\Big(\frac{2r}{na}\Big)\,, \tag{A.4-35b}$$

$$F_{nl}(\rho) := \rho^l\, e^{-\rho/2}\, L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)\,. \tag{A.4-35c}$$

n heißt Hauptquantenzahl, $n-l-1$ gibt die Anzahl der radialen Knoten an.

Orthogonalität

$$\langle\, nlm_l \,|\, n'l'm_l' \,\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\; u^*_{nlm_l}(\vec{r})\, u_{n'l'm_l'}(\vec{r}) = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{m_lm_l'}\,. \tag{A.4-36}$$

Die Funktionen (A.4-35) bilden *kein* vollständiges System. Erst durch Hinzunahme der verallgemeinerten Eigenfunktionen für die ungebundenen Zustände („Kontinuumszustände“, „Streuzustände“) wird ein vollständiges System erhalten.

A.5. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Linearer harmonischer Oszillator

Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\, X^2 \,; \tag{A.5-1}$$

Vernichtungsoperator a und Erzeugungsoperator $a^\dagger$ von Oszillatorquanten

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha X - \frac{1}{i\hbar\alpha}\, P)\,, \qquad a^\dagger := (a)^\dagger\,; \qquad \alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,. \tag{A.5-2}$$

Daraus folgt

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a^\dagger + a)\,, \qquad P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(a^\dagger - a)\,; \tag{A.5-3}$$

(Oszillator-)Quantenzahloperator

$$N = a^\dagger a\,, \qquad N^\dagger = N\,; \tag{A.5-4}$$

Lösung des Eigenwertproblems von N

$$N\,|\,n\,\rangle = n\,|\,n\,\rangle\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,; \qquad \langle\, n\,|\,n'\,\rangle = \delta_{nn'}\,; \qquad \sum_{n=0}^{\infty} |\,n\,\rangle\langle\, n\,| = \mathbb{1}\,; \tag{A.5-5a}$$

$$u_n(x) \equiv \langle\, x\,|\,n\,\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\, n!\,\sqrt{\pi}}}\,\exp\Big[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\Big]\, H_n(\alpha x) = u_n^*(x)\,, \tag{A.5-5b}$$

$$u_n(-x) = (-1)^n\, u_n(x)\,. \tag{A.5-5c}$$

Es gilt

$$H = (N + \frac{1}{2}\mathbb{1})\hbar\omega\,; \tag{A.5-6}$$

$$H\,|\,n\,\rangle = E_n\,|\,n\,\rangle\,, \quad E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,. \tag{A.5-7}$$

Vertauschungsbeziehung zwischen $a, a^\dagger$ und Wirkung von $a, a^\dagger$ auf die Eigenvektoren von N („Vernichtung“ bzw. „Erzeugung“ von „Anregungsquanten“ des Oszillators)

$$[a, a^\dagger] = \mathbb{1}\,; \tag{A.5-8}$$

$$a\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n}\,|\,n-1\,\rangle\,, \quad a^\dagger\,|\,n\,\rangle = \sqrt{n+1}\,|\,n+1\,\rangle\,; \tag{A.5-9}$$

$$|\,n\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(a^\dagger)^n\,|\,0\,\rangle\,. \tag{A.5-10}$$

Bzgl. der Lösung des Eigenwertproblems von a siehe die Bemerkungen zu Aufgabe 4.13.

A.6. Quantenmechanische Störungstheorie

Zeitunabhängige Störungstheorie (Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung)

Hamiltonoperator (H_0 „ungestörter“ Hamiltonoperator, W „Störoperator“ [„Störung“]):

$$H = H_0 + W\,. \tag{A.6-1}$$

Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung ist, dass das Spektrum von H_0 nicht rein kontinuierlich ist. Um die Schreibweise einfach zu halten, nehme ich für das Folgende zunächst ein rein diskretes Spektrum an.

Lösung des „ungestörten“ Eigenwertproblems (als bekannt vorausgesetzt):

$$H_0\,|\,u^0_{a\alpha}\,\rangle = E^0_a\,|\,u^0_{a\alpha}\,\rangle\,. \tag{A.6-2}$$

Der diskrete Index a nummeriert die Eigenwerte, und α ist ein Index, welcher die linear unabhängigen Eigenvektoren zu einem Eigenwert E^0_a zu unterscheiden gestattet. Um die Formeln nicht unnötig zu komplizieren, nehme ich an, dass die Vielfachheiten g^0_a der Eigenwerte E^0_a abzählbar (endlich oder unendlich) sind. α ist dann ebenfalls ein diskreter Index. Ferner seien die Eigenvektoren $|\,u^0_{a\alpha}\,\rangle$, $\alpha = 1, 2, \ldots, g^0_a$, welche den Eigenraum $\mathscr{H}(E^0_a)$ „aufspannen“, orthonormiert:

$$\langle\,u^0_{a\alpha}\,|\,u^0_{b\beta}\,\rangle = \delta_{ab}\,\delta_{\alpha\beta}\,. \tag{A.6-3}$$

Gesucht sind die störungstheoretischen Energiekorrekturen zu einem gegebenen *diskreten* Eigenwert E^0_n von H_0 mit *endlicher* Vielfachheit g^0_n und näherungsweise Eigenvektoren von H.

(a) E^0_n *nicht entartet* ($g^0_n = 1$)

Dann gilt

$$H\,|\,u_n\,\rangle = E_n\,|\,u_n\,\rangle\,, \tag{A.6-4}$$

$$E_n = E^0_n + \epsilon^{(1)}_n + \epsilon^{(2)}_n + \ldots\,, \tag{A.6-5}$$

$$|\,u_n\,\rangle = |\,u^0_n\,\rangle + |\,\chi^{(1)}_n\rangle + |\,\chi^{(2)}_n\rangle + \ldots\,, \tag{A.6-6}$$

wobei E^0_n als Näherung „nullter“ Ordnung für E_n und $|\,u^0_n\,\rangle \equiv |\,u^0_{n1}\,\rangle$ als Näherung „nullter“ Ordnung für $|\,u_n\,\rangle$ bezeichnet wird. Für die Energiekorrekturen erster und zweiter Ordnung sowie für den Korrekturket erster Ordnung gelten die Formeln

$$\epsilon^{(1)}_n = \langle\,u^0_n\,|\,W\,|\,u^0_n\,\rangle\,, \tag{A.6-7}$$

$$|\,\chi^{(1)}_n\rangle = \sum_{\substack{a\alpha\\ a\neq n}} |\,u^0_{a\alpha}\,\rangle\,\frac{\langle\,u^0_{a\alpha}\,|\,W\,|\,u^0_n\,\rangle}{E^0_n - E^0_a}\,, \tag{A.6-8}$$

$$\epsilon^{(2)}_n = \langle\,u^0_n\,|\,W\,|\,\chi^{(1)}_n\,\rangle = \sum_{\substack{a\alpha\\ a\neq n}} \frac{|\langle\,u^0_{a\alpha}\,|\,W\,|\,u^0_n\,\rangle|^2}{E^0_n - E^0_a}\,. \tag{A.6-9}$$

Ist das Spektrum von H_0 teils diskret, teils kontinuierlich, und normiert man die „Kontinuumszustände“ gemäß $\langle\,u^0_{a\alpha}\,|\,u^0_{b\beta}\,\rangle = \delta(a-b)\,\delta_{\alpha\beta}$, so hat man in den Formeln (A.6-8) und (A.6-9)

lediglich formal gleiche Terme mit $\sum_a \to \int da$ hinzuzunehmen.

(b) E_n^0 *entartet* ($g_n^0 \geq 2$)

In diesem Fall muss die Matrix des Störoperators W in dem g_n^0-dimensionalen Eigenraum $\mathscr{H}(E_n^0)$ zum Eigenwert E_n^0 „diagonalisiert“ werden. Verwendet man in $\mathscr{H}(E_n^0)$ das Basissystem $\{\,|\,u_{n\nu}^0\,\rangle,\ \nu = 1, 2, \ldots, g_n^0\,\}$, so hat man

$$H\,|\,u_{n\nu}\,\rangle = E_{n\nu}\,|\,u_{n\nu}\,\rangle\,, \quad \nu = 1, 2, \ldots, g_n^0\,; \tag{A.6-10}$$

$$E_{n\nu} = E_n^0 + \epsilon_{n\nu}^{(1)} + \epsilon_{n\nu}^{(2)} + \ldots\,, \tag{A.6-11}$$

$$|\,u_{n\nu}\,\rangle = |\,\chi_{n\nu}^{(0)}\,\rangle + |\,\chi_{n\nu}^{(1)}\,\rangle + \ldots\,; \tag{A.6-12}$$

$\epsilon_{n\nu}^{(1)},\ |\,\chi_{n\nu}^{(0)}\,\rangle$ EW bzw. EV der Matrix

$$\widehat{W} = \big[\langle\,u_{n\nu}^0\,|\,W\,|\,u_{n\nu'}^0\,\rangle,\ \nu, \nu' = 1, 2, \ldots, g_n^0\big]\,. \tag{A.6-13}$$

Sind alle Eigenwerte von $\widehat{W}$ Gl. (A.6-13) einfach, so sind die Vektoren $|\,\chi_{n\nu}^{(0)}\,\rangle$ (bis auf unimodulare Faktoren) eindeutig bestimmt, und die Entartung des Eigenwertes E_n^0 wird bereits in erster Ordnung Störungstheorie vollständig aufgehoben, d. h. man erhält g_n^0 verschiedene näherungsweise Eigenwerte $E_{n\nu}^{[1]} = E_n^0 + \epsilon_{n\nu}^{(1)}$ von H. Ist ein Eigenwert der Matrix $\widehat{W}$ g-fach ($1 < g \leq g_n^0$), so gibt es in erster Ordnung Störungstheorie g linear unabhängige näherungsweise Eigenvektoren von H zu ein und demselben näherungsweisen Eigenwert von H. Es sind dann mehrere $E_{n\nu}^{[1]}$ gleich, und man wird i. Allg. am Ende der Rechnung eine neue Indizierung einführen, falls man sich auf Störungstheorie erster Ordnung beschränkt. (Es ist natürlich möglich, dass auch bei Berücksichtigung *aller* Ordnungen eine Entartung übrig bleibt.)

Zeitabhängige Störungstheorie erster Ordnung für Übergänge zwischen gebundenen Eigenzuständen eines „ungestörten“ Hamiltonoperators

Hamiltonoperator (H_0 „ungestörter“ Hamiltonoperator, $W(t)$ explizit von der Zeit abhängiger „Störoperator“):

$$H(t) = H_0 + W(t)\,. \tag{A.6-14}$$

(a) *Übergangswahrscheinlichkeiten*

H_0 besitze diskrete Eigenwerte E_m^0, E_n^0 mit abzählbarer Vielfachheit (Eigenwertproblem von H_0: siehe (A.6-2), (A.6-3) und die Erläuterungen dazu). Zum Zeitpunkt t_0 sei der Eigenvektor $|\,u_{m\mu}^0\,\rangle$ von H_0 Zustandsvektor des betrachteten Systems. Für die Wahrscheinlichkeit, das System zum Zeitpunkt $t > t_0$ im Eigenzustand $|\,u_{n\nu}^0\,\rangle$ von H_0 anzutreffen, gilt dann in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie im Fall $(n, \nu) \neq (m, \mu)$

$$\begin{aligned} W_{m\mu \to n\nu}(t, t_0) \;&\approx\; W_{m\mu \to n\nu}^{[1]}(t, t_0) \\ &=\; \frac{1}{\hbar^2}\,\Big|\int_{t_0}^{t} d\tau\, \exp\Big[\frac{i}{\hbar}(E_n^0 - E_m^0)\tau\Big]\,\langle\,u_{n\nu}^0\,|\,W(\tau)\,|\,u_{m\mu}^0\,\rangle\,\Big|^2\,. \end{aligned} \tag{A.6-15}$$

(b) *Verweilwahrscheinlichkeit*

Besitzt H_0 ein *rein* diskretes Spektrum, und ist die Vielfachheit *aller* Eigenwerte abzählbar, so kann man die Verweilwahrscheinlichkeit $W_{m\mu\to m\mu}(t,t_0)$ mithilfe der Beziehung

$$W_{m\mu\to m\mu}(t,t_0) \;=\; 1 \;-\; \sum_{\substack{a\alpha\\(a,\alpha)\neq(m,\mu)}} W_{m\mu\to a\alpha}(t,t_0) \tag{A.6-16}$$

berechnen. Als Verweilwahrscheinlichkeit in erster Ordnung Störungstheorie bezeichnet man die durch

$$W^{[1]}_{m\mu\to m\mu}(t,t_0) \;=\; 1 \;-\; \sum_{\substack{a\alpha\\(a,\alpha)\neq(m,\mu)}} W^{[1]}_{m\mu\to a\alpha}(t,t_0) \tag{A.6-17}$$

gegebene Größe.

Ist das Spektrum von H_0 teils diskret, teils kontinuierlich, und normiert man die „Kontinuumszustände“ gemäß $\langle\, u^0_{a\alpha}\,|\,u^0_{b\beta}\,\rangle = \delta(a-b)\,\delta_{\alpha\beta}$, so hat man in den Formeln (A.6-16) und (A.6-17) lediglich formal gleiche Terme mit $\sum_a \to \int da$ abzuziehen. Analoge Modifikationen sind vorzunehmen, falls H_0 Eigenwerte mit nicht abzählbarer Vielfachheit besitzt.

Die Näherung (A.6-15) kann verwendet werden, falls die „Störung“ $W(\tau)$ für $t_0 \le \tau \le t$ hinreichend „schwach“, und das Zeitintervall $t-t_0$ hinreichend klein ist, sodass sämtliche Übergangswahrscheinlichkeiten klein gegen 1 sind, und die Verweilwahrscheinlichkeit noch annähernd 1 ist. Falls die „Störung“ $W(\tau)$ für $\tau \to \pm\infty$ genügend rasch „abklingt“, kann die Näherung sogar für $t_0 \to -\infty$, $t \to +\infty$ anwendbar sein.

„Plötzliche“ Änderung des Hamiltonoperators

Gelegentlich hat man es mit Problemen zu tun, bei denen sich der Systemhamiltonoperator „plötzlich“ [d. h. in einem Zeitintervall, welches gegenüber den ursprünglichen „Perioden“ $2\pi\hbar/(E^0_b - E^0_a)$ klein ist] ändert. Nach der „plötzlichen“ Änderung des Hamiltonoperators, dem „Einschalten“ der Störung, soll der Hamiltonoperator wieder zeitunabhängig sein.

Unmittelbar vor dem „Einschalten“ der Störung, zur Zeit $t = 0-$, sei das System in einem Eigenzustand $|\,u^0_{m\mu}\,\rangle$ von H_0 zu einem diskreten Eigenwert E^0_m mit abzählbarer Vielfachheit. Bei einer „plötzlichen“ Änderung des Hamiltonoperators gemäß

$$H = \begin{cases} H_0 & \text{für} \quad t < 0 \\ H_0 + W & \text{für} \quad t > 0 \end{cases} \tag{A.6-18}$$

gilt dann für den Zustandsvektor des Systems

$$|\,\psi(0+)\,\rangle = |\,\psi(0-)\,\rangle = |\,u^0_{m\mu}\,\rangle\,.$$

Der „neue“ Hamiltonoperator besitze einen diskreten Eigenwert E_n mit abzählbarer Vielfachheit. Für die Wahrscheinlichkeit, das System zu einem Zeitpunkt $t > 0$ im Eigenzustand $|\,u_{n\nu}\,\rangle$ von H anzutreffen, ergibt sich dann wegen $\langle\, u_{n\nu}\,|\,H = \langle\, u_{n\nu}\,|\,E_n$ ein von der Wahl dieses Zeitpunktes unabhängiger Ausdruck:

$$W_{m\mu(H_0)\to n\nu(H)} = |\langle\, u_{n\nu}\,|\,\psi(t)\,\rangle|^2 = |\langle\, u_{n\nu}\,|\,e^{-(i/\hbar)Ht}\,|\,u^0_{m\mu}\,\rangle|^2 = |\langle\, u_{n\nu}\,|\,u^0_{m\mu}\,\rangle|^2\,. \tag{A.6-19}$$

Diese Formel gilt für beliebig starke Störung. Für hinreichend schwache Störung kann das Eigenwertproblem von H näherungsweise mithilfe der zeitunabhängigen Störungstheorie gelöst

werden (s. Gl. (A.6-1) bis (A.6-13)). Ist insbesondere der Eigenwert E_n^0 von H_0, der die nullte Näherung für E_n darstellt, *nicht entartet*, und das Spektrum von H_0 rein diskret mit lauter abzählbaren Vielfachheiten, so folgt mit Gl. (A.6-6) und (A.6-8)

$$|\,u_n\,\rangle = |\,u_n^0\,\rangle + \sum_{\substack{a\alpha \\ a\neq n}} |\,u_{a\alpha}^0\,\rangle\,\frac{\langle\,u_{a\alpha}^0\,|\,W\,|\,u_n^0\,\rangle}{E_n^0 - E_a^0} + \dots\,, \tag{A.6-20}$$

und man erhält somit in erster Ordnung Störungstheorie im Fall $n \neq m$

$$W^{[1]}_{m\mu(H_0)\to n(H)} \;=\; \frac{|\langle\,u_n^0\,|\,W\,|\,u_{m\mu}^0\,\rangle|^2}{(E_n^0 - E_m^0)^2}\;. \tag{A.6-21}$$

Falls das Spektrum von H_0 nicht rein diskret ist, kommt in Gl. (A.6-20) in erster Ordnung Störungstheorie natürlich noch ein analog gebauter Term mit $\sum_a \to \int da$ hinzu, am Ergebnis (A.6-21) ändert dies jedoch nichts, da $|\,u_{m\mu}^0\,\rangle$ zu allen „Kontinuumszuständen“ von H_0 orthogonal ist. Entsprechendes gilt, wenn H_0 Eigenwerte mit nicht abzählbarer Vielfachheit besitzt.

Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang mit $(n,\nu) = (m,\mu)$ berechnet man in erster Ordnung Störungstheorie aus der zu (A.6-17) analogen Formel. Besitzt H_0 speziell ein vollständig diskretes Spektrum nichtentarteter Eigenwerte, so folgt

$$W^{[1]}_{m(H_0)\to m(H)} \;=\; 1 \;-\; \sum_{\substack{a \\ a\neq m}} \frac{|\langle\,u_a^0\,|\,W\,|\,u_m^0\,\rangle|^2}{(E_a^0 - E_m^0)^2}\;. \tag{A.6-22}$$

Eine notwendige Bedingung für die Brauchbarkeit der in erster Ordnung Störungstheorie erhaltenen Näherungen ist in jedem Falle

$$\sum_{\substack{a\alpha \\ (a,\alpha)\neq(m,\mu)}} W^{[1]}_{m\mu(H_0)\to a\alpha(H)} \;\ll\; 1\,. \tag{A.6-23}$$

A.7. Drehimpuls. Drehungen

Drehimpuls

Drei selbstadjungierte Operatoren $J_x \equiv J_1$, $J_y \equiv J_2$, $J_z \equiv J_3$ bilden die kartesischen Komponenten eines Drehimpulsoperators $\vec{J}$, wenn die folgenden Vertauschungsbeziehungen gelten:

$$[J_j, J_k] = i\hbar \sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl}\, J_l \quad\Longleftrightarrow\quad \sum_{k,l=1}^{3} \epsilon_{jkl}\, J_k J_l = i\hbar J_j\,. \tag{A.7-1}$$

Standardbasis $\{\,|\,\tau jm\,\rangle\}$:

$$\vec{J}^{\,2}\,|\,\tau jm\,\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|\,\tau jm\,\rangle\,, \tag{A.7-2}$$

$$J_z\,|\,\tau jm\,\rangle = m\hbar\,|\,\tau jm\,\rangle\,, \tag{A.7-3}$$

$$J_\pm\,|\,\tau jm\,\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\;\hbar\,|\,\tau j, m\pm 1\,\rangle\,; \tag{A.7-4}$$

$$J_\pm := J_x \pm iJ_y \quad (\text{„Leiteroperatoren“}). \tag{A.7-5}$$

Das Symbol τ steht dabei für einen Satz von Quantenzahlen, der zu einem Satz von untereinander und mit *allen* Komponenten von $\vec{J}$ vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren T gehört und der zusammen mit j, m einen *vollständigen* Satz von Quantenzahlen bildet.

Spin $s = \frac{1}{2}$

Mit den Definitionen

$$\vec{\sigma} := \frac{2}{\hbar}\,\vec{S}\,, \qquad \sigma_\pm := \sigma_x \pm i\sigma_y \tag{A.7-6}$$

folgt aus den Beziehungen (A.7-2) bis (A.7-5)

$$\vec{\sigma}^{\,2}\,|\pm\rangle = 3\,|\pm\rangle\,, \quad \sigma_z\,|\pm\rangle = \pm\,|\pm\rangle\,; \tag{A.7-7}$$

$$\sigma_\pm|\pm\rangle = \emptyset\,, \qquad \sigma_\pm\,|\mp\rangle = \;2\,|\pm\rangle\,. \tag{A.7-8}$$

Für die Spinoperatoren gelten neben den Drehimpuls-Vertauschungsbeziehungen (A.7-1), welche für die Komponenten von $\vec{\sigma}$ die Form

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl}\,\sigma_l \tag{A.7-9a}$$

annehmen, die Antivertauschungsbeziehungen

$$[\sigma_j, \sigma_k]_+ = 2\delta_{jk}\mathbb{1}\,. \tag{A.7-9b}$$

Addiert man die Beziehungen, die sich aus (A.7-9a) und (A.7-9b) für $j < k$ ergeben, so erhält man

$$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3\,, \quad \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1\,, \quad \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2\,. \tag{A.7-9c}$$

$\{m_s\}$-Darstellung

$$|\,\chi\,\rangle \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\chi} = \begin{bmatrix} \langle +|\,\chi\,\rangle \\ \langle -|\,\chi\,\rangle \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \chi(+) \\ \chi(-) \end{bmatrix}, \tag{A.7-10a}$$

$$\sigma_j \xrightarrow{\{m_s\}} \widehat{\sigma}_j, \quad j = 1,2,3 \text{ bzw. } x,y,z \text{ mit den Paulimatrizen}$$

$$\widehat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \qquad \widehat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{A.7-10b}$$

Drehungen

Drehungen im dreidimensionalen Ortsraum (Definition der Eulerwinkel s. Anhang A.11)

$$\vec{r}\,' \equiv \mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)\,\vec{r} \qquad \text{bzw.} \qquad x_i' = \sum_{j=1}^{3} \mathscr{D}_{ij}(\alpha\beta\gamma)\,x_j\,; \tag{A.7-11}$$

Drehoperator im Zustandsraum des betrachteten quantenmechanischen Systems ($\vec{J}$ Operator des Gesamtdrehimpulses des Systems)

$$D(\alpha\beta\gamma) \;=\; e^{-(i/\hbar)\alpha J_z}\, e^{-(i/\hbar)\beta J_y}\, e^{-(i/\hbar)\gamma J_z}\,, \qquad D^\dagger(\alpha\beta\gamma) = D^{-1}(\alpha\beta\gamma)\,; \tag{A.7-12}$$

Drehmatrixelemente

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) = \langle\, \tau j m' \,|\, D(\alpha\beta\gamma) \,|\, \tau j m \,\rangle \tag{A.7-13}$$

(s. Anhang A.2, Gl. (A.2-43) bis (A.2-54); bzgl. τ siehe die Erläuterung zu Gl. (A.7-2) bis (A.7-5));

Transformation von Drehimpuls-Eigenvektoren

$$D(\alpha\beta\gamma) \,|\, \tau j m \,\rangle \;=\; \sum_{m'=-j}^{+j} D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \,|\, \tau j m' \,\rangle \,. \tag{A.7-14}$$

Irreduzible Tensoroperatoren

$2k+1$ Operatoren $T^{(k)}_q$, $q = k, k-1, \ldots, -k$, bilden die sphärischen Standardkomponenten eines irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{T}^{(k)}$ vom Rang k bzgl. Drehungen (A.7-12) (Kurzsprechweise: bezüglich $\vec{J}$), wenn die folgenden Beziehungen gelten:

$$D(\alpha\beta\gamma)\, T^{(k)}_q D^\dagger(\alpha\beta\gamma) \;=\; \sum_{q'=-k}^{+k} D^{(k)}_{q'q}(\alpha\beta\gamma)\, T^{(k)}_{q'} \quad \Longleftrightarrow \tag{A.7-15}$$

$$[J_\pm, T^{(k)}_q] = \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)}\, \hbar\, T^{(k)}_{q\pm1}\,, \qquad [J_z, T^{(k)}_q] = q\hbar\, T^{(k)}_q\,. \tag{A.7-16}$$

Spezialfälle: $k = 0$: drehinvariante Operatoren; $k = 1$: Vektoroperatoren.

Drehinvariante Operatoren

S bzw. $\mathsf{S}^{(0)}$ ist ein drehinvarianter Operator in Bezug auf Drehungen (A.7-12) (Kurzsprechweise: bezüglich $\vec{J}$), wenn die folgenden Beziehungen gelten:

$$D(\alpha\beta\gamma)\, S\, D^\dagger(\alpha\beta\gamma) = S \quad \Longleftrightarrow \quad [D(\alpha\beta\gamma), S] = \mathbb{0} \quad \Longleftrightarrow \quad [J_i, S] = \mathbb{0}\,, \quad i = 1,2,3\,. \tag{A.7-17}$$

Vektoroperatoren

$\vec{A}$ bzw. $\mathsf{A}^{(1)}$ ist Vektoroperator in Bezug auf Drehungen (A.7-12) (Kurzsprechweise: bezüglich $\vec{J}$), wenn die folgenden Beziehungen gelten:

$$D(\alpha\beta\gamma)\, A^{(1)}_q D^\dagger(\alpha\beta\gamma) \;=\; \sum_{q'=-1}^{+1} D^{(1)}_{q'q}(\alpha\beta\gamma)\, A^{(1)}_{q'} \quad \Longleftrightarrow \tag{A.7-18}$$

$$D(\alpha\beta\gamma)\, A_i\, D^\dagger(\alpha\beta\gamma) \;=\; \sum_{j=1}^{3} \mathscr{D}_{ji}(\alpha\beta\gamma)\, A_j \quad \Longleftrightarrow \tag{A.7-19}$$

$$[J_\pm, A^{(1)}_q] = \sqrt{(1 \mp q)(2 \pm q)}\, \hbar\, A^{(1)}_{q\pm1}\,, \qquad [J_z, A^{(1)}_q] = q\hbar\, A^{(1)}_q \tag{A.7-20}$$

$$\Longleftrightarrow \quad [J_j, A_k] = i\hbar \sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} A_l\,. \tag{A.7-21}$$

Dabei sind $A_x \equiv A_1$, $A_y \equiv A_2$, $A_z \equiv A_3$ die kartesischen und

$$A^{(1)}_{\pm1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x \pm i A_y)\,, \qquad A^{(1)}_0 = A_z \tag{A.7-22}$$

die sphärischen Komponenten von $\vec{A}$.

Das innere Produkt zweier Vektoroperatoren $\vec{A}, \vec{B}$ ist formal durch

$$\vec{A}\cdot\vec{B} \;=\; \sum_{j=1}^{3} A_j B_j \;=\; \sum_{q=-1}^{+1} (-1)^q A_q^{(1)} B_{-q}^{(1)} \tag{A.7-23}$$

definiert. (Auch für „gewöhnliche“ Vektoren kann man analog zu (A.7-22) sphärische Komponenten definieren und das innere Produkt wie in (A.7-23) schreiben.)

Wigner-Eckart-Theorem

Für die Matrixelemente der sphärischen Standardkomponenten eines irreduziblen Tensoroperators $\mathsf{T}^{(k)}$ in einer Standardbasis $\{\,|\,\tau jm\,\rangle\}$ gilt:

$$\langle\,\tau' j' m'\,|\,T_q^{(k)}\,|\,\tau jm\,\rangle = \langle\,jkmq\,|\,j'm'\,\rangle\langle\,\tau' j'\,\|\,\mathsf{T}^{(k)}\,\|\,\tau j\,\rangle\,. \tag{A.7-24}$$

Der erste Faktor ist ein *Clebsch-Gordan-Koeffizient* (s. Gl. (A.7-28) bis (A.7-32) und die Tabellen A.7-1 bis A.7-3), der zweite Faktor heißt *reduziertes Matrixelement* von $\mathsf{T}^{(k)}$. Das reduzierte Matrixelement ist eine von den magnetischen Quantenzahlen unabhängige Größe. Die Quantenzahlen j, m beziehen sich auf einen beliebigen Drehimpuls, in Bezug auf welchen $\mathsf{T}^{(k)}$ einen irreduziblen Tensoroperator darstellt (s. (A.7-15) bzw. (A.7-16)). Bezüglich τ siehe die Erläuterung zu Gl. (A.7-2) bis (A.7-5).

Addition von Drehimpulsen

Operator des Gesamtdrehimpulses

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}. \tag{A.7-25}$$

Übergang von einer Standardbasis $\{\,|\,\gamma j_1 j_2 m_1 m_2\,\rangle\}$ von gemeinsamen Eigenvektoren der Operatoren Γ, $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$, $J_z^{(1)}$ und $J_z^{(2)}$ zu einer Standardbasis $\{\,|\,\gamma j_1 j_2 jm\,\rangle\}$ von gemeinsamen Eigenvektoren der Operatoren Γ, $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$, $\vec{J}^2$ und J_z:

$$|\,\gamma j_1 j_2 jm\,\rangle = \sum_{m_1} |\,\gamma j_1 j_2 m_1, m-m_1\,\rangle\langle\,j_1 j_2 m_1, m-m_1\,|\,jm\,\rangle\,, \tag{A.7-26}$$

$$|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2\,. \tag{A.7-27}$$

Das Symbol Γ steht dabei für einen Satz von untereinander und mit *allen* Komponenten von $\vec{J}^{(1)}$ und $\vec{J}^{(2)}$ vertauschbaren selbstadjungierten Operatoren, der zusammen mit $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$, $J_z^{(1)}$, $J_z^{(2)}$ bzw. mit $(\vec{J}^{(1)})^2$, $(\vec{J}^{(2)})^2$, $\vec{J}^2$, J_z in dem betrachteten Zustandsraum jeweils einen *vollständigen* Satz vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren bildet, und das Symbol γ steht für den zugehörigen Satz von Quantenzahlen.

Die Beziehung (A.7-27) wird als „Dreiecksungleichung“ bezeichnet. Die Koeffizienten der unitären Transformation (A.7-26) können aufgrund der Voraussetzungen bezüglich der Operatoren Γ von γ unabhängig gewählt werden. Unter Ausnützung der bei der Wahl der Phasenfaktoren bestehenden Freiheiten kann man sie außerdem reell wählen, sodass die Transformation sogar orthogonal ist. Die so festgelegten Transformationskoeffizienten heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Formel von Racah

$$\begin{aligned}\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle \;=\; & \delta_{m,m_1+m_2} \Big[(2j+1)\,\frac{(j_1+j_2-j)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j+j_2-j_1)!}{(j_1+j_2+j+1)!} \\ & \times (j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!\Big]^{1/2} \\ & \times \sum_{\nu=\nu_1}^{\nu_2} \frac{(-1)^\nu}{\nu!}\,\big[(j_1+j_2-j-\nu)!\,(j_1-m_1-\nu)!\,(j_2+m_2-\nu)! \\ & \qquad \times (j-j_2+m_1+\nu)!\,(j-j_1-m_2+\nu)!\big]^{-1}, \\ \nu_1 \;:=\; & \max\left(0,\, j_2-j-m_1,\, j_1-j+m_2\right), \\ \nu_2 \;:=\; & \min\left(j_1+j_2-j,\, j_1-m_1,\, j_2+m_2\right); \end{aligned} \tag{A.7-28}$$

Formel von Wigner

$$\begin{aligned}\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle \;=\; & \delta_{m,m_1+m_2} \\ & \times \left[(2j+1)\,\frac{(j_1+j_2-j)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j+j_2-j_1)!\,(j+m)!\,(j-m)!}{(j_1+j_2+j+1)!\,(j_1+m_1)!\,(j_1-m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!}\right]^{1/2} \\ & \times \sum_{\nu=\nu_1}^{\nu_2} \frac{(-1)^{\nu+j_2+m_2}}{\nu!}\,\frac{(j+j_2+m_1-\nu)!\,(j_1-m_1+\nu)!}{(j-j_1+j_2-\nu)!\,(j+m-\nu)!\,(j_1-j_2-m+\nu)!}\,, \\ \nu_1 \;:=\; & \max\left(0,\, j_2-j_1+m,\, m_1-j_1\right), \\ \nu_2 \;:=\; & \min\left(j_2+j+m_1,\, j-j_1+j_2,\, j+m\right); \end{aligned} \tag{A.7-29}$$

Orthogonalitätsbeziehungen

$$\sum_{m_1 m_2} \langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle \langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j' m' \,\rangle \;=\; \delta_{jj'}\,\delta_{mm'}\,\delta(j_1 j_2 j)\,, \tag{A.7-30}$$

$\delta(j_1 j_2 j) = 1$ oder 0, je nachdem, ob (A.7-27) erfüllt ist oder nicht;

$$\sum_{jm} \langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle \langle\, j_1 j_2 m_1' m_2' \,|\, j m \,\rangle \;=\; \delta_{m_1 m_1'}\,\delta_{m_2 m_2'}\,; \tag{A.7-31}$$

Symmetriebeziehungen

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\,\langle\, j_1 j_2, -m_1, -m_2 \,|\, j, -m \,\rangle\,, \tag{A.7-32a}$$

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\,\langle\, j_1 j_2, -m_1, -m_2 \,|\, j, -m \,\rangle\,, \tag{A.7-32b}$$

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_1-m_1}\left(\frac{2j+1}{2j_2+1}\right)^{1/2}\langle\, j_1 j m_1, -m \,|\, j_2, -m_2 \,\rangle\,, \tag{A.7-32c}$$

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_2+m_2}\left(\frac{2j+1}{2j_1+1}\right)^{1/2}\langle\, j j_2, -m, m_2 \,|\, j_1, -m_1 \,\rangle\,, \tag{A.7-32d}$$

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_1 - m_1} \Big(\frac{2j+1}{2j_2+1} \Big)^{1/2} \langle\, j j_1 m, -m_1 \,|\, j_2 m_2 \,\rangle \,, \tag{A.7-32e}$$

$$\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, j m \,\rangle = (-1)^{j_2 + m_2} \Big(\frac{2j+1}{2j_1+1} \Big)^{1/2} \langle\, j_2 j, -m_2, m \,|\, j_1 m_1 \,\rangle \,. \tag{A.7-32f}$$

Da die Berechnung spezieller Clebsch-Gordan-Koeffizienten mithilfe der Formeln (A.7-28), (A.7-29) langwierig ist, werden auf den folgenden Seiten die Ergebnisse der Auswertung für einige in den Anwendungen häufig vorkommende Spezialfälle in Tabellenform angegeben. Insbesondere enthält Tab. A.7-3 die *Zahlenwerte* der Clebsch-Gordan-Koeffizienten für[3]

$$(j_1, j_2) = (\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}),\ (1, \tfrac{1}{2}),\ (2, \tfrac{1}{2}),\ (\tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2}),\ (1, 1),\ (2, 1),\ (\tfrac{3}{2}, 1)\,.$$

Tab. A.7-1: Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle\, j_1 \tfrac{1}{2}, m - m_2, m_2 \,|\, j\, m \,\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle\, j_1 \tfrac{1}{2}, m \mp \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2} \,|\, j_1 + \tfrac{1}{2}, m \,\rangle &= \sqrt{\frac{j_1 \pm m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \\
\langle\, j_1 \tfrac{1}{2}, m \mp \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2} \,|\, j_1 - \tfrac{1}{2}, m \,\rangle &= \mp \sqrt{\frac{j_1 \mp m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}
\end{aligned}$$

Tab. A.7-2: Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle\, j_1 1, m - m_2, m_2 \,|\, j\, m \,\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle\, j_1 1, m \mp 1, \pm 1 \,|\, j_1 + 1, m \,\rangle &= \sqrt{\frac{(j_1 \pm m)(j_1 \pm m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}} \\
\langle\, j_1 1, m \mp 1, \pm 1 \,|\, j_1 - 1, m \,\rangle &= \sqrt{\frac{(j_1 \mp m)(j_1 \mp m + 1)}{2j_1(2j_1 + 1)}} \\
\langle\, j_1 1, m \mp 1, \pm 1 \,|\, j_1 m \,\rangle &= \mp \sqrt{\frac{(j_1 \pm m)(j_1 \mp m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)}} \\
\langle\, j_1 1\, m\, 0 \,|\, j_1 + 1, m \,\rangle &= \sqrt{\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)}} \\
\langle\, j_1 1\, m\, 0 \,|\, j_1 - 1, m \,\rangle &= -\sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{j_1(2j_1 + 1)}} \\
\langle\, j_1 1\, m\, 0 \,|\, j_1 m \,\rangle &= \frac{m}{\sqrt{j_1(j_1 + 1)}}
\end{aligned}$$

[3] Zahlenwerte für $(j_1, j_2) = (2, 2)$, $(\frac{3}{2}, 2)$ und $(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$ findet man auf der Homepage der Particle Data Group, Lawrence Berkeley National Laboratory, http://pdg.lbl.gov/ unter Mathematical Tools.

Tab. A.7-3: Clebsch-Gordan-Koeffizienten $\langle\, j_1 j_2 m_1 m_2 \,|\, jm \,\rangle$ für einige Wertepaare (j_1, j_2). Die Tabelle enthält die *Quadrate* der zu den jeweiligen Quantenzahlen (s. die Erklärung in der linken unteren Ecke) gehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten, ein etwaiges negatives Vorzeichen des betreffenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten ist vorangesetzt.
Ein Beispiel: $\frac{2}{3}$ steht für $\sqrt{\frac{2}{3}}$ und $-\frac{2}{3}$ steht für $-\sqrt{\frac{2}{3}}$

$\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)$

		2					
		$+2$	2	1			
$+\frac{3}{2}$	$+\frac{1}{2}$	1	$+1$	$+1$			
	$+\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	2	1	
	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	0	0	
		$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	2	1
		$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-1
			$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	2
			$-\frac{3}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{3}{4}$	-2
				$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	

$\left(1, \frac{1}{2}\right)$

		$\frac{3}{2}$					
		$+\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$+1$	$+\frac{1}{2}$	1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$			
	$+1$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	
	0	$+\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	
		0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$	
		-1	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{3}{2}$	
			-1	$-\frac{1}{2}$	1		

$\left(2, \frac{1}{2}\right)$

		$\frac{5}{2}$					
		$+\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$			
$+2$	$+\frac{1}{2}$	1	$+\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}$			
	$+2$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	
	$+1$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{4}{5}$	$-\frac{1}{5}$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	
		$+1$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$
		0	$+\frac{1}{2}$	$\frac{3}{5}$	$-\frac{2}{5}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
			0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$
			-1	$+\frac{1}{2}$	$\frac{2}{5}$	$-\frac{3}{5}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$
				-1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{5}{2}$
				-2	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{4}{5}$	$-\frac{5}{2}$
					-2	$-\frac{1}{2}$	1	

$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

		1			
		$+1$	1	0	
$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	1	0	0	
	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1
		$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	

(j_1, j_2)

		j	j'
		m	m
m_1	m_2	$*$	$*$
m_1'	m_2'	$*$	$*$

$(1,1)$

		2		
		+2	2	1
	+1	+1	1	+1	+1
		+1	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	2	1	0
		0	+1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	0
				+1	−1	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$		
				0	0	$\frac{2}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	2	1
				−1	+1	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	−1	−1
						0	−1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	2
						−1	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	−2
								−1	−1	1

$(2,1)$

		3								
		+3	3	2						
+2	+1	1	+2	+2						
	+2	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	3	2	1			
	+1	+1	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	+1	+1	+1			
		+2	−1	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{3}{5}$				
		+1	0	$\frac{8}{15}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{3}{10}$	3	2	1	
		0	+1	$\frac{6}{15}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{10}$	0	0	0	
				+1	−1	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{10}$		
				0	0	$\frac{3}{5}$	0	$-\frac{2}{5}$	3	2	1
				−1	+1	$\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{10}$	−1	−1	−1
						0	−1	$\frac{6}{15}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{10}$		
						−1	0	$\frac{8}{15}$	$-\frac{1}{6}$	$-\frac{3}{10}$	3	2
						−2	+1	$\frac{1}{15}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{3}{5}$	−2	−2
								−1	−1	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	3
								−2	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	−3
										−2	−1	1

$(\frac{3}{2},1)$

		$\frac{5}{2}$								
		$+\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$						
$+\frac{3}{2}$	+1	1	$+\frac{3}{2}$	$+\frac{3}{2}$						
	$+\frac{3}{2}$	0	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$			
	$+\frac{1}{2}$	+1	$\frac{3}{5}$	$-\frac{2}{5}$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$			
		$+\frac{3}{2}$	−1	$\frac{1}{10}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{1}{2}$				
		$+\frac{1}{2}$	0	$\frac{3}{5}$	$\frac{1}{15}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	
		$-\frac{1}{2}$	+1	$\frac{3}{10}$	$-\frac{8}{15}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	
				+1	−1	$\frac{3}{10}$	$\frac{8}{15}$	$\frac{1}{6}$		
				$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{3}{5}$	$-\frac{1}{15}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$
				$-\frac{3}{2}$	+1	$\frac{1}{10}$	$-\frac{2}{5}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$
						$-\frac{1}{2}$	−1	$\frac{3}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{5}{2}$
						$-\frac{3}{2}$	0	$\frac{2}{5}$	$-\frac{3}{5}$	$-\frac{5}{2}$
								$-\frac{3}{2}$	−1	1

(j_1, j_2)

		j	j'
		m	m
m_1	m_2	$*$	$*$
m_1'	m_2'	$*$	$*$

A.8. Permutationen. Identische Teilchen

Permutationsoperatoren

Wir betrachten ein System von N Teilchen mit gleichem Spin (*gleichartige*, nicht notwendigerweise *identische* Teilchen). Den dynamischen Variablen und möglichen Zuständen eines Teilchens entsprechen dann in eineindeutiger Weise Variablen und Zustände der anderen Teilchen, und es ist deshalb möglich und sinnvoll, Permutationen von Einteilchenzuständen verschiedener Faktorräume zu definieren.

Es sei $\{\,|\,v_\lambda\rangle,\ \lambda\in\mathbb{N}\}$ ein beliebiges vollständiges Orthonormalsystem von Einteilchenzuständen. Die Vektoren

$$|\,v_{\alpha_1}v_{\alpha_2}\dots v_{\alpha_N}\rangle := |\,v_{\alpha_1}\rangle^{(1)}|\,v_{\alpha_2}\rangle^{(2)}\dots|\,v_{\alpha_N}\rangle^{(N)}\,,\quad \alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_N\in\mathbb{N} \tag{A.8-1}$$

bilden dann ein vollständiges Orthonormalsystem im Produktraum

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}^{(1)}\otimes\mathscr{H}^{(2)}\otimes\dots\otimes\mathscr{H}^{(N)}\,. \tag{A.8-2}$$

$j_1,j_2,\dots,j_N$ sei eine beliebige Anordnung der N Zahlen $1,2,\dots,N$. Der im Hilbertraum $\mathscr{H}$ der Permutation

$$p=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & \dots & N\\ j_1 & j_2 & j_3 & \dots & j_N\end{bmatrix} \tag{A.8-3}$$

zugeordnete *Permutationsoperator* P_p kann formal folgendermaßen durch die Wirkung auf die Vektoren des Basissystems (A.8-1) definiert werden: *Der Einteilchenzustand des Faktorraumes j_k soll durch den Einteilchenzustand des Faktorraumes k ersetzt werden, und zwar für $k=1,2,\dots,N$.* Ein Beispiel für den Fall $N=3$:

$$p=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 3 & 1 & 2\end{bmatrix},\qquad P_p\,|\,v_{\alpha_1}v_{\alpha_2}v_{\alpha_3}\rangle = |\,v_{\alpha_2}v_{\alpha_3}v_{\alpha_1}\rangle\,. \tag{A.8-4}$$

Auf diese Weise werden den $N!$ Permutationen $N!$ Permutationsoperatoren zugeordnet. Es gilt

$$P_p^{-1}=P_p^\dagger\,. \tag{A.8-5}$$

Die Permutationsoperatoren zu den *Transpositionen*

$$p=\begin{bmatrix}1 & 2 & \dots & j-1 & j & j+1 & \dots & k-1 & k & k+1 & \dots & N\\ 1 & 2 & \dots & j-1 & k & j+1 & \dots & k-1 & j & k+1 & \dots & N\end{bmatrix} \tag{A.8-6}$$

die man kurz $p=(jk)$ schreibt, heißen *Austauschoperatoren.*

Eine Permutation p wird als *gerade* oder als *ungerade* bezeichnet, je nachdem, ob sie durch eine gerade oder ungerade Anzahl von Transpositionen ersetzt werden kann. Im ersteren Fall ordnet man ihr die Zahl $\eta_p=+1$, im anderen Fall die Zahl $\eta_p=-1$ zu (*Parität* der Permutation).

Symmetrisierungs- und Antisymmetrisierungsoperator

Die Operatoren

$$\mathscr{S} := \frac{1}{N!}\sum_p P_p\,, \qquad \mathscr{A} := \frac{1}{N!}\sum_p \eta_p P_p\,, \qquad \mathscr{R} := \mathbb{1} - \mathscr{S} - \mathscr{A} \tag{A.8-7}$$

sind die Projektionsoperatoren zu drei orthogonalen Teilräumen $\mathscr{H}_\mathrm{s}$, $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ und $\mathscr{H}_\mathrm{r}$ von $\mathscr{H}$. (Für $N = 2$ ist $\mathscr{R}$ der Nulloperator, für $N > 2$ trifft dies nicht mehr zu.) Es gilt:

$$|\,w\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{s} \quad\Rightarrow\quad \mathscr{S}\,|\,w\,\rangle = |\,w\,\rangle\,, \qquad \mathscr{A}\,|\,w\,\rangle = \emptyset\,, \qquad \mathscr{R}\,|\,w\,\rangle = \emptyset\,, \tag{A.8-8}$$

$$P_p\,|\,w\,\rangle = |\,w\,\rangle\,; \tag{A.8-9}$$

$$|\,w\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{a} \quad\Rightarrow\quad \mathscr{S}\,|\,w\,\rangle = \emptyset\,, \qquad \mathscr{A}\,|\,w\,\rangle = |\,w\,\rangle\,, \quad \mathscr{R}\,|\,w\,\rangle = \emptyset\,, \tag{A.8-10}$$

$$P_p\,|\,w\,\rangle = \eta_p|\,w\,\rangle\,; \tag{A.8-11}$$

$$|\,w\,\rangle \in \mathscr{H} \quad\Rightarrow\quad \mathscr{S}\,|\,w\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{s}\,, \qquad P_p\big[\mathscr{S}\,|\,w\,\rangle\big] = \mathscr{S}\,|\,w\,\rangle\,, \tag{A.8-12}$$

$$\mathscr{A}\,|\,w\,\rangle \in \mathscr{H}_\mathrm{a}\,, \qquad P_p\big[\mathscr{A}\,|\,w\,\rangle\big] = \eta_p\big[\mathscr{A}\,|\,w\,\rangle\big]\,. \tag{A.8-13}$$

Wegen (A.8-9), (A.8-11) bezeichnet man die Vektoren aus $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ als *symmetrisch* und die Vektoren aus $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ als *antisymmetrisch* und wegen (A.8-12), (A.8-13) nennt man die Projektionsoperatoren $\mathscr{S}$ und $\mathscr{A}$ *Symmetrisierungs-* bzw. *Antisymmetrisierungsoperator*.

Identische Teilchen. Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsprinzip

Für Systeme *identischer* Teilchen gilt das Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsprinzip: Der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ eines Systems von N identischen Boseteilchen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) muss symmetrisch sein, der Zustandsvektor $|\,\psi\,\rangle$ eines Systems von N identischen Fermiteilchen (Teilchen mit halbzahligem Spin) muss antisymmetrisch sein.

Ein Basissystem von $\mathscr{H}_\mathrm{s}$ kann durch Symmetrisieren der Produktzustände (A.8-1) erhalten werden. Geht man von dem Vektor

$$|\,v_\alpha(N_\alpha)\,v_\beta(N_\beta)\ldots v_\kappa(N_\kappa)\,\rangle := |\,\underbrace{v_\alpha v_\alpha\ldots v_\alpha}_{N_\alpha\text{-mal}}\,\underbrace{v_\beta v_\beta\ldots v_\beta}_{N_\beta\text{-mal}}\ldots\underbrace{v_\kappa v_\kappa\ldots v_\kappa}_{N_\kappa\text{-mal}}\,\rangle\,, \tag{A.8-14a}$$

$$N_\alpha + N_\beta + \ldots + N_\kappa = N \tag{A.8-14b}$$

des Basissystems (A.8-1) aus, so ist

$$|\,v_\alpha(N_\alpha)\,v_\beta(N_\beta)\ldots v_\kappa(N_\kappa)\,\rangle_\mathrm{s} := \sqrt{\frac{N!}{N_\alpha!\,N_\beta!\cdots N_\kappa!}}\;\mathscr{S}\,|\,v_\alpha(N_\alpha)\,v_\beta(N_\beta)\ldots v_\kappa(N_\kappa)\,\rangle \tag{A.8-15}$$

der entsprechende auf eins normierte Vektor aus $\mathscr{H}_\mathrm{s}$. Alle Vektoren der Form (A.8-1) die durch Permutation der Einteilchenzustände auseinander hervorgehen, liefern wegen $\mathscr{S}P_p = \mathscr{S}$ bei Symmetrisierung denselben Vektor.

Analog erhält man durch Antisymmetrisieren der Vektoren (A.8-1) ein Basissystem von $\mathscr{H}_\mathrm{a}$. Ein vom Nullvektor verschiedener Vektor ergibt sich bei Anwenden von $\mathscr{A}$ allerdings nur, wenn im betreffenden Produktvektor N *verschiedene* Einteilchenzustände aufscheinen. Da

alle Produktvektoren mit demselben Satz von Einteilchenzuständen bei Antisymmetrisierung bis auf das Vorzeichen denselben Vektor aus $\mathscr{H}_\mathrm{a}$ ergeben, trifft man zweckmäßigerweise von vornherein eine Festlegung bezüglich der Reihung der „besetzten“ Einteilchenzustände, etwa $\alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_N$. Die auf eins normierten Basisvektoren von $\mathscr{H}_\mathrm{a}$

$$|\, v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \ldots v_{\alpha_N} \rangle_\mathrm{a} := \sqrt{N!}\, \mathscr{A}\, |\, v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \ldots v_{\alpha_N} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} |\, v_{\alpha_1} \rangle^{(1)} & |\, v_{\alpha_1} \rangle^{(2)} & \ldots & |\, v_{\alpha_1} \rangle^{(N)} \\ |\, v_{\alpha_2} \rangle^{(1)} & |\, v_{\alpha_2} \rangle^{(2)} & \ldots & |\, v_{\alpha_2} \rangle^{(N)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\, v_{\alpha_N} \rangle^{(1)} & |\, v_{\alpha_N} \rangle^{(2)} & \ldots & |\, v_{\alpha_N} \rangle^{(N)} \end{bmatrix} \tag{A.8-16}$$

werden als *Slaterdeterminanten* bezeichnet.

A.9. Streuung

Streuung von Teilchen an einem Potential bzw. elastische Streuung nichtidentischer Teilchen im Schwerpunktsystem

$\vec{r}$ Relativkoordinaten, m reduzierte Masse

(a) *Erste bornsche Näherung* (bornsche Näherung im engeren Sinn)

Notwendige Bedingung für die Anwendbarkeit

$$V(\vec{r}) \text{ strebt für } r \to +\infty \text{ stärker gegen null als } \tfrac{1}{r} \text{ („endliche Reichweite“);} \tag{A.9-1}$$

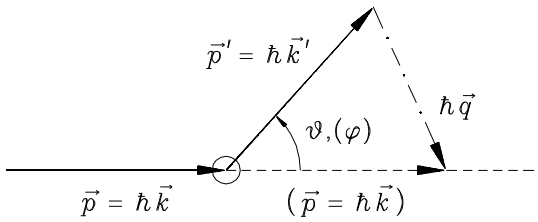


Abb. A.9-1: Elastische Streuung ($|\vec{p}\,| = |\vec{p}\,'| = p = \hbar k$)

Streuamplitude (s. Abb. A.9-1)

$$f^\mathrm{B}(\Omega) = -4\pi^2 m \hbar\, \langle\, \vec{p}\,' \,|\, V(\vec{R}) \,|\, \vec{p}\, \rangle \quad \text{mit} \quad \langle\, \vec{p}\, |\, \vec{p}\,' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,') \tag{A.9-2}$$

(s. Gl. (A.4-4), (A.4-5) von Anhang A.4).

Für ein sphärisch symmetrisches Potential folgt aus (A.9-2) speziell

$$f^\mathrm{B}(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{+\infty} dr\, r\, V(r) \sin qr\,, \qquad q = |\vec{q}\,| = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}\,. \tag{A.9-3}$$

Ein „bequem“ anwendbares, aber nicht strenges Kriterium für die Brauchbarkeit der bornschen Näherung ist (s. z. B. [7]) — vorausgesetzt, dass die Integrale existieren —

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3r \, \frac{e^{ikr}}{r} \, V(\vec{r}) \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right| \ll 1 \tag{A.9-4}$$

bzw. für sphärisch symmetrische Potentiale

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2 k} \int\limits_0^{+\infty} dr \, V(r) \, e^{ikr} \sin kr \right| = \left| \frac{m}{\hbar^2 k} \int\limits_0^{+\infty} dr \, V(r) \left[e^{2ikr} - 1 \right] \right| \ll 1 \,, \tag{A.9-5}$$

Differentieller Streuwirkungsquerschnitt in bornscher Näherung

$$\frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\Omega)}{d\Omega} = |f^{\mathrm{B}}(\Omega)|^2 \,; \tag{A.9-6a}$$

totaler Streuwirkungsquerschnitt in bornscher Näherung

$$\sigma^{\mathrm{B}} = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega \, \frac{d\sigma^{\mathrm{B}}(\Omega)}{d\Omega} = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega \, |f^{\mathrm{B}}(\Omega)|^2 \,. \tag{A.9-6b}$$

(b) *Partialwellenmethode*

Notwendige Bedingungen für die Anwendbarkeit

$$\begin{aligned} &\text{(I)} \quad V = V(r) \ \text{(sphärisch symmetrisches Potential);} \\ &\text{(II)} \quad V(r \to +\infty) \to 0 \ \text{stärker als} \ \tfrac{1}{r} \ \text{(„endliche Reichweite“);} \end{aligned} \tag{A.9-7}$$

Streuamplitude ($P_l(x) \equiv P_l^0(x)$)

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \, e^{i\delta_l} \sin\delta_l \, P_l(\cos\vartheta) \,; \tag{A.9-8}$$

differentieller Streuwirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} &= |f(\vartheta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 \sin^2\delta_l \left[P_l(\cos\vartheta) \right]^2 \\ &+ \frac{1}{k^2} \sum_{\substack{l,l'=0 \\ l<l'}}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \, 2\cos\left(\delta_l - \delta_{l'}\right) P_l(\cos\vartheta) \, P_{l'}(\cos\vartheta) \,; \end{aligned} \tag{A.9-9}$$

totaler Streuwirkungsquerschnitt

$$\sigma = \int\limits_{[4\pi]} d\Omega \, \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l \,. \tag{A.9-10}$$

Für ein Potential endlicher Reichweite *im engeren Sinne*, d. h. für ein Potential, das außerhalb einer Kugel mit endlichem Radius r_0 exakt null ist, ergeben sich die Streuphasen $\delta_l = \delta_l(k)$

aus den Stetigkeitsbedingungen für die Lösungen der „radialen“ Schrödingergleichung an der Anschlussstelle $r = r_0$. Da dann die Radialfunktionen für $r > r_0$ durch

$$R_{kl}^{>}(r) = B_l \left[\cos\delta_l \, j_l(kr) + \sin\delta_l \, n_l(kr)\right] , \tag{A.9-11}$$

$$B_l = B_l(k) , \quad \delta_l = \delta_l(k) , \quad k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (E > 0) \tag{A.9-12}$$

gegeben sind (s. Aufgabe 2.26), folgt als Bestimmungsgleichung für δ_l

$$\left[\frac{\frac{d}{dr} R_{kl}^{<}(r)}{R_{kl}^{<}(r)}\right]_{r=r_0-} = \left[\frac{\cos\delta_l \, \frac{d}{dr} j_l(kr) + \sin\delta_l \, \frac{d}{dr} n_l(kr)}{\cos\delta_l \, j_l(kr) + \sin\delta_l \, n_l(kr)}\right]_{r=r_0+} , \tag{A.9-13}$$

wobei $R_{kl}^{<}$ die Lösungen der Radialgleichung für den „Potentialbereich“ $r < r_0$ sein sollen.

Die Bezeichnung *Phasenverschiebungen* bzw. *Streuphasen* für die Größen δ_l rührt von der asymptotischen Form von $R_{kl}^{>}$ her. Mit Gl. (A.2-35), (A.2-36) folgt nämlich

$$R_{kl}^{>}(r \to +\infty) \longrightarrow B_l \, \frac{\sin\left(kr - l\pi/2 + \delta_l\right)}{kr} . \tag{A.9-14}$$

Für Potentiale, welche (A.9-7) erfüllen, aber *nicht* außerhalb einer Kugel mit endlichem Radius null sind, ist die Berechnung der Streuphasen i. Allg. schwieriger.[4] Einfach ist sie dann nur, wenn man die Radialfunktion R_{kl} asymptotisch in eine mit (A.9-14) unmittelbar vergleichbare Form bringen kann.

(c) *Coulombstreuung*

Coulombpotential

$$V_{\text{Coul}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 \, e^2}{r} ; \tag{A.9-15}$$

Coulombstreuamplitude

$$f_{\text{Coul}}(\vartheta) = -\frac{Z_1 Z_2 \, e^2}{2mv^2} \, \frac{1}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}} \, \exp\Big\{i\Big[2\gamma_0 - \frac{Z_1 Z_2 \, e^2}{\hbar v} \, \log\left(\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right)\Big]\Big\} , \tag{A.9-16a}$$

$$\gamma_0 := \arg\Gamma\big(1 + i \, \frac{Z_1 Z_2 \, e^2}{\hbar v}\big) , \quad v := \sqrt{\frac{2E}{m}} ; \tag{A.9-16b}$$

differentieller Streuwirkungsquerschnitt: *rutherfordsche Streuformel*

$$\frac{d\sigma_{\text{Coul}}(\vartheta)}{d\Omega} = |f_{\text{Coul}}(\vartheta)|^2 = \left[\frac{Z_1 Z_2 \, e^2}{2mv^2}\right]^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} . \tag{A.9-17}$$

Streuung identischer Teilchen (Schwerpunktsystem)

$\vec{r} := \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ Relativkoordinaten, $\vec{r}_0 := \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ Schwerpunktskoordinaten

Die Streuung identischer Teilchen stellt eine physikalische Situation dar, bei der ausgehend von einem bestimmten (zunächst als *rein* angenommenen) Ausgangszustand des Zweiteilchensystems der getestete Endzustand auf zwei innerhalb des betrachteten Experimentes nicht unterscheidbare („virtuelle“) alternative Weisen erreicht werden kann (siehe Abb. A.9-2).

[4] Siehe z. B. Taylor, J. R.: Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions. Krieger Publishing Company, Malabar 1983. Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2006.

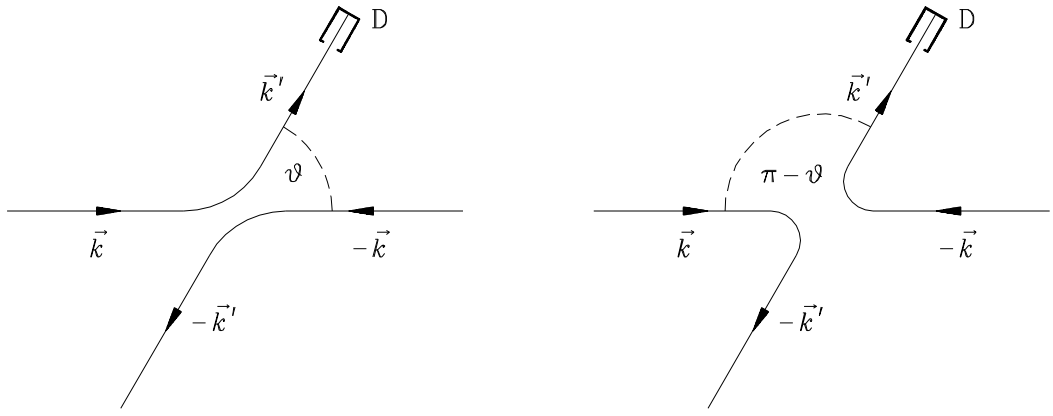


Abb. A.9-2: Streuung identischer Teilchen (Schwerpunktsystem); D Detektor

Aufgrund der Gesetze für die Kombination von quantentheoretischen Wahrscheinlichkeitsamplituden (s. Tabelle A.10-1 von Anhang A.10) hat man für die beiden gedachten Alternativen nicht die Intensitäten (d. h. die Wirkungsquerschnitte), sondern die *Amplituden* zu addieren (*Interferenz*). Die Streuamplituden sind dabei mit solchen Phasen zu addieren, wie sie das Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsprinzip für den Gesamt-Zustandsvektor nach sich zieht.

Der Faktor des Gesamt-Zustandsvektors, der die Schwerpunktsbewegung beschreibt, ist symmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung, da die zugehörige Zustandsfunktion nur von $\vec{r}_0 = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ abhängt. Die Forderung der Symmetrie bzw. Antisymmetrie überträgt sich somit auf den Zustandsvektor der Relativbewegung. Bei Teilchen mit Spin interessiert man sich in erster Linie für Eigenvektoren zum Gesamtspin, also für Zustandsvektoren, welche die Form eines direkten Produktes eines Bahn- und eines Spinteiles besitzen, bei Teilchen ohne Spin hat man von vornherein nur einen Bahnteil. Der symmetrisierte [antisymmetrisierte] asymptotische Bahnteil der Zustandsfunktion der Relativbewegung enthält wegen $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2 \;\Rightarrow\; \vec{r} \leftrightarrow -\vec{r}$, d. h. $(r, \vartheta, \varphi) \leftrightarrow (r, \pi - \vartheta, \varphi + \pi)$, anstelle der Streuamplitude $f(\vartheta, \varphi)$ die Amplitude

$$f(\vartheta, \varphi) + \epsilon\, f(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)\,, \qquad \epsilon = +1\;[-1]\,. \tag{A.9-18}$$

Für den differentiellen Streuwirkungsquerschnitt im Schwerpunktsystem folgt somit

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \left|f(\vartheta, \varphi) + \epsilon\, f(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)\right|^2\,, \qquad \epsilon = +1\;[-1]\,. \tag{A.9-19}$$

Handelt es sich beispielsweise um Fermiteilchen in einem antisymmetrischen Gesamt-Spinzustand, so muss der Bahnteil des Zustandsvektors der Relativbewegung symmetrisch sein, und in Formel (A.9-19) ist $\epsilon = +1$ zu wählen.

Hat man es mit einem statistischen Gemisch in Bezug auf den Spinzustand der Zweiteilchensysteme zu tun, so hat man gemäß dem Gesetz (5) von Tabelle A.10-1 die zugehörigen Intensitäten, d. h. die Wirkungsquerschnitte, mit den statistischen Gewichten zu mitteln. Für unpolarisierte Teilchenstrahlen ist jedem der Eigenzustände von $\vec{S}^2 = (\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)})^2$ und $S_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$ das gleiche statistische Gewicht zuzuordnen.

Auch die Beziehung zwischen differentiellem und totalem Streuwirkungsquerschnitt muss für identische Teilchen abgeändert werden, falls man die Streuereignisse nur zu dem im Laboratorium auf das Target einfallenden „Teilchenstrom“ in Beziehung setzt. Man hat dann die Formel

$$\sigma = \frac{1}{2} \int\limits_{[4\pi]} \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega}\, d\Omega \tag{A.9-20}$$

zu verwenden.

A.10. Statistische Aussagen der Quantentheorie

Speziell: Erläuterungen zu den Aufgaben 3.1 bis 3.9 und 6.23 bis 6.25

Die Aufgaben 3.1 bis 3.9 und 6.23 bis 6.25 behandeln Gedankenexperimente mit Anordnungen von „modifizierten“ Stern-Gerlach-Apparaten, ähnlich wie sie in den Feynman Lectures [30] zur Einführung in die Grundideen der Quantentheorie diskutiert werden. Die grundlegenden Konzepte der Zustandsbeschreibung (Zustandsvektor, Dichteoperator, Basissysteme, Projektionsoperatoren, Messung und Zustandsreduktion) und die Gesetze für die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerten, welche zu den statistischen Aussagen der Quantentheorie führen, können anhand derartiger Gedankenexperimente in umfassender und dennoch einfacher Weise erarbeitet werden.

Es wird dabei ein monoenergetischer „Strahl“ von neutralen Spin-s-Teilchen betrachtet, der genügend intensitätsarm sein soll, damit man von Wechselwirkungen der Teilchen untereinander absehen kann. Messungen am „Strahl“ können dann als Messungen an vielen gleich präparierten Systemen (= Teilchen) interpretiert werden. Einen solchen „Strahl“ lassen wir im Gedankenexperiment auf eine Anordnung von „modifizierten“ Stern-Gerlach-Apparaten einfallen, deren Polschuhe so ausgebildet sein sollen, dass die „virtuellen Teilstrahlen“ (bzgl. des Wortes „virtuell“ s. unten) wieder räumlich zusammengeführt werden und längs der ursprünglichen Strahlrichtung den Apparat verlassen, falls nicht im Inneren des Apparates einer oder mehrere der „virtuellen Wege“ durch Masken blockiert werden; siehe z. B. Abb. A.10-1.

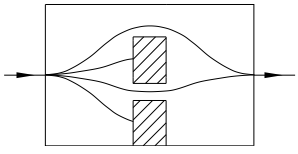


Abb. A.10-1: Modifizierter Stern-Gerlach-Apparat für $s = \frac{3}{2}$ (vier „virtuelle Teilstrahlen“)

Die in den Abbildungen gezeichneten „virtuellen Wege“ stellen die Bahnen der unter den üblichen Versuchsbedingungen quasipunktförmigen Teilpakete (s. z. B. [1]) dar, in die ein einfallendes Wellenpaket durch die Filterung aufgespalten wird, und die wieder kohärent zusammengeführt werden, falls nicht Teilpakete „durch Masken aus dem Verkehr gezogen werden“. (Der Leser vergegenwärtige sich, dass die Teilpakete weder ein in $2s+1$ Teile „zerstückeltes“ Teilchen noch $2s+1$ verschiedene Teilchen beschreiben, sondern $2s+1$ denkbare *Möglichkeiten für ein Teilchen* der betrachteten Gesamtheit.)

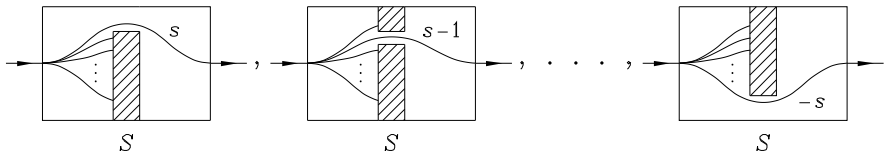


Abb. A.10-2: S-Apparate mit einem offenen „Kanal“ (S-Filter)

Verschiedene Feldgradientenrichtungen (Quantisierungsrichtungen) in der zur Strahlrichtung senkrechten Ebene kennzeichnen wir durch verschiedene Buchstaben $S, T, R, \ldots$ Die Spineigenzustände für eine gegebene Quantisierungsrichtung $S, T, R, \ldots$ bezeichnen wir mit $|\, mS \,\rangle$, $|\, mT \,\rangle$, $|\, mR \,\rangle, \ldots$ ($m = s, s-1, \ldots, -s$; m magnetische Quantenzahl). Orthonormiertheit und Vollständigkeit der von den S-Apparaten der Abb. A.10-2 präparierten Zustände $|\, mS \,\rangle$, $m = s, s-1, \ldots, -s$, schreiben sich dann

$$\langle\, mS \,|\, m'S \,\rangle = \delta_{mm'}\,, \qquad \sum_m |\, mS \,\rangle\langle\, mS \,| = \mathbb{1}\,. \tag{A.10-1}$$

In den Aufgaben 3.3 bis 3.9 sind die gefragten Wahrscheinlichkeiten bzw. Strahlintensitäten jeweils durch die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\langle\, mS \,|\, m'T \,\rangle, \ldots$ auszudrücken. Für die zahlenmäßige Berechnung der Ergebnisse müssen die Winkel zwischen den Quantisierungsrichtungen $S, T, \ldots$ spezifiziert werden. Das Transformationsverhalten von Drehimpulseigenzuständen bei räumlichen Drehungen (s. Anhang A.7, Gl. (A.7-14)) liefert dann die zahlenmäßigen Werte für die Amplituden $\langle\, mS \,|\, m'T \,\rangle$ in Form von Drehmatrixelementen $D^{(s)}_{mm'}(0, \beta, 0)$. Dieser Teil der Aufgaben wird erst im Kapitel 6 behandelt, um im Kapitel 3 die allgemeinen (d. h. die auf beliebige Systeme und Messungen anwendbaren) Gesetze in den Vordergrund zu stellen.

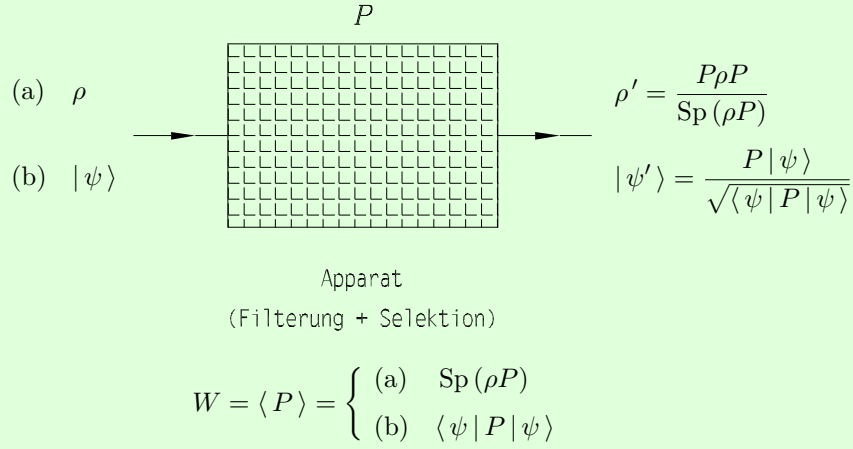


Abb. A.10-3: Zustandsreduktion bei einer Umpräparation bzw. Wahrscheinlichkeit für den Versuchsausgang „Ja“ bei einer Messung (a) für eine gemischte Gesamtheit; (b) für eine reine Gesamtheit

Im quantentheoretischen Formalismus handelt es sich um eine Folge von „Ja-Nein-Entscheidungen“. (Jedes System, d. h. jedes Teilchen, „passiert“ den betreffenden Apparat oder

wird in einer Maske absorbiert.) Die Abbildung A.10-3 fasst in symbolischer Form die beiden für die betrachteten Experimente maßgebenden quantentheoretischen Postulate zusammen (s. z. B. [5]).

P ist dabei der dem Apparat zugeordnete Projektionsoperator, dessen Eigenwert 1 dem Versuchsausgang „Ja“ und dessen Eigenwert 0 dem Versuchsausgang „Nein“ entspricht, und ρ bzw. $|\psi\rangle$ beziehen sich auf den Zustand *vor* der Umpräparation bzw. Messung. Die Wahrscheinlichkeit W für den Versuchsausgang „Ja“ bedeutet im Falle eines Stern-Gerlach-Apparates der Art von Abb. A.10-1 die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen, das in den Apparat „eintritt“, aus diesem auch wieder „austritt“.

Es ist lehrreich, anhand der Aufgaben 3.2 bis 3.9 zu verifizieren, dass der in Abb. A.10-3 dargestellte allgemeine quantentheoretische Formalismus fünf einfachen (von der Diskussion des Doppelspaltversuches plausiblen) Gesetzen zur Kombination quantentheoretischer Wahrscheinlichkeitsamplituden äquivalent ist. Diese Gesetze stellen die verbale Beschreibung der feynmanschen *Pfad-(Weg-)Integral-Formulierung der Quantenmechanik* dar (s. z. B. [1]). Wie die Aufgaben 3.2 bis 3.9 zeigen, führt ihre Anwendung i. Allg. sogar wesentlich rascher zum Ergebnis als der Standardformalismus. Dieser Vorteil muss damit erkauft werden, dass man das Problem jeweils gedanklich analysieren muss, während der Standardformalismus „mechanisch“ zum Ziel führt.

Tab. A.10-1: Gesetze für die Kombination von Wahrscheinlichkeitsamplituden (s. [30])

Vollständig präparierte Systeme (reine Gesamtheiten)

(1) Die Wahrscheinlichkeit für einen „Endzustand“ ist gegeben durch das Absolutquadrat einer komplexen Zahl, der Wahrscheinlichkeitsamplitude des „Endzustandes“. Als „Endzustände“ bezeichnet man die bei dem betrachteten Experiment unterscheidbaren (nicht notwendigerweise unterschiedenen; siehe (4)) alternativen Versuchsausgänge.

(2) Gibt es mehrere innerhalb des betrachteten Experimentes prinzipiell nicht unterscheidbare alternative Weisen („virtuelle Wege“), auf welchen ein „Endzustand“ erreicht werden kann, so ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Erreichen dieses „Endzustandes“ die Summe der Wahrscheinlichkeitsamplituden für die betreffenden „virtuellen Wege“ (*Interferenz*).

(3) Setzt sich einer der „virtuellen Wege“ aus mehreren „Wegteilen“ zusammen, so ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude für diesen „virtuellen Weg“ das Produkt der Wahrscheinlichkeitsamplituden für die „Wegteile“.

(4) Fasst man mehrere „Endzustände“ zu einem „Ereignis“ zusammen, so ist die Wahrscheinlichkeit für dieses „Ereignis“ durch die Summe der Wahrscheinlichkeiten für die betreffenden „Endzustände“ gegeben.

Unvollständig präparierte Systeme (gemischte Gesamtheiten)

(5) Die Wahrscheinlichkeit für einen „Endzustand“ bzw. für ein „Ereignis“ ist durch das mit den statistischen Gewichten der Gemischzustände gebildete gewichtete Mittel der für die einzelnen Gemischzustände erhaltenen betreffenden Wahrscheinlichkeiten gegeben.

A.11. Definition der Eulerwinkel

Beschreibung der Drehung eines starren Körpers durch drei Winkel α, β, γ mit

$$0 \leq \alpha < 2\pi\,, \quad 0 \leq \beta \leq \pi\,, \quad 0 \leq \gamma < 2\pi\,. \tag{A.11-1}$$

xyz-System: „raumfestes“ System. Daneben wird ein „körperfestes“ System betrachtet, das in seiner Anfangslage mit dem xyz-System zusammenfällt, und dessen Endlage ein $x'y'z'$-System festlegt.

Definition der Eulerwinkel[5]

(1) Drehung des Körpers um die z-Achse um den Winkel α, dabei geht das körperfeste System in die Lage $\xi_1\eta_1\zeta_1$ über;

(2) Drehung des Körpers um die η_1-Achse um den Winkel β, dabei geht das körperfeste System in die Lage $\xi_2\eta_2\zeta_2$ über;

(3) Drehung des Körpers um die ζ_2-Achse um den Winkel γ, dabei geht das körperfeste System in die Lage $x'y'z'$ über.

Gleichwertig dazu ist:

(1′) Drehung des Körpers um die z-Achse um den Winkel γ, dabei geht das körperfeste System in die Lage $x_1y_1z_1$ über;

(2′) Drehung des Körpers um die y-Achse um den Winkel β, dabei geht das körperfeste System in die Lage $x_2y_2z_2$ über;

(3′) Drehung des Körpers um die z-Achse um den Winkel α, dabei geht das körperfeste System in die Lage $x'y'z'$ über.

Für die Definition des Drehoperators in der Quantentheorie zieht man die letztere Form vor (s. Gl. (A.7-12)), da dann nur Drehimpulskomponenten bezüglich der Achsen *eines* Koordinatensystems eingehen. Aufgrund der ersten Definition sieht man jedoch unmittelbar, dass die räumlichen Polarwinkel ϑ, φ der z'-Achse im xyz-System mit den Eulerwinkeln gemäß

$$\vartheta = \beta\,, \quad \varphi = \alpha \tag{A.11-2}$$

zusammenhängen (s. Abb. A.11-1).

[5] Die hier gegebene Definition stimmt mit jener von [2]–[7], [15] und [16] überein. Es sind jedoch in der Literatur unter der Bezeichnung Eulerwinkel auch anders definierte Parameter in Gebrauch (siehe z. B. [30]).

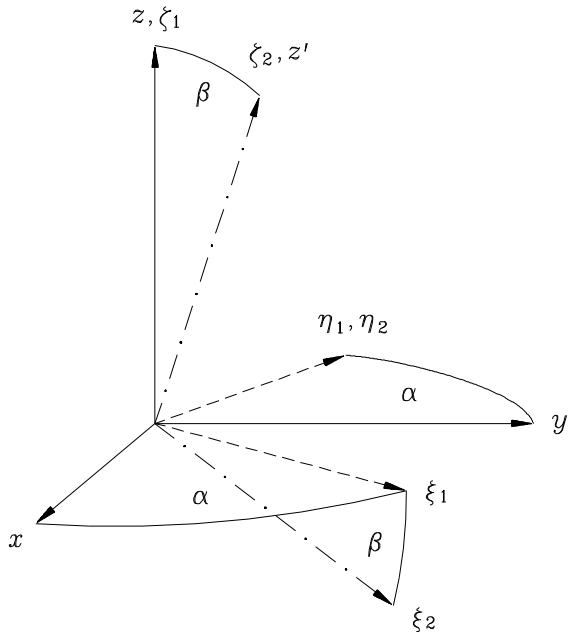


Abb. A.11-1: Illustration zu $\vartheta = \beta$, $\varphi = \alpha$ (siehe die Definition (1), (2) der Eulerwinkel α, β)

Anhang B

Physikalische Konstanten

Die folgenden Zahlenwerte für die fundamentalen physikalischen Konstanten sind dem 2010 vom Committee on Data for Science and Technology (CODATA) empfohlenen konsistenten Satz von Mohr, Taylor und Newell[1] entnommen. Die Ziffern in Klammern hinter einem Zahlenwert W kennzeichnen die Unsicherheit in den letzten Stellen des Wertes. Die Unsicherheit ist als einfache Standardabweichung σ angegeben. Die Chance, dass der wahre Wert im Intervall $W \pm \sigma$ liegt, beträgt 68,27%, sie beträgt 95,45% für das Intervall $W \pm 2\sigma$ und 99,73% für das Intervall $W \pm 3\sigma$.

Die Werte sind in gaußschen cgs-Einheiten angegeben. In jenen Fällen, in denen eine Formel angeführt ist, bezieht sich diese ebenfalls auf das gaußsche cgs-System. Umrechnungsfaktoren für den Übergang zu SI-Einheiten sowie zwischen einigen in der Atomphysik gebräuchlichen Energieeinheiten sind im Anschluss an die folgende Tabelle angegeben.

Größe	Symbol	Formel	Wert
Vakuumlichtgeschwindigkeit	c		$2{,}99792458 \cdot 10^{10}\ \mathrm{cm \cdot s^{-1}}$ (exakt)
Planckkonstante	h		$6{,}62606957(29) \cdot 10^{-27}\ \mathrm{erg \cdot s}$
(Wirkungsquantum)	$\hbar$	$h/2\pi$	$1{,}054571726(47) \cdot 10^{-27}\ \mathrm{erg \cdot s}$
elektrische Elementarladung	e		$4{,}80320451(10) \cdot 10^{-10}\ \mathrm{erg^{1/2} \cdot cm^{1/2}}$
Avogadrokonstante (loschmidtsche Zahl)	N_A		$6{,}02214129(27) \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$
Boltzmannkonstante	k_B		$1{,}3806488(13) \cdot 10^{-16}\ \mathrm{erg \cdot K^{-1}}$
Gravitationskonstante	G		$6{,}67384(80) \cdot 10^{-8}\ \mathrm{dyn \cdot cm^2 \cdot g^{-2}}$
Feinstrukturkonstante	α	$e^2/\hbar c$	$7{,}2973525698(24) \cdot 10^{-3}$
(Sommerfeldkonstante)	$1/\alpha$		$137{,}035999074(45)$
Ruhmasse des Elektrons	m_e		$9{,}10938291(40) \cdot 10^{-28}\ \mathrm{g}$
Ruhmasse des Protons	m_p		$1{,}672621777(74) \cdot 10^{-24}\ \mathrm{g}$
Ruhmasse des Neutrons	m_n		$1{,}674927351(74) \cdot 10^{-24}\ \mathrm{g}$
Verhältnis aus Proton- und Elektronruhmasse		$m_\mathrm{p}/m_\mathrm{e}$	$1836{,}15267245(75)$
Rydbergkonstante für unendliche Kernmasse	R_∞	$m_\mathrm{e} e^4/4\pi\hbar^3 c$	$1{,}0973731568539(55) \cdot 10^5\ \mathrm{cm^{-1}}$

[1] Mohr, P. J., B. N. Taylor und D. B. Newell: Preprint National Institute of Standards, USA, March 15, 2012; s. auch http://physics.nist.gov/cuu/

Größe	Symbol	Formel	Wert
Rydbergkonstante für das Wasserstoffatom	R_H	$R_\infty/(1+m_\mathrm{e}/m_\mathrm{p})$	$1{,}0967758340656(57)\cdot10^5\ \mathrm{cm}^{-1}$
bohrscher Radius für unendliche Kernmasse	a_0	$\hbar^2/m_\mathrm{e}e^2$	$5{,}2917721092(17)\cdot10^{-9}\ \mathrm{cm}$
bohrscher Radius für das Wasserstoffatom	a_H	$a_0(1+m_\mathrm{e}/m_\mathrm{p})$	$5{,}2946540984(17)\cdot10^{-9}\ \mathrm{cm}$
Hartree-Energie	E_h	e^2/a_0	$4{,}35974434(19)\cdot10^{-11}\ \mathrm{erg}$
klassischer Elektronradius	r_e	$e^2/m_\mathrm{e}c^2$	$2{,}8179403267(27)\cdot10^{-13}\ \mathrm{cm}$
Comptonwellenlänge des Elektrons	$\lambda_\mathrm{C,e}$	$\hbar/m_\mathrm{e}c$	$2{,}4263102389(16)\cdot10^{-10}\ \mathrm{cm}$
Comptonwellenlänge des Protons	$\lambda_\mathrm{C,p}$	$\hbar/m_\mathrm{p}c$	$1{,}32140985623(94)\cdot10^{-13}\ \mathrm{cm}$
Comptonwellenlänge des Neutrons	$\lambda_\mathrm{C,n}$	$\hbar/m_\mathrm{n}c$	$1{,}3195909068(11)\cdot10^{-13}\ \mathrm{cm}$
bohrsches Magneton	μ_B	$e\hbar/2m_\mathrm{e}c$	$9{,}27400968(20)\cdot10^{-21}\ \mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}$
Kernmagneton	μ_K	$e\hbar/2m_\mathrm{p}c$	$5{,}05078353(11)\cdot10^{-24}\ \mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}$
magnetisches Moment des freien Elektrons	μ_e		$9{,}28476430(21)\cdot10^{-21}\ \mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}$
magnetisches Moment des freien Elektrons in bohrschen Magnetonen		$\mu_\mathrm{e}/\mu_\mathrm{B}$	$1{,}00115965218076(27)$
gyromagnetischer Faktor des Spins des Elektrons	$g_{s,\mathrm{e}}$	$2\mu_\mathrm{e}/\mu_\mathrm{B}$	$2{,}00231930436153(53)$
magnetisches Moment des freien Protons	μ_p		$1{,}410606743(33)\cdot10^{-23}\ \mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}$
magnetisches Moment des freien Protons in Kernmagnetonen		$\mu_\mathrm{p}/\mu_\mathrm{K}$	$2{,}792847356(23)$
gyromagnetischer Faktor des Spins des Protons	$g_{s,\mathrm{p}}$	$2\mu_\mathrm{p}/\mu_\mathrm{K}$	$5{,}585694713(46)$
magnetisches Moment des Neutrons	μ_n		$-0{,}96623647(23)\cdot10^{-23}\ \mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}$
magnetisches Moment des Neutrons in Kernmagnetonen		$\mu_\mathrm{n}/\mu_\mathrm{K}$	$-1{,}91304272(45)$
gyromagnetischer Faktor des Spins des Neutrons	$g_{s,\mathrm{n}}$	$2\mu_\mathrm{n}/\mu_\mathrm{K}$	$-3{,}82608545(90)$

Umrechnung zwischen einigen in der Atomphysik gebräuchlichen Energieeinheiten[2]

$1\,\mathrm{eV} = 1{,}602176565(35)\cdot 10^{-12}\,\mathrm{erg} = 1{,}602176565(35)\cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}$

$1\,\mathrm{Ry} = 2{,}179872171(11)\cdot 10^{-11}\,\mathrm{erg} = 2{,}179872171(11)\cdot 10^{-18}\,\mathrm{J}$
$= 13{,}60569253(30)\,\mathrm{eV}$

$1\ \text{hartree} = 4{,}35974434(19)\cdot 10^{-11}\,\mathrm{erg} = 4{,}35974434(19)\cdot 10^{-18}\,\mathrm{J}$
$= 27{,}21138505(60)\,\mathrm{eV}$

1 atomare Energieeinheit $\equiv 1$ hartree $= 2\,\mathrm{Ry}$

Umrechnung von gaußschen cgs-Einheiten in SI-Einheiten

$c_0 \equiv 2{,}99792458\cdot 10^{10}$
(Zahlenwert der in cm/s angegebenen Vakuumlichtgeschwindigkeit [exakt])

Länge	$1\,\mathrm{cm} = 10^{-2}\,\mathrm{m}$
Masse	$1\,\mathrm{g} = 10^{-3}\,\mathrm{kg}$
Kraft	$1\,\mathrm{dyn} = 10^{-5}\,\mathrm{N}$
Energie	$1\,\mathrm{erg} = 10^{-7}\,\mathrm{J}$
Leistung	$1\,\mathrm{erg/s} = 10^{-7}\,\mathrm{W}$ $(\mathrm{W} \equiv \mathrm{V}\cdot\mathrm{A})$
elektrische Ladung	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{1/2} \mathrel{\widehat{=}} 10\,c_0^{-1}\,\mathrm{C}$ $(\mathrm{C} \equiv \mathrm{A}\cdot\mathrm{s})$
elektrische Stromstärke	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{1/2}\cdot\mathrm{s}^{-1} \mathrel{\widehat{=}} 10\,c_0^{-1}\,\mathrm{A}$
elektrische Spannung	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{-1/2} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-8}\,c_0\,\mathrm{V}$
elektrische Feldstärke	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{-3/2} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-6}\,c_0\,\mathrm{V/m}$
elektrische Verschiebung	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{-3/2} \mathrel{\widehat{=}} 10^{5}\,(4\pi c_0)^{-1}\,\mathrm{C/m^2}$
elektrischer Fluss	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{1/2} \mathrel{\widehat{=}} 10\,(4\pi c_0)^{-1}\,\mathrm{C}$
elektrisches Moment	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2} \mathrel{\widehat{=}} (10\,c_0)^{-1}\,\mathrm{C}\cdot\mathrm{m}$
magnetische Feldstärke	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{-3/2} \equiv 1\,\mathrm{Oe} \mathrel{\widehat{=}} 10^{3}\,(4\pi)^{-1}\,\mathrm{A/m}$
magnetische Induktion	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{-3/2} \equiv 1\,\mathrm{G} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-4}\,\mathrm{T}$ $(\mathrm{T} \equiv \mathrm{V}\cdot\mathrm{s/m^2})$
magnetischer Fluss	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{1/2} \equiv 1\,\mathrm{Mx} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-8}\,\mathrm{Wb}$ $(\mathrm{Wb} \equiv \mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$
magnetisches Moment	$1\,\mathrm{erg}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2} \mathrel{\widehat{=}} 10^{-3}\,\mathrm{A}\cdot\mathrm{m^2}$

[2]Siehe die Fußnote von Seite 523.

Literaturverzeichnis

Zu den einzelnen Kapiteln speziell empfohlen:

Kapitel 1: [3]–[5], [7], [9]; zu den Bemerkungen: [10]–[13].
Kapitel 2: [1]–[8].
Kapitel 3: [1], [3]–[5], [7]–[9], [30].
Kapitel 4: [1], [3]–[5], [7], [8].
Kapitel 5: [1]–[7].
Kapitel 6: [1]–[5], [7].
Kapitel 7: [1]–[7].
Kapitel 8: [2], [3], [5], [7], [8].
Kapitel 9: [1]–[3], [5]–[7], [16], [18], [22], [23], [31]–[35].

Lehrbücher über Quantentheorie

[1] Cohen-Tannoudji, C., B. Diu und F. Laloe: Quantenmechanik. 2 Bde., Walter de Gruyter, Berlin 2009, 2008.

[2] Galindo, A., und P. Pascual: Quantum Mechanics. 2 Bde., Springer-Verlag, Berlin 1990, 1991.

[3] Messiah, A.: Quantenmechanik. 2 Bde., Walter de Gruyter, Berlin 1991, 1990.

[4] Ballentine, L. E.: Quantum Mechanics. World Scientific, New Jersey 1998.

[5] Fick, E.: Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie. AULA-Verlag, Wiesbaden 1988.

[6] Davydov, A. S.: Quantenmechanik. J. A. Barth Verlag, Leipzig 1992.

[7] Hittmair, O.: Lehrbuch der Quantentheorie. Carl Hanser Verlag, München 1972.

[8] Grawert, G.: Quantenmechanik. AULA-Verlag, Wiesbaden 1989.

[9] Mitter, H.: Quantentheorie. BI Wissenschaftsverlag, Mannheim 1987.

Mathematische Methoden und axiomatische Darstellung der Quantentheorie

[10] Großmann, S.: Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik.
AULA-Verlag, Wiesbaden 1988.

[11] Fano, G.: Mathematical Methods of Quantum Mechanics.
Mc Graw-Hill Book Company, New York 1971.

[12] Prugovečki, E.: Quantum Mechanics in Hilbert Space.
Academic Press, New York 1981.
Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2006.

[13] Thirring, W.: Lehrbuch der Mathematischen Physik.
Bd. 3: Quantenmechanik von Atomen und Molekülen.
Springer-Verlag, Wien 1994.

[14] Ludwig, G.: Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik.
Bd. 3: Quantentheorie.
Vieweg, Braunschweig 1984.

Praktische Anwendungen der Quantentheorie und Übungsaufgaben zur Quantentheorie

[15] Constantinescu, F., und E. Magyari: Problems in Quantum Mechanics.
Pergamon Press, Oxford 1976.

[16] Flügge, S.: Practical Quantum Mechanics.
Springer-Verlag, Berlin 1999.

[17] Lim, Y. K. (Ed.): Problems and Solutions on Quantum Mechanics.
World Scientific, Singapore 1998.

[18] Ter Haar, D. (Ed.): Selected Problems in Quantum Mechanics.
Pion Limited, London 1975.

[19] Squires, G. L.: Problems in quantum mechanics with solutions.
Cambridge University Press, Cambridge 1995.

[20] Kogan, V. I., und V. M. Galitskiy: Problems in Quantum Mechanics.
Prentice Hall, Inc., New Jersey 1963.

[21] Gol'dman, I. I., und V. D. Krivchenkov: Problems in Quantum Mechanics.
Pergamon Press, Oxford 1961.
Reprint: Dover Publications, Inc., New York 1993.

[22] Grawert, G.: Quantenmechanik in Anwendungen und Übungen.
AULA-Verlag, Wiesbaden 1972.

[23] Gombas, P., und D. Kisdi: Einführung in die Quantenmechanik
und ihre Anwendungen.
Springer-Verlag, Wien 1984.

[24] Mavromatis, H. A.: Exercises in Quantum Mechanics.
Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1992.

[25] Basdevant, J.-L., und J. Dalibard: The Quantum Mechanics Solver.
Springer-Verlag, Berlin 2006.

[26] Capri, A. Z.: Problems and solutions in nonrelativistic quantum mechanics.
World Scientific, River Edge 2002.

[27] Peleg, Y., R. Pnini und E. Zaarur: Schaum's outline of theory and problems
of quantum mechanics.
Mc Graw-Hill Book Company, New York 1998.

[28] Raj, M. G.: Problems in Quantum Mechanics.
Anmol Publications PVT. LTD., New Delhi 1998.

[29] Tamvakis, K.: Problems and solutions in quantum mechanics.
Cambridge University Press, Cambridge 2005.

Literatur zu speziellen Fragestellungen und Themenbereichen

([30] zu Fragestellungen der Quantentheorie, [31]-[35] zur Atomphysik; s. die Hinweise am Anfang des Literaturverzeichnisses)

[30] Feynman, R. P., R. B. Leighton und M. Sands: Feynman Vorlesungen über Physik.
Bd. 3: Quantenmechanik.
Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München 2007.

[31] Bethe, H. A., und R. Jackiw: Intermediate Quantum Mechanics.
Westview Press, Inc., Nashville 1997.

[32] Bethe, H. A., und E. E. Salpeter: Quantum Mechanics of One- and
Two-Electron Atoms.
Plenum Publishing Corporation, New York 1977.
Reprint: Dover Publications, Inc., New York 2008.

[33] Cagnac, B., und J. C. Pebay-Peyroula: Modern Atomic Physics. 2 Bde.,
Halsted Press, New York 1975.

[34] Sobel'man, I. I.: Theory of Atomic Spectra.
Alpha Science International, Oxford 2006.

[35] Condon, E. U., und G. H. Shortley: The Theory of Atomic Spectra.
Cambridge University Press, Cambridge 1970.

Mathematische Nachschlagewerke

[36] Gradstein, I. S., und I. M. Ryshik: Summen-, Produkt- und Integraltafeln. 2 Bde., Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main 1981.

[37] Abramowitz, M., und I. Stegun (Ed.): Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables.
Herausgegeben vom U.S. National Institute of Standards and Technology, gedruckt vom U.S. Government Printing Office, Washington 10^{th} Printing 1972.

Das Nachschlagewerk ist copyrightfrei, die Auflage von 1972 kann auf mehreren Internetadressen, z. B. auf http://www.math.sfu.ca/~cbm/aands/, legal kostenlos angesehen und von dort heruntergeladen werden. Es wurde auch von Dover Publications, Inc., New York, nachgedruckt (9^{th} Dover Printing = 10^{th} GPO Printing). Die Formeln ohne Graphen und Tabellen sind im Verlag Harri Deutsch erschienen:

Abramowitz, M., und I. Stegun (Ed.): Pocketbook of Mathematical Functions.
Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main 1984.

Sachverzeichnis

Einfache Zahlen stellen Seitenzahlen dar, zusammengesetzte Zahlen wie 9.12 sind Nummern von Aufgaben, Verweise wie A.3 beziehen sich auf Anhänge und Verweise wie T4.3 auf Testaufgaben. Mit 6.27(b) wird auf Punkt (b) von Aufgabe 6.27 hingewiesen. Schräg gestellte Seitenzahlen wie *34* verweisen auf Stellen, die *grundlegende* Aussagen zu den betreffenden Einträgen enthalten, normal gesetzte Seitenzahlen wie 16 beziehen sich auf bloße Erwähnungen oder Anwendungen.

A

Ableitung
- einer Operatorfunktion 16, *34*, 37–39
- einer operatorwertigen Funktion 1.16, 1.17(b)

Abschirmfunktion 465
Abschirmkonstante *464–465*, 472
Addition von Drehimpulsen *506*; 6.18, 6.19, 6.26, 7.10, 7.11, 9.12; T6.9 bis T6.11
adjungierter Operator zu einem gegebenen linearen Operator *26*, 54, 167; 1.7
Alkaliatome 9.10, 9.11
anharmonischer Oszillator 5.3, 5.10; T5.8
anisotroper Oszillator 5.14
antisymmetrische Zustände *512–513*; 7.10 bis 7.12, 7.15, 9.12; T7.3
Antisymmetrisierungsoperator 350, 367, 443, 461, *512–513*; 7.8, 7.10, 7.11
Antisymmetrisierungsprinzip 354, 359, *512*, 516
Atom
- Helium- 93; 9.12 bis 9.14
- Kohlenstoff- 361
- Natrium- 9.8(b), 9.10, 9.11
- Silizium- 361
- Wasserstoff- 93, 242, 430–432, 455, *498–499*; 3.26, 9.1 bis 9.4, 9.7; T9.1 bis T9.4

atomare Energieeinheit 466–467
Atome
- mit einem Valenzelektron 9.9 bis 9.11; T9.5 bis T9.9
- mit zwei Valenzelektronen 361; 9.12 bis 9.14
- mit Z Elektronen 443, 449; 9.6, 9.8

Atomradien *siehe* Thomas-Fermi-Radius
Augereffekt *siehe* Selbstionisation
Austauschintegrale *463–464*, 467–468, 470
Austauschoperatoren *511*; 7.1, 7.2, 7.4 bis 7.7, 7.9, 7.11, 7.14
Auswahlregeln 2.6, 6.28(b)
- für Strahlungsübergänge 464; 9.9, 9.10(c), 9.11(c); T9.8, T9.9

B

Bahnaustauschoperator 352, 361; 7.1, 7.2, 7.4
Bahndrehimpuls 29, 167, 310, 342, 359–360, 431–432; 2.24 bis 2.26, 3.26, 6.3, 6.21, 6.27, 6.28; T6.13
Baker-Campbell-Hausdorff Theorem *44*
Bargmannkriterium *132*, 264–265
Basissysteme *siehe* auch Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsbeziehungen
- Orthogonalität 17; 1.2, 1.3, 1.11, 1.12
- Vollständigkeit 17; 1.2, 1.11, 1.12

beschränkte Operatoren 5, 16, 18, 20, *26–27*, 33–34, 53, 60
Besselfunktionen, sphärische 485, *488–489*

Beugung *175*, 382
Bewegungsgleichungen 4.2, 4.3, 4.8, 4.9, 4.13, 4.14, 6.14, 6.15; T4.1
Blochtheorem *76*, 122
Blockmatrizen 49, *51*
bohrscher Radius 408, 417, *498*
bohrsches Magneton 438, 450, 455, 459
Born-Kármán-Randbedingungen *siehe* periodische Randbedingungen
bornsche Näherung 394, *513–514*; 8.3 bis 8.6; T8.3 bis T8.5
Boseteilchen (Bosonen) 346–347, *512*; 7.13, 7.14, 8.7, 8.9, 8.10; T7.4 bis T7.7

C

charakteristische Gleichung *siehe* Säkulargleichung
Clebsch-Gordan-Koeffizienten 359–360, 396, 432, *506–510*; 6.18, 6.19, 6.26, 6.28 bis 6.32, 7.11, 9.7 bis 9.9; T6.9 bis T6.12
Clebsch-Gordan-Reihe 326, 434, 486, *490*
Coulombintegrale 467–468, *470*
Coulombpotential 375, 390–391, 419, 426, 463–464, 471–472, 498; 3.16, 4.6(b1), 9.13
  abgeschirmtes 390–391, 393, 411, 450, 454; 3.16
Coulombstreuamplitude 390–391, 393, *515*
Coulombstreuung *515*; 8.5(b), 8.7, 8.8
Coulombwechselwirkung 9.12 bis 9.14

D

Darstellung 1.3, 1.11
  Energie- 179, 219; 3.24
  Impuls- 27, 163, 212–213; 3.13 bis 3.16, 4.9, 9.2(d); T3.8
  $\{m_s\}$- 36, 504; 6.4, 6.7, 6.10, 6.13, 6.15, 6.16
  Orts- 27–29, 31, 81–82, 97, 99–101; 2.10 bis 2.21, 2.24 bis 2.26, 3.14(c), 4.9, 4.13, 4.14, 7.10, 7.13, 7.14; T4.3
  $\{\vec{r}\,m_s\}$- 439–440, 448, 452; 6.14, 9.7
  $\{\vartheta\varphi m_s\}$- 6.17; T6.4
  $\{\varphi\}$- T2.9
Darstellungswechsel 100; 1.11; T1.7
Darwinterm 414, 420, 425, 430, 450, 454–455, 459
de Broglie-Wellenlänge 175, 380
Definitionsbereiche von Operatoren 16, 18, 33–34, 37, 45, 57–58, 60, 131, *165–168*; 1.14, 1.15
deltaförmiges Potential 2.11, 2.12, 2.18, 2.19, 2.21, 3.14; T2.5, T2.6, T2.8, T5.2,
determinative Messungen *siehe* Messungen
Dichteoperator 3.1, 3.2, 3.5 bis 3.7, 3.9, 4.8, 6.8 bis 6.10, 6.13, 6.16, 8.11; T3.2, T6.3, T6.5, T6.6
  Bewegungsgleichung im Schrödingerbild *211*
dichter (überall dichter) Teilraum 23, *24–25*
Dipolmoment *siehe* elektrisches bzw. magnetisches Dipolmoment
Dipolstrahlung *siehe* Auswahlregeln
Diracformalismus *25–26*, 60, 80–82, *167–168*; A.3; T1.2
„Dirac-Kamm“ 2.21
diracsche δ-Funktion A.1
direkte Integrale *463*, 467–468, 470
diskrete Eigenwerte im Kontinuum *93*, 426, 466
„Doppelstufenpotential“ 2.20(d)
Drehimpuls A.7
  Bahn- 29, 167, 310, 342, 359–360, 431, 432; 2.24 bis 2.26, 3.26, 6.3, 6.21, 6.27, 6.28; T6.13
  innerer *siehe* Spin
  Unschärfe 6.2, 6.5, 6.6; T6.9
  Vertauschungsbeziehungen *503*
drehinvariante Operatoren *505*; 6.27(b)
Drehmatrizen 36, 156, 162, 293, 297, 327, 398, *489–490*, 505, 518; 6.22(b), 6.23 bis 6.26; T6.6, T6.9, T6.10
Drehoperatoren 327, *504–505*, 521; 6.21, 6.22
Drehungen
  im Ortsraum *504*, 521–522; 6.21
    infinitesimale 6.21(a)
  Transformation der Ortseigenzustände *318*

Transformation von Drehimpuls-Eigenvektoren 292, 297, 299, 398, *505*; 6.23 bis 6.26
Transformation von drehinvarianten Operatoren *505*
Transformation von irreduziblen Tensoroperatoren *505*
Transformation von Vektoroperatoren 297, 299, 398, *505*; 6.27

E

Eichinvarianz *185*
Eichtransformationen 102, *185*
Eichung
Fock-Schwinger- *149*
Landau- *73*
Eigenräume 33, 35, 54, 60, 458, 500–501; 1.24
Eigenwertbedingungen 170; 2.12 bis 2.14, 2.18, 2.21, 2.25; T2.5
Eigenwertprobleme 22, *51–52*, 57, 244, 296, 304, 323, 347, 422, 424, 450; 1.17, 1.23 bis 1.25, 2.1, 2.12 bis 2.18, 2.21, 2.24, 2.25, 5.14(b), 6.20, 7.14; A.4; T1.6, T1.9, T1.10, T2.5, T2.9, T2.10, T6.7
elektrisches Dipolmoment 2.6, 2.24, 9.6, 9.9
induziertes *431–432*
permanentes *409*, 427, *430–432*
elektrisches Quadrupolmoment
von Atomen mit einem Valenzelektron 9.7
von Kernen 442
von Mehrelektronenatomen 442
Elektronenschalen 9.8
Energiebänder 2.21
Energiedarstellung 179, 219; 3.24
Energieeigenzustände 163, 167, 171, 175, 176, 203, 219, 222, 224, 230, 246, 255, 277, 427, 472; 2.1, 2.4, 2.10, 2.12 bis 2.21, 2.24 bis 2.26, 3.17, 3.21 bis 3.23, 4.5, 4.6, 4.12, 5.13, 6.20, 7.10 bis 7.14, 9.1, 9.2, 9.5 bis 9.9; T2.9, T2.10, T3.7, T3.8, T4.4, T4.5, T6.1, T6.8, T7.1, T7.2, T7.6, T7.7
Energiekorrekturen
erster Ordnung für entartete Niveaus *501*
erster und zweiter Ordnung für nicht entartete Niveaus *500*
Entartungsaufhebung 246, 424, 452, 456, *501*
Entartungsgrad *siehe* Vielfachheit
Entartungsräume *siehe* Eigenräume
Entwicklungsoperator, zeitlicher 38, 42, 205, 210, 212, 219, 308, 311; 4.1
Erwartungswerte 3.11 bis 3.13, 3.17, 3.21 bis 3.23, 3.26, 4.2 bis 4.6, 4.9, 4.13, 5.13, 6.11, 6.12, 6.16, 9.1, 9.2, 9.6 bis 9.8; T3.2, T3.3, T3.5, T3.7, T3.9, T4.2
Bewegungsgleichung *206*, *208*
Bezeichnungsweise *205*
Erzeugungsoperator eines Oszillatorquants 43, 70; 2.5, 2.6, 3.22 bis 3.24, 5.1, 5.2, 7.4; A.5; T2.10
Exponentialpotential 5.12
Eulerwinkel A.11

F

Feinstruktur 449; 9.10, 9.11
beim Natriumatom 9.10, 9.11
beim Wasserstoffatom 408, 418, *420–421*, 425, 430
der LS-Terme des Heliumatoms 464
der Paschen-Back-Linien 9.11
Fermiteilchen (Fermionen) *512*, 516; 7.10 bis 7.12, 7.15, 8.8, 8.10, 9.8, 9.12, 9.14; T7.1 bis T7.4, T8.6
Fock-Schwinger-Eichung *149*
Folgen von Operatoren *32*
gleichmäßige, starke und schwache Konvergenz *32*
freies Teilchen *siehe* kräftefreies Teilchen
fundamentale Vertauschungsbeziehungen *siehe* kanonische Vertauschungsbeziehungen

G

„gaußartiges“ Wellenpaket *siehe* Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion

Gaußverteilung *178*, 213–215, 220
gebundene Zustände 135, 147, 167, 174–176, 200, 208, 210, 342, 374, 381, 384, 386, 389, 407, 409, 431, 432, 466, 498, 501; 2.4, 2.6, 2.10, 2.12 bis 2.16, 2.18, 2.25, 3.14; T2.2 bis T2.5
  Bargmannkriterium *132*, 264–265
  Bedingungen für die Existenz *93*, 131–132; 5.12; T5.6
geladenes Teilchen im Magnetfeld 40; 2.17, 3.25, 6.14
gemischte Gesamtheiten 322, *323*, 516, *518–519*; 3.1, 3.2, 3.6, 3.7, 3.9, 4.8, 6.9, 6.10, 6.13, 6.16, 8.8(c), 8.9, 8.11; T3.2, T6.2, T6.3, T6.5, T6.6
gerade Operatoren bzgl. Inversion 446–448
Gesamtspin 353, 413, 516; 6.18 bis 6.20, 7.5(c), 7.9 bis 7.11, 8.11; T6.9, T6.10
g-Faktoren 329, 440–442, 452; 6.32

H

Hantelmoleküle *siehe* Rotator
harmonischer Oszillator 95, 243, 245; 2.6(b), 2.16, 2.17, 2.22, 2.23, 3.20, 3.22 bis 3.24, 4.3, 4.6(b2), 4.12 bis 4.14, 5.1, 5.2, 5.5, 5.6, 5.8, 5.11, 7.14; A.4, A.5; T2.10, T3.6, T3.7, T4.5, T4.6, T5.5
  Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren 43, 70; 2.5, 2.6, 3.22 bis 3.24, 5.1, 5.2, 7.4; A.5; T2.10
  Impulsdarstellung 3.15
  kohärente Zustände *221–222*
  Unschärfenprodukt 177; 3.22, 3.23
  „verschobener“ 2.16, 4.14, 5.1, 5.5
Hartkugelpotential 8.2(a); T8.1
Hartree-Fock-Verfahren 465, 473
Heisenbergbild 34, 42; 4.1 bis 4.4; T4.1, T4.2, T6.3
heisenbergsche Bewegungsgleichungen 35, 39–40; 4.2, 4.3
heisenbergsche Unbestimmtheitsbeziehungen *siehe* Unbestimmtheitsbeziehungen
Heliumatom 93; 9.12 bis 9.14
Hermitepolynome *487*
hermitesche Operatoren *24–27*, 46, 52; 1.14, 1.15; T1.8
hundsche Regel 361, 412, 463–464
Hyperfeinstruktur 408, 418, *420–421*, 455

I

idempotente Operatoren 303; 1.9, 1.10, 1.13
identische Teilchen 346–347, 352, 515–517; 7.10 bis 7.15, 8.7 bis 8.10, 9.8, 9.12, 9.14; A.8; T7.1 bis T7.7
Impulsdarstellung 27, 163, 212–213; 3.13 bis 3.16, 4.9, 9.2(d); T3.8
Impulseigenfunktionen 27–28, 81, 86–87, 212, *495–496*
Impulsoperatoren 27–28, 31, 38, 42, 44–45, 70, 325, 365; 2.3, 2.8, 2.9, 2.17(c), 3.25, 4.2, 4.3, 7.2; T2.1
infinitesimale Drehungen 6.21(a)
infinitesimale Translationen *87*
Interferenz 115, 118, 156, 160, 300–301, 393–394, 516, *519*
inverser Operator zu einem gegebenen Operator 1.16(b), 1.24(f), 1.27, 1.28(a2)
Inversion am Ursprung *69*, 70, *128*, *327*
  Transformation der Ortseigenzustände *69*, 80
  Transformation des Orts- und Impulsoperators 2.3
  Transformation ungerader Operatoren 2.2(c)
Inversionsinvarianz 90, 176, 431; 2.4, 2.6, 2.10, 2.13, 2.18
Inversionsoperator *siehe* Paritätsoperator
Inversionssymmetrie *siehe* Inversionsinvarianz
Ionen
  kohlenstoffähnliche 361
  siliziumähnliche 361
  wasserstoffähnliche 417, 427, 470, *498–499*; 9.1, 9.3, 9.5
Ionisationswahrscheinlichkeit 429

irreduzible Tensoroperatoren *505–506*; 6.27 bis 6.32, 9.7 bis 9.9; T6.13
isometrische Operatoren *22*
Isotopieverschiebung der Spektrallinien *422*

J

jj-Addition 441, 449

K

kanonische Bewegungsgleichungen 39–40; 4.2, 4.3; T4.1
kanonische kohärente Zustände *siehe* kohärente Zustände des harmonischen Oszillators
kanonische Transformationen 2.17(c), 5.14(b), 7.14; T2.1
kanonische Vertauschungsbeziehungen 38, 39, 42, 44, 98, 184, 288, 349, 365
Kastenpotential
  gebundene Zustände 2.13
  Streuung 2.20(c)
  unendlich tiefes 106, 108–110, 125; 2.10, 3.11, 3.19, 3.21, 5.9, 7.10, 7.13
Kernradien 408, *419*
kohärente Zustände des harmonischen Oszillators *221–222*
kohlenstoffähnliche Ionen 361
Kohlenstoffatom 361
Kommutatoren *siehe* Vertauschungsbeziehungen
Konfigurationen 342, 360–361, 412, 449, 450, *460*, 462–464, 468, 473
  „doppelt angeregte“ *465*
Kontaktwechselwirkung *siehe* Darwinterm
kräftefreies Teilchen 38, 125, 306, 309, *495–496*; 4.2, 4.9
Kugelfunktionen 485, *486–487*
Kugelspinoren *433*, 434, 440, 450

L

Laguerrepolynome, zugeordnete 485, *488*
Landaueichung *73*
Landauniveaus *102*
Landéfaktoren *siehe* *g*-Faktoren
Larmorfrequenz 306, *310*, 312, 454
Larmorpräzession 6.15, 6.16
„Leergitter“ 125
levinsonsches Theorem *135*
LS-Addition 331, 431, 441, 449, 472; 7.11, 9.12
LS-Niveaus 361; 9.12, 9.13
LS-Vektoren 449; 7.11, 9.12

M

Magnetfeld 40; 6.14
  homogenes 6.14(b)
  zeitlich konstantes homogenes 309–310, 411, 449–450, 452, 454–455, 458–460; 2.17, 3.25, 6.16; T9.4
magnetisches Dipolmoment
  eines Atoms 331; 9.8
  eines Kerns 331, 420, *441*
Matrixdarstellung von Vektoren und Operatoren 13, 17–18, 36; 1.3, 1.11, 3.24; T1.3, T1.7
matrixwertige Funktionen 1.17
Messungen *51*, *54*, 151, *152*, 153, 247, 300–301, *517–519*; 3.3 bis 3.9, 3.26, 6.17, 8.11; T4.4
Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion *177–178*, 214, 219–221
„Minimum“-Wellenpaket *siehe* Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion
Mittelwerte *siehe* Erwartungswerte
Modellpotentiale 121
mottsche Streuformel 394
$\{m_s\}$-Darstellung 36, 504; 6.4, 6.7, 6.10, 6.13, 6.15, 6.16; T6.3

N

Natriumatom 9.8(b), 9.10, 9.11
negativ definite selbstadjungierte Operatoren T1.11
Norm
  eines Operators *33*
  eines Vektors *24*
Normaloperatoren *53–55*; 1.13, 1.24(c), 1.26
  Spektraldarstellung *53*

O

Observablen
  Beschreibung durch selbstadjungierte Operatoren *27–29*
  verträgliche *54*, 175, 184
    gleichzeitige Messung *193*
    vollständige Sätze *51*, 60
Operatoräquivalenz *331*
Operator-Differentialgleichungen *33*, 35, 43, 204, 206
Operator-Exponentialfunktion *33–34*, 38
Operatorfunktionen *34*, 55, 71, 87, 183–184, 205; 1.18, 1.19; T1.4
  Ableitung 16, *34*, 37–39
Operator-Potenzreihen *33–34*, 38, 182
Operatorungleichungen *58*
operatorwertige Funktionen *32*; 1.16, 1.17(b), 1.20, 1.21
  Ableitung *33*; 1.16
  Stetigkeit *33*
  Taylorentwicklung *33*; 1.20
Orthogonalitätsbeziehungen 13, 17, 33, 36, 52, 54, 95, 100; A.2, A.4
„Orthohelium“ *464*, 465
Ortsdarstellung 27–29, 31, 81–82, 97, 99–101; 2.10 bis 2.21, 2.24 bis 2.26, 3.14(c), 4.9, 4.13, 4.14, 7.10, 7.13, 7.14; T4.3
Ortseigenzustände 86, 100, 286, 318, 339; 2.2, 2.3, 7.1, 7.2
Ortsoperatoren 31, 38, 42, 44, 70–71, 80, 286, 339, 365; 2.2, 2.3, 2.8, 2.17(c), 3.25, 4.2, 4.3, 7.1, 7.2; T2.1
Oszillator *siehe* anharmonischer oder anisotroper oder harmonischer Oszillator

P

„Parahelium“ 465
Parität 102, 104, 106–107, 109, 128, 240, 246, 423, 427, 430–432, 444–445, 449, 487; 2.2, 2.4
  einer Permutation 352, *511*
Paritätsoperator 176, 178–179, 240, 246, 349, 409, 430; 2.2 bis 2.5
Partialwellenmethode 389, *514–515*; 8.1, 8.2, 8.10; T8.1, T8.2, T8.6
Paschen-Back-Effekt 9.11
  kombiniert mit Starkeffekt T9.4
Paulimatrizen 36, 211, 292, 305, 311, 320, *504*
periodische Randbedingungen 28, *52*, *495*
periodisches δ-Potential 2.21
Permutationen 317, 339–340, 349, 352, 367; A.8
  Parität 352, *511*
Permutationsoperatoren 7.1, 7.2, 7.4 bis 7.9, 7.11, 7.14, 7.15; A.8
Phasenverschiebungen 134–135, *514–515*; 8.1, 8.2; T8.1, T8.2
$\{\varphi\}$-Darstellung T2.9
P-Invarianz *siehe* Inversionsinvarianz
Poissonverteilung *222*
positiv definite selbstadjungierte Operatoren 419; 1.28; T1.11
Potentialschwelle 2.20(b); T2.7
Präparationen 174, 201, 247, 301, 309–310, 323; 3.3 bis 3.9
präparative Messungen *siehe* Präparationen
Produkträume 80, 98–99, 316–317, 319, 339–341, 350, 352–357, 359–360, 363–366, *511*; T4.6
Produktzustände 80, 97–99, 242, 305–306, 324, 339–340, 354, 357, 360, 367, 461, 470, *511*; T4.6
Projektionsmatrizen 1.17(a2)
Projektionsoperatoren 33–34, 53, 60, *165–166*, 297–299, 302–303, 367, 512, *518–519*; 1.7, 1.9, 1.10, 1.28, 3.1 bis 3.9, 3.26, 6.17; T6.3

Q

Quadrupolmoment *siehe* elektrisches Quadrupolmoment
Quadrupoltensoroperator 442, 446; 9.7
quasigebundene Zustände *121*, *241*, 426, 465
„quasiklassische Bewegung“ *222*, 224
„Quasikreiswellenzahl“ *76*, 122
quasistationäre Zustände *siehe* quasigebundene Zustände

R

„Radialimpuls“ *28*
Ramsauereffekt *387*
Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung
siehe Störungstheorie, zeitunabhängige
reduziertes Energiebandschema 125
reduziertes Matrixelement 444–445, *506*; 6.28, 6.30, 9.7(c); T6.13
reine Gesamtheiten 152, *518–519*; 3.2 bis 3.5, 3.8, 6.7, 6.8, 6.10, 6.13; T3.2, T6.3
relativistische Massenkorrektur 414, 420, 425, 430, 450, 454–455, 459, 464
Relativkoordinaten 393, 513, *515*; 7.14
Resonanzenergien *115*, 116, 118–122; T2.8
Resonanzstreuung *115*, *381*, 466
ritzsches Verfahren *siehe* Variationsverfahren
$\{\vec{r}\, m_s\}$-Darstellung 439–440, 448, 452; 6.14, 9.7
Rotator, starrer 2.24, 6.3; T2.9
Runge-Lenz-Vektor *431*
rutherfordsche Streuformel 391, 393, *515*

S

Säkulargleichung 45, 47, 50–51, 57, 79, 245, 292, 294, 335, 424
Schrödingerbild 34; 4.1, 4.8, 4.9, 4.12, 4.13, 6.15, 6.16; T4.3, T6.12
Schrödingergleichung
in der Impulsdarstellung 3.14 bis 3.16; T3.8
in der Ortsdarstellung 2.10 bis 2.15, 2.18 bis 2.21, 2.25, 2.26
zeitabhängige 4.9, 4.13, 4.14, 6.14, 6.15; T4.3
Schwerpunktskoordinaten *515*; 7.14
selbstadjungierte Operatoren 22, *27–29*, 30, *33–34*, 52, 131, *165–167*; 1.5 bis 1.7, 1.17 bis 1.19, 1.22 bis 1.24, 1.28 bis 1.30; T1.10
negativ definite T1.11
positiv definite 419; 1.28; T1.11
Spektraldarstellung *33*, 51, 58, 81–83, 86–87, *165*, 169, 296–297, 304
vollständige Sätze 59–60, 129, 132, 495–499; 1.24(d), 1.31, 2.17(b2), 2.17(c2)
Selbstionisation 93, *426*, 466
selbstionisierende Zustände *466*
separable Hilberträume *18*
siliziumähnliche Ionen 361
Siliziumatom 361
Slaterdeterminanten 342, 357–359, 362, 437, 443, 461–462, *513*; 7.15; T7.3
Spektraldarstellung
eines Normaloperators *53*
eines selbstadjungierten Operators *33*, 51, 58, 81–83, 86–87, *165*, 169, 296–297, 304
eines unitären Operators 210, 212, 219
von Funktionen selbstadjungierter Operatoren *34*, 37, 39, 83, 87, 169, 210, 212, 219, 326, 346
sphärische Besselfunktionen 485, *488–489*
sphärische Komponenten
eines irreduziblen Tensoroperators
vom Rang k *505*
vom Rang 1 432, 438, *505*; 6.27, 6.28, 6.30 bis 6.32, 9.9
vom Rang 2 432, *437*, 442; 6.29, 9.9; T6.13
Spiegelung am Ursprung *siehe* Inversion am Ursprung
Spin *504*; 3.1 bis 3.9, 6.4 bis 6.13, 6.15 bis 6.20, 6.23 bis 6.26, 8.11; T6.1 bis T6.12
Spinaustauschoperator 354, 358, 361; 7.5 bis 7.7, 7.9
Spin-Bahn-Wechselwirkung 414, 420, 425, 430, 449, 463–464; 9.10, 9.11; T9.7
Spinmatrizen *siehe* Paulimatrizen
Spinprojektion auf eine gegebene Richtung 6.5, 6.7, 6.8, 6.10, 6.15(c); T6.2
Spinresonanzmethode *306*
Spin-Spin-Wechselwirkung 449, 463–464; T6.8

Spurbildung 153, 157–158, 161–162, 211, 294, 311, *518*; 1.7(c), 1.8, 3.1, 6.10, 6.13
Standardbasis 293, 326, *503*, 506; 6.2, 6.29 bis 6.32; T6.13
Starkeffekt
  kombiniert mit Paschen-Back-Effekt T9.4
  linearer 9.4
  quadratischer 427
stationäre Zustände 110, 200, 208, 212, 219, 222, 241, 426, 431, 466; 6.15(b)
statistische Gemische *siehe* gemischte Gesamtheiten
statistischer Operator *siehe* Dichteoperator
Stern-Gerlach-Apparate, „modifizierte“ 3.1 bis 3.9, 6.23 bis 6.25; A.10
„Störung“ *500*
  „plötzliches Einschalten“ *502–503*; 5.5, 9.5
Störungstheorie
  zeitabhängige *501–502*; 5.6; T5.5, T9.3
  zeitunabhängige *500–501*; 2.1(b), 2.24(b), 5.1 bis 5.4, 5.14(c), 9.3, 9.4, 9.10 bis 9.13; T5.1 bis T5.4, T9.2, T9.4, T9.7 bis T9.9
Stoßparameter, klassischer *380*
Strahlungsübergänge *siehe* Auswahlregeln
Streuamplitude 173, 377, 387, 389, 391, 394, 396–398, 402, 513–514, 516; 8.2
  für Coulombstreuung 390–391, 393, *515*
Streulänge 8.2, 8.11; T8.4
Streulängenoperator 8.11
Streuphasen *siehe* Phasenverschiebungen
Streuung A.9
  an einem „Doppelstufenpotential“ 2.20(d)
  an einem Kastenpotential 2.20(c)
  an einer „harten Kugel“ 8.2(a); T8.1
  an einer Potentialschwelle 2.20(b)
  bornsche Näherung 394, *513–514*; 8.3 bis 8.6; T8.3 bis T8.5
  Coulomb- *515*; 8.5(b), 8.7, 8.8
  Elektron-Elektron- 8.8
  identischer Teilchen 391, *515–517*; 8.7 bis 8.10; T8.6
  Neutron-Neutron- 405
  Neutron-Proton- 8.11
  Partialwellenmethode 389, *514–515*; 8.1, 8.2, 8.10; T8.1, T8.2, T8.6
  Proton-Proton- *396*
  Resonanz- *115*, *381*, 466
  von α-Teilchen an α-Teilchen 8.7
  von Elektronen an Atomen 387, *392–393*
Streuwirkungsquerschnitte
  differentielle *514–516*; 8.3, 8.5, 8.7 bis 8.9; T8.2 bis T8.4, T8.6
  totale *514–517*; 8.1 bis 8.3, 8.5, 8.10, 8.11; T8.1, T8.4
symmetrische Operatoren *24*
symmetrische Zustände 345, *512*; 7.13, 7.14
Symmetrisierungsoperator 345, 350, *512*; 7.8, 7.13, 7.14
Symmetrisierungsprinzip 346–347, 363, 365, *512*, 516

T

Teilchen im homogenen Kraftfeld T3.8, T4.1 bis T4.3
Tensorkräfte 401
Tensoroperatoren *siehe* irreduzible Tensoroperatoren
$\{\vartheta\varphi m_s\}$-Darstellung 6.17; T6.4
Thomas-Fermi-Radius *392*
Topfpotential 2.25, 2.26, 8.1 bis 8.4
Translationen
  räumliche 42, 45, *71*, 98
    infinitesimale *87*
  Transformation der Ortseigenzustände bei räumlichen Translationen 2.7
  Transformation des Orts- und Impulsoperators bei räumlichen Translationen 42; 2.8
  zeitliche 42
Translationsoperatoren 39, 42, 97–98; 2.7 bis 2.9
Transmissionskoeffizient 109, 125; 2.19, 2.20; T2.6 bis T2.8

Tunneleffekt 93, 241, 426; 2.20(b); T2.7

U

Übergangswahrscheinlichkeiten *501*; 5.6, 9.5; T5.5, T9.3
Umpräparationen *152*, *518*; 3.1, 3.2, 3.4 bis 3.9, 3.26(i), 6.17(b)
Unbestimmtheit *siehe* Unschärfe
Unbestimmtheitsbeziehungen 3.18 bis 3.23, 3.25, 6.6
  allgemeine heisenbergsche Unbestimmtheitsbeziehung *185*; 4.4
uneigentliche Eigenvektoren 27
ungerade Operatoren bzgl. Inversion 128, 240, 423, 430, 444; 2.2(c), 2.3
unitäre Operatoren *55*; 1.11(a), 1.12, 1.13, 2.2, 2.7, 2.17, 6.21; T1.6, T1.7, T2.1
unitäre Transformationen 506; 1.11, 2.2, 2.7, 2.9, 2.17(b), 6.21; T1.7, T2.1
Unschärfe 1.30
  der Drehimpulskomponenten 6.2, 6.6
  der Energie 3.11(b); T3.3, T3.7
  des Impulses 3.18 bis 3.23, 4.9, 4.13, 9.2; T3.4, T3.5, T4.2, T4.5
  des Teilchenortes 3.18 bis 3.23, 4.9 bis 4.11, 4.13, 9.2; T3.4, T3.5, T4.2, T4.5
Unschärfenprodukt, minimales *177*, 180, 214, 219–220

V

Variationsprinzip 131, 164, 262–264, 272, 473; T5.6
Variationsverfahren 5.7 bis 5.14, 9.14; T5.7, T5.8, T6.1
  für Anregungsniveaus 474; 5.9, 5.11
Vektoroperatoren 431, 438, 444–445, 447–448, *505–506*; 6.27(a), 6.28, 6.30 bis 6.32; T6.13
Vektorpotential 73, 96, 102, *185*
„verborgene“ Symmetrien *431*, 455
Vernichtungsoperator eines Oszillatorquants 43, 70, *222*; 2.5, 2.6, 3.22 bis 3.24, 5.1, 5.2, 7.4; A.5; T2.10
  Eigenvektoren *siehe* kohärente Zustände
vertauschbare selbstadjungierte Operatoren 54; 1.22, 1.31, 3.26(i), 6.17(b); T1.10
  vollständige Sätze 59–60, 129, 132, 495–499; 1.24(d), 1.31, 2.17(b2), 2.17(c2)
Vertauschungsbeziehungen *15–16*, *38–39*, 184, 324–325, 499, *503–505*
  fundamentale *siehe* kanonische
  kanonische 38–39, 42, 44, 98, 184, 288, 349, 365
Verweilwahrscheinlichkeit *502*; 5.6
Vielfachheit von Eigenwerten 1.24, 2.17, 2.22 bis 2.24; T1.10, T7.1, T7.2, T7.4, T7.6, T7.7
Virialtheorem
  klassisches *210*
  quantenmechanisches 31, 177, 180, 414, 417, 472; 4.6, 5.13
virtuelle Energieniveaus *121*, *381*; T2.8
vollständige Orthonormalsysteme *siehe* Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsbeziehungen
vollständige Sätze vertauschbarer selbstadjungierter Operatoren *siehe* selbstadjungierte Operatoren, vollständige Sätze
vollständige Sätze verträglicher Observablen *51*, 60
Vollständigkeit *60*
Vollständigkeitsbeziehungen 13, 17, 33, 36, 52, 54, 81, 86, 95, 100, 169, 212, 219; A.2, A.4

W

wasserstoffähnliche Ionen 417, 427, 470, *498–499*; 9.1, 9.3, 9.5
Wasserstoffatom 93, 242, 430–432, 455, *498–499*; 3.26, 9.1 bis 9.4, 9.7; T9.1 bis T9.4
Wellenmechanik *27–29*, *31*
Wellenpaket
  eines kräftefreien Teilchens 38; 4.9
  für ein Teilchen im Oszillatorpotential 4.13, 4.14

für ein Teilchen in einem homogenen Kraftfeld T4.3
„gaußartiges“ *siehe* Minimum-Unschärfenprodukt-Zustandsfunktion
„Zerfließen“ 4.9 bis 4.11; T4.2, T4.3
Wigner-Eckart-Theorem 449, *506*; 6.28 bis 6.32, 9.7 bis 9.9; T6.13
Wignerformel *381*
Wirkungsquerschnitte *siehe* Streuwirkungsquerschnitte

Y

Yukawapotential *173*, 405; 8.5, 8.6

Z

Zeemaneffekt 331; 9.10(b); T9.8
Zentralfeldnäherung 361, 450, 472–473; 9.8, 9.9, 9.12, 9.13
zufällige Entartung 358, 364, 431
Zustandsreduktionen *siehe* Umpräparationen
Zwei-Zustand-Systeme 2.1, 4.8; T3.3, T4.4
Zyklotron-Resonanz-Frequenz *102*

Abkürzungen. Bezeichnungen. Symbole

AB	Anfangsbedingung(en)
EV	Eigenvektor(en)
EW	Eigenwert(e)
RB	Randbedingung(en)
VS	Voraussetzung(en)
A in $\mathscr{D}_A$	Operator (Operationsvorschrift A, Definitionsbereich $\mathscr{D}_A$) Kurzsprechweise: Operator A
$\widehat{A}$	quadratische Matrix
$\widehat{A}^{\{\,.\,\}}$	Matrix des Operators A in der $\{\,.\,\}$-Darstellung
$A^{\{\,.\,\}}$	wellenmechanischer Operator in der $\{\,.\,\}$-Darstellung
$A^\dagger$	adjungierter Operator zu A
A^{-1}	inverser Operator zu A
A_{H}	Operator A im Heisenbergbild
arg	Argument einer komplexen Zahl
$\mathbb{C}$	Körper der komplexen Zahlen
det	Determinante einer Matrix; s. auch $\lvert\,.\,\rvert$
δ_{ij}	Kroneckerdelta
$\delta(x)$	diracsche δ-Funktion
inf	Infimum bzw. größte untere Schranke
Im	Imaginärteil einer komplexen Zahl
lim	Grenzwert einer Folge von Zahlen, Vektoren oder Operatoren
log	natürlicher Logarithmus
$\mathbb{N}$	Menge $\{1, 2, 3, \ldots\}$, d. h. Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{N}_0$	Menge $\{0, 1, 2, \ldots\}$
$O(\epsilon^n)$	Terme der Ordnung ϵ^n
$\mathbb{R}$	Körper der reellen Zahlen
$\mathbb{R}^+$	Menge der positiven reellen Zahlen
$\mathbb{R}_0^+$	Menge der nichtnegativen reellen Zahlen
$\mathbb{R}^3$	Menge der geordneten Tripel reeller Zahlen

r, ϑ, φ	Kugelkoordinaten
Re	Realteil einer komplexen Zahl
Sp	Spur eines Operators oder einer Matrix
$\mathsf{T}^{(k)}$	irreduzibler Tensoroperator vom Rang k
x, y, z x_1, x_2, x_3	kartesische Koordinaten
Ω	Kurzschreibweise für die räumlichen Polarwinkel (ϑ, φ)
$\widehat{u}$	Spaltenmatrix
$\widetilde{u}$	Fouriertransformierte der Funktion u; beim Variationsverfahren: Versuchsfunktion
0	Zahl Null
$\vec{0}$	Nullvektor im dreidimensionalen euklidischen Raum
$\emptyset$	Nullvektor im Hilbertraum
$\mathbb{0}$	Nulloperator
$\widehat{\mathbb{0}}$	Nullmatrix
1	Zahl Eins
$\mathbb{1}$	Einheitsoperator
$\widehat{\mathbb{1}}$	Einheitsmatrix
$\equiv$	identisch gleich oder alternative Bezeichnung derselben Größe
$:=$ $=:$	in Definitionsgleichungen benützt, wobei der Doppelpunkt bei dem zu definierenden Symbol steht
$\approx$	näherungsweise gleich
$\simeq$	gleich oder näherungsweise gleich
$\sim$	größenordnungsmäßig gleich (Abschätzung)
$\widehat{=}$	entspricht
$<$	kleiner
$\leq$	kleiner oder gleich
$\lesssim$	von kleinerer oder gleicher Größenordnung
$\ll$	sehr klein gegen
$\propto$	proportional
$\cdot$	inneres Produkt von Vektoren des dreidimensionalen euklidischen Raumes
$\times$	äußeres Produkt von Vektoren des dreidimensionalen euklidischen Raumes; gewöhnliches Multiplikationszeichen als „Trennsymbol“ bei Fortsetzung eines Produktes über mehrere Zeilen
$\otimes$	direktes Produkt von Hilberträumen

$\Rightarrow$	wenn ..., dann ... (Schlussfolgerung)
$\Longleftrightarrow$	... genau dann, wenn ... (Gleichwertigkeit)
$\rightarrow$	... ersetzt durch ...; bei Grenzübergängen: ... gegen ...; bei Funktionen: ... Abbildung auf (in) ...
$\xrightarrow{\{.\}}$	... in der $\{\,.\,\}$-Darstellung dargestellt durch ... (Matrixdarstellung von Vektoren und Operatoren)
$\leftrightarrow$	... zugeordnet zu ...; Vertauschung von ... mit ...
$\subset$	... echte Teilmenge von ...
$\subseteq$	... Teilmenge von ...
$\not\subseteq$	... nicht Teilmenge von ...
$\cap$	Durchschnittsbildung von Mengen
$\cup$	Vereinigung von Mengen
*	komplexe Konjugation
$\lvert\,.\,\rvert$	Absolutbetrag einer komplexen Zahl; Determinante einer Matrix; euklidische Norm
$\in$	... ist enthalten in der Menge ...
$\notin$	... ist nicht enthalten in der Menge ...
$\forall$	für alle
$\not\forall$	nicht für alle
$\exists$	existiert
$\nexists$	existiert nicht
$\vee$	oder (Disjunktion)
$\perp$	senkrecht
$\parallel$	parallel
$\lvert\,.\,\rangle$	Ketvektor
$\langle\,.\,\rvert$	Bravektor
$\langle\,.\,\rvert\,.\,\rangle$	inneres Produkt von Vektoren eines Hilbertraumes in Diracschreibweise
$\lVert\,.\,\rVert$	Norm eines Hilbertraum-Vektors oder eines Operators
$\langle\ .\ \rangle$	Erwartungswert einer Observablen
$(\,.\,,\,.\,)$	beidseitig offenes Intervall; inneres Produkt von Vektoren eines Hilbertraumes
$[\,.\,,\,.\,)$	linksseitig abgeschlossenes, rechtsseitig offenes Intervall
$(\,.\,,\,.\,]$	linksseitig offenes, rechtsseitig abgeschlossenes Intervall
$[\,.\,,\,.\,]$	beidseitig abgeschlossenes Intervall; Kommutatorklammer für Operatoren
$[\,.\,,\,.\,]_+$	Antikommutatorklammer für Operatoren