T2

Mitschrift von Markus Drapalik und Bernhard Reiter
nach einer Vorlesung von Prof. Harald Grosse

SS 2005

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

1.1 Überblick

07.03.2005 Anfang

ad T4

statistische Physik: Thermodynamik

Naturkonstanten: $k = 1,38 \cdot 10^{-23}\, J/K$ (Boltzmannkonstante

kanonische Ensemble: mittelt über Konfiguration mit dem Boltzmanfaktor

$$Z = \sum e^{-\beta E(Konf)} = e^{-\beta F(T,\ldots)}$$

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{kT} \\ Z &\ldots \text{ Zustandssummen} \\ E &\ldots \text{ Energie} \\ F &\ldots \text{ freie Energie} \end{aligned}$$

Gibbs, Boltzmann, Planck, Einstein

$m_e \approx 0.5\, MeV/c^2 = 10^{-27}\, g$

$m_e c^2 \approx 10^{-6} erg$

$$1,6 \cdot 10^{-12} erg = 1\, eV$$

Zimmertemperatur: $T = 300\,\mathrm{K} = 5 \cdot 10^{-14}\,\mathrm{erg} = \frac{1}{40} eV$

deswegen funktionieren die meisten Gleichungen auch noch bei Zimmertemperatur: thermische Korrekturen im Promillebereich

1.2 Geschichte

Kirchhoff, Bunsen (1859): entdecken Spektrallinien

Balmer (1885): Balmerserie (Regularitäten)

Rydberg (1890)

Röntgen (1895)

Max Planck (1900): Strahlungsformeln (der Maxi Planck, der Star unter allen)

Albert Einstein (1905): Lichtquantenhypothese ($E = h\nu$[1])

(1908): Kombinationsprinzip

Ernest Rutherford (1911): Atomkern (der hat gestrahlt und hat dann den Atomkern entdeckt)

Max Laue (1912): Streuung von Röntgenstrahlen am Kristall

Niels Bohr (1913): (Theaterstück: Kopenhagen - Missverständnis zwischen Bohr und Heisenberg)

[1] $\frac{E}{\nu}$ ist daher immer konstant!
$E_{ges} = N \cdot \hbar\omega$
Energie ist also quantisiert
(Wenn sie einem auf einem anderen Stern mitteilen wollen, was sind die ganzen Zahlen, dann sagen's ihm er soll das messen)
$c = \lambda\nu = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{2\pi\nu}{\omega}$

Compton, deBroglie (1923): Comptoneffekt ($\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$,$|\vec{p}| = \hbar\frac{\omega}{c} = \frac{E}{c}$[2])

Heisenberg, Born (1925): Matrizenmechanik (Operatorenmechanik)

Schrödinger (1926): Quantisierung als Eigenwertproblem

Born: Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Davisson, Germer (1927): Streuung von e^- an Kristallen, Beugung

1.3 Strahlungsformel

geht um Beschreibung der Hohlraumstrahlung durch Gesetz für Energiedichte $E(\nu, T)$

Rayleigh-Jeans-Gesetz:

für kleine Frequenzen

$$E(\nu, T) = konst \cdot \nu^2 kT$$

Wien:

für große Frequenzen

$$E(\nu, T) = konst \cdot \nu^2 (h\nu) \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

hier kommt der Boltzmannfaktor hinein

für Zwischenbereich interpoliert:

$$E(\nu, T) = konst \cdot h\nu^3 \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

an dem Minus sieht man, dass das Bosonen sind

07.03.2005 Ende 08.03.2005 Anfang

1.4 Welle-Teilchen Dualismus

Welle: leiten Wellengeleichung aus Maxwell-Gleichungen her

	$\vec{E}$	$\vec{B}$
Quellen	$div\vec{E} = 4\pi\varrho$	$div\vec{B} = 0$
Wirbel	$rot\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$	$rot\vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\vec{j}$

betrachten den Fall $\varrho = 0$, $\vec{j} = 0$

[2] $\Rightarrow E = |\vec{p}|c \Rightarrow E^2 = |\vec{p}|^2c^2 + m^2c^4$ relativistische Energie-Impuls-Beziehung
aus der Formel ist klar: Photon hat Masse Null
wie messe ich in Raum und Zeit?
$\underbrace{E^2}_{t} - \underbrace{\vec{p}^2 c^2}_{\vec{x}} = m^2c^4$
es ist nicht alles relativ
btw: ziehe ich Wurzel aus Energie-Impuls-Beziehung, sehe ich, dass Anti-Teilchen bestehen:
$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + |\vec{p}|^2c^2} = mc^2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2c^2}} = mc^2(1 + \frac{\vec{p}^2}{2m^2c^2} + O(\vec{p}^2)^2)$
$E_+ = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} + O(p^2)$

führen Potentiale ein:

$$\vec{B} = rot\vec{A}$$

bestätigen das: $div\vec{B} = 0$

weitere Überlegungen:

$$rot\vec{E} = -\frac{1}{c} rot\dot{\vec{A}}$$

$$rot\underbrace{(\vec{E} + \frac{1}{c}\dot{\vec{A}})}_{0} = 0$$

sei jetzt $\vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{A}}(t, \vec{x})$

Eichung des Potentials:

Potential kann immer geeicht werden, wählen, weil's praktisch ist, $div\vec{A} = 0$ 09.03.2005 Anfang

1.5 Comptoneffekt

Streuung von Röntgenstrahlen an Elektronen (Bindungsenergie ca. 10-100eV)

Man beobachtet: Streustrahlung *gleicher* Frequenz wie die eingestrahlte und zuaätzlich Strahlung mit geringerer Frequenz

Rechnen das realtivistisch:

$$E = \hbar\omega$$

$$c = \lambda\nu = \frac{\lambda}{2\pi\omega}$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

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

Rechnen das ganze im Ruhsystem

$$\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega + \sqrt{\vec{q}^2c^2 + m_e^2c^4}$$

$$\vec{p} = \vec{p'} + \vec{q}$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k},\ \vec{p}' = \hbar\vec{k}'$$

$$E_e^2 = m_e^2 c^4 + \vec{q}^2 c^2$$

$$\hbar(\omega - \omega') + m_e c^2 = \sqrt{\vec{q}^2 c^2 + m_e^2 c^4}$$

$$\hbar^2(\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega') + 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 + m_e^2 c^4 = \underbrace{(\vec{p} - \vec{p}')^2}_{\vec{q}^2} c^2 + m_e^2 c^4$$

$$-2\hbar\omega\omega' + 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 = -2\cos\vartheta\hbar^2|\vec{k}||\vec{k}'|^2 = 2\cos\vartheta\hbar^2\frac{\omega\omega'}{c^2}c^2$$

$$(\omega - \omega')\frac{m_e c^2}{\hbar} = \omega\omega'(1 - \cos\vartheta)$$

$$\frac{\lambda'}{2\pi c} - \frac{\lambda}{2\pi c} = \frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} = \frac{\omega - \omega'}{\omega\omega'} = \frac{\hbar}{m_e c^2}(1 - \cos\vartheta)$$

$$\underbrace{\lambda'}_{\text{Wellenlänge der gestreuten Welle}} = \underbrace{\lambda}_{\text{alte Wellenlänge}} + \frac{h}{m_e c}\underbrace{(1 - \cos\vartheta)}_{>0}$$

$$\frac{h}{m_e c} = \text{Comptonwellenlänge} \approx 7 \cdot 10^{-11}\,\text{m}$$

1.6 Übergang zur Quantisierung

Welle:

$$\Psi(t, \vec{x}) = e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t + \frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}$$

nichtrelativistisches, freies Teilchen ($E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$):

$$\Psi(t, \vec{x}) = e^{-i\frac{\vec{p}^2}{2m\hbar}t + \frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}}$$

wenden Operator $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ auf diese Wellenfunktion an:

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) = \vec{p}\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x})$$

kommen damit auf eine Eigenwertgleichung

Dies ist die Eigenwertgleichung für den Impulsoperator $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

Das ist jetzt eigentlich nichts Besonderes, aber vor 1900 hat niemand das physikalisch gedacht

Es ist eine Quantisierungsvorschrift[3]

Interpretation:

habe einen Phasenraum und möchte ein korrespondierendes quantisiertes System kreieren

Dazu benutze ich eine solche Quantisierungsvorschrift (sie führt also ein klassisches, dynamisches System $P = \{(\vec{x}, \vec{p})\}$ mit Hamiltonfunktion, Poissonklammern in ein korrespondierendes Quantensystem über)

Vorschrift: ersetzen:

$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$
$$\frac{\vec{p}^2}{2m} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$
$$\vec{x} \to \hat{\vec{x}}$$

Multiplikation mit $\vec{x}$:

$$\hat{\vec{x}}\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x}) = \vec{x}\Psi_{\vec{p}}(t, \vec{x})$$

da

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}\Psi_{\vec{p}} \equiv E\Psi_{\vec{p}}$$

daraus folgt die 3dimensionale Schrödingergleichung ($E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$):

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

Beispiel Magnetfeld:

$$\vec{\nabla} \to \vec{\nabla} + ie\vec{A}$$

$$\vec{p}\vec{A} = m\vec{v}\vec{A}(\vec{x}) \Rightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\hat{\vec{x}})$$

Ansatz zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung:

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

[3]Der Impuls ist aber nicht quantisiert, der bleibt kontinuierlich

$$e^{-i\frac{Et}{\hbar}}E\Phi(x) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\vec{x}})\Phi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$$E\Phi(x) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\vec{x}})\Phi(x)$$

Das ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung (geht natürlich nur mit zeitunabhängigen Potentialen)

betrachten nun noch Integral über den Raum:

$$\int_{Vol} d^3x|\Phi(\vec{x})|$$

ergibt die Wahrscheinlichkeit, dass ich ein Teilchen im Volumen treffe 09.03.2005 Ende 14.03.2005 Anfang

1.7 Materie-Welle

Elektronen werden an Kristall gestreut, er besteht Interferenz (Davisson-Germer)

Falls

$$d \cdot \sin\vartheta = n \cdot \lambda$$

kommt es zur Verstärkung.

2 Die Schrödingergleichung

(das sollte Kapitel 2 sein)

2.1 einige Wellengleichungen

ebene Welle: $\Psi_{\vec{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_p t}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}$, $E_p = \frac{p^2}{2m}$

	klassische Physik	Quantenmechanik
Impuls	$\vec{p}$	$\frac{\hbar}{2}\nabla\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = \vec{p}\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x})$
Ort	$\vec{x}$	$\hat{\vec{x}}\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = \vec{x}\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x})$
Energie	E	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = E\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x})$

zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$i\hbar\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\vec{x}}))\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x})$$

komplex konjugiert:

$$-i\hbar\Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\vec{x}}))\Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x})$$

Normierungsbedingung:

$$\int d^3x \Psi^*_{\vec{p}}(0,\vec{x})\Psi_{\vec{p}}(0,\vec{x}) \Rightarrow \int d^3x \Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x})\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = 1$$

Behauptung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int d^3x \Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x})\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}) = i\hbar\int d^3x\{(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x}))\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x})+\Psi^*_{\vec{p}}(t,\vec{x})(\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\vec{p}}(t,\vec{x}))\} = 0$$

[4]

zeitunabhängige Schrödingergleichung:

Sei $V(x)$ unabhängig von t

Ansatz (Produktansatz):

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

$$(i\hbar)\cdot(\frac{-iE}{\hbar})e^{\frac{iE}{\hbar}t}\Phi(\vec{x}) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}))\Phi(\vec{x})e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}))\Phi(\vec{x}) = E\Phi(\vec{x})$$

Genau genommen fehlt ja in Schrödingergleichung $E^2 = m^2c^4 + \vec{p}^2c^2$.

berücksichtigt man das, kommt man zur Klein-Gordon-Gleichung:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = (m^2c^4 + c^2(-)\hbar^2\Delta)\Psi \Rightarrow (\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m^2c^2}{\hbar^2})\Psi(t,\vec{x}) = 0$$

diese beschreibt die relativistische Bewegung von Teilchen mit Spin 0 (gehören zu den Bosonen): Π-Mesonen

ist aber keine wichtige Gleichung

kann auch $E = \sqrt{\vec{p}^2c^2 + m^2c^4}$ direkt in Quantenmechanik überführen:

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

ist die Salpetergleichung und braucht keiner

wie stelle ich ein Photon dar?

mit einer Wellengleichung

$$\Box A_\mu(t,\vec{x}) = \{ \begin{matrix} 0 \\ J_\mu(t,\vec{x}) \end{matrix}$$

das ist durch folgende Beziehung mit Maxwell verknüpft:

[4] $h = c = m = 1 = e = \pi$, solche Einheiten haben die Theoretiker gerne

$$A_\mu = \begin{pmatrix} V \\ \vec{A} \end{pmatrix}$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

Dirac-Gleichung:[5]

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

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

geht über in:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \{c\alpha_1 \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_1 \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + \}$$

(Ende 14.03. fehlt) Beginn 25.04.2005

1D-Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x))\psi(x) &= E\psi(x) \\ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi''}_{\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi'|^2} + \int dx\, |\psi|^2\, V(x) &= E \underbrace{\int dx\, |\psi|^2}_{1} \\ \underbrace{\langle T \rangle_\psi}_{>0} + \langle V \rangle_\psi &= E \end{aligned}$$

(2)

Sei

$$\begin{aligned} V(x) &\leq 0, V(\infty) = 0 \\ V'(x) \geq 0 \quad &fr \quad x \geq 0 \\ V(x) = V(-x) & \end{aligned}$$

Bsp

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \geq a \\ V_0 & |x| < a \end{cases}$$

(1)

Gerade Fkt: $\psi(x) = -\psi(x)$

Ungerade Fkt$\psi(x) = -\psi(-x)$

[5] der Dirac hat ja noch nix von den Antiteilchen gewusst, aber er hat sie erfunden

$$\tan \kappa\alpha = \frac{\kappa\alpha}{\underbrace{\sqrt{V_0 a^2 - x^2 a^2}}_{\epsilon}}$$

Ü Limes $2V_0 a = \lambda$ fest, $a > 0, V_0 \to \infty$

$$\cot \sqrt{V_0^2 a^2 - \epsilon} = \frac{\sqrt{V_0 a^2 - \epsilon a^2}}{\sqrt{\epsilon a^2}}$$

$$\begin{aligned} \underbrace{k^2 e^2}_{\epsilon a^2} &= V_0 a^2 - \kappa^2 a^2 \\ \kappa^2 a^2 &= V_0 a^2 - \epsilon^2 a^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi &= c_1 e^{-kx}, \quad k^2 = \epsilon \\ \psi &= c_2 cos\kappa x, \quad \kappa^{2 = V_0 - \epsilon} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cot \sqrt{\frac{\lambda}{2} a - \epsilon a^2} &= \frac{\sqrt{\frac{\lambda}{2} a - \epsilon a^2}}{\sqrt{\epsilon a^2}} \\ \sqrt{a} \cot \sqrt{\frac{\lambda}{2} - \frac{\epsilon}{a}} &= \frac{\sqrt{\frac{\lambda}{2} a - \epsilon a}}{\sqrt{\epsilon}} \\ a \to 0, del'H(: \sqrt{\frac{\lambda}{2}})^{-1} &= \frac{\sqrt{\frac{\lambda}{2} - \epsilon a}}{\sqrt{\epsilon}}, \quad \epsilon = \frac{\lambda^2}{4} \end{aligned}$$

(Spitz nach unten)

$$-\psi_\epsilon'' - \lambda \delta_\epsilon(x) \psi_\epsilon(x) = E_\epsilon \psi_\epsilon(x)$$

$$-\psi'(\tilde{\epsilon}) + \psi(\tilde{\epsilon}) - \lambda \underbrace{\int_{-\tilde{\epsilon}}^{\tilde{\epsilon}} dx \delta(x) \psi(x)}_{\psi(0)} = E \int_{-\bar{\epsilon}}^{\bar{\epsilon}} dx \psi(x) \to 0 fre -> 0$$

$$\lim_{\eta \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) \psi(x) = \psi(0)$$

$$\psi'(\underbrace{0_+}_{\tilde{\epsilon}}) - \psi(\underbrace{0_-}_{-\tilde{\epsilon}}) = - \underbrace{\lambda}_{\text{Kopplungskonstante}} \psi(0), \quad \psi \text{ stetig}$$

$$-\psi'' = E\psi \quad \text{für } x \neq 0, \ E \text{ negativ}$$

$$\begin{aligned} -\psi'' + V(x)\psi &= E\psi, \psi \in L^2 \\ -\Delta\psi + V(\bar{x})\psi &= E\psi(\bar{x}) \end{aligned}$$

$$V(x) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$\psi \in C^\infty(\mathbb{R}\backslash\{0\})$$

Ungerade:

(wieder (2))

$$\begin{aligned} -\psi'' &= (V_0 - \epsilon)\psi \\ \text{I: } \psi &= c_1 e^{-kx}, \quad k^2 = \epsilon \\ \text{II: } \psi &= c_4 \sin \kappa x, \quad \kappa^2 = V_0 - \epsilon \\ \text{Anstückeln: } x = a : c_1 e^{-ka} &= c_4 \sin \kappa a \\ \text{Ableiten: } -kc_1 e^{-ka} &= c_4 \kappa \cos \kappa a \\ -\frac{1}{k} &= \frac{1}{\kappa} \tan \kappa a \\ -\tan \kappa a &= \frac{\kappa a}{ka} = \frac{\kappa a}{\sqrt{V_0 a^2 - \kappa^2 a^2}} \end{aligned}$$

Falls $\sqrt{V_0} < \frac{\pi}{2}$: kein Bindungszustand

$\frac{\pi}{2} < \sqrt{V_0}a < \frac{3\pi}{2}$: $\exists!1$ Bindungszustand

Ende 25.04.2005
Beginn
26.04.2005

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (E - V(x))\psi(x)$$

Sei $V(x) \le 0$, $V(\pm\infty) = 0$ ($V' > 0$ für $x > 0$), $|V(0)| < \infty$, $V(x) = V(-x)$

Versuchen L^2-Lösungen heuristisch zu charakterisieren (Konvexitätsüberlegungen)

Suchen antisymmetrische Lösungen

Randbedingungen: $\psi'(0) \neq 0$, $\psi(0) = 0$

Bildchen Potential1

Sei $E < 0$

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (\underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}|E|}_{-\varepsilon} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}|V(x)|}_{v(x)})\psi(x)$$

$$\psi'' = (\varepsilon - v(x))\psi(x)$$

Krümmung $= 0$ für $\varepsilon = v(x_{klassisch})$ und $\forall \bar{x}_i$, für die $\psi(\bar{x}) = 0$

- falls $\varepsilon > v(x)$ und $\psi(x) > 0 \Rightarrow \psi'' > 0$ konkav von unten
- falls $\varepsilon > v(x)$ und $\psi(x) < 0 \Rightarrow \psi'' < 0$ konvex von unten
- falls $\varepsilon < v(x)$ und $\psi(x) > 0 \Rightarrow \psi'' < 0$
- falls $\varepsilon > v(x)$ und $\psi(x) > 0 \Rightarrow \psi'' > 0$

Bildchen Potential rechts

Vorr.: die Eigenfunktionen $\psi_1, \psi_2, \ldots$ zu den Eigenwerten $E_1, E_2, \ldots$ bzw. $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$

$\forall 0 < x < x_{klassisch} \quad \psi'' < 0 \rightarrow |\psi(x)| \leq \psi'(0)x$

Behauptung: Die n-te Eigenfunktion hat genau $n-1$ Nullstellen im offenen Intervall $(0, \infty)$

Seien: ψ_1, ψ_2 Lösungen zu Energien $\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{\varepsilon}_2$, sei $\tilde{\varepsilon}_1 > \tilde{\varepsilon}_2$

$$\psi_1'' = (\tilde{\varepsilon}_1 - v(x))\psi_1(x)$$
$$\psi_2'' = (\tilde{\varepsilon}_2 - v(x))\psi_2(x)$$

Bildchen Sinüsser

$\tilde{\varepsilon}_2$ ergibt eben einen Knoten mehr als $\tilde{\varepsilon}_1$

$$\psi_2\psi_1'' = (\tilde{\varepsilon}_1 - v(x))\psi_1\psi_2$$

$$\psi_1\psi_2'' = (\tilde{\varepsilon}_2 - v(x))\psi_1\psi_2$$

$$(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')' = (\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'') = (\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2\psi_1\psi_2)$$

$$\int_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} dx: \quad (\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'')|_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} = (\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)\int_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} dx\psi_1\psi_2$$

$$\psi_2(\bar{x}_2)\underbrace{\psi_1'(\bar{x}_2)}_{<0} - \psi_2(\bar{x}_1)\underbrace{\psi_1'(\bar{x}_1)}_{>0} = \underbrace{(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)}_{>0}\int_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} dx\psi_1\psi_2$$

Sei $\psi_2(x) \geq 0 \, \forall \, \bar{x}_1 \leq x \leq \bar{x}_2 \, \Rightarrow$ Widerspruch!

Sei $\psi_2 \, \forall \, \bar{x}_1 \leq x \leq \bar{x}_2$ nichtnegativ

Bildchen Logistik

$$\begin{aligned} T &= \int_0^\infty dx|\psi'|^2 \geq \frac{1}{4}\int_0^\infty dx\frac{|\psi|^2}{x^2} \\ &= \int_0^\infty dx|\psi'|^2 \geq \frac{1}{4}\int_0^\infty dx\frac{|\psi|^2}{x^2} \end{aligned}$$

aus $\psi(0) = \psi'(0) = 0 \Rightarrow \psi(x) = 0$, muss daher immer durch 0 durchrasen

Bildchen Kasten mit Sinüssern

Lösungsfunktion muss Vorzeichen Wechseln, da ja Orthonormalsystem

Ende 26.04.2005
Beginn
27.04.2005

$$\begin{aligned}
\psi_1'' &= (\epsilon_1 - v(x))\psi_1(x) \\
\psi_2'' &= (\epsilon_2 - v(x))\psi_2(x) \\
(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')|_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} &= \underbrace{(\epsilon_1 - \epsilon_2)}_{>0} \int_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} dx \underbrace{\psi_1}_{>0} \psi 2
\end{aligned}$$

$$\psi_1(\bar{x}_1) = \psi_1(\bar{x}_2) = 0$$

$\psi_2(\bar{x}_2) \underbrace{\psi_1'(\bar{x}_2)}_{<0} - \psi_2(\bar{x}_1) \underbrace{\psi_1'(\bar{x}_1)}_{>0} = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_{\bar{x}_1}^{\bar{x}_2} dx\psi_1\psi_2 \Rightarrow \psi_2$ muss im Intervall $(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$Nullstelle haben bzw. Vorzeich

$$\begin{aligned}
-\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi &= \frac{2m}{\hbar} E\psi(x) \\
\psi'' &= (V_0 - E)\psi
\end{aligned}$$

$$I : \psi(x) = c_1 e^{-kx}$$

$$\begin{aligned}
k^2 &= v_0 - \epsilon \\
k &= \sqrt{v_0 - \epsilon}
\end{aligned}$$

$$v_0 \nearrow \infty$$

$$\begin{aligned}
-> \psi(x) &= 0 \quad \forall x \geq a \\
\psi(a) &= \psi(-a) = 0
\end{aligned}$$

(Dirichlet-Randwert-Problem)

$L^2([-a, a], dx)$

$\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi * (x)\varphi(x) = \langle\psi|\varphi\rangle$

Mannigfaltigkeit: Torus

7.

Der harmonische Oszillator

Bem.: typische Potenziale

niedrig-energetische Anregungen

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= L^2(\mathbb{R}, dx) \\
H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\
H\psi &= E\psi
\end{aligned}
$$

Sei $x = \frac{y}{\lambda}$:

$$
\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2\frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2\lambda^2}y^2 \\
(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2\lambda^4}}_{=1}y^2)\psi(y) &= \underbrace{\frac{m}{\hbar^2\lambda^2}E}_{\epsilon}\psi(y)
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
m^2\omega^2 &= \hbar^2\lambda^4 \\
\lambda^2 &= \frac{m\omega}{\hbar} \\
\lambda &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}
\end{aligned}
$$

$$
\epsilon = \frac{mE}{\hbar^2\lambda^2} = \frac{E}{\hbar\omega}
$$

Sei

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{dy} + y) \\
A^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{dy} + y)
\end{aligned}
$$

$$
\langle\varphi|A\psi\rangle = \left\langle A^\dagger\varphi|A\right\rangle
$$

$$
(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy})^\dagger = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy} = -\frac{1}{i}(\frac{d}{dy})^\dagger
$$

$$
\begin{aligned}
p^\dagger &= p \\
(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy})^\dagger &= (\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dy}) \\
(\hbar\frac{d}{dy})^\dagger &= -\hbar\frac{d}{dy} \\
&= \hbar(\frac{d}{dy})^\dagger
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
A^\dagger A &= \frac{1}{2}(-\frac{d}{dy}+y)(\frac{d}{dy}+y) \\
&= \frac{1}{2}\{-\frac{d^2}{dy^2}+y^2-\underbrace{\underbrace{\frac{d}{dy}y}_{(\frac{d}{dy}y)+y\frac{d}{dy}} +y\frac{d}{dy}}_{1}\}
\end{aligned}
$$

ist unterhalb beschränkt. Gleichheit: Nullpunktenergie.

$$
\langle\psi|h\psi\rangle = \underbrace{\left\langle\psi|A^\dagger A\psi\right\rangle}_{=||A\psi>|^2} + \frac{1}{2}\langle\psi|\psi\rangle \geq \frac{1}{2}
$$

Gleichheit $\Leftrightarrow \sqrt{2}A\,|\psi\rangle = 0$

$$
\begin{aligned}
(\frac{d}{dy}+y)\psi(x) &= 0 \\
\psi(y) &= \psi(0)e^{-\frac{y^2}{2}} \\
&= \psi(0)e^{-\frac{\lambda^2 x^2}{2}} \\
&= \psi(0)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}
\end{aligned}
$$

Ende 27.04.2005
Beginn
02.05.2005

Harmonischer Oszillator

$$
[h,\, A] = \left[A^\dagger A,\, A\right] = \underbrace{\left[A^\dagger,\, A\right]}_{-1} A = -A
$$

Sei

$$
\begin{aligned}
h\,|\psi\rangle &= E\,|\psi\rangle ???\, \langle\psi|\psi\rangle = 1 \Rightarrow A^\dagger\,|\psi\rangle\, ist EV zuh zum EW \epsilon+1 \\
&\Rightarrow A\,|\psi\rangle\, ist EV zuh zum EW \epsilon-1
\end{aligned}
$$

Bew.

$$
\begin{aligned}
\left(hA^\dagger - A^\dagger h\right)|\psi\rangle &= A^\dagger\,|\psi\rangle \\
hA^\dagger\,|\psi\rangle &= (\epsilon+1)A^\dagger\,|\psi\rangle \\
(hA - Ah)\,|\psi\rangle &= -A\,|\psi\rangle \\
h \underbrace{A\,|\psi\rangle}_{EV zuh zum EW \epsilon-1} &= (A\epsilon - A)\,|\psi\rangle = (\epsilon-1)A\,|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
\left\| A^\dagger \left|\psi\right\rangle \right\|^2 &= \left\langle A^\dagger\psi | A^\dagger\psi\right\rangle = \left\langle \psi | \underbrace{AA^\dagger}_{A^\dagger A+1} \psi \right\rangle = \left\langle \psi | (\underbrace{A^\dagger A + \frac{1}{2}}_{\epsilon} + \frac{1}{2 Satz}) | \psi \right\rangle = (\epsilon + \frac{1}{2}) mit A^\dagger \left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H} \\
\left\| A^\dagger \left|\psi\right\rangle \right\|^2 &= \left\langle \psi | A^\dagger A \psi \right\rangle = (\epsilon - \frac{1}{2})1 \\
&= \left\langle \psi | (h - \frac{1}{2})\psi \right\rangle = (\epsilon - \frac{1}{2}) \\
h &= A^\dagger A + \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Satz: h ist nach unten durch $\frac{1}{2}$beschränkt.

$$\forall\psi \in \mathcal{H}$$

$$\left\langle \psi | \psi \right\rangle$$

...

Bem: Zwischen $\frac{1}{2}$ und $\frac{3}{2}$gibt es keine Eigenvektoren; die einzig möglichen Eigenvektoren sind bei $\epsilon_0 = \frac{1}{2}$, $\epsilon_1 = \frac{3}{2}$,\ldots $\epsilon_n = n + \frac{1}{2}$

Die dazugehörigen Eigenvektoren sind

$$\begin{aligned}
&\left|0\right\rangle \\
\left|1\right\rangle &= A^\dagger \left|0\right\rangle \\
\left|2\right\rangle &= \frac{(A^\dagger)^2 \left|0\right\rangle}{\sqrt{2}} \\
&\vdots \\
\left|n\right\rangle &= \frac{(A^\dagger)^n \left|0\right\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{A^\dagger}{\sqrt{n}} \underbrace{\left|n-1\right\rangle}_{\frac{(A^\dagger)^{n-1}}{\sqrt{n-1}}\left|n-1\right\rangle}
\end{aligned}$$

Normierung: Beh.: $\left\| (A^\dagger)^n \left|0\right\rangle \right\|^2 = n!$

Induktion: $\left\| A^\dagger (A^\dagger)^{n-1} \left|0\right\rangle \right\|^2 = \left\langle 0 | A^{n-1} \underbrace{(AA^\dagger)}_{(\underbrace{A^\dagger A}_{n-1}+1)} | (A^\dagger)^{n+1} | 0 \right\rangle = n \left\langle 0 | A^{n-1} (A^\dagger)^{n+1} | 0 \right\rangle =$

$n(n-1)! = n!$

EW von $A^\dagger A$:

$$A^\dagger A \left|n\right\rangle = (h - \frac{1}{2}) \left|n\right\rangle = (n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}) \left|n\right\rangle$$

$A^\dagger A$ heißt Quanten(Teilchen-)Zahloperator

$$\begin{aligned}
\left|0\right\rangle &= N \mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} \\
\left|1\right\rangle &= \frac{N}{\sqrt{2}}(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} + y)\mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{2N}{\sqrt{2}} y \mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} antisymm, ein Knoten \propto H_1(y)\mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} \\
\left|2\right\rangle &= \frac{2N}{\sqrt{2}\sqrt{2}}(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} + y)\mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} = \frac{2N}{\sqrt{2}} y \mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}} antisymm, ein Knoten \propto H_1(y)\mathrm{e}^{-\frac{y^2}{2}}
\end{aligned}$$

harmonischer Oszillator: Ende 02.05.2005 Beginn 03.05.2005

$h = A^\dagger A + \frac{1}{2}$, $[A, A^\dagger] = 1$, $[h, A^\dagger] = A^\dagger$, $[h, A] = -A$

EV: $|0\rangle : A|0\rangle = 0$, $|0\rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{y^2}{2}} = const\, e^{\frac{m\omega}{t}\frac{x^2}{2}}$, $\langle 0 |0\rangle = 1$

Vakuum=kein Quant

Ein Quant: $|1\rangle = A^\dagger |0\rangle$, $\langle 1 |1\rangle = \langle 0| AA^\dagger |0\rangle = 1$, $A^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{dy} + y)$, $\langle 1 |0\rangle = \langle 0| A |0\rangle = \mathcal{O}$

$\langle 1| = \langle 0| A$

Zwei Quant:

$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(A^\dagger)^2 |0\rangle$, $\ldots \gamma_n |n\rangle = A^\dagger |n-1\rangle = 1$, $\gamma_n^2 = \langle n-1| AA^\dagger |n-1\rangle$

hier fehlt einiges

$\langle n |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} \langle 0| A^m |n\rangle$, $A|n\rangle = \sigma_n |n-1\rangle$, $\langle n| A^\dagger A |n\rangle = \sigma_n^2 = n$, $\sigma_n = \sqrt{n}$

$\langle n |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}}\sqrt{n} \langle 0| A^{m-1} |n-1\rangle \propto \langle 0| A^{m-2} |n-2\rangle \ldots \propto \langle 0| A^{m-n} |0\rangle = \mathcal{O}$

$h|n\rangle = (n + \frac{1}{2})|n\rangle = (A^\dagger A + \frac{1}{2})|n\rangle$

Born-Jordan-Heisenberg - Matrizenmechanik:

kleiner Einschub Matrizenmechanik

(aber nicht so wichtig)

Basis für $\mathcal{H}$: $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots$, vollständig. ON

Wahl einer Darstellung:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

hier fehlt auch was

$A^\dagger |n\rangle = \gamma_n |n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

$\langle m| A^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,\langle m |n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}$

$\langle 1| A^\dagger |0\rangle = 1$

$$(A^\dagger)_{mn} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \sqrt{4} & \end{pmatrix}, (A)_{mn} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

$$h = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Einschub wieder Ende

$\lambda^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$, $x = \frac{y}{\lambda}$

$\begin{cases} A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{d}{dy} + y) \\ A^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{dy} + y) \end{cases}$

$$A + A^\dagger = \sqrt{2}y = \sqrt{2}\lambda x = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hat{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(A - A^\dagger) = \frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \end{pmatrix}$$

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \end{pmatrix} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\hat{x}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \ddots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & \\ & & \ddots & & \ddots \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$(\hat{x})_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n+1}\delta_{n,m+1})$$

$$\langle n| \hat{x}^2 |n\rangle = (2n+1)\frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle n| \hat{x} |n\rangle = 0$$

andere Variante zur Berechnung:

$$\hat{x}^2 \propto (A + A^\dagger)^2$$

$$= \langle n| (A + A^\dagger)^2 |n\rangle = \langle n| (A^2 + \underbrace{AA^\dagger}_{A^\dagger A+1} + \underbrace{A^\dagger A}_{n} + {A^\dagger}^2) |n\rangle = 2n + 1$$

$$\langle n| \hat{p}^2 |n\rangle = -\hbar^2 \frac{m\omega}{2\hbar} \langle n| (A - A^\dagger)^2 |n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n + 1)$$

$$\langle n| \hat{p} |n\rangle = 0$$

$$\Rightarrow (\Delta\hat{x})^2_n (\Delta\hat{p})^2_n = (2n + 1)\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{m\omega\hbar}{2}(2n + 1)$$

$$(\Delta\hat{x})_n (\Delta\hat{p})_n = (2n + 1)\frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle n| T |n\rangle = \langle n| \frac{\hat{p}^2}{2m} |n\rangle = \frac{\omega\hbar}{4}(2n + 1)$$

$$\langle n| V |n\rangle = \frac{m\omega^2}{2} \langle n| \hat{x}^2 |n\rangle = \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}(2n + 1) = \hbar\omega(2n + 1) \equiv \langle n| T |n\rangle$$

Dies war das Virialtheorem

Bem.: berechnen:

$$[\hat{p}\hat{x}, \hat{x}^2] = \hat{x}[\hat{p}, \hat{x}]\hat{x} + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{x}^2 = -2i\hbar\hat{x}^2$$

$$[\hat{p}\hat{x}, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2\hat{p}i\hbar$$

Ende 03.05.2005

Anfang 4.5. fehlt heftigst

$$\rightarrow H(y) = \sum_{p=0,1,\ldots} h_{2p} y^{2p} \approx \sum_p \frac{1}{pi} y^{2p} = e^{y^2}$$

falls k bzw. p bis ∞ läuft $\Rightarrow \psi(y) \approx e^{\frac{y^2}{2}}$

$\Rightarrow$ Reihe muss unendliches Polynom sein.

$\Rightarrow \exists k_{max} \equiv N \quad \ni \quad 2\epsilon_N - 1 = 2N \Rightarrow \epsilon_N = N + \frac{1}{2}$

III) 3-dimensionale Schrödingergleichung $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

III)1) 3-dim harm. Oszillator

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\Delta + \frac{m\omega^2}{2}x_1^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_2^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_3^2, \quad \mathcal{D}(H) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \subset \mathcal{H}$$

$H\psi = E\psi$ Produktansatz: $\psi(x_1,x_2,x_3) = \chi_1(x_1)\chi_2(x_2)\chi_3(x_3), \quad \chi_i \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx_i)$

$$-\chi_2\chi_3\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\chi_1 + \frac{m\omega_1^2}{2}\chi_1\chi_2\chi_3 + \chi_3\chi_1(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m\omega_2^2}{2}\chi_2^2)\chi_2 + \chi_1\chi_2(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{m\omega_3^2}{2}\chi_3^2)\chi_3 = E$$

$$\underbrace{(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{m\omega_1^2}{2}x_1^2)\chi_1(x_1)}_{\underbrace{\chi_1(x_1)}_{E_1}} + (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m\omega_2^2}{2}x_2^2)\chi_2(x_2) + (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{m\omega_3^2}{2}x_3^2)\chi_3(x_3) = E$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega_1(h_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(h_2 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_3(h_3 + \frac{1}{2})$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3} = c_{n_1,n_2,n_3} H_{n_1}(x_1)H_{n_2}(x_2)H_{n_3}(x_3)e^{-(\frac{m\omega_1}{2\hbar}x_1^2 + \frac{m\omega_2}{2\hbar}x_2^2 + \frac{m\omega_3}{2\hbar}x_3^2)}$$

Ende 04.05.2005 (Keine VO da Test am 09.05.2005) Beginn 10.05.2005

3-dim Oszillator

$H = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \hbar\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_3(n_3 + \frac{1}{2})$$

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega : \qquad E_{n_1,n_2,n_3} = \hbar\omega(\underbrace{n_1 + n_2 + n_3}_{N} + \frac{3}{2})$$

Drehimpuls:

$$L_k = \epsilon_{kmn}x_m p_n$$

$$\{L_k, L_m\} = \epsilon_{kmn} l_k$$

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned}$$

kanonische Kommutatorrelation:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{auf } \mathcal{D}$$

Hats aus Sparsamkeit weggelassen...

$$[x, p_x] = i\hbar, \quad [y, p_x] = 0$$

$$[x, p_y] = 0, \quad [y, p_y] = i\hbar$$

$$[x, p_z] =, \quad [y, p_z] = 0$$

gehen über zu Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned}$$

formen Differenzialoperatoren um:

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta} = \frac{\partial x}{\partial\vartheta}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\vartheta}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\vartheta}\frac{\partial}{\partial z}$$

(Rest aus Gründen der allgemeinen Bekanntheit erspart)
und setzen für die Drehimpulse ein:

$$\begin{aligned} L_x &= (\frac{\hbar}{i}(-\cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \\ L_y &= (\frac{\hbar}{i}(-\cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \\ L_z &= (\frac{\hbar}{i}(-\cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \end{aligned}$$

und weiters:

$$\begin{aligned} L_+ &= L_x + iL_y = \frac{\hbar}{i}(-\cot\vartheta e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} + ie^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \\ L_- &= L_x - iL_y = \frac{\hbar}{i}(-\cot\vartheta e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} - ie^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\vartheta}) \\ L_-^\dagger &= (L_x - iL_y)^\dagger = L_x^\dagger + iL_y^\dagger \end{aligned}$$

alles auf $C^\infty(S^2)$
Eigenwertproblem für L_z auf $L^2((0, 2\pi), d\varphi)$
unleserliche Zeile

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi) - L_z\Phi(\varphi) = \lambda\Phi(\varphi)$$

$$d\ln\Phi = \frac{d\Phi}{\Phi} = \frac{i}{\hbar}\lambda d\varphi$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi|\Phi(\varphi)|^2 = 1$$

Bedingung: $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi} \Rightarrow \lambda = \hbar m, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

ganzzahlige Quantisierung!!

Kommutatoren:

wir schicken voraus:

$$[L_x, L_y] = iL_z$$

weil nämlich mit $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$

$$[(yp_z - zp_y), (zp_x - xp_z)] = i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z$$

(das darf sich jeder selbst durchrechnen)

und jetzt mit zyklischem Vertauschen:

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\
[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\
[L_z, L_x] &= i\hbar L_y
\end{aligned}$$

das ist die Lie-Algebra der Drehgruppe ($O(3) = SU(z)$)

jetzt weiter die Kommutatoren:

$$[L_+, L_-] = [(L_x + iL_y), (L_x - iL_y)] = -ii\hbar L_z + i(-i)\hbar L_z = 2\hbar L_z$$

$$[L_+, L_z] = [(L_x + iL_y), L_z] = -i\hbar L_y + ii\hbar L_x = -\hbar(L_x + iL_y) = -\hbar L_+$$

$$[L_z, L_+] = \hbar L_+$$

wir erkennen: L_+ und L_- sind Leiteroperatoren

Drehimpulsalgebra

Ende 10.05.2005 Beginn 11.05.2005

$$\left\{L_x^d, L_y^d\right\} = L_z^d$$

$$L_x = yP_z - zP_y, \ldots \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

$$[L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = \mathrm{i}\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = \mathrm{i}\hbar L_y$$

EW-Problem für $L_z\Phi(y) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi) \overset{\Phi(\varphi)\text{eindeutig}}{\Rightarrow} \Phi(\varphi) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\overbrace{m}^{\in\mathbb{Z}}\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$

Bemerkung. Bedingung der Eindeutigkeit wird bei Spin $\frac{1}{2}$ ($\frac{3}{2}$,...) Teilchen verletzt

Exp: H. Rauch et al. 2π-Drehung $\Rightarrow$Interferenz-Pattern, 4π-Drehung keine (Schal-Illustration...)

$\Phi(0) = \xi\Phi(2\pi)$

Falls $\exists$ Phase bei Drehung um 2π: $\xi = 1$ Boson, Spin $0, 1, \ldots$

-1: Fermion, Spin $\frac{1}{2}, \ldots$

i,-i 4 (?) Einheitswurzel

N-te Einheitswurzel: Anyon QHE

$$L_+ = L_x + \mathrm{i}L_y, \quad L_- = L_x - \mathrm{i}L_y; \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

$$[L_z, L_+] = [L_z, (L_x + \mathrm{i}L_y)] = \mathrm{i}\hbar L_y + \mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar)L_x = \hbar\left(L_x + \mathrm{i}L_y\right) = \hbar L_+$$

analog

$$[L_z, L_-] = -\hbar L_-$$

$$[L_z, L_+]^\dagger = \left[L_z^\dagger, L_+^\dagger\right] = [L_-, L_z] = -[L_z, L_-]$$

$$\begin{aligned} L_+L_- &= L_x^2 + L_y^2 - \mathrm{i}\underbrace{(L_xL_y - L_yL_x)}_{\mathrm{i}\hbar L_z} \\ L_-L_+ &= L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 \\ \boldsymbol{L}^2 &= L_-L_+ - \hbar L_z + L_z^2 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{L}^2, L_k\right] &= [L_m L_m, L_k] \\
&= L_m \underbrace{[L_m, L_k]}_{\mathrm{i}\hbar\epsilon_{mkn}L_n} + \underbrace{[L_m, L_k]}_{\mathrm{i}\hbar\epsilon_{mkn}L_n} L_m \\
&= \mathrm{i}\hbar(\epsilon_{mkn}L_m L_n + \underbrace{\epsilon_{nkm}}_{-\epsilon_{mkn}} L_m L_n) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{L}^2$ ist der Casimiroperator (kommutiert mit allen Erzeugern der Liealgebra $O(3) = SU(2)$

Der Casimir, des is derselbe wie vom Casimireffekt, der is vor a por Johrn gstorbn, der wor der Präsident von irgendso ana Europäischen Physikalischen irgendwos Gesellschaft...

$\boldsymbol{L}^2$ und L_z können gleichzeitig diagonalisiert werden.

Eigenwertproblem$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(S^2, \underbrace{\mathrm{d}\Omega}_{\sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \mathrm{d}\varphi})$

$\boldsymbol{L}^2 \left|lm\right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left|lm\right\rangle, \quad L_z \left|lm\right\rangle = \hbar m \left|lm\right\rangle$

explizit

$\boldsymbol{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\vartheta,\varphi)$

$L_Z Y(\vartheta,\varphi) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} Y(\vartheta,\varphi) = \hbar m \underbrace{Y(\vartheta,\varphi)}_{P(\vartheta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}}$

$AB = BA$

Suchen gemeinsame Eigenvektoren

$A\varphi_i = \lambda_i \varphi_i \Rightarrow BA\varphi_i = \lambda_i(B\varphi_i) = A(B\varphi_i)$

Diagonalisiere B

$B\psi_i = \mu_k \psi_k \Rightarrow$ Gemeinsame Eigenvektoren sind $\varphi_i \circ \psi_k$

Korr: $Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \left|lm\right\rangle = P(\vartheta)\Phi(\varphi)$

$[A, B] = 0$ Sei $A\varphi = \lambda\varphi \Rightarrow BA\varphi = \lambda B\varphi = AB\varphi \Rightarrow \varphi$ Eigenvektor zum selben Eigenwert λ

Sei $B\psi = \mu\psi \Rightarrow AB\psi = \mu A\varphi = BA\psi \Rightarrow \psi$ Eigenvektor zum selben Eigenwert μ

l unbekannt $\boldsymbol{L}^2 \left|lm\right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left|lm\right\rangle$

$\boldsymbol{L}^2 L_z \left|lm\right\rangle = \hbar^2 l(l+1) L_z \left|lm\right\rangle$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 \left|lm\right\rangle &= \hbar^2 l(l+1) \left|lm\right\rangle \\
\boldsymbol{L}^2 L_z \left|lm\right\rangle &= \hbar^2 l(l+1) L_z \left|lm\right\rangle \\
L_z \left|lm\right\rangle &= \hbar m \left|lm\right\rangle \\
\Rightarrow \left|lm\right\rangle &= P(\vartheta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}
\end{aligned}
$$

$$(H_1 + H_2)\psi_{n_1}\psi_{n_2}\psi_{n_3}\,|n_1 n_2 n_3\rangle$$

Beh.

$L_+\,|l,m\rangle = c_{lm}\,|l,m+1\rangle$

Vor: $\langle l,m\,|\,l',m'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$

$L_z L_+\,|l,m\rangle = c_{lm} L_z\,|l,m+1\rangle$

$$\begin{aligned}
L_z L_+\,|l,m\rangle &= c_{lm} L_z\,|l,m+1\rangle \\
(L_z L_+ + \hbar L_+)\,|l,m\rangle &= \hbar L_+(m+1)\,|l,m\rangle = \hbar(m+1)c_{lm} L_z L_+\,|l,m+1\rangle \\
\Rightarrow L_z \underbrace{L_+\,|l,m\rangle}_{|l,m+1\rangle} &= \hbar(m\pm 1)L_\pm\,|l,m\rangle \\
\|L_+\,|l,m\rangle\|^2 &= \left\| \overbrace{c_{lm}}^{\text{sei reell}}\,|l,m\rangle \right\|^2 \\
\langle l,m|\underbrace{L_- L_+}_{\boldsymbol{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z}|l,m\rangle &= c_{lm}^2 \\
&= \hbar^2(l(l+1) - m^2 - m) \\
&= \hbar^2(l(l+1) - m(m+1)) \\
&\geq 0
\end{aligned}$$

Ende 11.05.2005

16., 17.05.2005: Pfingsten

Anfang 18.05.2005

da fehlt jede Menge

B diagonal außer Entartung

$$A_{mn} = \begin{pmatrix}
\begin{pmatrix} \alpha_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_1 \end{pmatrix} & & & \\
& \begin{pmatrix} \alpha_2 & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_2 \end{pmatrix} & & \\
& & \begin{pmatrix} \alpha_3 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_3 \end{pmatrix} & \\
& & & \ddots
\end{pmatrix}$$

$$B_{nm} = \begin{pmatrix} B_{11} & & & \\ & B_{22} & & \\ & & B_{33} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

diagonalisiere B in Unterräume in denen A entaretet ist

vielleicht fehlt hier auch was (glaub aber nicht)

$$L_+ \left|l,l\right\rangle (\vartheta,\varphi) = 0$$

$$\hbar e^{i\varphi}\left(i\cot\vartheta \underbrace{\frac{\partial}{\partial\varphi}}_{il} + \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) P_l(z)\frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} = 0 \Rightarrow l\cot\vartheta P_l = \frac{\partial}{\partial\vartheta}P_l$$

$$P_l \ldots \text{Legendre-Funktion}$$

$$P_l(\vartheta) = const_l(\sin\vartheta)^l$$

$$\frac{\partial P_l}{\partial\vartheta} = const_l l(\sin\vartheta)^{l-1}\cos\vartheta = const_l\cdot l(\sin\vartheta)^l\cot\vartheta$$

$$\boldsymbol{L}^2 \left|l,0\right\rangle = \hbar^2 l(l+1)\left|l,0\right\rangle = L_-L_+\left|l,0\right\rangle$$

$$L_-L_+ + L_z^2 - \hbar L_z = \hbar e^{-i\varphi}(i\cot\vartheta \underbrace{\frac{\partial}{\partial\varphi}}_{i} - \frac{\partial}{\partial\vartheta})P_l(\vartheta) = \hbar^2 l(l+1)P_l(\vartheta)$$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} - \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)P_l = l\left(l+1\right)P_l \Rightarrow -\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}P_l = l\left(l+1\right)P_l$$

$$\left|l,m\right\rangle(\vartheta,\varphi) = Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = \underbrace{c_{lm}P_{lm}(\vartheta)}_{\text{reell}}\underbrace{e^{im\varphi}}_{\sqrt{2\pi}}$$

stellen uns Kreis mit Radius $R=\sqrt{l(l+1)}$ vor, Lösungen liegen im 1. Quadranten (zwischen $\left|l,0\right\rangle$ und $\left|l,l\right\rangle$), und dazu noch die komplex konjugierten

hier fehlen die einzelnen kets 1,1 u.ä. mit ihren zugehörigen Normierungsfaktoren (sollten oben schon einmal ohne Normiereung stehen, tun sie aber noch nicht)

damit sind auf jedenfall die Orbitale der Elektronen im Atom festgelegt (das freut den Chemiker)

sei $m>0$

$$P_{l,m}(\vartheta) = (-1)^m\left(1-z^2\right)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z)$$

Die radiale Schrödingergleichung $D = 3$

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$$

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

$$-\hbar^2\Delta = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r) \quad \underbrace{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}_{c_{lm}P_{lm}(\vartheta)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}}$$

$$\int_{-1}^{1} dz\, P_l(z)P_{l'}(z') = c_l\delta_{l,l'}$$

$$d\Omega = \underbrace{\sin\vartheta d\vartheta}_{d\cos\varphi} d\varphi$$

$$\int d\Omega d^*(\Omega)g(\Omega) \equiv \langle f|g\rangle$$

Ende 18.05.2005
Anfang 23.05.2005

3 Die dreidimensionale Schrödingergleichung: Radialsymmetrische Potentiale

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi(r,\vartheta,\varphi) = E\psi(r,\vartheta,\varphi)$$

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$-\Delta = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\Delta_{(\vartheta,\varphi)}}{r^2}$$

$$-\Delta_{(\vartheta,\varphi)} = -\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{L}^2$$

$$\boldsymbol{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\Delta_{(\vartheta,\varphi)}}{r^2}\right) + V(r)\right]RY_{lm} = ER(r)Y_{lm}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right)R(r) = ER(r)$$

$$r \in [0,\infty)$$

Sei $R(r) = \frac{u(r)}{r}$

$$\begin{aligned}
R'(r) &= \frac{u'(r)}{r} - \frac{u(r)}{r^2} \\
r^2 R'(r) &= r u'(r) - u(r) \\
\left(r^2 R'(r)\right)' &= u'(r) + r u''(r) - u'(r)
\end{aligned}$$

radiale Schrödingergleichung $\frac{2m}{\hbar^2} V(r) \equiv v(r) \quad \frac{2m}{\hbar^2} E \equiv \epsilon$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}u''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\frac{u(r)}{r} + \frac{V(r)}{r}u(r) = E\frac{u(r)}{r}$$
$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \underbrace{\frac{l(l+1)}{r^2} + v(r)}_{v_{eff}(r)}\right) u(r) = \epsilon u(r)$$

Graph: 0 bis infty; x: r y:v(r); -e^2/r=v(r);bei x=0:-13.5eV(1s: Grundzustand H-Atom) sowie l(l+1)/r^2 und summe der beiden. min: v_min: Kreisbahn

Für $E < 0$ gibt es gebundene Zustände (für $v(r) = -\frac{e^2}{r}$) falls $\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 \left|R(r)\right|^2 < \infty$, $R(r) = \frac{u(r)}{r} \Rightarrow \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 u(r)^2 < 0$

$$\boldsymbol{L}^2 = L_k L_k = \epsilon_{kmn} \hat{x}_m \hat{p}_n \epsilon_{k\alpha\beta} \hat{x}_\alpha \hat{p}_\beta$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$$

$$= \hbar^2 \epsilon \frac{\partial}{\partial r} r^2 + r^2 \boldsymbol{p}^2$$

und verwenden von

$$\sum_{k=1}^{3} x_k \frac{\partial}{\partial x_k} = r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{p}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

Asymptotisches Verhalten: $r \nearrow \infty$, sei $\lim_{r\nearrow\infty} v(r) = 0$

$$\Rightarrow -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} u(r) = \epsilon u(r), \quad u_\infty(r) = \ \mathrm{e}^{-\sqrt{-\epsilon} r} \ldots \text{exponentieller Abfall}$$

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r)\right) u(r) = \epsilon u(r)$$

$r \searrow 0$, sei $\lim_{r\searrow o} \left(r^2 v(r)\right) = 0$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_0(r) = 0$$

Ansatz: $u(r) = cr^\lambda$

$$c\lambda(\lambda-1)r^{\lambda+2} = cl(l+1)r^{\lambda+2}$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}+l^2+l} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2} = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases}$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty \mathrm{dr}\,\mathrm{u}^2(\mathrm{r}) < \infty$$

allg Lsg: $u_0 = \alpha_l r^{l+1} + \beta_l r^{-l}$ $\beta_l = 0 \forall l \geq 1$ Für $l = 0$ wählen wir Lsg: $v_0(r) = \alpha_0 r$

Das Wasserstoffatom

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}_{\frac{p^2}{2m}} - \frac{ze^2}{r} \text{ mit } z = 1$$

$$(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

Stabilität:

$$\langle H \rangle \cong \frac{\hbar^2}{4 \cdot 2m} \underbrace{\frac{1}{(\Delta x)^2}}_{L^2} - l^2 \underbrace{\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle}_{\frac{1}{L}}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}L} f = -\frac{\hbar^2}{4m^2L^3} + \frac{e^2}{L^2}$$

$$f(L) = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{L^2} - \frac{e^2}{L} = -2\frac{\psi m l^4}{\hbar^2}$$

$L_{min} = \frac{\hbar^2}{4ml^2}$

Größenordnungen:

$$\frac{e^2}{R_{kl}} = mc^2 \Rightarrow R_{kl} = \frac{e^2}{mc^2}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

$$R_{kl} \cdot \frac{1}{\alpha} = \frac{e^2}{mc^2}\frac{\hbar c}{e^2} = \frac{\hbar}{mc} = \lambda_c$$

$$\lambda_c \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{mc}\frac{\hbar c}{e^2} = \frac{\hbar^2}{me^2} \ldots \text{Bohr-Radius}$$

Energie:

$$E = \frac{mc^2}{0.5\,\mathrm{MeV}}$$

$$mc^2 = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27\,\mathrm{eV}$$

Ende 23.05.2005
Beginn
24.05.2005

H-Atom, $H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$

$$\inf_{\Psi\to 0}\frac{\langle\Psi|H\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\langle\text{Grundzustandsenergie}\rangle-\infty$$

und weiter mit irgendetwas anderem

$$\langle H\rangle=\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle-e^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle\geq c\frac{\hbar^2}{2ml_1^2}-e^2\frac{1}{l_2}$$

$l_1^2=\langle r^2\rangle$, $\frac{1}{l_1}=\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle$

$$\inf\langle H\rangle\geq\inf_{\|\Psi\|=1}\left(\frac{\hbar^2}{2m\langle r\rangle}-e^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle\right)=-\infty$$

aus der Unschärferelation $\Rightarrow$ Stabilität des H-Atoms

Bsp einer Wellenfunktion, spdass obiges beliebig klein wird

R groß, ε klein

$$\langle r^2\rangle\approx\frac{R^2}{2}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle\approx\frac{1}{2}\varepsilon$$

radiale Schwingungsgleichung

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right)-\frac{l^2}{r}\right)u(r)&=Eu(r)\\ \left(\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right)-\frac{\beta}{r}\right)u(r)&=-\kappa^2u(r)\end{aligned}$$

Verhalten: $u(r)\approx_{r\to\infty}e^{-\kappa r}$, $u(r)\approx_{\gamma\to 0}\gamma^{l+1}$

Ansatz:

$$\begin{aligned}u(r)&=e^{-\kappa r}L(r)\\ u'(r)&=e^{-\kappa r}(L'-\kappa L)\\ u''(r)&=e^{-\kappa r}(-2\kappa L'+\kappa^2L+L'')\end{aligned}$$

$$u''=\left(\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{\beta}{r}+\kappa^2\right)e^{-\kappa r}$$

Laguerre-DGL

$$L''-\frac{l(l+1)}{r^2}L-2\kappa L'+\frac{\beta}{r}L=0$$

$$
\begin{aligned}
L(r) &= r^{l+1}\sum_{n=0}^{\infty} c_n r^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^{n+l-1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^{n+l-1}\left[\underbrace{(n+l+1)\,(n+l) - l(l+1)}_{n^2+n(2l+1)=n(n+2l+1)}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} c_n r^{n+l}\left[2\kappa(n+l+1)-\beta\right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} r^{n+l}\left[(n+1)(n+2l+2)\right] = \sum c_n r^{n+l}\left[2\kappa(n+l+1)-\beta\right] \\
c_{n+1} &= c_n \frac{2\kappa(n+l+1)-\beta}{(n+1)(n+2l+2)} \approx \left(\frac{2\kappa}{n+1}\right) c_n \ldots \approx \frac{(2\kappa)^{n+1}}{(n+1)!} c_1 \\
n(r) &= \sum_n c_r r^n e^{-\kappa r} \approx \sum \frac{(2\kappa r)^{n+1}}{(n+1)!} e^{-\kappa r} = e^{2\kappa r - \kappa r} \notin L^2
\end{aligned}
$$

Haben also keine Lösung, da Reihe abbrechen muss

$$
\Rightarrow 2\kappa \underbrace{(n+l+1)}_{N} = \beta
$$

N ist Hauptquantenzahl ≥ 1

$$
E = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta^2}{4N^2} = -\frac{1}{N^2}\frac{\hbar^2}{8m}\frac{4m^2e^4}{\hbar^4} = -\frac{1}{2N^2}\left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right)
$$

haben hier ein diskretes Punktspektrum

$$
\begin{aligned}
N &= n+l+1 \\
n &\ \ldots\ \text{radiale Quantenzahl} \\
l &= 1, 2, \ldots
\end{aligned}
$$

Grafik Energieniveaus (Orbitale)

$$
h_l = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\beta}{r}
$$

es fehlen in unserer Rechnung noch ein paar Kleinigkeiten: z.B. Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Algebraische Lösungsmethoden Beh.:

$$
h_l = A_l^{\dagger} A_l
$$

mit

$$
A_l = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}
$$

$$
\begin{aligned}
A_l^\dagger A_l &= \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}\right) \\
&= -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2} + \left(\underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r} - \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}}_{-\frac{1}{r^2}}\right) + \frac{(l+1)^2}{r^2} - 2\frac{\beta}{2r} + \frac{\beta^2}{4(l+1)^2} \\
&= -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2} + \frac{(l+1)^2 - (l+1)}{r^2} - \frac{\beta}{r} + \frac{\beta^2}{4(l+1)^2} = h_l + \frac{R^2}{4(l+1)^2}
\end{aligned}
$$

Ende 24.05.2005
Beginn
25.05.2005

(sollte nichts am Anfang fehlen)

H-Atom

$$
h_l = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\beta}{r} = A_l^\dagger A_l - \frac{\beta^2}{4(l+1)^2}, \quad \beta = \frac{2m}{\hbar^2}e^2, \quad \epsilon = \frac{2m}{\hbar^2}E
$$

$$
A_l^\dagger = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}
$$

$$
\begin{aligned}
A_l^\dagger A_l &= \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}\right) \\
&= -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + (l+1)\underbrace{\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{r} - \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)}_{-\frac{1}{r^2}} + \frac{(l+1)^2}{r^2} - \frac{\beta}{r}
\end{aligned}
$$

jetzt fehlt was

$$
\begin{aligned}
A_l k_l &= \left(k_l + 2\frac{l+1}{r^2}\right) A_l \\
&= \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1) + 2(l+1)}{r^2} - \frac{\beta}{r}\right) A_l \\
&= k_{l+1} A_l \\
A_l^\dagger \underbrace{\left(k_l + 2\frac{(l+1)}{r^2}\right)}_{k_{l+1}} &= k_l A_l^\dagger
\end{aligned}
$$

$$
k_l A_l^\dagger = A_l^\dagger k_{l-1}
$$

Sei $h_l u_{n,l} = \epsilon_{n,l} u_{n,l} \Rightarrow \underbrace{A_l k_l}_{k_{l+1}A_l} u_{n,l} = \epsilon_{n,l} A_l u_{n,l} \Rightarrow A_l u_{n,l} \propto u_{n-1,l+1}$

$N = n + l + 1$, $E_{n,l} = -\frac{1}{2N^2}$

N=2,3:...

3: 3s 2p

2: 2p

$V_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r}$

$k_l = A_l^\dagger A_l - \frac{\beta^2}{4(l+1)^2} \geq -\frac{\beta^2}{4(l+1)^2}$, Gleichheit $\Leftrightarrow A_l u_{0,l} = 0$

$$\Rightarrow \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{\beta}{2(l+1)}\right) u_{0,l} = 0$$

Lösung: $u_{0,l} = c_l r^{l+1} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2(l+1)}r}$

$\frac{\beta}{2} = \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{1}{r_B}$

$\frac{e^2}{R} = mc^2 \frac{c^4}{\hbar^2 c^2}$

$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$

$$u_{1s}(r) = u_{0,0}(r) = c_o r \mathrm{e}^{-\frac{r}{r_B}}$$

$$\langle r \rangle_{1s} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r u_{1s}^2(r)}{\int_0^\infty \mathrm{d}r\, u_{1s}^2(r)}$$

$$\langle r \rangle_{1s} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 r R_{1s}^2(r)}{\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 R_{1s}^2(r)}$$

Ende 25.05.2005
Anfang
30.05.2005

$$A_l = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{1}{r_B(l+1)}$$

$$\left(A_l, A_l^\dagger\right) = 2\frac{l+1}{r^2}$$

$$h_l = A_l^\dagger A_l + \frac{\beta}{4(l+1)^2}$$

$$[A_l, h_l] = \left[A_l, A_l^\dagger A_l\right] = 2\left(\frac{l+1}{r^2}\right) A_l$$

,

$$A_l u_{0,l} = 0 \Leftrightarrow u_{0,l} = c_l r^{l+1} e^{-\frac{\beta r}{2(l+1)}}$$

$$A_l h_l = \underbrace{\left(h_l + 2\frac{l+1}{r^2}\right)}_{h_{l+1}} A_l$$

$$A_l^\dagger h_{l+1} = h_l A_l^\dagger$$

Sei $h_l u_{n,l} = \epsilon_{n.l} u_{n,l}$

$$\Rightarrow h_{l+1} A_l u_{n,l} = A_l h_l u_{n,l} = \epsilon_{n,l} \underbrace{(A_l u_{n,l})}_{\propto u_{n+1,l+1}}$$

$$h_{l+1}u_{n,l+1} = \epsilon_{n,l+1}u_{n,l+1}$$
$$A_l^\dagger h_{l+1}u_{n,l+1} = h_l A_l^\dagger u_{n,l+1} = \epsilon_{n,l+1}A_l^\dagger u_{n,l+1} \Rightarrow A_l^\dagger u_{n,l+1} \propto u_{n+1.l}$$

Bsp: Gegeben: $u_{0,l}$; gesucht: $u_{1,l-1} \propto A_{l+1}^\dagger u_{0,l} = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l}{r} + \frac{1}{2l}\right) r^{l+1}\mathrm{e}^{-\frac{\beta r}{2(l+1)}} = \underbrace{\left(-\frac{2l+1}{r} + \beta\left(\frac{1}{2l} + \frac{1}{2(l+1)}\right)\right)}_{\text{1 Knoten in }(0,\infty)} r^{l+1}\mathrm{e}^{-\frac{\beta r}{2(l+1)}} \cong untenr \searrow 0(=)r^l$

4 Streuung

4.1 Streuung in einer Dimension

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Sei $V(x) \overset{|x|\to\infty}{\longrightarrow} 0(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |V(x)| < \infty \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x\,|V(x)| < \infty, \exists V')$

Spektrum des s.o. Op H kann diskretes Punktspektrum haben und hat absolut stetiges kontinuierliches Spektrum (bezüglich Lebesgue-Maß) ($\neq$ singuläres stetig; $\nexists$ in Atom-, Molekülphysik (siehe B. Simon, M. Reed))

$A = A^\dagger$

$A = \int_\gamma \lambda \mathrm{d}E(\lambda)$ vs.

$A = \sum \alpha_n \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{P}$

spA

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \delta(k-k')$$

Anfang 31.05.2005

4.1.1 Potentialstreuung $D = 1$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x), \quad E > 0, \quad V(x) \overset{|x|\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

Suchen Lösungen, die für $x \to \pm\infty$ zu Lösungen der freien Schrödingergleichung $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = E\varphi(x)$ „konvergieren" ($\exists$ zeitabhängige Streutheorie (starke Konvergenz von unitären Gruppen))

$$\varphi(x) = \alpha(k)\mathrm{e}^{ikx} + \beta(k)\mathrm{e}^{-ikx}$$

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

Randbedingungen:

$$\psi(x) \overset{x\to-\infty}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$\begin{aligned} e^{ikx} &\quad \dots \quad \text{ebene einfallende Welle} \\ R(k) &\quad \dots \quad \text{Reflexionskoeffizient} \end{aligned}$$

bzw.

$$\psi(x) \overset{x\to+\infty}{\longrightarrow} T(k)e^{ikx}$$

$$T(k) \quad \dots \quad \text{Transmissionskoeffizient}$$

(wenn nix reflektiert wird, haben wir Soliton-Welle)

Beispiel.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \bar{\lambda}\delta(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + a\delta(x)\right)\psi(x) = \epsilon\psi(x)$$

RB bei $x = 0$, $\lim_{\epsilon\to 0}\left(\psi'(\tilde{\epsilon}) - \psi'(-\tilde{\epsilon})\right) = \lambda\psi(0)$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R(k)e^{-ikx} & x < 0 \\ T(k)e^{ikx} & x > 0 \end{cases}$$

$$1 + R(k) = T(k)$$

$$ikT(k) - ik(1 - R(k)) = \lambda T(k)$$

$$-ik + ikR(k) = (\lambda - ik)(1 + R(k)) = \lambda - ik + \lambda R - ikR$$

$$R(k) = \frac{\lambda}{2ik - \lambda}, \quad T(k) = \frac{2ik}{2ik - \lambda}$$

folgendes hat Grosse weggelöscht...

$$\boldsymbol{j}(x) =$$

$$|R|^2 + |T|^2 = 1$$

Beispiel.

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi = E\psi$$

2 Fälle: sei

$$V_0 > E, \quad +\frac{d^2}{dx^2}\psi = (V_0 - E)\psi \to \psi(x) = \alpha(\kappa)e^{\kappa x} + \beta(\kappa)e^{-\kappa x}$$

$$\kappa^2 = V_0 - E$$

$$\underbrace{|T(k)|^2}_{\text{Durchlässigkeit}} \approx \underbrace{\mathrm{e}^{2\kappa a}}_{\text{Gamovfaktor}} = \mathrm{e}^{-2a\sqrt{(V_0-E)\frac{2m}{\hbar}}}$$

4 Randbedingungen:

$$2 \text{ bei } x = -a \text{ und } 2 \text{ bei} x = a$$

4.1.2 Streuung im $D = 3$

(kugelsymmetrisches Potential)

nicht vergessen: $\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}\cos\theta \mathrm{d}\varphi$

$\boldsymbol{k}$ ... Impuls des gestreuten Teilchen /der gestreuten Welle

gestreute Welle ist für ausreichend große r Kugelwelle Ende 31.05.2005 Anfang 01.06.2005

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \lambda V(r)\right)\psi(\boldsymbol{x}) = \underbrace{E}_{\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}}\psi(\boldsymbol{x})$$

$$\left(\Delta + k^2\right)\psi(\boldsymbol{x}) = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\lambda V(r)\psi(\boldsymbol{x})}_{\rho(\boldsymbol{x})} \quad + \text{Randbedingungen}$$

Bemerkung.

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x})$$

$$u(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 y \rho(\boldsymbol{y})}{4\pi\,|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}$$

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 y \rho(\boldsymbol{y})}{4\pi}\left(-\Delta_x \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right) = \rho(\boldsymbol{x})$$

$$-\Delta_x \underbrace{G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}_{\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}} = \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$$

$$-\Delta\frac{1}{|\boldsymbol{x}|} = 4\pi\delta^3(\boldsymbol{x})$$

$$\left(-\Delta - k^2\right)\psi(\boldsymbol{x}) = -\tilde{\rho}(\boldsymbol{x})$$

brauchen Greenfunktion: $\left(-\Delta - k^2\right)G(\boldsymbol{x}) = \delta^3(\boldsymbol{x})$

Behauptung.

$$G(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}|\boldsymbol{k}||\boldsymbol{x}|}}{4\pi\,|\boldsymbol{x}|} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r}$$

Beweis. $r \neq 0$ z.z.

a)

$$\begin{aligned}
\left(-\Delta - k^2\right) G(|\boldsymbol{x}|) &= 0 \\
\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - k^2\right)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \left(\mathrm{i}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r^2}\right) - k^2\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \\
&= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mathrm{i}kr\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right) - k^2\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \\
&= -\frac{1}{r^2}\left(\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - k^2 r\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right) - k^2\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} = 0
\end{aligned}$$

$$\int_{|\Delta\boldsymbol{x}|\le\varepsilon} \mathrm{d}^3x \left(\left(-\Delta - k^2\right)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r}\right) g(\boldsymbol{x}) = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{|\Delta\boldsymbol{x}|\le\varepsilon} \mathrm{d}^3x\,\delta^3(\boldsymbol{x}) g(\boldsymbol{x})$$

$$\text{Greenformel:} \qquad \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{|\Delta\boldsymbol{x}|\le\varepsilon} \mathrm{d}^2\boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{\nabla}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r}\right) g(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{0})$$

$$\begin{aligned}
\left(-\Delta - q^2\right)\int \frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(2\pi)^3}\tilde{G}(\boldsymbol{k}) &= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} \\
&= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}\left(\boldsymbol{k}^2 - \boldsymbol{q}^2\right)\tilde{G}(\boldsymbol{k}) \\
&= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}
\end{aligned}$$

Gesucht: Lösung von $\left(-\Delta - q^2\right) G(\boldsymbol{x}) = \delta^3(\boldsymbol{x})$

Ansatz:

$$G(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}\tilde{G}(\boldsymbol{k}) \leftrightarrow \tilde{G}(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}G(\boldsymbol{x})$$

$\Rightarrow \tilde{G}(\boldsymbol{k}) = \dfrac{1}{k^2 - q^2} +$ Lösung der homogenen Gleichung

$\Rightarrow \psi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} - \lambda\dfrac{2m}{4\pi\hbar^2}\displaystyle\int \mathrm{d}^3y\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}|\boldsymbol{k}||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}V(|\boldsymbol{y}|)\psi(\boldsymbol{y})$ Lippmann-Schwinger-Gleichung

Der linke Term ist dabei Lösung von $\left(-\Delta + k^2\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} = 0$

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung ist von der Gestalt

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \psi_{\text{hom}} + \lambda\int \mathrm{d}y\,\ker(x,y)\psi(y) \\
&= \psi_{\text{hom}} + \lambda\int \mathrm{d}y\,\ker(x,y)\left(\psi_{\text{hom}}(y) + \lambda\int \mathrm{d}z\,\ker(y,z)\psi(z)\right) \\
&= \psi_{\text{hom}} + \lambda\int \mathrm{d}y\,\ker(x,y)\psi_{\text{hom}}(y) + \underbrace{\lambda^2\int \mathrm{d}y\,\ker(x,y)\int \mathrm{d}z\,\ker(y,z)\psi(z)}_{\mathcal{O}(\lambda^2)}
\end{aligned}$$

$$\lambda V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Näherung: 1. Term der Born-Reihe

$$\psi^B(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{ß\boldsymbol{kx}} - \frac{2m\lambda}{4\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{d}^3y\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}V(|\boldsymbol{y}|)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}} + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) \overset{|\boldsymbol{x}\longrightarrow\infty|}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}}{r}f(\theta)$$

wo $f(\theta)$ Streuamplitude

$\square$

Ende 01.06.2005 Anfang 06.06.2005

Streuung: Schrödingergl + RB = Integralgl.

1. Born-Näherung

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}} \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\int\frac{\mathrm{d}^3y\mathrm{e}^{k\overbrace{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}^{r-\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}{r}}}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}V(|\boldsymbol{y}|)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}}_{\psi^s_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})} + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right)$$

$$\psi^s_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \overset{|x|\to\infty}{\longrightarrow} \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int\mathrm{d}^3y\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\cdot\boldsymbol{y}\right)}V(|\boldsymbol{y}|)}_{\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}f_q^{1B}(\vartheta)}$$

$|\boldsymbol{x}| = r$

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}| &= \sqrt{\boldsymbol{x}^2+\boldsymbol{y}^2-2\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}} \\
&= r\sqrt{1+\frac{\boldsymbol{y}^2}{r^2}-2\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\underbrace{\frac{\boldsymbol{y}}{r}}_{\mathcal{O}(\frac{1}{r})}} \\
&= \ r\left(1-\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\frac{\boldsymbol{y}}{r}+\mathcal{O}(\frac{1}{r^2})\right) = r-\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}{r}+\mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right)
\end{aligned}$$

$$\sqrt{1-\tilde{x}} = 1+\frac{\tilde{x}}{r?}+\mathcal{O}\left(\tilde{x}^2\right)$$

$$f_q^{1B}(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int\mathrm{d}^3y\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{qy}}V(|\boldsymbol{y}|)$$

wo

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{q} &= \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \\
\boldsymbol{k}' &= k\frac{\boldsymbol{x}}{r} \\
\left|\boldsymbol{k}'\right| &= k \\
q^2 = \boldsymbol{q}^2 &= \left(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'\right)^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\vartheta \\
&= 2k^2 \underbrace{(1-\cos\vartheta)}_{2\sin^3\frac{\vartheta}{2}} \\
q &= 2k\sin\frac{\vartheta}{2}
\end{aligned}
$$

$\mathrm{d}f = r^2\mathrm{d}l$

$\boldsymbol{q}$ =Impulsübertragung

ϑ =Streuwinkel (im Ruhsystem des Targets)

löst Schrgl. zur Energie $E = \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2$

Randbed:

$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \overset{|\boldsymbol{x}|\to\infty}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \qquad \underbrace{f(\vartheta)}_{\text{Streuamplitude}}$

(Interferenzterm wird ausgeblendet)

...

Teilchendichte . Fläche . Geschwindigkeit=# der Teilchen die pro Sekunde durch die Fläche durchtreten

$\left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}\right| = 1T./Vol$

$\boldsymbol{j}_{\text{ein}} = \frac{\hbar}{2m}\left(\psi^*_{\text{ein}}\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\psi_{\text{ein}} - \psi_{\text{ein}}\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\psi^*_{\text{ein}}\right) = \frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m} = \frac{\boldsymbol{p}}{m} = \boldsymbol{v}$

$\boldsymbol{j}_{\text{aus}} = \frac{\hbar}{2m}\left(\psi^*_{\text{aus}}\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\psi_{\text{aus}} - \psi_{\text{aus}}\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\psi^*_{\text{aus}}\right) = \underbrace{\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m}}_{\boldsymbol{v}}\underbrace{\left|f_q^{1B}(\vartheta)\right|^2}_{r^2}$

ψ_{aus}=# der Teilchen pro Sekunde, die in den Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ gestreut werden

$\mathrm{d}\sigma = \frac{\#aus}{\#ein} \Rightarrow \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f|^2$

$\frac{v\left|f_q^{1B}(\vartheta)\right|^2}{r^2}\overbrace{r^2\mathrm{d}\Omega}^{\mathrm{d}f}/\mathrm{d}\Omega$

$\mathrm{d}\Omega$# Teilchen die pro

$\int\mathrm{d}\Omega\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \sigma_{\text{tot}}$ (Fläche)

$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2$

$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2$

$$\begin{aligned} f_q^{1B}(\vartheta) &= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\int \mathrm{d}^3y \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{y}} V(|\boldsymbol{q}|) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}y\, y^2 \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi \int_{-1}^{1}\mathrm{d}z \mathrm{e}^{\mathrm{i}qyz} V(q) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{4\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}y\, y^2 2\pi \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}qy} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qy}}{\mathrm{i}qy} \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}\lambda \int_0^\infty \mathrm{d}y\, y \frac{\sin qy}{q} V(y) \end{aligned}$$

mit $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{y} = |\boldsymbol{q}|\,|\boldsymbol{y}|\overbrace{\cos\vartheta}^{z}$=qyz

$\int_0^{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\Omega = \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \mathrm{d}\varphi = -\mathrm{d}\underbrace{\cos\vartheta}_{z}\varphi$ Ende 06.06.2005 Anfang 07.06.2005

Streuung, Streuamplitude

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \overset{|x|\to\infty}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \underbrace{\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f(\vartheta)}_{\text{Kugelwelle}}$$

$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2$

$\boldsymbol{q}^2 = q^2 = 2k^2 - 2\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}' = 2k^2(1-\cos\vartheta) = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}$

$E = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

1. Born Näherung:

$$f(\vartheta) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\int_0^\infty \mathrm{d}yy\frac{\sin yqV(y)}{q}$$

Beispiel. $\lambda V(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r_B} & \text{für } 0 \le r \le r_B \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r_B}\int_0^{r_B}\mathrm{d}yy\frac{\sin yq}{q} \\ &\overset{q\searrow 0}{\simeq} \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r_B}\int_0^{r_B}\mathrm{d}yy\frac{yq}{q} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r_B}\frac{r_B^3}{3} \\ &= \frac{2}{3}r_B \end{aligned}$$

Streuquerschnitt wird für kleine Energien isotrop

$$|f(\vartheta)|^2 \simeq \left(\frac{2m}{\hbar^2}\lambda\right)^2\left(\int_0^\infty \mathrm{d}yy^2V(r)\right)^2$$

Im Bsp:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2 \overset{q\searrow 0}{\simeq} \frac{4}{g}r_B^2$$

$\frac{e^2}{r} = mc^2$, $r = \frac{e^2}{mc^2}\frac{\hbar^2c^2}{e^4} = \frac{\hbar^2}{mc^2}r_B = \frac{\hbar^2}{e^2}$

Bsp: Yukawapotential $\lambda V(r) = -g\frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}$

$$\begin{aligned}
f(\vartheta) &= \frac{2m}{\hbar^2} g \int_0^\infty \mathrm{d}yy \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}yq}}{q} \left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}yq} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}yq}}{2\mathrm{i}} \right) \\
&= \frac{2m}{\hbar^2} g \frac{1}{2\mathrm{i}q} \underbrace{\left\{ \frac{1}{\mu - \mathrm{i}q} - \frac{1}{\mu + \mathrm{i}q} \right\}}_{\frac{2\mathrm{i}q}{\mu^2+q^2}} \\
&= \frac{2mg}{\hbar^2(\mu^2+q^2)} \\
&\Rightarrow \mu = 0; g \to \pm e^2
\end{aligned}$$

Streuung am Coulombpotential (Rutherford)

$q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$

$\int_0^\infty \mathrm{d}y\mathrm{e}^{-\alpha y} = \frac{1}{\alpha}$ falls $\operatorname{Re}\alpha > 0$ $\int_0^\infty \mathrm{d}y\mathrm{e}^{\mathrm{i}y(q+\mathrm{i}\varepsilon)} = \frac{1}{(-i)(q+\mathrm{i}\varepsilon)}$

$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \frac{Z^2 4m^2e^4}{16\hbar^2k^4\sin^4\frac{\vartheta}{2}} = \frac{Z^2e^4}{16E^2\sin^4\frac{\vartheta}{2}}$

Bemerkung.

1. Diff. Streuquerschnitt ist unabhängig von $\hbar$ (klassisch identisch)
2. divergiert für $\vartheta = \Theta$(nicht messbar ;$\exists$ immer Abschirmung) $\Rightarrow \sigma_{\text{tot}} = \int \mathrm{d}\Omega \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \infty$(Infrarotproblem der QED)
   (Teilchentrajektorien werden nie gerade Linien) $\exists$ logarithmische Modifikationen
3. Coulomb-Lippmann-Schwinger lösbar
   exakte Lösung für $|f(\vartheta)|$ ist gleich$\left|f^{1B}(\vartheta)\right|$ (obwohl Born'sche Näherung)
4. Coulombpotential ist langreichweitig für $r \to \infty (rV(r)) \neq 0$
   (weitentfernte Teilchen "spüren" noch das Potential) Streuung Elektronen am Kern; Rutherford deduzierte Atomstruktur

5) Spin – Statistik – Periodensystem

Neutrale Atome: $H = \sum_{j=1}^Z \left(\frac{P_j^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_j} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|}$ Ende 07.06.2005 Beginn 08.06.2005

5) Spin-Statistik (Periodensystem)

Stern-Gerlach Versuch: Elektronenstrahl durch Magnetfeld gestreut

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{B} = -\mu_z B_z$$

$$\Rightarrow \text{Kraft} = +\mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \pm O$$

Kopplung an Magnetfeld: Zeeman-Effekt

Atome mit Z ungerade geben gerade H von ?? $\Rightarrow$ Drehimpulsoperator

Lorentzkraft: $\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{E} + \frac{q}{c}\boldsymbol{v_x}\boldsymbol{R}$

$$\mathcal{L} = \frac{mv^2}{2} + \frac{e}{c}\boldsymbol{v}\boldsymbol{A} - V(\boldsymbol{x})$$

statisch: $\boldsymbol{B} = \text{rot}\,\boldsymbol{A}$

$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' + \boldsymbol{\nabla} W(\boldsymbol{x})$

Vektorpotential nicht eindeutig

Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = \frac{(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A})}{2m} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\boldsymbol{p}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2$$

Minimalsubstitution: $\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$

konstantes Magnetfeld: $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$

wählen Eichung: $\boldsymbol{A} = -\frac{B}{2}\begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\frac{\partial A_x}{\partial y} = -\frac{B}{2}, \qquad \frac{\partial A_y}{\partial x} = +\frac{B}{2} \quad \Rightarrow \quad \text{rot}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ +B \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}L_z B + \frac{e^2}{2mc^2}\frac{B^2}{4}(x^2 + y^2)$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p} = -\frac{B}{2}(yp_x - xp_y) = +L_z\frac{B}{2}$$

diamagnetisches Term ist sehr klein und wird daher vernachlässigt $\Rightarrow$ Lamdan-Hamiltonoperator

H-Atom im Magnetfeld:

$$H_B = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \underbrace{\frac{e}{2mc}L_z B}_{\mu B} - \frac{e^2}{r}$$

daraus folgt Aufspaltung der im H-Atom entarteten Energieniveaus (Zeeman-Effekt)

$l = 2,\, B \neq 0:\ (\Delta E_m)_{spinlos} = -\frac{e}{2mc}\langle nl\tilde{m}|\, L_z\, |nl\tilde{m}\rangle\, B = -\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)\tilde{m}B$

$$\frac{e\hbar}{2mc}\ldots \text{Bohr'sches Magneton}$$

magnetisches Moment

$e^-, p, n, \ldots$ Spin $\frac{1}{2}$: $\boldsymbol{\mu} = g\frac{e}{2mc}\boldsymbol{s}$

$$g = 2 + (\frac{\alpha}{2\pi} + \mathcal{O}(\alpha^2))\ldots \text{gyromagnetisches Verhältnis}$$

2 aus Dirac-Gleichung (und die Antiteilchen auch)

$\frac{\alpha}{2\pi}$ von Schwinger

Spin-Matrizen:

$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \text{ im } \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$$

Basis ist $|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\,, \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle$

$$\boldsymbol{\sigma}^2 = 3 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 1 + 1 + 1 = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

erfüllt Drehimpulsalgebra: $[s_x, s_y] = i\hbar s_z$ im $\mathbb{C}^2$: $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, 2\hbar^2 1 = \boldsymbol{L}^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

$$\boldsymbol{L} \Rightarrow \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{J}$$

falls $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ jedes für sich eine SU(2)-Algebra erfüllen, erfüllt auch $\boldsymbol{J}$ SU(2)-Algebra

$\forall$ reine Zustand über $\mathbb{C}^2$ heißt ein q-Bit: $|\varphi\rangle\langle\varphi|$ Ende 08.06.2005 Beginn 13.06.2005

4.1.3 Spin 1/2 Teilchen: e, p, n,...

hier fehlt furchtbar viel

Wählen Basis in $\mathbb{C}^2$: $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\text{Zustand } P_\uparrow = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Zustand } P_\downarrow = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gemischter Zustand:

$$\alpha P_\uparrow + (1-\alpha)\, P_\downarrow = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & (1-\alpha) \end{pmatrix}, \quad 0 < \alpha < 1$$

Allgemeinste 2-dimensionale Dichtematrix:

$$0 \leq \rho, \quad \mathrm{Tr}\rho = 1$$

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & 1 - n_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(1 + \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)$$

man betrachte dazu einfach explizite Berechnung von RS

$0 \leq \rho \leq 1$, beide EW müssen positiv sein, d.h. $\mathrm{Tr}\rho$ positiv und $\det \rho \geq 0$

$\det \rho = \frac{1}{4} \left(1 + n_3\right) \left(1 - n_3\right) - \left(n_1 - in_2\right) \left(n_1 + in_2\right) = \frac{1}{4} \left(1 - n_3^2 - n_1^2 - n_2^2\right) \geq 0$

$$\Rightarrow |\boldsymbol{n}| \leq 1$$

nennt man Blochsphäre

Alle reinen Zustände: ein EW $= 1$, anderer EW $= 0$ ist äquivalent zu $\det \rho = 0 \Leftrightarrow |\boldsymbol{n}| = 1$

d.h. $\boldsymbol{n}$ ist auf der S^2

Geg.: $\rho \in U$ unitär $\Rightarrow U \rho U^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & (1 - \alpha) \end{pmatrix}$

Observable: 2x2 hermitesche Matrizen Geg.: Zustand ρ, Observable A

Erwartungswert im Zustand ρ A zu messen: $\mathrm{Tr}\rho A = \langle A \rangle_\rho$

$$A = \alpha_0 \mathbf{1} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \qquad \alpha_0, \alpha_i \in \mathbb{R}$$

$$\forall \text{reine Zustände} = 1 \text{ Q-Bit}$$
$$\forall \text{gemischten Zustände} = \text{noisy Q-Bit}$$

N-QBits reiner Zustand über $\mathbb{C}^2 \otimes \ldots \otimes \mathbb{C}^2$

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \equiv \mathbb{C}^4$$

Basis:

$$\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right), \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$e_i \otimes f_j : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \hline 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} K_1 \\ K_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1 L_1 \\ K_2 L_2 \\ \hline K_1 L_2 \\ K_2 L_1 \end{pmatrix}$$

Matrizen: $\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\left(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2\right) \equiv \frac{\hbar}{2}\left(\boldsymbol{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_2 \otimes \boldsymbol{\sigma}_2\right)$

unitäre Transformationen von N-QBits heißen Quantum Gates

Menge von Quantum Gates entspricht Rechnen des Quantencomputers ($2^N \times 2^N$ Matrizen) Ende 13.06.2005 Beginn 14.06.2005

4.1.4 2 Spins in $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \equiv \mathbb{C}^4$

Tensorprodukt: $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$: wählt ONS in $\underbrace{\mathcal{H}_1}_{e_i}$ & $\underbrace{\mathcal{H}_2}_{f_i}$

bilden formales Produkt (??) $e_i \otimes f_j$ wählt dies als Basis, linear ausdehnen, vervollständigen

$$\mathbb{C}_1^2: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1$$

$$\mathbb{C}_2^2: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$$

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \hline 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \hline 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \hline 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \hline 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A_{li} B_{mj} u_i \otimes v_j = A_{li} B_{mj} u_i v_j$$

$$\left(A \otimes B\right)\left(u \otimes v\right) = Au \otimes Bv$$

Gesamtspin:

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S}_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes \boldsymbol{S}_2 = \frac{\hbar}{2} \left(\boldsymbol{\sigma}_1 \times 1_2 + 1_1 \otimes \boldsymbol{\sigma}_2 \right)$$

$$\begin{aligned} S^+ &= \\ S^- &= \\ S^z &= S_1^z + S_2^z = \frac{\hbar}{2} \left(\sigma_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes \sigma_2 \right) \end{aligned}$$

$$(A \otimes B)_{ijlke} = A_{ij} B_{kl} u_j v_e = A_{ij} u_i B_{kl} v_l = \begin{pmatrix} A_{ij} B_{11} & A_{ij} B_{12} \\ A_{ij} B_{21} & A_{ij} B_{22} \end{pmatrix}$$

Beispiel.

$$\sigma_1^z \otimes 1_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{matrix} & 0 \\ 0 & \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{matrix} \end{pmatrix}$$

$$1_1 \otimes \sigma_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix} & 0 \\ 0 & \begin{matrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{matrix} \end{pmatrix}$$

$$S^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 2 \end{pmatrix}$$

Basis in $\mathbb{C}^4$:

$$\text{Triplett: } \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$\text{Singlett: } \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$S^z \, |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} 2 \, |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$S^z \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) \frac{1}{\sqrt{2}} = 0$$

$$S^z \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \frac{1}{\sqrt{2}} = 0$$

$$S^z \left|\downarrow\downarrow\right\rangle = -\hbar \left|\downarrow\downarrow\right\rangle$$

$$S^z \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = (S_1^z + S_2^z) \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = \hbar \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left|\uparrow\uparrow\right\rangle$$

$$\boldsymbol{S}^2 \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = \hbar^2 s(s+1) \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = \left(\underbrace{\boldsymbol{S}_1^2}_{\frac{3}{4}\hbar^2} + \underbrace{\boldsymbol{S}_2^2}_{\frac{3}{4}\hbar^2} + 2 \underbrace{\boldsymbol{S}_1 \otimes \boldsymbol{S}_2}_{S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + S_1^z S_2^z} \right) \left|\uparrow\uparrow\right\rangle$$

$$\boldsymbol{S}^2 \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \frac{1}{\sqrt{2}} = \hbar^2 \frac{2}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) = \hbar^2 \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2}\right) \left|\uparrow\uparrow\right\rangle$$

$$\boldsymbol{S}^2 \left|\downarrow\downarrow\right\rangle = 2\hbar^2 \left|\downarrow\downarrow\right\rangle$$

$$\boldsymbol{L}^2 \left|l, m\right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left|l, m\right\rangle$$

$$\boldsymbol{S}^2 \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2}\right) \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$$

...

$$\underbrace{\mathcal{D}^{(l)}}_{(2l+1)\times(2l+1)} \otimes \underbrace{\mathcal{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)}}_{2\times 2} = \underbrace{\mathcal{D}^{\left(l+\frac{1}{2}\right)}}_{\mathbb{C}^{2l+2}} \oplus \underbrace{\mathcal{D}^{\left(l-\frac{1}{2}\right)}}_{\mathbb{C}^{2l}}$$

Dimensionen stimmmen schon mal (kein Beweis, aber schon recht nett) Ende 14.06.2005 Anfang 15.06.2005

Bemerkung.

$$\underbrace{\mathcal{D}^{(l_1)}}_{(2l+1)} \otimes \underbrace{\mathcal{D}^{(l_2)}}_{(2l+1)} = \bigoplus_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \mathcal{D}^{(l)}$$

(o. Bew) Clebsch-Gordon-Reihe

$$\mathcal{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)} \otimes \mathcal{D}^{\left(\frac{1}{2}\right)} = \mathcal{D}^{(0)} \oplus \mathcal{D}^{(1)}$$

Unitäre Transformationen im Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, \mathrm{d}^3x)$

Translation: $\psi(\boldsymbol{x})$, $\quad \boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$ (3par-Gruppe) $\psi'(\boldsymbol{x})$

Wahrscheinlichkeit:

fordern$|\psi'(\boldsymbol{x}')|^2 = |\psi(\boldsymbol{x})|^2$

wählen: $\psi'(\boldsymbol{x}') = \psi(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{a})$(Phasenwahl)

Darstellung: $\psi'(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{a})$

Behauptung. *Der Impulsoperator ist der infinitesimale Erzeuger der Translationen*

$\psi'(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{ap}}\psi(\boldsymbol{x}) = \left(\mathrm{e}^{-\boldsymbol{a}\boldsymbol{\nabla}}\psi\right)(\boldsymbol{x}) = \sum_n \frac{(-\boldsymbol{a}\boldsymbol{\nabla})^n}{n!}\psi(\boldsymbol{x})$

$U_{\boldsymbol{a}}U_{\boldsymbol{a}}^\dagger = U_{\boldsymbol{a}}^\dagger U_{\boldsymbol{a}} = 1 \simeq (1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{ap})\psi(\boldsymbol{x})$

$\psi'(\boldsymbol{x}) - \psi(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{a}\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{x})$ *inf. Erzeuger Nabla*

Unitäre Gruppe: $U_{\boldsymbol{a}_1}U_{\boldsymbol{a}_2} = U_{\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2}$

Drehimpuls: $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x}$

Beispiel. Drehung um z-Achse $\boldsymbol{x}_i' = R_{ij}^{()}\boldsymbol{x}_j$

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$|\psi'(\boldsymbol{x}')| = |\psi(\boldsymbol{x})|$

Wählen Phase.

$\psi'(\boldsymbol{x}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{x})$

Beispiel. $\psi'(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha\boldsymbol{nL}}\psi(\boldsymbol{x})$

z-Richtung:

$\psi'(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\alpha L_z}\psi(\boldsymbol{x}) = \left(1 - \frac{1}{\hbar}\alpha\frac{\hbar}{\alpha}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\psi(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x}) - \alpha x\frac{\partial}{\partial y}\psi(\boldsymbol{x}) + \alpha y\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{x})$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha x - \sin\alpha y \\ \sin\alpha x + \cos\alpha y \\ z \end{pmatrix}$$

Inf. Entwickliung von $\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}) = \psi(x-\alpha y, \alpha x+y, z) \simeq \psi(x,y,z)\underbrace{-\alpha y\frac{\partial}{\partial x}\psi + \alpha\frac{\partial}{\partial y}\psi}_{(\alpha L_z\alpha)(\boldsymbol{x})}$

xxx.uni-augsburg.de

qspires/slac

Bogdanov/Sokal

He:

Ende 15.06.2005
22.06.2005: keine VO wg. Test
Anfang 27.06.2005

$$H(\epsilon) = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} + \epsilon\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}$$

$$E_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2} = \underbrace{E_H}_{-13.5\,\mathrm{eV}} Z^2\left(\frac{1}{(n_1+l_1+1)^2} + \frac{1}{(n_2+l_2+1)^2}\right)$$

a) $E(\epsilon)$ ist monoton steigend

b) $H(\epsilon)$ ist linear in $\epsilon \Rightarrow E(\epsilon)$ ist konkav

c) Sei $\boldsymbol{x}_1$ groß $\epsilon\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|} \simeq \epsilon\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1|} \Rightarrow$ Pot. gesehen von $\boldsymbol{x}_1$: $(-Z+\epsilon)\frac{e^2}{r_1}$

$\Rightarrow$Alle neutralen Atome haben unendlich viele Bindungszustände.

Für $\epsilon = 1$ und $Z = 1$ Elektron sieht kurzreichweitiges Potential

$\Rightarrow \exists!1$ Bindungszustand von H^- natürlicher Parität(S) (Sternatmosphäre)

($\exists!3$ Bindungszustände von H^- unnatürlicher Parität(P)

$\langle 0|\, V\, |0\rangle = e^2 \int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \varphi_{1s}^2(\boldsymbol{x})\varphi_{1s}^2(\boldsymbol{y}) \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{5}{4}e^2$

$E_{\mathrm{He}} \leq E_H \left(2Z^2 - \frac{5}{4}Z\right)\Big|_{Z=2}$

Störungsreihe: $H = H_0 + \epsilon v$; Vor: keine Entartung

$H_0 \left|n\right\rangle^{(0)} = E_n \left|n\right\rangle^{(0)}$

$$(H_0 + \epsilon v)\left(\underbrace{|0\rangle^{(0)} + |0\rangle^{(1)} + \dots}_{\epsilon}\right) = \left(E_0^{(0)} + \epsilon E_0^{(1)} + \epsilon^2 E_0^{(2)} + \dots\right)\left(|0\rangle^{(0)} + |0\rangle^{(1)} + \dots\right)$$

Sei ${}^{\epsilon}\langle 0|0\rangle^{\epsilon} = 1 = {}^{\epsilon}\langle 0|0\rangle^{(0)} \Rightarrow {}^{\epsilon}\langle 0|0\rangle^{(1)} = 0, \dots {}^{0}\langle 0|0\rangle^{(1)}$

0. Ordnung: $H_0 |0\rangle^{(0)} = E_0^{(0)} |0\rangle^{(0)}$

1. Ordnung: $H_0 |0\rangle^{(1)} + V |0\rangle^{(0)} = E_0^{(0)} |0\rangle^{(1)} + E_0^{(1)} |0\rangle^{(0)}$, $E_0^{(1)} ={}^{(0)} \langle 0|\, V\, |0\rangle^{(0)}$

${}^{(0)}\langle 0|\, H_0\, |0\rangle^{(1)} + {}^{(0)}\langle 0|\, V\, |0\rangle^{(0)} = {}^{(0)}\langle 0|0\rangle^{(1)} E_0^{(0)} + E_0^{(1)} \underbrace{{}^{(0)}\langle 0|0\rangle^{(0)}}_{1}$

2. O: $H_0 |0\rangle^{(2)} + V |0\rangle^{(1)} = E_0^{(0)} |0\rangle^{(2)} + E_0^{(1)} |0\rangle^{(0)} + E_0^{(2)} |0\rangle^{(0)}$

${}^{(0)}\left\langle 0\middle|\left(H_0 - E_0^{(0)}\right)\middle|0\right\rangle^{(2)} + {}^{(0)}\left\langle 0\middle|\left(V - E_0^{(0)}\right)\middle|0\right\rangle^{(1)} = E_0^{(2)} \underbrace{{}^{(0)}\langle 0|0\rangle^{(0)}}_{1}$

$\Rightarrow E_0^{(2)} = {}^{(0)}\langle 0|\, V\, |0\rangle^{(1)}$

Beh: $|0\rangle^{(1)} = -\sum_{n\neq 0} \frac{|n\rangle^{(0)}\langle n|^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} |0\rangle^{(0)}$

$\underbrace{\left(H_0 - E_0^{(1)}\right)}_{\sum_{n\neq 0}\left(E_n^{(0)} - E_0^{(0)}\right)|n\rangle\langle n|} \quad |0\rangle^{(1)} = \left(-V + E_0^{(1)}\right)|0\rangle^{(1)}$

(kleine Teile fehlen)

H														

neutrale Atome: N=Z $H = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_j}\right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|}$

Thm: Sei $H = -\Delta - \frac{1}{r} + V(r)$

Für $V = 0$ gibt es Entartung und Niveaus $E_{n,l} = E_{n-1,l+1}$

(Thm: $\Delta V(r) >< 0 \Rightarrow E_{n,l} >< E_{n-1,l+1}$

Anwendung: Einteilchenbild

$\left(\Delta - \frac{Ze^2}{r} + \int \mathrm{d}^3y \frac{\rho(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right)\psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x})$, $\rho(\boldsymbol{x}) = \sum \int \psi(x, x_i, x_n)\mathrm{d}^3x_i \mathrm{d}^3x_N \frac{3\hbar\omega}{2}$

28.06.

wissen schon:

$$H_{N,Z} = \sum_j^N \frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m} - \sum_j^N \frac{z_e^2}{|\boldsymbol{x}_j|} + e^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|}$$

dazu kommt noch:

- Berücksichtigung des Spins & Pauliprinzip

- relativistische Korrekturen
- Spin-Bahn-Kopplung
- Feinstruktur:
  - $\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{L} \frac{dV}{dr}$
  - $\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j \cdot$ Spin-Bahn-Kopplung
- elektrische Felder
- magnetische Felder

Kann dann Bearbeiten:

$$\sqrt{c^2 \boldsymbol{p}^2 + m^2 c^4} = mc^2 \left(1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^2 c^2} - O\left(\frac{\left(\boldsymbol{p}^2\right)^2}{c^4} \right) \right)$$

verwende da aber besser gleich Dirac-Gleichung oder überhaupt relativistische Feldgleichungen

mit Spin (aber ohne relativistische Korr.) komme ich zu Pauli-Gleichung

$$H_{Pauli} = \sum_j \frac{\left(\boldsymbol{\sigma}_j \left(\boldsymbol{p}_i - e\boldsymbol{A}_j\right)\right)^2}{2m} + V(\ldots)$$

kann auch Moleküle basteln, indem ich einfach Gleichungen zweier Atome addiere (und schaue, was passiert)

damit Vorstellungen wie Van-der-Waals-Kraft unnötig (aber PDGL-Systeme sehr kompliziert)

5 Abschlussbemerkungen

Ein Formalismus ist noch keine "Theorie", es Bedarf einer Interpretation

Schrödinger Wellenfunktion ist nicht messbar

QM widerspricht klassischem Determinismus: was heißt das?

Bem.:

$$\frac{1}{2} \langle \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}) \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{b}) | \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \rangle = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \cos(\alpha - \beta)$$

gibt es Hidden-Variables? wurde heiß diskutiert von Neumann, Bohm[6], Bell (1966)

Beweis, dass QM tatsächlich anders als KM aus

Clausner-Horn-Shimoni-Holt-Ungleichung

[6] sehr kurios, Bohm'sche Quantenmechanik vereinigt QM mit klassischer Trajektorie so, dass Ergebnisse der QM herauskommen

Seien $\xi_i(\lambda)$ und $\eta_j(\lambda)$ stochastische Variable, $i, j = 1, 2$

$$E_{ij} = E(\xi_i, \eta_j) = \int d\rho(\lambda)\xi_i(\lambda)\eta_j(\lambda)$$

$$|\xi_i(\lambda)| \leq 1 \qquad |\eta_j(\lambda)| \leq 1$$

Beh.:

$$|E_{11} - E_{12}| + |E_{21} + E_{22}| \leq 2$$

$$E_{11} - E_{12} = \int \mathrm{d}\rho \left\{ (\xi_1\eta_1)\,(1 \pm \xi_2\eta_2) - \left(\xi_1\eta_2 \left(1 \pm \xi_2 \underbrace{\eta_1}_{*} \right) \right) \right\}$$

$$|E_{11} - E_{12}| \leq 2 \pm (E_{22} + E_{21})$$

*: falls $|x| \leq 2 \pm y \Rightarrow |x| + |y| \leq 2$

daher gilt das vorige

liegt so eine Verteilung vor, dann gilt in der QM

$$|\cos(\alpha_1 - \beta_1) - \cos(\alpha_1 - \beta_2)| + |\cos(\alpha_2 - \beta_1) - \cos(\alpha_2 - \beta_2)| \leq 2$$

wählen $\alpha_1 = \frac{\pi}{2}$, $\beta_1 = \frac{\pi}{4}$, $\alpha_2 = 0$, $\beta_2 = -\frac{\pi}{4}$

damit:

$$\left| \underbrace{\cos(\alpha_1 - \beta_1)}_{\frac{\sqrt{2}}{2}} - \underbrace{\cos(\alpha_1 - \beta_2)}_{\frac{\sqrt{2}}{2}} \right| + \left| \underbrace{\cos(\alpha_2 - \beta_1)}_{\frac{\sqrt{2}}{2}} + \underbrace{\cos(\alpha_2 - \beta_2)}_{\frac{\sqrt{2}}{2}} \right| \leq 2$$

Annahme: Linearität des Erwartungswerts

es gibt also keine Hidden-Variables

Interpretation:

Einstein-Schrödinger: "Gott würfelt nicht", Katze, ERP

Heisenberg-Bohr: nur beobachtbare Größen, Kopenhagener Interpretation, Messung: Beobachter stört, Unschärfe - verborgene Parameter?, Wellenpaket wird reduziert

weitere lustige Fragen: reduktion des Wellenpakets im Gehirn?, Wellenfunktion des Universums

Interpretation von Everett & Wheeler: Many-Worlds-Theory

2 Grundpfeiler der modernen Physik:

- relativistische QM (Quantenfeldtheorie): Materie

- allgemeine Relativitätstheorie: Raum-Zeit

und beide widersprechen einander