

Quantenmechanik I

Zusammenfassung/Übersicht

erstellt von Tizian Römer

basierend auf der Vorlesung
Moderne Theoretische Physik 1 (Theo D)
von Prof. Dr. Jörg Schmalian
aus dem Sommersemester 2015
am Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Ich veröffentliche diese *Zusammenfassung/Übersicht* inklusive
der Grafiken unter der Creative-Commons-Lizenz
[CC BY-SA 4.0.](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/)

Zusammengefasst ist es jedem erlaubt, dieses Dokument (oder
Teile daraus) zu beliebigen Zwecken zu verbreiten, solange der
Name des Urhebers genannt wird.

Kontakt via E-Mail: tiroemer@yahoo.de

Inhaltsverzeichnis

1	Die Schrödinger-Gleichung	2
1.1	Herleitung für ein freies Teilchen	2
1.2	Erwartungswerte	2
1.3	Operatoren	2
1.4	Zeitabhängigkeit von Observablen	2
1.5	Kommutator	2
1.6	Ehrenfest-Theorem	2
1.7	Stationäre Schrödinger-Gleichung	2
1.8	Wahrscheinlichkeitsstrom	2
2	Messung, Unschärfe, Impulsdarstellung	3
2.1	Hermitesche Operatoren	3
2.2	Messung und Unschärfe	3
2.3	Heisenbergsche Unschärferelation	3
2.4	Matrizendarstellung der Quantenmechanik	3
2.5	Impulsdarstellung	3
2.6	Operatoren in Impulsdarstellung	3
3	Harmonischer Oszillator	4
3.1	Herleitung 1	4
3.2	Lösung des Harmonischen Oszillators (Übersicht)	4
3.3	Herleitung 2	4
3.4	Hermitpolynome	4
4	Eindimensionale Probleme	5
4.1	Stufenpotential	5
4.2	Kastenpotential (Herleitung Skript S. 46)	5
4.3	Parität	5
4.4	Rechteckige Box	5
5	Drehimpuls	6
5.1	Teilchen auf Kreisbahn und Drehimpulsoperator	6
5.2	Rotationssymmetrie	6
5.3	Kommutatoralgebra	6
5.4	Drehimpuls und entartete Zustände	6
5.5	Eigenschaften von Drehimpulsoperatoren	6
5.6	Orbitaler Drehimpuls in Kugelkoordinaten	6
5.7	Bewegung auf Kreisbahn	7
5.8	Eigenfunktionen von Drehimpulsoperatoren	7
5.9	Kugelflächenfunktionen	7
5.10	Spin	7
6	Teilchen im Magnetfeld	8
6.1	Spin im Magnetfeld ohne Orstabhängigkeit	8
6.2	Teilchen im äußeren EM-Feld	8
6.3	Landau-Niveaus	8
6.4	Landau-Niveaus mit Spin	8
6.5	Wahl des Vektorpotentials für konstantes B-Feld	8
6.6	Hamiltonoperator mit Spin und Bahndrehimpuls	8
6.7	Magnetische Monopole	9
6.8	Aharonov-Bohm-Effekt	9
7	Bilder in der Quantenmechanik	10
7.1	Heisenbergbild: Zeitabhängige Operatoren	10
7.2	Zeitentwicklungsoperator	10
7.3	Heisenbergsche Bewegungsgleichung	10
7.4	Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)	10
8	Zentralpotential	11
8.1	Teilchen im Zentralpotential	11
8.2	Coulomb-Potential, Wasserstoffatom	11
8.3	Lösung des Wasserstoffproblem (Übersicht)	11
9	Störungstheorie (zeitunabh.)	12
9.1	Prinzip	12
9.2	Nicht-entartete Störungstheorie: Erste Ordnung	12
9.3	Nicht-entartete Störungstheorie: Zweite Ordnung	12
9.4	Entartete Störungstheorie	12
10	Variationsprinzip und Pfadintegrale	13
10.1	Variationsprinzip	13
10.2	Pfadintegrale in der Quantenmechanik	13
10.3	Klassischer Pfad und Quantenfluktuationen	13
10.4	Pfadintegral eines freien Teilchens	14

1 Die Schrödinger-Gleichung

1.1 Herleitung für ein freies Teilchen

de Broglie: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$
 nicht-relativistische Energie: $E = p^2/2m$
 Annahme: Wellengleichung der Form

$$a \frac{\partial^n \psi}{\partial t^n} = b \frac{\partial^m \psi}{\partial x^m}$$

Lösung sollte Welle sein, also $\Psi \sim e^{i(kx - \omega t)}$:

$$\Rightarrow a(-i\omega)^n = b(ik)^m \Leftrightarrow a \left(-i \frac{\hbar k^2}{2m}\right)^n = b(ik)^m$$

$$\Rightarrow m = 2n$$

Einfachste Wahl: $n = 1, m = 2$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

1.2 Erwartungswerte

$\langle \vec{r} \rangle = \int d\vec{r}^3 \vec{r} \psi^* \psi$ (1) Produktregel, Schrödinger-Gleichung eingesetzt

$\langle \vec{v} \rangle = \frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \int d\vec{r}^3 \vec{r} \frac{d}{dt} \psi^* \psi$ (2) zweimal PI

$$\stackrel{(1)}{=} \frac{\hbar}{2mi} \int d\vec{r}^3 ((\nabla^2 \psi^*) \psi \vec{r} - \psi^* \vec{r} \nabla^2 \psi)$$

$$\stackrel{(2)}{=} \frac{\hbar}{2mi} \int d\vec{r}^3 (\psi^* \nabla^2 \psi \vec{r} - \psi^* \vec{r} \nabla^2 \psi)$$

$$\nabla^2 \psi \vec{r} \stackrel{\wedge}{=} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} x_\beta \psi = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial x_\beta}{\partial x_\alpha} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} x_\beta \right)$$

$$= \frac{\partial \psi}{\partial x_\beta} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_\alpha^2} x_\beta + \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial x_\beta}{\partial x_\alpha} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial x_\beta} + x_\beta \nabla^2 \psi = 2 \nabla \psi + \vec{r} \nabla^2 \psi$$

$$= \frac{\hbar}{mi} \int d\vec{r}^3 (\psi^* \nabla \psi)$$

$$\Rightarrow \vec{p} = m \langle \vec{v} \rangle = -i\hbar \int d\vec{r}^3 (\psi^* \nabla \psi)$$

1.3 Operatoren

Physikalische Observable O , dargestellt durch Operator \hat{O} :

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv \langle O \rangle = \int d\vec{r}^3 \psi^* \hat{O} \psi, \quad \hat{O} \psi = O \psi$$

Wichtige Operatoren:

$$\hat{r} = \vec{r} \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad \hat{V} = V(\vec{r}) \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

1.4 Zeitabhängigkeit von Observablen

$$i\hbar \frac{\partial \langle \hat{O} \rangle}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{r}^3 \psi^* \hat{O} \psi$$

$$= \int d\vec{r}^3 \left(i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{O} \psi + i\hbar \psi^* \hat{O} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)$$

$$= - \int d\vec{r}^3 \left((\hat{H} \psi^*) \hat{O} \psi - \psi^* \hat{O} \hat{H} \psi \right)$$

$$= - \int d\vec{r}^3 (\psi^* \hat{H} \hat{O} \psi - \psi^* \hat{O} \hat{H} \psi) = \int d\vec{r}^3 \psi^* [\hat{O}, \hat{H}] \psi$$

$$= \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle$$

Da $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ folgt $\langle \hat{H} \rangle = \text{const.}$, also Energieerhaltung

1.5 Kommutator

Für Operatoren A, B, C gilt:

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[A, B^n] = \sum_{m=0}^{n-1} B^m [A, B] B^{n-1-m}$$

Mit $[B, [A, B]] = 0$ folgen die beiden Formeln:

$$[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$$

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \text{ (Baker-Campbell-Hausdorff)}$$

Beispiele (Skript S. 12):

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{r}_\beta] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta} \quad [\hat{p}, \hat{T}] = [\hat{r}, \hat{V}] = 0$$

$$[\hat{r}, \hat{H}] = [\hat{r}, \hat{T}] = i\hbar \hat{p}/m \quad [\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \hat{V}] = -i\hbar \nabla V(\vec{r})$$

1.6 Ehrenfest-Theorem

Aus Abschnitt 1.4/1.5 folgt:

$$i\hbar \frac{\partial \langle \hat{p} \rangle}{\partial t} = \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \langle [\hat{p}, \hat{V}] \rangle = -i\hbar \langle \nabla V(\vec{r}) \rangle = i\hbar \langle \hat{F} \rangle$$

Im Erwartungswert gelten die klassischen Gleichungen:

$$\frac{\partial \langle \hat{p} \rangle}{\partial t} = \langle \hat{F} \rangle \quad m \frac{\partial \langle \hat{r} \rangle}{\partial t} = \langle \hat{p} \rangle$$

1.7 Stationäre Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad \frac{\partial V}{\partial t} = 0$$

Separationsansatz: $\psi(\vec{r}, t) := f(t) \varphi(\vec{r})$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar \frac{\partial f}{\partial t}}{f} = \frac{1}{\varphi} \hat{H} \varphi = \text{const.} = E$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = E f \Rightarrow f(t) = f_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \hat{H} \varphi = E \varphi \Rightarrow \text{Eigenwertgleichung}$$

Da die Zeitabhängigkeit nur ein Phasenfaktor ist, ist $\langle \hat{r} \rangle = \int d\vec{r}^3 \psi^* \vec{r} \psi$ zeitunabhängig. Aber: Bei mehreren Lösungen

$(\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n)$ ist auch $\psi = \sum_n a_n \varphi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$ eine Lösung und dann ist $\langle \hat{r} \rangle$ zeitabhängig.

1.8 Wahrscheinlichkeitsstrom

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho := \psi^* \psi$. Existiert $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j}$?

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi$$

$$= \psi^* \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi - \psi \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^* \stackrel{(1)}{=} -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = -\nabla \cdot \vec{j}$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Mit $\psi := A(r) e^{is(r)}$ folgt:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \psi^* \psi \nabla s$$

Beispiel: $\psi \sim e^{i\vec{k}\vec{r}} \Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar}{m} \psi^* \psi \vec{k} = \rho \vec{v}$ (mit $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$)

2 Messung, Unschärfe, Impulsdarstellung

2.1 Hermiteische Operatoren

\hat{O}^\dagger ist der hermitesche/adjungierte Operator zu \hat{O} , falls gilt:

$$\int dr^3 \psi^* \hat{O} \psi = \int dr^3 (\hat{O}^\dagger \psi)^* \psi$$

Operator \hat{O} heißt *hermitesch/selbstadjungiert* falls $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$.

Eigenwert-Gleichung: $\hat{O} \varphi_n = o_n \varphi_n$

$$\Rightarrow \int dr^3 \varphi_n^* \hat{O} \varphi_n = \begin{cases} o_n \int dr^3 \varphi_n^* \varphi_n \\ \int dr^3 (\hat{O} \varphi_n)^* \varphi_n = o_n^* \int dr^3 \varphi_n^* \varphi_n \end{cases}$$

$\Rightarrow o_n = o_n^* \Rightarrow$ EW von hermiteschen Operatoren sind reell
Betrachte

I: $\int dr^3 \varphi_m^* \hat{O} \varphi_n = o_n \int dr^3 \varphi_m^* \varphi_n$

II: $\int dr^3 \varphi_n^* \hat{O} \varphi_m = o_m \int dr^3 \varphi_n^* \varphi_m$

I - II*: $(o_n - o_m) \int \varphi_m^* \varphi_n = 0$

\Rightarrow unterschiedliche EF sind orthogonal

Für hermitesche Operatoren gilt auch Orthonormalität

($\int \varphi_m^* \varphi_n = \delta_{mn}$) und Vollständigkeit ($\sum_n \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$). Also lässt sich jede Funktion ψ entwickeln nach:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n a_n \varphi_n(\vec{r})$$

Damit: $\langle \hat{O} \rangle = \sum_{nm} a_n^* a_m \int dr^3 \varphi_n^* \hat{O} \varphi_m =$

$$\sum_{nm} a_n^* a_m o_m \underbrace{\int dr^3 \varphi_n^* \varphi_m}_{=\delta_{nm}} = \sum_n |a_n|^2 o_n \in \mathbb{R}$$

Ferner: $\int dr^3 \varphi_n^* \psi = \sum_m a_m \int dr^3 \varphi_n^* \varphi_m = a_n$

$|a_n|^2$ ist Wahrscheinlichkeit, dass ψ im EZ φ_n ist. Also muss

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \text{ gelten.}$$

2.2 Messung und Unschärfe

Abweichung einer Observablen vom Erwartungswert:

$$\Delta \hat{O} = \hat{O} - \langle \hat{O} \rangle \Rightarrow \langle \Delta \hat{O} \rangle = 0 \Rightarrow \text{langweilig}$$

$$\text{Daher: Varianz } \langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2 \geq 0$$

Scharfe Messung: $\langle \Delta \hat{O} \rangle = 0 \Leftrightarrow \Delta \hat{O} \psi = 0 \Leftrightarrow \hat{O} \psi = \langle \hat{O} \rangle \psi$

Seien O, P Operatoren mit gemeinsamen EF ψ_n :

$$O \psi_n = o_n \psi_n \quad P \psi_n = p_n \psi_n$$

$$\Rightarrow OP \psi_n = p_n O \psi_n = o_n p_n \psi_n = o_n P \psi_n = PO \psi_n$$

Also: O, P haben gemeinsame EF $\Leftrightarrow [O, P] = 0 \Leftrightarrow O, P$ können gleichzeitig scharf gemessen werden

2.3 Heisenbergsche Unschärferelation

Was wenn $[O, P] \neq 0$? Sei $iR := [O, P]$ (für O, P selbstadj.).

Mit Schwarzscher Ungleichung $\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle = |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$ mit $|\alpha\rangle = \Delta O |\psi\rangle, |\beta\rangle = \Delta P |\psi\rangle$ folgt:

$$\langle (\Delta O)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle \geq |\langle \Delta O \Delta P \rangle|^2 = |\langle [\Delta O, \Delta P] / 2 + \{ \Delta O, \Delta P \} / 2 \rangle|^2$$

$$= \frac{1}{4} |\langle iR + \{ \Delta O, \Delta P \} \rangle|^2 = \frac{1}{4} (\langle R \rangle^2 + \langle \{ \Delta O, \Delta P \} \rangle^2) \geq \frac{1}{4} \langle R \rangle^2$$

$$= \frac{1}{4} |\langle [O, P] \rangle|^2$$

$$\text{Also: } \langle (\Delta O)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [O, P] \rangle|^2$$

2.4 Matrizendarstellung der Quantenmechanik

$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ mit $|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$:

$\sum_n a_n \hat{H} |n\rangle = E \sum_n a_n |n\rangle$, multipliziere. mit $\langle m |$:

$\sum_n a_n \langle m | \hat{H} |n\rangle = E \sum_n a_n \langle m | n \rangle = E a_m$. Mit Matrix $\mathcal{H}_{mn} :=$

$\langle m | \hat{H} |n\rangle$ und Vektor $(\vec{a})_m = a_m$ und damit

$$\mathcal{H} \vec{a} = E \vec{a}$$

2.5 Impulsdarstellung

Für Impulsoperator \hat{p} gilt $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle, p \in \mathbb{R}$.

Entwicklung: $|\psi\rangle = \int dp a_p |p\rangle \Rightarrow a_p = \langle p | \psi \rangle = \psi(p)$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \int dp \psi(p) |p\rangle \Leftrightarrow \langle p' | \psi \rangle = \int dp \psi(p) \langle p' | p \rangle$$

$$\Rightarrow \langle p' | p \rangle = \delta(p - p')$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \int dp \langle p | \psi \rangle |p\rangle = \int dp |p\rangle \langle p | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \int dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{I}$$

Gleiches gilt genauso auch für $p = x$. Damit:

$$\Rightarrow \langle p | \psi \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle \Rightarrow \text{Umrechnung } \psi(p), \psi(x).$$

Was ist $\langle p | x \rangle$? Ortsdarstellung von $\hat{p} |p\rangle$ sollte gleich $\hat{p} \varphi(x)$ sein mit $\varphi(x) = \langle x | p \rangle$:

$$\langle x | \hat{p} | p \rangle = p \langle x | p \rangle \Leftrightarrow -i\hbar \nabla \langle x | p \rangle = p \langle x | p \rangle$$

$$\Rightarrow \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \Leftrightarrow \langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

Übergang zw. Orts-/Impulsraum via Fouriertransformation:

$$\psi(p) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x), \quad \psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \psi(p)$$

2.6 Operatoren in Impulsdarstellung

Impulsoperator:

$$\langle p | \hat{p} | \psi \rangle = p \langle p | \psi \rangle \Rightarrow \hat{p} = p$$

Ortsoperator:

$$\langle p | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx' \langle p | x' \rangle \langle x' | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx' \langle p | x' \rangle x' \langle x' | \psi \rangle$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dx' \langle p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{x} = i\hbar \nabla_p$$

Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \nabla V(\hat{x}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \nabla V(i\hbar \nabla_p)$$

3 Harmonischer Oszillator

3.1 Herleitung 1

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2 \text{ mit } k := m\omega^2:$$

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

$$\text{Dimensionslose Skalierung: } \xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \epsilon := \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\Rightarrow H\psi = \left(-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{m\omega^2}{2}x^2\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\epsilon\psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\epsilon - \xi^2)\psi = 0$$

Betrachte zunächst $\xi \gg \max(\epsilon, 1)$:

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{d\xi} \left(\left(\frac{d\psi}{d\xi} \right)^2 - \xi^2\psi^2 \right) = 2\xi\psi^2 \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0 \quad \left| \cdot \frac{d\psi}{d\xi} \right.$$

$$\Leftrightarrow \left(\left(\frac{d\psi}{d\xi} \right)^2 - \xi^2\psi^2 \right) = c \Leftrightarrow \frac{d\psi}{d\xi} = \pm \sqrt{c + \xi^2\psi^2}$$

Mit $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi = 0$ und $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi' = 0$ folgt $c = 0$. Also:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \pm \xi\psi \Rightarrow \psi \sim e^{\pm \frac{\xi^2}{2}} \text{ (+ ist nicht möglich)}$$

Also haben wir $\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2}$. Einsetzen ergibt:

$$h'' - 2\xi h' + (\epsilon - 1)h = 0$$

$$\text{Potenzreihenansatz: } h(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

$$\Rightarrow h' = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n \xi^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1} (n+1) \xi^n$$

$$\Rightarrow h'' = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1) \xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2} (n+2)(n+1) \xi^n$$

$$\Rightarrow a_{n+2} (n+2)(n+1) - 2a_n n + (\epsilon - 1)a_n = 0$$

$$\Leftrightarrow a_{n+2} = \frac{(2n+1-\epsilon)}{(n+2)(n+1)} a_n$$

Für große n : $a_{n+2} \rightarrow \frac{2}{n} a_n$, das entspricht e^{ξ^2} , also $\psi \approx e^{\xi^2/2}$ und das divergiert. Damit ψ nicht divergiert, muss die Reihe abbrechen: Wähle $\epsilon = 2n_0 + 1 \Leftrightarrow E = \hbar\omega(n_0 + 1/2)$, dann bricht die Reihe bei n_0 ab. Es muss dann noch gelten:

n_0 gerade $\Rightarrow a_1 = 0$
 n_0 ungerade $\Rightarrow a_0 = 0$
 \Rightarrow nur symmetrische oder antisymmetrische Lösungen
 Die Rekursionsrelation entspricht den Hermitepolynomen

$$H_{n_0}(\xi) e^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^{n_0} e^{-\xi^2/2}$$

$$\Rightarrow \psi_n(\xi) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

n_0 gerade $\Rightarrow a_1 = 0$

n_0 ungerade $\Rightarrow a_0 = 0$

\Rightarrow nur symmetrische oder antisymmetrische Lösungen

Die Rekursionsrelation entspricht den Hermitepolynomen

$$H_{n_0}(\xi) e^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^{n_0} e^{-\xi^2/2}$$

$$\Rightarrow \psi_n(\xi) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

3.2 Lösung des Harmonischen Oszillators (Übersicht)

Wellenfunktionen:

$$\psi_n(\xi) = c_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$\text{mit } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \text{ und } c_n = \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

$$n \in \mathbb{N}_0$$

Eigenenergien:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Konkrete Lösungen für $n \leq 2$:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

3.3 Herleitung 2

Definitionen:

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right) \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right) \quad \hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

$$\Rightarrow \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

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

Kommutator-Identitäten:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

EF von \hat{N} sind EF von \hat{H} . Mit $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$:

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N}|n\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle\right) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Was ergibt $\hat{a}|n\rangle, \hat{a}^\dagger|n\rangle$?

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\hat{N}|n\rangle + [\hat{N}, \hat{a}]|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{a}|n\rangle = c|n-1\rangle$$

$$c\hat{N}|n-1\rangle = c(n-1)|n-1\rangle$$

Bestimmung von c :

$$n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = c^* c \langle n-1|n-1\rangle = |c|^2$$

$$\Leftrightarrow c = \sqrt{n}$$

$$\langle n|\hat{a}^\dagger = c^* \langle n-1|$$

Endergebnis:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (\text{Herleitung genauso})$$

$$\Rightarrow |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle$$

Um mit \hat{a} keine Zustände mit $n < 0$ zu erzeugen, muss $n \in \mathbb{N}_0$ sein.

Grundzustand:

$\hat{a}|0\rangle = 0$, in Ortsdarstellung:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \psi_0(\xi) = 0 \Rightarrow \psi_0(\xi) \sim e^{-\xi^2/2}$$

$$\Rightarrow \psi_n(\xi) \sim \hat{a}^{\dagger n} \psi_0(\xi) = \hat{a}^{\dagger n} e^{-\xi^2/2} \sim \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} = H_n e^{-\xi^2/2}$$

3.4 Hermitpolynome

$$H_n(z) = e^{\frac{z^2}{2}} \left(z - \frac{d}{dz}\right)^n e^{-\frac{z^2}{2}} = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$$

Eigenschaften:

$$\rightarrow e^{-t^2+2zt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(z)$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial z} H_n(z) = 2nH_{n-1}(z)$$

$$\rightarrow H_{n+1}(z) = 2zH_n(z) - 2nH_{n-1}(z)$$

$$\rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z\frac{\partial}{\partial z} + 2n\right) H_n(z) = 0$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} H_n(z) H_m(z) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

Konkrete Hermitpolynome für $n \leq 4$:

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = -2 + 4\xi^2;$$

$$H_3(\xi) = -12\xi + 8\xi^3; \quad H_4(\xi) = 12 + 48\xi^2 + 16\xi^4$$

4 Eindimensionale Probleme

4.1 Stufenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

$x < 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \psi(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{=\psi_{\rightarrow}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{=\psi_{\leftarrow}}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Wahrscheinlichkeitsstrom:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \Rightarrow \begin{aligned} j_{\rightarrow} &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \\ j_{\leftarrow} &= -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 \end{aligned}$$

Reflexionskoeffizient: $R = \left| \frac{j_{\leftarrow}}{j_{\rightarrow}} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2$

$x > 0, E > V_0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0)\psi \Rightarrow \psi(x) = \underbrace{C'e^{ik'x}}_{=\psi'_{\rightarrow}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow j'_{\rightarrow} = \frac{\hbar k'}{m} |C'|^2$$

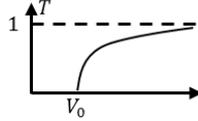
Transmissionskoeffizient: $T = \left| \frac{j'_{\rightarrow}}{j_{\rightarrow}} \right| = \frac{k'}{k} \left| \frac{C'}{A} \right|^2 = 1 - R$

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \Rightarrow A + B = C'$$

$$\psi'(0^-) = \psi'(0^+) \Rightarrow k(A - B) = k'C'$$

$$\Rightarrow \frac{C'}{A} = \frac{2}{1+k'/k} \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{1-k'/k}{1+k'/k}$$

$$\Rightarrow T = \frac{(4k')/k}{(1+k'/k)^2} = \frac{4\sqrt{1-V_0/E}}{1+\sqrt{1-V_0/E}}$$



$x > 0, E < V_0$:

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \Rightarrow A + B = C$$

$$\psi'(0^-) = \psi'(0^+) \Rightarrow ik(A - B) = -\kappa C$$

$$\Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{1-i\kappa/k}{1+i\kappa/k} = \frac{z^*}{z} = e^{-2i\phi} \quad |z = re^{i\phi}, \tan \phi = \frac{\text{Im } z}{\text{Re } z} = \frac{\kappa}{k}$$

$$\Rightarrow \psi(x < 0) = A(e^{ikx} + e^{-i(kx+2\phi)})$$

$$\Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{2}{1+i\kappa/k} = \frac{2}{r} e^{-i\phi} = \frac{2}{1+\kappa^2/k^2} e^{-i\phi}$$

$$= \frac{2}{1+\tan^2 \phi} e^{-i\phi} = 2e^{-i\phi} \cos^2 \phi$$

$$\Rightarrow \psi(x > 0) = 2A \cos^2(\phi) e^{-i\phi} e^{-\kappa x}$$

4.2 Kastenpotential (Herleitung Skript S. 46)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -a \\ V_0, & -a \leq x \leq a \\ 0, & x > a \end{cases}$$

$E > V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, & -a \leq x \leq a \\ Fe^{ikx}, & x > a \end{cases} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k' &= \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

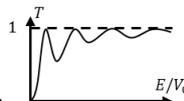
$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

Setze $A = 1$. Damit:

$$F = \frac{2e^{-2ika}}{\cos(2k'a) - \frac{i}{2} \frac{k^2+k'^2}{kk'} \sin(2k'a)}, \quad B = F \frac{i}{2} \frac{k'^2-k^2}{kk'} \sin(2k'a)$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4E(E-V_0)} \sin^2(2k'a)}$$

Es ist $T = 1$ für $2k'a = n\pi$, mit $k' = 2\pi/\lambda'$ folgt $(n\lambda')/2 = 2a$, wobei $2a$ gerade die Potentialbreite ist.



$E < V_0$:

Gleiches ψ mit $k' = i\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar = i\kappa$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4E(E-V_0)} \sinh^2(2\kappa a)} \approx 16 \frac{E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-4\kappa a}$$

(letzter Schritt für $\kappa a \gg 1$, dies ist der Tunneleffekt)

4.3 Parität

Definition Paritätsoperator: $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$

\hat{P} ist selbstadj.: $\int dx \psi^*(x) \hat{P}\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \varphi(-x)$

$$\begin{aligned} & \stackrel{x \rightarrow -x}{=} - \int_{\infty}^{-\infty} dx \psi^*(-x) \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(-x) \varphi(x) \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} dx (\hat{P}\psi(x))^* \varphi(x) \end{aligned}$$

Es gilt $[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow V(x) = V(-x)$:

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\psi(x) &= \hat{P} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(-x) \right) \hat{P}\psi(x) \stackrel{V(x)=V(-x)}{=} \hat{H}\hat{P}\psi(x) \end{aligned}$$

Wegen $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ haben \hat{P}, \hat{H} gemeinsame EF. Betrachte Eigenwertgleichung $\hat{P}\psi(x) = P\psi(x)$ und

$$\begin{aligned} \hat{P}^2\psi(x) &= \begin{cases} \hat{P}\psi(-x) = \psi(x) \\ P^2\psi(x) \end{cases} \Rightarrow P = \pm 1, \hat{P}^2 = \mathbb{I} \\ \Rightarrow \hat{P}\varphi(x) &= \begin{cases} \varphi(-x) \\ P\varphi(x) = \pm\varphi(x) \end{cases} \Rightarrow \text{gerade oder ungerade} \end{aligned}$$

4.4 Rechteckige Box

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < -a \\ 0, & -a \leq x \leq a \\ V_0, & x > a \end{cases}$$

$E > V_0$:

Betrachte Problem für $E > 0, V_0 = -W_0$:

$$\Rightarrow k' = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar^2$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4E(E+V_0)} \sin^2(2k'a)}$$

\Rightarrow Weiterhin existieren Fälle mit $R \neq 0$ oder $T = 1$

$E < V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x < -a \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & -a \leq x \leq a \\ Fe^{-\kappa x} & x > a \end{cases} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Parität $\Rightarrow \psi(-x) = \pm\psi(x) \Rightarrow F = \pm A, D = \pm C$

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & Ae^{\kappa x}, \\ 2C \cos(kx) \text{ oder } 2iC \sin(kx) & \\ Ae^{-\kappa x} & -Ae^{-\kappa x} \end{cases}$$

Nun genügen RB an rechter Grenze ($\tilde{C} := 2C$):

$$\begin{aligned} \psi(a^+) = \psi(a^-) & \left| \begin{array}{l} Ae^{-\kappa a} = \tilde{C} \cos(ka) \\ \kappa Ae^{-\kappa a} = \tilde{C} k \sin(ka) \end{array} \right. \left| \begin{array}{l} -Ae^{-\kappa a} = i\tilde{C} \sin(ka) \\ \kappa Ae^{-\kappa a} = ik\tilde{C} \cos(ka) \end{array} \right. \end{aligned}$$

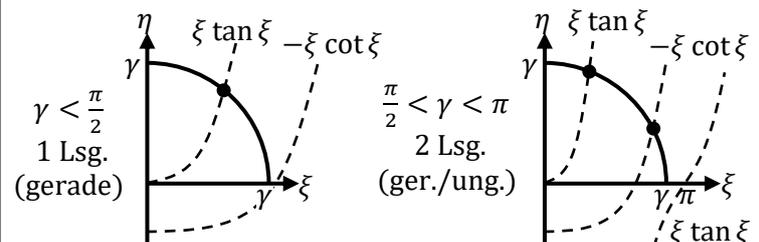
Mit $\eta = \kappa a, \xi = ka$: $\kappa = k \tan(\xi) \quad \kappa = -k \cot(\xi)$

$$\Rightarrow \eta = \xi \tan \xi \quad \eta = -\xi \cot \xi$$

$$\Rightarrow \eta^2 + \xi^2 = a^2(k^2 + \kappa^2) = V_0/\frac{\hbar^2}{2ma^2} =: \gamma^2$$

Für $\gamma = n\pi/2$ gibt es n_0 gebundene Zustände, wobei n_0 das kleinste n ist, das folgende Gleichung erfüllt:

$$V_0 < \left(\frac{n\pi}{2} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$



5 Drehimpuls

5.1 Teilchen auf Kreisbahn und Drehimpulsoperator

Lagrange-Fkt.: $L(\phi, \dot{\phi}) = \frac{m}{2} v^2 - V = \frac{mR^2}{2} \dot{\phi}^2 - V(\phi)$

Kann. Impuls: $p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mR^2 \dot{\phi}$

Hamilton-Fkt.: $H(\phi, p_\phi) = T + V = \frac{mR^2}{2} \dot{\phi}^2 + V(\phi)$
 $= \frac{p_\phi^2}{2mR^2} + V(\phi)$

Mit Operatoren $\hat{\phi} = \phi$, $\hat{p}_\phi = -i\hbar \nabla_\phi$ folgt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + V(\phi)$$

Drehimpulsoperator:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \hat{r} \times \nabla \quad \hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

5.2 Rotationssymmetrie

Infinitesimale Rotation: $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + d\vec{r} = \vec{r} + \overrightarrow{d\varphi} \times \vec{r}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi(\vec{r}) &\rightarrow \psi(\vec{r} + d\vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) + d\vec{r} \cdot \nabla \psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r}) + (\overrightarrow{d\varphi} \times \vec{r}) \cdot \nabla \psi(\vec{r}) = (\vec{r} \times \nabla) \cdot \overrightarrow{d\varphi} \psi(\vec{r}) \\ &= (1 + \overrightarrow{d\varphi} \cdot (\vec{r} \times \nabla)) \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

\Rightarrow Inf. Rotationsoperator: $\hat{R} = 1 + \overrightarrow{d\varphi} \cdot (\vec{r} \times \nabla) = 1 + \frac{i\vec{L} \cdot \overrightarrow{d\varphi}}{\hbar}$

Für endliche Drehwinkel $\vec{\omega}$: $\hat{R}_{\vec{\omega}} = e^{-\frac{i\vec{L} \cdot \vec{\omega}}{\hbar}}$

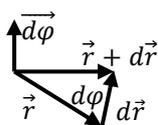
(vgl. Translationsop.: $T_{\vec{a}} = e^{-\frac{i\vec{p} \cdot \vec{a}}{\hbar}}$)

Also ist ein System invariant unter inf. Drehungen, falls $[\hat{R}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0$.

Falls dies gilt:

$\Rightarrow \frac{\partial \langle \hat{L} \rangle}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{L}, \hat{H}] \rangle = 0$, Drehimpulserhaltung

$\Rightarrow \vec{L}, E$ können gleichzeitig scharf gemessen werden



5.3 Kommutatoralgebra

$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$, mit $[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$ folgt:

$[L_x, L_y] = \epsilon_{1jk} \epsilon_{2lm} [x_j p_k, x_l p_m]$

$$\begin{aligned} &= \epsilon_{1jk} \epsilon_{2lm} \left(x_j \underbrace{[p_k, x_l p_m]}_{=-i\hbar \delta_{kl} p_m} + \underbrace{[x_j, x_l p_m]}_{=i\hbar \delta_{jm} p_l} p_k \right) \\ &= i\hbar (\epsilon_{1jk} \epsilon_{2lj} x_l p_k - \epsilon_{1jk} \epsilon_{2km} x_j p_m) = i\hbar (x_1 p_2 - x_2 p_1) = i\hbar L_z \\ \Rightarrow [L_i, L_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \end{aligned}$$

Betrachte: $[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2]$

1. Term: $[L_z, L_x^2] = L_z L_x^2 - L_x^2 L_z = L_x L_z L_x + i\hbar L_y L_x - (L_z L_x L_x - i\hbar L_x L_y) = i\hbar (L_y L_x + L_x L_y)$

2. Term genauso: $[L_z, L_y^2] = -i\hbar (L_y L_x + L_x L_y)$
 $\Rightarrow [L_z, L^2] = [L_x, L^2] = [L_y, L^2] = 0$

5.4 Drehimpuls und entartete Zustände

Betrachte Zustände mit nicht-entartetem Spektrum.

$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \hat{H}\psi^* = E\psi^*$$

ψ nicht-entartet $\Rightarrow \psi = \psi^* \Rightarrow \psi \in \mathbb{R}$

$\langle \hat{L}_j \rangle = \epsilon_{ijk} \langle \hat{x}_j \hat{p}_k \rangle = -i\hbar \epsilon_{ijk} \int dr^3 \psi^* x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi = i\gamma, \gamma \in \mathbb{R}$

(da $\psi \in \mathbb{R}$, abgesehen von globalen Phasenfaktoren)

Da \hat{L}_j hermitsch $\Rightarrow \langle \hat{L}_j \rangle \in \mathbb{R} \Rightarrow \langle \hat{L}_j \rangle = 0$

Betrachte 2 Operatoren O, P mit $[O, P] \neq 0$ sowie $[O, H] = [P, H] = 0$ und $P\psi = p\psi$ (ψ EZ von P).

$\Rightarrow O\psi \neq \alpha\psi, \quad HO\psi = OH\psi = EO\psi$

Damit sind ψ und $O\psi$ entartete Zustände

5.5 Eigenschaften von Drehimpulsoperatoren

\hat{J} sei (nur) definiert durch $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \Rightarrow [\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0$

$\hat{J}_\pm := \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \Rightarrow \hat{J}_\pm^\dagger = \hat{J}_\mp$

Eigenschaften:

$\Rightarrow [\hat{J}_\pm, \hat{J}^2] = 0 \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hbar \hat{J}_\pm \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z$

$\hat{J}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z = \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$

Eigenfunktionen:

Sei φ_m EF von $J_z: J_z \varphi_m = \hbar m \varphi_m$ mit Eigenwert $\hbar m \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow J_z J_+ \varphi_m = J_+ J_z \varphi_m + \hbar J_+ \varphi_m = \hbar(m+1) J_+ \varphi_m$

$\Rightarrow J_+ \varphi_m = c_m \varphi_{m+1}$, genauso: $J_- \varphi_m = c'_m \varphi_{m-1}$

$[J_z, \hat{J}^2] = 0 \Rightarrow \varphi_m$ ist auch EF von \hat{J}^2 :

$\hat{J}^2 \varphi_m = \hbar^2 k_m^2 \varphi_m$

$\hat{J}^2 \varphi_{m+1} = \left\{ c_m^{-1} J_+ \hat{J}^2 \varphi_m + c_m^{-1} J_+ \hbar^2 k_m^2 \varphi_m \right\} = \hbar^2 k_m^2 \varphi_{m+1} + \hbar^2 k_m^2 \varphi_{m+1}$

$\Rightarrow k_m^2 = k_{m+1}^2 \Rightarrow$ vermutlich $k_m \equiv k$ (von m unabhängig)

Wie viele EF gibt es?

$\langle m | \hat{J}^2 | m \rangle = \hbar^2 k^2 = \underbrace{\langle m | J_x^2 | m \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle m | J_y^2 | m \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle m | J_z^2 | m \rangle}_{=\hbar^2 m^2}$
 $\geq \hbar^2 m^2$

$\Rightarrow k^2 \geq m^2, k > 0 \Rightarrow -k \leq m \leq k$

$\Rightarrow J_+ \varphi_{m_{\max}} = 0, J_- \varphi_{m_{\min}} = 0$

$\hat{J}^2 = J_\mp J_\pm + J_z^2 \pm \hbar J_z$

Betrachte:

$\hat{J}^2 \varphi_{m_{\max}} = \hbar^2 k^2 \varphi_{m_{\max}} = \hbar^2 (m_{\max}^2 + m_{\max}) \varphi_{m_{\max}}$

$\hat{J}^2 \varphi_{m_{\min}} = \hbar^2 k^2 \varphi_{m_{\min}} = \hbar^2 (m_{\min}^2 - m_{\min}) \varphi_{m_{\min}}$

$\Rightarrow m_{\max}^2 + m_{\max} = m_{\min}^2 - m_{\min} \Leftrightarrow m_{\max} = -m_{\min}$

Sei nun $j := m_{\max}$, also folgt insgesamt:

$\hat{J}^2 \varphi_m = \hbar^2 j(j+1) \varphi_m \quad -j \leq m \leq j$

$J_z \varphi_m = \hbar m \varphi_m$

Damit m in 1er-Schritten von $-j$ bis j kommt, muss gelten:

$j = \begin{cases} \text{ganze Zahl} & (m=0 \text{ kommt vor}) \\ \frac{1}{2} \times \text{ungerade Zahl} & (m=0 \text{ kommt nicht vor}) \end{cases}$

Es war $J_\pm |m\rangle = c_m^{(\pm)} |m \pm 1\rangle$. Bestimmung von c_m :

$|c_m|^2 \langle m+1 | m+1 \rangle = \langle m | J_- J_+ | m \rangle = \langle m | \hat{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z | m \rangle$
 $= \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1))$

$\Rightarrow c_m = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$

$\Rightarrow c'_m = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$

\Rightarrow Für jedes j gibt es $2j+1$ Zustände

\Rightarrow Es gilt $c_{m_{\max}} = c_l = 0$ und $c'_{m_{\min}} = c_{-l} = 0$

5.6 Orbitaler Drehimpuls in Kugelkoordinaten

Drehimpuls in Kugelkoordinaten:

$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$

$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

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

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2$$

Hamiltonoperator in Kugelkoordinaten:

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(\hat{r})$

Für ein Zentralpotential $V(\vec{r}) = V(r)$ gilt offensichtlich $[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$ und damit Drehimpulserhaltung.

5.7 Bewegung auf Kreisbahn

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2mr^2} + V(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\varphi)$$

Wie im linearen 1D-Fall wird Teilchen auf Kreisbahn R gezwängt. Dann sollte gelten:

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

Für $V(\varphi) = 0$ folgt $\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Rightarrow m \in \mathbb{Z}$

Mit $\hat{L}_z \psi(\varphi) = \hbar m \psi(\varphi)$ folgt, dass für \hat{L}_z hier keine halbzahligen Eigenwerte erlaubt sind.

Vermutung: $\langle \Delta L | \Delta \varphi \rangle \geq \hbar/4$. L ist scharf messbar. Dann müsste $\Delta \varphi = \infty$ sein, aber $\Delta \varphi \leq 2\pi$. Auflösung des Paradoxons:

$\hat{\varphi} \psi(\varphi) = \varphi \psi(\varphi) \Rightarrow$ Lösungsraum wird verlassen, da $\varphi \psi(\varphi)$ nicht mehr 2π -periodisch. Der Winkel ist keine Observable! Er ist auch nicht eindeutig messbar, da $\varphi = \varphi_0$ und $\varphi = \varphi_0 + n \cdot 2\pi$ nicht unterscheidbar sind.

5.8 Eigenfunktionen von Drehimpulsoperatoren

Eigenwertgleichungen:

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

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

Mit $\hat{L}_z = -i\hbar \partial/\partial \varphi$ folgt:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) = im Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Separationsansatz führt auf $Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta)$.

Wegen $Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi + 2\pi) \Rightarrow m \in \mathbb{Z}$

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{L}_+ Y_{ll}(\theta, \varphi) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow e^{i\varphi} \left(i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial \theta} \right) e^{il\varphi} \Theta_{ll}(\theta) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Leftrightarrow \left(-l \cot \theta + \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta_{ll}(\theta) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta_{ll}(\theta) = l \cot \theta \Theta_{ll}(\theta)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\Theta_{ll}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta_{ll}(\theta) = l \cot \theta$$

$$\Leftrightarrow \ln \Theta_{ll}(\theta) = \ln \sin^l \theta + c$$

$$\Leftrightarrow \Theta_{ll}(\theta) = c \sin^l \theta$$

$$\Rightarrow Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\varphi} \quad (\text{nach Normierung})$$

analog:

$$\hat{L}_- Y_{l,-l}(\theta, \varphi) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow Y_{l,-l}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

Die weiteren Funktionen können erzeugt werden über

$$Y_{l,l-1} \sim \hat{L}_- Y_{ll} \quad Y_{l,l+1} \sim \hat{L}_+ Y_{l,-l} \quad \text{etc.}$$

5.9 Kugelflächenfunktionen

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

$$\text{mit } P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

(Legendre-Polynome)

Eigenschaften:

$$\int d\Omega Y_{lm}^* Y_{l'm'} = \langle lm | l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$P_l^m(x) = (-1)^{l-m} P_l^m(-x)$$

Paritätsoperator \hat{P} : $\hat{P} Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Y_{lm} sind vollständig:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad a_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^* f$$

Konkrete Kugelflächenfunktionen für $l \leq 1$:

$$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

5.10 Spin

Stern-Gerlach-Versuch: Es gibt weitere Quantenzahl mit zwei Zuständen. Die Abhängigkeit vom Magnetfeld legt nahe, dass es ein Drehimpuls ist, also ein Operator \hat{S} mit:

$$[s_i, s_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} s_k$$

Da nur zwei Zustände (Experiment): $j = 1/2$, also $|j, m\rangle = |1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle$ oder $|1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle$. Damit:

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \hbar/2 |\uparrow\rangle, \quad \hat{s}_z |\downarrow\rangle = -\hbar/2 |\downarrow\rangle$$

Da nur zwei Möglichkeiten: Matrizendarstellung einfacher.

$$\text{Spinor: } \psi(\vec{r}, m) \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ da dann } \hat{s}_z \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ -\psi_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\text{Mit } \psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ folgt } \hat{s}_z \psi_{\uparrow\downarrow} = \pm \hbar/2 \psi_{\uparrow\downarrow}$$

Es gilt $\hat{s}_+ |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m+1)} |s, m+1\rangle$, also:

$$\hat{s}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\hat{s}_+ |1/2, 1/2\rangle = 0$$

Matrix mit dieser Eigenschaft:

$$\hat{s}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{s}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{s}_- = \hat{s}_+^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit folgt auch:

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} (s_+ + s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i} (s_+ - s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen (vollständige Basis aller 2×2 -Matrizen):

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

Eigenschaften ($\sigma_0 =$ Einheitsmatrix):

$$\sigma_j \sigma_k = i \epsilon_{jkm} \sigma_m + \delta_{jk} \sigma_0, \quad (\vec{a} \vec{\sigma}) (\vec{b} \vec{\sigma}) = (\vec{a} \vec{b}) \sigma_0 + i (\vec{a} \times \vec{b}) \vec{\sigma}$$

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \epsilon_{jkm} \sigma_m \quad \{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\sigma_0 \delta_{jk}$$

6 Teilchen im Magnetfeld

6.1 Spin im Magnetfeld ohne Orstabhängigkeit

Der Spin ist proportional zum magnetischen Moment:

$$\vec{\mu} = -\gamma \vec{s} = -\mu_B \vec{\sigma}, \quad \gamma = \frac{e}{mc}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \text{ (Bohr-Magneton)}$$

Mit $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ liegt es nahe, dass $\hat{H} \rightarrow \hat{H} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \hat{H} + \gamma \vec{s} \cdot \vec{B}$.

Betrachtet man ein Teilchen nur in einem Punkt, ist \hat{p} und \hat{V} uninteressant und $\hat{H} = \gamma \vec{s} \cdot \vec{B}$ genügt. OBdA gilt $\vec{B} = B \vec{e}_z$:

$$\Rightarrow \hat{H} = \gamma B s_z = \mu_B B \sigma_z$$

$$\Rightarrow \text{Eigenwerte: } E_{1,2} = \pm \mu_B B = \pm \frac{e\hbar}{2mc} m_s B = m_s \hbar \omega_L$$

$$\text{Spinquantenzahl: } m_s = \pm \frac{1}{2}, \quad \text{Larmorfrequenz: } \omega_L$$

Damit gilt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow\downarrow}}{\partial t} = \pm \mu_B B \psi_{\uparrow\downarrow} \Rightarrow \psi_{\uparrow\downarrow}(t) = e^{\mp i \frac{\mu_B B}{\hbar} t} = e^{-i m_s \omega_L t}$$

$$\Rightarrow \langle s_x \rangle = \psi^\dagger s_x \psi = \frac{\hbar}{2} (\psi_\uparrow^*, \psi_\downarrow^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\psi_\uparrow^* \psi_\downarrow + \psi_\downarrow^* \psi_\uparrow) \quad \text{(Rabi-Oszillation)}$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\psi_\downarrow^*(0) \psi_\uparrow(0) e^{-i\omega_L t} + \psi_\uparrow^*(0) \psi_\downarrow(0) e^{i\omega_L t})$$

6.2 Teilchen im äußeren EM-Feld

Klassisch gilt für die Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi$$

$$\text{mit } \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \text{ und } \vec{E} = -\nabla\varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

$$\text{Eichtransformationen: } \vec{A} = \vec{A}' - \nabla f, \quad \varphi = \varphi' + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$

Damit die Schrödinger-Gl. $i\hbar \partial \psi / \partial t = H \psi$ unter Eichtrafo invariant bleibt, muss Wellenfkt. zu $\psi = \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f(\vec{r}, t)}$ angepasst werden. Damit:

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} + \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \psi' \right) e^{-i \frac{e}{\hbar c} f}$$

$$\Rightarrow H \psi = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' + \frac{e}{c} \nabla f \right)^2 + e\varphi' + \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \right) \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' + \frac{e}{c} \nabla f \right)^2 + e\varphi' \right) \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f}$$

$$\Rightarrow \vec{p} \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} = e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} \left(\vec{p} \psi' - \frac{e}{c} \psi' \nabla f \right)$$

$$\Rightarrow \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' + \frac{e}{c} \nabla f \right) \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} = \psi' e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 + e\varphi' \right) \psi'$$

Anpassung Wahrscheinlichkeitsstrom:

$$\vec{j} \rightarrow \vec{j}' = \frac{\hbar}{2im} (\psi'^* \nabla \psi' - \psi' \nabla \psi'^*) - \frac{e}{mc} \vec{A}' |\psi'|^2$$

6.3 Landau-Niveaus

Sei $\vec{B} = B \vec{e}_z$, wähle $\vec{A} = -yB \vec{e}_x$ (dann gilt $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$). Mit dieser Wahl:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\left(p_x + \frac{e}{c} yB \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right)$$

\Rightarrow unabhängig von $x, z \Rightarrow$ Translationsinv. \Rightarrow ebene Welle

$\Rightarrow \psi = e^{i(k_x x + k_z z)} u(y)$ Einsetzen:

$$\Rightarrow H \psi = \frac{1}{2m} \left(\left(\hbar k_x + \frac{e}{c} yB \right)^2 + p_y^2 + \hbar^2 k_z^2 \right) u(y) = E u(y)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 (y_0 + y)^2 \right) u(y) = \tilde{E} u(y)$$

$$\text{mit } \tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \text{ und } y_0 = \frac{\hbar k_x}{eB}$$

\Rightarrow Harmonisches Oszillator-Problem mit Kraftkonstante

$$\kappa = \frac{1}{m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \Rightarrow E = \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m},$$

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}} = \frac{eB}{mc} \Rightarrow \text{Larmor-Frequenz!}$$

6.4 Landau-Niveaus mit Spin

Mit $\gamma \vec{s} = e\hbar/2mc \vec{\sigma} = \mu_B \vec{\sigma}$ erneute $\vec{A} = -yB \vec{e}_x$:

$$H = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right) \sigma_0 + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad \text{(Pauli-Gleichung)}$$

$$= \left(\frac{1}{2m} \left(\left(p_x + \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) + e\varphi \right) \sigma_0 + \mu_B B \sigma_z$$

$$\Rightarrow \left(\left(\frac{1}{2m} \left(\left(p_x + \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) + e\varphi \right) \pm \mu_B B \right) \psi = E \psi$$

$$\Rightarrow E = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_L \left(n + m_s + \frac{1}{2} \right)$$

6.5 Wahl des Vektorpotentials für konstantes B-Feld

Wählt man $\vec{A} = (\vec{B} \times \vec{r})/2$ so für $\vec{B} = \text{const.} (!)$, geht das auf:

$$B_\alpha = (\nabla \times \vec{A})_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \partial_\beta A_\gamma = \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\gamma\mu\nu} \partial_\beta B_\mu x_\nu \quad \begin{matrix} B_\mu = \text{const.} \\ \partial_\beta x_\nu = \delta_{\beta\nu} \end{matrix}$$

$$= \frac{1}{2} (\delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu}) B_\mu \delta_{\beta\nu}$$

$$= \frac{1}{2} (\delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\beta} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\nu\mu}) B_\mu = \frac{1}{2} (3B_\alpha - B_\alpha) = B_\alpha$$

$$\text{Damit: } \nabla \cdot \vec{A} = \partial_\gamma A_\gamma = \partial_\gamma \frac{1}{2} \epsilon_{\gamma\mu\nu} B_\mu x_\nu = \frac{1}{2} \epsilon_{\gamma\mu\nu} B_\mu \delta_{\gamma\nu} = 0$$

\Rightarrow Coulomb-Eichung erfüllt

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{A}_\beta] \psi = (\hat{p}_\alpha \hat{A}_\beta - \hat{A}_\beta \hat{p}_\alpha) \psi$$

$$= (\hat{p}_\alpha \hat{A}_\beta) \psi + \hat{A}_\beta (\hat{p}_\alpha \psi) - \hat{A}_\beta \hat{p}_\alpha \psi = (\hat{p}_\alpha \hat{A}_\beta) \psi$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha [\hat{p}_\alpha, \hat{A}_\alpha] = \sum_\alpha (\hat{p}_\alpha \hat{A}_\alpha) = -i\hbar \nabla \cdot \vec{A} = 0 \quad (\Rightarrow \text{Coulomb-E.})$$

$$\Rightarrow \sum_\alpha [\hat{p}_\alpha, \hat{A}_\alpha] = \sum_\alpha (\hat{p}_\alpha \hat{A}_\alpha - \hat{A}_\alpha \hat{p}_\alpha) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$$

$$\Rightarrow \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{L}$$

6.6 Hamiltonoperator mit Spin und Bahndrehimpuls

$$\Rightarrow H = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\varphi \right) \sigma_0 + \frac{e}{mc} \vec{B} \cdot \vec{s}$$

$$= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e\varphi}{\underset{=V}{c}} \right) \sigma_0 + \frac{e}{mc} \left(\frac{1}{2} \vec{L} \cdot \vec{B} + \vec{s} \cdot \vec{B} \right) + \frac{e^2}{8mc^2} (\vec{B} \times \vec{r})^2$$

$$\Rightarrow \text{Gesamtdrehmoment: } \vec{\mu}_{\text{tot}} = -\frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{s})$$

Hier sieht man den Landé-Faktor $g = 2$.

6.7 Magnetische Monopole

Maxwell-Gleichungen unter Annahme magnetischer Monopole:

$$\nabla \vec{E} = 4\pi \rho_e \quad \nabla \vec{B} = 4\pi \rho_m$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - 4\pi \vec{j}_m \quad \nabla \times \vec{B} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + 4\pi \vec{j}_e$$

Magnetische Punktladung: $\rho_m = e_m \delta(\vec{r}) \Rightarrow \vec{B} = \frac{e_m}{r^2} \vec{e}_r$

$$\text{mit } \vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \left(\frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (A_\varphi \sin \theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \varphi} \right) \right) \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} r A_\varphi \right) \vec{e}_\theta + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r A_\theta - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\varphi$$

$$\text{folgt: } \vec{A} = A_\varphi \vec{e}_\varphi = \frac{e_m}{r} \frac{k - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_\varphi \quad k \in \mathbb{R}$$

Aber bisher galt $\nabla \vec{B} = \nabla(\nabla \times \vec{A}) = 0$. Jetzt nicht mehr, da \vec{A} Polstellen hat!

Z. B. für $k = 1$: Polstelle bei $\theta = \pi$ (also $(0,0,-z)$ für $z > 0$)

für $k = -1$: Polstelle bei $\theta = 0$ (also $(0,0,z)$ für $z > 0$)

Monopole ergeben Liniensingularitäten des Vektorpotentials, die im Monopol enden. Deren Lage kann durch Eichung von k variiert werden. Idee (Dirac):

$$z > 0: \vec{A}_I = \frac{e_m}{r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_\varphi \quad z < 0: \vec{A}_{II} = \frac{e_m}{r} \frac{-1 - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_\varphi$$

Sie sollten das gleiche \vec{B} -Feld ergeben, d.h.:

$$\vec{A}_I = \vec{A}_{II} + \nabla f = \vec{A}_{II} + \frac{2e_m}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi$$

Berechnung von f :

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi \Rightarrow f = 2e_m \varphi$$

Damit gilt für die beiden Wellenfunktionen:

$$\psi_{II} = \psi_I e^{-i \frac{e}{\hbar c} f} = \psi_I e^{-i \frac{2e e_m \varphi}{\hbar c}}$$

Aus der Forderung nach Eindeutigkeit folgt:

$$e^{-i \frac{2e e_m \varphi}{\hbar c}} \stackrel{!}{=} e^{-i \frac{2e e_m}{\hbar c} (\varphi + 2\pi)} \Leftrightarrow e^{-i \frac{4\pi e e_m}{\hbar c}} = 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{4\pi e e_m}{\hbar c} = n \cdot 2\pi \Leftrightarrow e = \frac{n \hbar c}{2e_m}$$

\Rightarrow in Anwesenheit einer magnetischen Ladung e_m ist e quantisiert!

6.8 Aharonov-Bohm-Effekt

\vec{B} -Feld nur direkt hinter Doppelspalt (etwa in Spule). Sonst überall $\vec{B} = 0$, aber $\vec{A} = \nabla \chi \neq 0$.

Denn für den Fluss gilt:

$$\Phi = \int_S d\vec{s} \vec{B} = \int_S d\vec{s} \nabla \times \vec{A} = \oint_{\partial S} d\vec{r} \vec{A} \neq 0 \Rightarrow \vec{A} \neq 0$$

Schrödinger-Gleichung:

$$\left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right) \psi = E\psi$$

$$\text{Lösung: } \psi = \psi_0 e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi}, \text{ wobei } \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + e\varphi \right) \psi_0 = E\psi_0$$

Beweis:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi = e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi} \left(\vec{p} \psi_0 + \psi_0 \frac{e}{c} \nabla \chi - \frac{e}{c} \vec{A} \psi_0 \right) = e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi} \vec{p} \psi_0$$

$$\text{Aus } \nabla \chi = \vec{A} \text{ folgt } \chi = \chi(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}')$$

Betrachte die beiden Wellenfunktionen im Raum hinter dem Spalt, die durch die Wellen der beiden Spalten verursacht werden:

$$\psi_I(\vec{r}) = \psi_{I0}(\vec{r}) e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi_I} \sim \psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_I} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \text{ (II äqu.)}$$

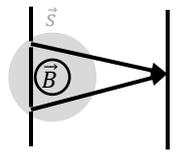
Gesamt Wellenfkt. am Schirm:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \psi_I + \psi_{II} \\ &= \psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_I} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \\ &\quad + \psi_{II0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_{II}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \\ &= \left(\psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_I - \gamma_{II}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) + \psi_{II0}(\vec{r}) \right) \\ &\quad \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_{II}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \\ &= \left(\psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \oint_{\gamma} d\vec{r}' \vec{A} \right) + \psi_{II0}(\vec{r}) \right) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_{II}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \\ &= \left(\psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \Phi \right) + \psi_{II0}(\vec{r}) \right) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \int_{\gamma_{II}} d\vec{r}' \vec{A}(\vec{r}') \right) \end{aligned}$$

Für die Intensität folgt:

$$|\psi|^2 = \left| \psi_{I0}(\vec{r}) \exp \left(i \frac{e}{\hbar c} \Phi \right) + \psi_{II0}(\vec{r}) \right|^2$$

Also gibt es eine zusätzliche Phase $e/\hbar c \Phi$ zwischen den beiden Teilwellen, die vom Fluss Φ abhängt und zu einer Gesamtverschiebung des Interferenzmusters führt.



7 Bilder in der Quantenmechanik

7.1 Heisenbergbild: Zeitabhängige Operatoren

Operatoren in Fkt. mit Taylorreihe mit $\hat{O}|n\rangle = o_n|n\rangle$:

$$f(\hat{O})|n\rangle = \sum_m a_m \hat{O}^m |n\rangle = \sum_m a_m o_n^m |n\rangle = f(o_n)|n\rangle$$

Betrachtet man in der SG $i\hbar \partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$ den Hamilton als Konstante, findet man die Lösung (mit \hat{H} -EF φ_n):

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \psi(\vec{r}, 0) = \sum_n a_n e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \varphi_n(\vec{r}, 0) \\ &= \sum_n a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(\vec{r}, 0)\end{aligned}$$

Dies ist eine Lsg. der SG:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= \sum_n a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \hat{H}\varphi_n(\vec{r}, 0) = \sum_n a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} E_n \varphi_n(\vec{r}, 0) \\ i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} &= i\hbar \sum_n a_n \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(\vec{r}, 0) = \sum_n a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} E_n \varphi_n(\vec{r}, 0)\end{aligned}$$

7.2 Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t') := e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t')}$$

$$\Rightarrow \psi(t) = U(t, t')\psi(t')$$

Eigenschaften:

$$U^{-1}(t, t') = U(t', t) \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (\text{unitär})$$

Betrachte $|\varphi\rangle = U|\varphi'\rangle$ sowie $|\psi\rangle = U|\psi'\rangle$:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi'|U^\dagger U|\psi'\rangle = \langle\varphi'|U^{-1}U|\psi'\rangle = \langle\varphi'|\psi'\rangle$$

(unitäre Operatoren sind normerhaltend)

$$\begin{aligned}\Rightarrow \langle\varphi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle &= \langle\varphi(0)|U^{-1}(t, 0)\hat{O}U(t, 0)|\psi(0)\rangle \\ &= \langle\varphi(0)|\hat{O}_H(t)|\psi(0)\rangle\end{aligned}$$

7.3 Heisenbergsche Bewegungsgleichung

Mit $\hat{O}_H = \hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U}$ folgt:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{O}_H}{dt} &= \frac{d\hat{U}^{-1}}{dt}\hat{O}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{O}\frac{d\hat{U}}{dt} + \hat{U}^{-1}\frac{d\hat{O}}{dt}\hat{U} \\ &= \frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{O}_H - \frac{i}{\hbar}\hat{O}_H\hat{H} + \frac{\partial\hat{O}_H}{\partial t}, \text{ wobei hier } \frac{\partial\hat{O}_H}{\partial t} := \hat{U}^{-1}\frac{d\hat{O}}{dt}\hat{U}\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{d\hat{O}_H}{dt} = [\hat{O}_H, \hat{H}] + i\hbar \frac{\partial\hat{O}_H}{\partial t}$$

\Rightarrow Heisenbergsche Bewegungsgleichung

7.4 Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

Betrachte $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(t)$, wobei $V(t)$ das Potential einer äußeren Wechselwirkung, z. B. Messung, darstellt. Dann:

$$\hat{O}_D := e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{O} e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}, \quad \psi_D := e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi \quad \text{mit } i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Damit gilt die Heisenbergsche Bewegungsgleichung:

$$i\hbar \frac{d\hat{O}_D}{dt} = [\hat{O}_D, \hat{H}_0] + i\hbar \frac{\partial\hat{O}_D}{\partial t} \quad \text{und außerdem:}$$

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial\psi_D}{\partial t} &= -\hat{H}_0\psi_D + i\hbar e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\hat{H}_0\psi_D + e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{H}\psi \\ &= -\hat{H}_0\psi_D + e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} (\hat{H}_0 + V)\psi = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} V \underbrace{e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}}_{=1} \psi \\ &= V_D(t)\psi_D(t)\end{aligned}$$

Das Dirac-Bild ist vor allem für die Quantenfeldtheorie von Bedeutung.

8 Zentralpotential

8.1 Teilchen im Zentralpotential

Hamilton zweier Teilchen:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Aufteilung in Schwerpunkts- \vec{R} und Relativkoordinaten \vec{r} :

$$\vec{R} := (m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2)/(m_1 + m_2), \quad \vec{r} := \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + V(\vec{r})$$

$$M := m_1 + m_2, \quad \frac{1}{m} := \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Hamilton lässt sich aufteilen, also auch Lösung:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi \Leftrightarrow \hat{H}_R\phi = E_R\phi, \quad \hat{H}_r\psi = E_r\psi$$

Ab jetzt: $\hat{H} := \hat{H}_r, E := E_r$

In Kugelkoordinaten (\hat{p}_r entspricht nur den Radialableitungen):

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}\right) + V(r)\right)\psi = E\psi$$

Da \vec{L}^2 nur Winkelanteile enthält, gilt $[\hat{H}, \vec{L}] = 0 \Rightarrow$ gem. EF

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

$$\Rightarrow \hat{H}\psi = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}\right) + V(r)\right)R(r) = ER(r)$$

Mit $V_{\text{eff}}(r) := \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r)$ (Zentrifugalkraft!) folgt:

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r)\right)R(r) = ER(r)$$

8.2 Coulomb-Potential, Wasserstoffatom

Nun: $V(r) = -e^2/r$. Mit $u(r) := rR(r)$ und $\hat{p}_r = \frac{\hbar}{ir}\frac{\partial}{\partial r}r$ folgt:

$$\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} - \frac{e^2}{r}\right)\frac{u}{r} = E\frac{u}{r}$$

Mit $\hat{p}_r^2 \frac{u}{r} = \hat{p}_r \frac{\hbar}{ir}\frac{\partial}{\partial r}u = \frac{\hbar}{ir}\frac{\partial}{\partial r}r \frac{\hbar}{ir}\frac{\partial}{\partial r}u = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}u$ folgt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^3} - \frac{e^2}{r}\right)u = E\frac{u}{r}$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m e^2}{\hbar^2 r} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)u = 0$$

Definiere folgende Größen: $\kappa^2 := -2mE/\hbar^2; \quad x := 2kr$

Mit bohrschem Radius:

$$a_0 = \hbar^2/(me^2) \Rightarrow R_0 := \hbar^2/(2ma_0^2) \approx 13,6 \text{ eV}$$

$$n^2 := -R_0/E = (m^2 e^4)/(\hbar^4 \kappa^2)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{n}{x} - \frac{1}{4}\right)u = 0$$

Für $x \rightarrow \infty$ gilt:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u}{4} \Rightarrow u(x) = e^{\pm \frac{x}{2}} = e^{-\frac{x}{2}} \quad (\text{darf nicht divergieren})$$

Für $x \rightarrow 0$ gilt:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{l(l+1)}{x^2}u \quad \text{Ansatz: } u(x) = x^q. \text{ Einsetzen:}$$

$$q(q-1)x^{q-2} = l(l+1)x^{q-2} \Rightarrow q = -l, l+1$$

$$\Rightarrow u(x) = Ax^{-l} + Bx^{l+1} = Bx^{l+1} \quad (\text{darf nicht divergieren})$$

Gesamtansatz:

$$u(x) = x^{l+1}e^{-\frac{x}{2}}F(x)$$

Ansatz: $F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$, einsetzen ergibt

$$\left(x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-n)\right)F(x) = 0$$

Mit $F'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)c_{k+1}x^k, \quad xF'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} kc_k x^k$

und $xF''(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)kc_{k+1}x^k$ folgt

$$c_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)}c_k$$

Für $k \rightarrow \infty$ folgt $c_{k+1} = c_k/k$, was gerade e^{-x} entspricht.

Darf nicht divergieren, also muss $k+l+1-n \stackrel{!}{=} 0$ sein. Daraus folgt $n \in \mathbb{N}^+$ und $l \leq n-1$.

8.3 Lösung des Wasserstoffproblem (Übersicht)

Wellenfunktionen:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Es ist $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}; l < n; -l \leq m \leq l$.

Mit $u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$ und $x := 2kr$ sowie $\kappa^2 := -2mE/\hbar^2$:

$$u_{nl}(x) = x^{l+1}e^{-x/2}F_{nl}(x)$$

Es ist $F_{nl}(x) = L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$ mit Laguerre-Polynomen $L_p^q(x)$:

$$L_p^q(x) = (-1)^q \frac{d^q}{dx^q} L_{p+q}(x); \quad L_p(x) = e^x \frac{d^p}{dx^p} x^p e^{-x}$$

$$\text{Bsp: } L_0^q(x) = 1; \quad L_1^q(x) = -x + q + 1$$

Eigenenergien:

$$E_n = -\frac{R_0}{n^2}$$

$$\text{Rydberg: } R_0 = \hbar^2/2ma_0^2$$

$$\text{Bohrscher Radius: } a_0 = \hbar^2/me^2$$

Konkrete Lösungen für $n \leq 2$ und ψ_{300} :

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} Y_{00}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi} = \text{const.}$$

$$\psi_{200}(\vec{r}) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/(2a_0)} Y_{00}(\theta, \varphi)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_{211}(\vec{r}) \\ \psi_{210}(\vec{r}) \\ \psi_{2,1,-1}(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2} a_0} e^{-r/(2a_0)} \begin{pmatrix} Y_{11}(\theta, \varphi) \\ Y_{10}(\theta, \varphi) \\ Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

$$\psi_{300}(\vec{r}) = \frac{2}{3(3a_0)^{3/2}} \left(3 - \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{9a_0^2}\right) e^{-r/(3a_0)} Y_{00}(\theta, \varphi)$$

9 Störungstheorie (zeitunabh.)

9.1 Prinzip

Sei ein Hamilton-Operator der Art $H = H_0 + V$, wobei die Eigenfunktionen und -Energien von H_0 bekannt sind:

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

V ist „Störungsterm“. Für kleine Störung betrachte

$H_\lambda = H_0 + \lambda V$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Ansatz: Taylorentwicklung um λ :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j \psi_n^{(j)}$$

Einsetzen in SG ergibt:

$$(H_0 + \lambda V)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots)$$

Terme nullter Ordnung: $H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$

Terme erster Ordnung:

$$\begin{aligned} \lambda H_0 \psi_n^{(1)} + \lambda V \psi_n^{(0)} &= \lambda E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + \lambda E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \\ \Leftrightarrow H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} &= E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \end{aligned}$$

Terme zweiter Ordnung (λ schon gekürzt):

$$H_0 \psi_n^{(2)} + V \psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}$$

Ohne Beweis: Wenn $\psi_n^{(1)}$ eine Lösung ist, dann auch

$\tilde{\psi}_n^{(1)} = \psi_n^{(1)} + a \psi_n^{(0)}$. Damit:

$$\langle \tilde{\psi}_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle + a \stackrel{!}{=} 0$$

Da a beliebig ist, kann $\tilde{\psi}_n^{(1)}$ immer so gewählt werden, dass

$\langle \tilde{\psi}_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0$ gilt. Im folgenden wird die Tilde nicht mehr geschrieben.

9.2 Nicht-entartete Störungstheorie: Erste Ordnung (also Spektrum von H_0 nicht entartet)

Da $\psi_n^{(0)}$ vollständig, kann man

$$\psi_n^{(1)} = \sum_l c_{nl} \psi_l^{(0)}$$

schreiben. Aus $\langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0$ folgt dann $c_{nn} = 0$. Einsetzen in

Gleichung erster Ordnung:

$$\sum_l c_{nl} \underbrace{H_0 \psi_l^{(0)}}_{= E_l^{(0)} \psi_l^{(0)}} + V \psi_n^{(0)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(0)} \sum_l c_{nl} \psi_l^{(0)}$$

Man integriere beide Seiten mit $\int \psi_m^{*(0)}$:

$$c_{nm} E_m^{(0)} + \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{nm} + c_{nm} E_n^{(0)}$$

Fall a: $n = m$:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle \\ \Rightarrow E_n &= E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

$$c_{nn} = 0$$

Fall b: $n \neq m$:

$$\begin{aligned} c_{nm} &= \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ \Rightarrow \psi_n^{(1)} &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \end{aligned}$$

Nicht-Entartung hier wichtig

9.3 Nicht-entartete Störungstheorie: Zweite Ordnung

$$\psi_n^{(2)} = \sum_l c_{nl} \psi_l^{(0)}$$

Einsetzen in Gleichung erster Ordnung:

$$\sum_l E_l^{(0)} d_{nl} \psi_l^{(0)} + V \psi_n^{(1)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(0)} \sum_l d_{nl} \psi_l^{(0)}$$

Man integriere beide Seiten mit $\int \psi_m^{*(0)}$:

$$E_m^{(0)} d_{nm} + \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(2)} \delta_{nm} + E_n^{(1)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(0)} d_{nm}$$

Fall a: $n = m$:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \Rightarrow E_n^{(2)} \geq 0 \end{aligned}$$

Fall b: $n \neq m$:

$$d_{nm} = \frac{E_n^{(1)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle - \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(1)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

d_{nm} folgt aus Normierung

9.4 Entartete Störungstheorie

(also Spektrum von H_0 entartet)

Entwickle wieder

$$\psi_n^{(1)} = \sum_l c_{nl} \psi_l^{(0)}$$

Gleichung erster Ordnung wie bei nicht-Entartung (nach Integration):

$$c_{nm} E_m^{(0)} + \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{nm} + c_{nm} E_n^{(0)}$$

Betrachte nun nur einen entarteten Unterraum des Hilbertraums, also eine Menge von $\psi_j^{(0)}$ mit $E_j^{(0)} = E^{(0)} \forall j$.

$$\Rightarrow \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{nm}$$

Scheinbarer Widerspruch, da linke Seite nicht zwingend null ist für $n \neq m$. Aber: Für entartete $\psi_j^{(0)}$ sind auch

Linearkombinationen $\tilde{\psi}_{j'}^{(0)} = \sum_j c_{j'j} \psi_j^{(0)}$ Eigenfunktionen von

H_0 . Man wähle nun die LK, für die $\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle$ nur

Diagonalelemente hat. Diese können unterschiedlich sein (Aufhebung der Entartung).

Letztlich sind $E_n^{(1)}$ die Eigenwerte der Matrix

$$M_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle.$$

10 Variationsprinzip und Pfadintegrale

10.1 Variationsprinzip

Sei $|\phi_m\rangle$ ein Satz von erratenen Wellenfunktionen mit $E_m = \langle \phi_m | H | \phi_m \rangle$. Seien $|\psi_n\rangle$ die tatsächlichen Wellenfkt:

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\phi_m\rangle &= \sum_n a_{nm} |\psi_n\rangle \\ \Rightarrow E_m &= \sum_{nn'} a_{nm}^* a_{n'm} \underbrace{\langle \psi_n | H | \psi_{n'} \rangle}_{=E_{n'}\delta_{nn'}} = \sum_n |a_{nm}|^2 E_n \\ &\geq \sum_n |a_{nm}|^2 E_0 = E_0 \quad \sum_n |a_{nm}|^2 = 1 \end{aligned}$$

Zur Berechnung sollte $|\phi_m\rangle$ von Variationsparametern λ_i abhängen: $|\phi_m(\lambda_i, \vec{r})\rangle$. Damit:

$$E_m(\lambda_i) = \langle \phi_m(\lambda_i, \vec{r}) | H | \phi_m(\lambda_i, \vec{r}) \rangle$$

Beste Wahl: $\min_{\lambda_i} E_m(\lambda_i)$

10.2 Pfadintegrale in der Quantenmechanik

Pfadintegral betrachtet quantenmechanische Bewegung von x_a (z. B. vor Spalt) nach x_b (z. B. Schirm) als Summe aller möglichen Pfade. Betrachte Zeitentwicklung:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi\rangle, \quad x(0) = x_a, \quad x(T) = x_b.$$

Gesucht ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen zu $t = T$ bei x_b ist:

$$\langle x_b | x(T) \rangle = \langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle$$

Es ist $H = \hat{T} + \hat{V}$, aber da i. Allg. $[\hat{T}, \hat{V}] \neq 0$ folgt

$$e^{-\frac{iHT}{\hbar}} | x_a \rangle \neq e^{-\frac{i\hat{T}T}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{V}T}{\hbar}} | x_a \rangle = e^{-\frac{iV(x_a)T}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{T}T}{\hbar}} | x_a \rangle$$

Aber für kleine Zeiten δt gilt:

$$e^{-\frac{iH\delta t}{\hbar}} = 1 - \frac{i}{\hbar} (\hat{T} + \hat{V}) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$e^{-\frac{i\hat{T}\delta t}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{V}\delta t}{\hbar}} = 1 - \frac{i}{\hbar} (\hat{T} + \hat{V}) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Also: $e^{-\frac{iH\delta t}{\hbar}} = e^{-\frac{i\hat{T}\delta t}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{V}\delta t}{\hbar}} + \mathcal{O}(\delta t^2)$

Teile T auf in $\delta t = T/n$. Damit:

$$e^{-\frac{iHT}{\hbar}} = \left(e^{-\frac{iH\delta t}{\hbar}} \right)^n = \left(e^{-\frac{iH\delta t}{\hbar}} \right)^n$$

Berechne nun:

$$\begin{aligned} \langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle &= \langle x_b | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right)^n | x_a \rangle \quad \text{Füge 1 ein: } \int dx_i |x_i\rangle \langle x_i| \\ &= \int dx_1 \dots dx_{n-1} \langle x_b | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right) | x_{n-1} \rangle \\ &\quad \cdot \langle x_{n-1} | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right) | x_{n-2} \rangle \dots \langle x_1 | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right) | x_a \rangle \\ &= \int \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \prod_{i=0}^{n-1} \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right) | x_i \rangle \quad \begin{matrix} x_0 := x_a \\ x_n := x_b \end{matrix} \end{aligned}$$

Betrachte nun:

$$\begin{aligned} \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right) | x_i \rangle &\approx \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{i\hat{T}\delta t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\hat{V}\delta t}{\hbar}\right) | x_i \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{i\hat{T}\delta t}{\hbar}\right) | x_i \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \int dp \langle x_{i+1} | \exp\left(-\frac{ip^2\delta t}{2m\hbar}\right) | p \rangle \langle p | x_i \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \int dp \exp\left(-\frac{ip^2\delta t}{2m\hbar}\right) \langle x_{i+1} | p \rangle \langle p | x_i \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \int dp \exp\left(-\frac{ip^2\delta t}{2m\hbar}\right) \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{ipx_{i+1}}{\hbar}} e^{-\frac{ipx_i}{\hbar}} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \int dp \exp\left(-\frac{ip^2\delta t}{2m\hbar} + \frac{ipx_{i+1}}{\hbar} - \frac{ipx_i}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{iV(x_i)\delta t}{\hbar}\right) \int dp \exp\left(-\frac{ip^2\delta t}{2m\hbar} + \frac{ipx_{i+1}}{\hbar} - \frac{ipx_i}{\hbar}\right) \\ &= \gamma \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} \delta t + p(x_i - x_{i+1}) \right)} \end{aligned}$$

Quadr. Ergänzung:
 $z := p + \frac{m}{\delta t} (x_i - x_{i+1})$

$$\begin{aligned} &= \gamma \int dp e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\delta t}{2m} \left(p + \frac{m}{\delta t} (x_i - x_{i+1}) \right)^2 - \frac{m}{2\delta t} (x_{i+1} - x_i)^2 \right)} \\ &= \gamma \int dz e^{-\frac{i\delta t}{\hbar} \frac{z^2}{2m}} e^{\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\delta t} \right)^2 \delta t} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\delta t} \right)^2 - V(x_i) \right) \delta t} \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt:

$$\begin{aligned} \langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle &= \int \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \prod_{i=0}^{n-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\delta t} \right)^2 - V(x_i) \right) \delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2) \right) \\ &\approx \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\delta t} \right)^2 - V(x_i) \right) \delta t} \quad \int Dx := \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \int \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \end{aligned}$$

Definiere nun $t_i := i \cdot \delta t$, sodass $x_i = x(t_i)$. Für den Grenzfall $\delta t \rightarrow 0$ gilt dann:

$$\sum_{i=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x(t_i + \delta t) - x(t_i)}{\delta t} \right)^2 - V(x(t_i)) \right) \delta t$$

$$\xrightarrow{\delta t \rightarrow 0} \int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x(t)) \right) = S[x(t)] \Rightarrow \text{Wirkung!}$$

Insgesamt:

$$\langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle = \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$$

10.3 Klassischer Pfad und Quantenfluktuationen

Aus dem Ergebnis

$$\langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle = \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}$$

sieht man, dass Pfade $x(t)$, für die die Wirkung stark fluktuiert, durch destruktive Interferenz klein werden. Dominiert wird das Pfadintegral also vom klassischen Weg $x_{cl}(t)$, welche stationäre Phasen haben. Betrachte hierzu

$$x(t) = x_{cl}(t) + \delta x(t)$$

mit $\delta x(0) = \delta x(T) = 0$. Betrachte bei $S[x] = T[x] - V[x]$:

$$\begin{aligned} T[x] &= \int_0^T dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \\ &= \int_0^T dt \frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 + \int_0^T dt \frac{m}{2} (\delta \dot{x})^2 + m \int_0^T dt \dot{x}_{cl} \delta \dot{x} \end{aligned}$$

Betrachte letzten Term:

$$\int_0^T dt \dot{x}_{cl} \delta \dot{x} = \underbrace{[\dot{x}_{cl} \delta x]_0^T}_{=0} - \int_0^T dt \ddot{x}_{cl} \delta x = \frac{1}{m} \int_0^T dt \frac{\partial V(x_{cl})}{\partial x_{cl}} \delta x$$

(Da im klassischen die Newtonschen Gleichungen gelten)

Betrachte außerdem:

$$\begin{aligned} V[x] &= \int_0^T dt V(x_{cl} + \delta x) \\ &\approx \int_0^T dt \left(V(x_{cl}) + \frac{\partial V(x_{cl})}{\partial x_{cl}} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(x_{cl})}{\partial x_{cl}^2} \delta x^2 \right) \end{aligned}$$

Damit folgt insgesamt:

$$\begin{aligned} S[x] &= T[x] - V[x] \\ &= \int_0^T dt \frac{m}{2} \dot{x}_{cl}^2 + \int_0^T dt \frac{m}{2} (\delta \dot{x})^2 + \int_0^T dt \frac{\partial V(x_{cl})}{\partial x_{cl}} \delta x \\ &\quad - \int_0^T dt \left(V(x_{cl}) + \frac{\partial V(x_{cl})}{\partial x_{cl}} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(x_{cl})}{\partial x_{cl}^2} \delta x^2 \right) \\ &= T[x_{cl}] - V[x_{cl}] + \int_0^T dt \frac{m}{2} (\delta \dot{x})^2 - \frac{1}{2} \int_0^T dt \frac{\partial^2 V(x_{cl})}{\partial x_{cl}^2} \delta x^2 \\ &= S_{cl}[x] + S_q[x] \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle = \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} = e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x]} \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} S_q[x]}$$

10.4 Pfadintegral eines freien Teilchens

Betrachte nun freies Teilchen, also $V = 0$:

$$\begin{aligned} \langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle &= \int Dx e^{i \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m(x_{k+1}-x_k)^2}{2\delta t} - v(x_k) \right) \delta t} \\ &= \int Dx \prod_{k=0}^{n-1} e^{\frac{im(x_{k+1}-x_k)^2}{2\hbar\delta t} \delta t} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \int \prod_{k=1}^{n-1} dx_k \prod_{k=0}^{n-1} e^{\frac{im}{2\hbar\delta t} (x_{k+1}-x_k)^2} \quad y_i := \sqrt{\frac{m}{2\hbar\delta t}} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \left(\frac{2\hbar\delta t}{m} \right)^{\frac{n-1}{2}} \int \prod_{k=1}^{n-1} dy_k \prod_{k=0}^{n-1} e^{i(y_{k+1}-y_k)^2} \end{aligned}$$

Definiere nun $z_k = y_k - y_{k-1}$, also $z_1 = y_1 - y_0$,
 $z_2 = y_2 - y_0 - z_1$, ..., $z_n = y_n - y_0 - \sum_{l=1}^{n-1} z_l$

Damit:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{i(y_1-y_0)^2} e^{i(y_2-y_1)^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 e^{iz_1^2} e^{i(y_2-y_0-z_1)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2i}} e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dy_2 e^{i(y_3-y_2)^2} e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2} &= \sqrt{\frac{2\pi}{3i}} e^{\frac{i}{2}(y_3-y_0)^2}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dy_l e^{i(y_{l+1}-y_l)^2} e^{\frac{i}{l}(y_l-y_0)^2} &= \sqrt{\frac{l\pi}{(l+1)i}} e^{\frac{i}{l+1}(y_{l+1}-y_0)^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= (i\pi)^{-\frac{n}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\delta t}} \prod_{k=1}^{n-1} \sqrt{\frac{k\pi}{(k+1)i}} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \sqrt{\frac{(n-1)!}{n!}} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar n \delta t}} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar n \delta t}} e^{i \frac{m}{2\hbar n \delta t} (x_b-x_a)^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} e^{i \frac{m}{2\hbar T} (x_b-x_a)^2} \end{aligned}$$

Definiere nun:

$$G(x_a, x_b, t) = \langle x_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{i \frac{m}{2\hbar t} (x_b-x_a)^2}$$

Leicht zeigt sich, dass

$$i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 G}{\partial x_a^2}$$

gilt. Beginnt man mit einer beliebigen Wellenfkt. $\psi(x, 0)$:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | \psi_a \rangle \\ &= \int dx_a \langle x | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | x_a \rangle \langle x_a | \psi_a \rangle = \int dx_a G(x, x_a, t) \psi(x_a, 0) \end{aligned}$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= i\hbar \int dx_a \frac{\partial G}{\partial t} \psi(x_a, 0) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx_a \frac{\partial^2 G}{\partial x_a^2} \psi(x_a, 0) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_a^2} \end{aligned}$$

Die so berechnete Wellenfkt. erfüllt also die Schrödinger-Gl.