

Planck's Vorlesung

Bestimmung der spektralen Energiedichte
 $u(\omega, T)$ des elektromagnetischen Feldes
im thermischen Gleichgewicht (Temp.:

$$V \cdot u(\omega, T) d\omega$$

ist die e.m. Energie im Volumen V
und im Frequenzbereich $(\omega, \omega + d\omega)$

- Eigenschwingungen sind harmonische Oszillatoren ($\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x}) f(t)$ mit $\ddot{f} + \omega_f^2 f = 0$)
- Anzahl ES mit Frequenzen $\leq \omega$

$$N(\omega) = \frac{V \omega^3}{3\pi^2 c^3} \quad \rightarrow \quad \frac{dN}{d\omega} = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3}$$

- Th. Gl. gew. stellt sich durch Kopplung an die Materie ein

Planck's Vorgehen

i) Materie \equiv unabh. harm. Osz. ("Resonatoren")

E_{ω_0} : Energie eines Reso. (Freq. ω_0)

U_{ω} : " einer ES (" ω)

Im th. Gl. gew: $\bar{U}_{\omega_0} = \bar{E}_{\omega_0}$ ✓

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{U}_{\omega}$$
 ✓

ii) Bestimme \bar{E}_w bei Temp. T
(und damit $u(w, T)$)

- Thermisches Gleichgewicht unter den Resonatoren bei der Temperatur $T \xrightarrow{*} \bar{E}_{\omega_0}$
- spektrale Energiedichte $u(\omega, T)$ der Feldenergie:

$$V \cdot u(\omega, T) d\omega = \bar{U}_{\omega} dN \quad \left| \begin{array}{l} = \text{Energie aller} \\ \text{Moden in } [\omega, \omega+d\omega] \end{array} \right.$$

$$\rightarrow u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{U}_{\omega}$$

- * W'keit, ein Hamiltonsches System bei Temperatur T mit Koordinaten p, q in $dpdq$ zu finden

$$w(p, q) dpdq = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z(\beta)} dpdq,$$

$$Z(\beta) = \int dpdq e^{-\beta H(p, q)}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Mittlere Energie

$$\bar{E} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta)$$

Plouck 14. Dez. 1900

Wir betrachten - und dies ist
der wesentlichste Punkt der
ganzen Berechnung - E als
zusammengesetzt aus einer ganz
bestimmten Anzahl endlicher Teile
und bedienen uns dazu der
Naturconstanten $h = 6,55 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec.}$

(E : Energie eines Resonators,
 $h = 2\pi h$)

Einstein 1905

Monochromatische Strahlung geringer
Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereichs
der Wienschen Strahlungsformel)
verhält sich in wärmetheoretischer
Beziehung so, wie sie aus voneinander
unabhängigen Energiequanten von
der Größe $h\nu$ besteht.

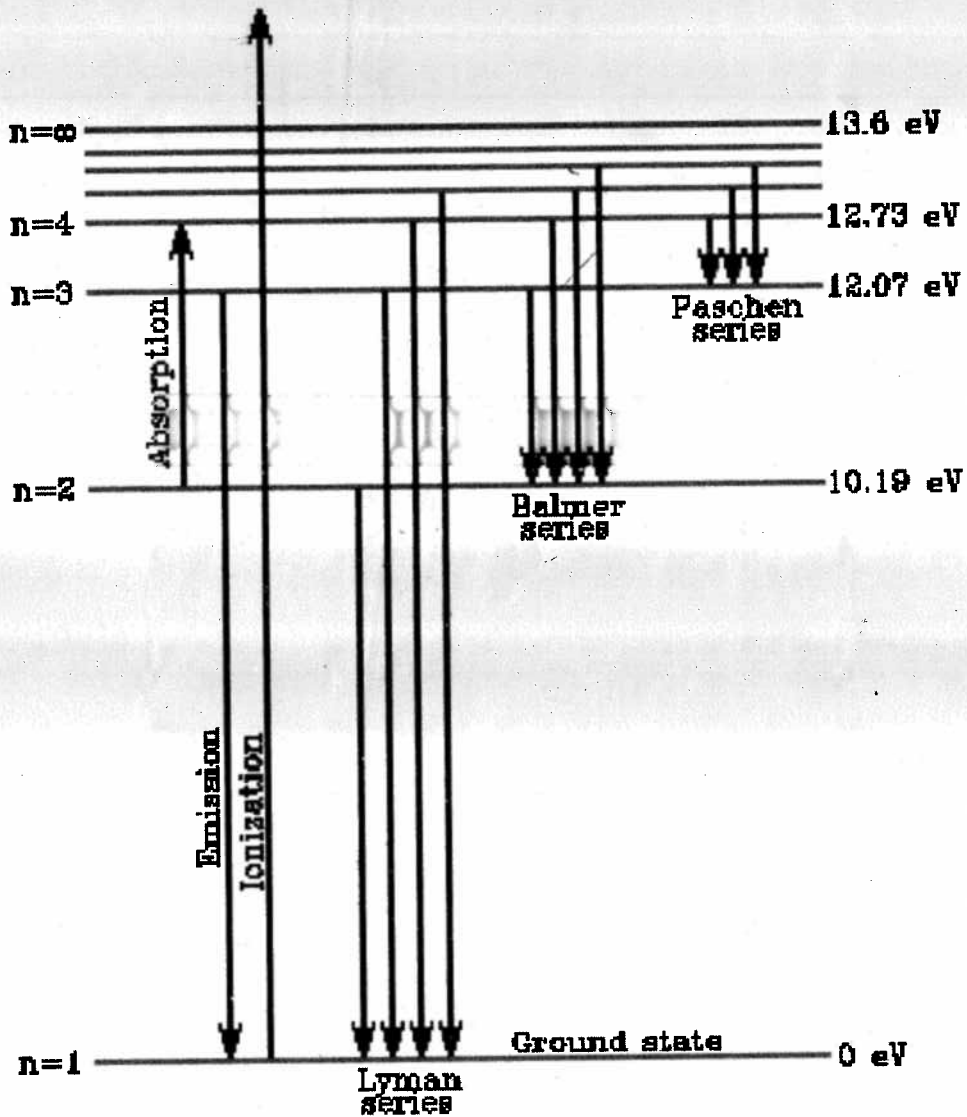
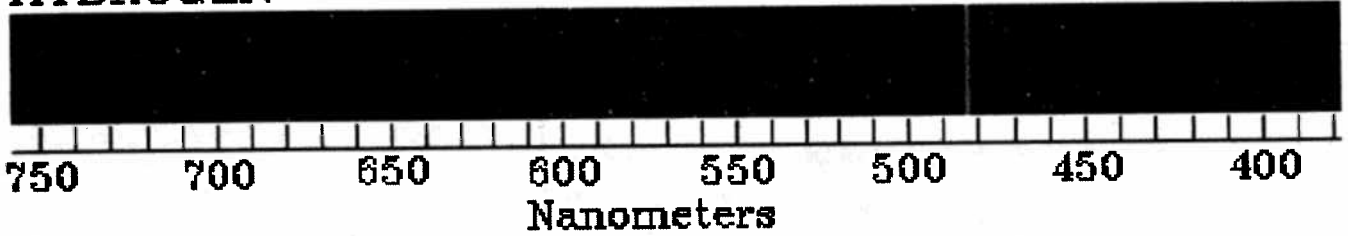
HYDROGEN

$n=3$

$n=4$

$n=5$

$n=6$



Atome zeigen diskrete Lichtemissionsspektren.

Frequenzen beim H-Atom:

$$\omega_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, m = 1, 2, \dots \\ n > m$$

(Balmer 1885)

Bohr 1913: 1) Das Atom kommt nur in Zuständen mit diskreten Energien E_n vor.

2) Übergänge $n \rightarrow m$, $E_m < E_n$ geschehen unter Emission eines Lichtquants, also eines der Frequenz

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m)$$

(auch $m \rightarrow n$ unter Absorption möglich)

$$\rightarrow E_n = -R_y \frac{1}{n^2} \quad (R_y = R \cdot \hbar)$$

Bohr - Rutherford Modell des H-Atoms

Elektron (Masse m , Ladung $-e$)

Kern (Masse M , " $+e$)

$M \gg m$. Zunächst $M = \infty$

Kreisbahnen, parametrisiert durch L

$$r = \frac{L^2}{me^2}, \quad \omega = \frac{me^4}{L^3}, \quad E = \frac{-me^4}{2L^2}$$

Nach $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$: $L \propto n$

Bohrs Quantifizierungsbedingung

$$L_n = \hbar n.$$

Beispiel: Das 2-Körperproblem:
 Relativbewegung in Polarkoordinaten

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + V(r)$$

Dann:

- Separationskonstanten $E, \alpha_\varphi, \alpha_\theta$

$$\alpha_\varphi = \vec{L} \cdot \vec{e}_3$$

$$\alpha_\theta^2 = \vec{L}^2$$

- $$\left. \begin{aligned} W_\varphi(\alpha) &= 2\pi \alpha_\varphi \\ W_\theta(\alpha) &= 2\pi (\alpha_\theta - \alpha_\varphi) \end{aligned} \right\} \alpha_\theta = \frac{1}{2\pi} (W_\varphi + W_\theta)$$
- $$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr$$

- Quantisierung ($W_i = 2\pi n_i \hbar$):

$$\vec{L} \cdot \vec{e}_3 = n_\varphi \cdot \hbar$$

$$\vec{L}^2 = \left[\frac{(n_\varphi + n_\theta) \hbar}{e} \right]^2 \quad (\text{da } \alpha_\theta = l \hbar)$$

$$E = E_{n_r, l}$$

$$\left\{ \begin{aligned} n_\varphi &\in \mathbb{Z} \\ n_\theta &= 0, 1, 2, \dots \\ n_r &= 1, 2, \dots \end{aligned} \right.$$

Quantisierung der Wirkung

Hamiltonsches System mit 1 Freiheitsgrad,
(q, p)

Gebundene Bahnen sind quantentheoretisch
zulässig, falls Wirkung quantisiert ist:

$$\oint p dq = 2\pi n h$$

↑
Integral über
Bahnkurve

mit $n = 0, (\pm)1, (\pm)2, \dots$ (Quantenzahl)
(\pm bei Rotationsbewegungen)

Bahnkurve ist topologisch ein Kreis
im Phasenraum \mathbb{R}^2

Hamiltonsches System mit f Freiheits-
 graden $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ ist vollständig
separabel, falls die zeitunabhängige
 Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}) = E$$

eine vollständig Lösung der Form

$$S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f) = \sum_{k=1}^f S_k(q_k, \alpha_1, \dots, \alpha_f)$$

besitzt.

- Separationskonstanten $\alpha = (\alpha_1 = E, \alpha_2, \dots, \alpha_f)$
 sind Erhaltungsgrößen
- Bewegung in den Koordinaten $(q_k, p_k) \in \mathbb{R}^2$
 findet auf dem Kreis

$$p_k = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha),$$

unabhängig von (q_j, p_j) , ($j \neq k$).

- Bewegung in den Koordinaten $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f) \in \mathbb{R}^{2f}$
 findet auf einem f -dimensionalen
 Torus statt, bestimmt durch $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_f)$

Quantisierungsbedingung: Zulässig sind
Tori falls

$$W_k(\alpha) := \oint \underbrace{p_k}_{=} dq_k = 2\pi n_k h$$
$$= \frac{\partial S_k}{\partial q_k} \quad (n_k = 0, (\pm)1, (\pm)2, \dots)$$

für alle $k=1, \dots, f$.

(n_1, \dots, n_f) bestimmt $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$, insb.

$$\alpha_1 = E_{n_1, \dots, n_f}$$

Umsetzung erfordert Berechnung der
Integrale W_k .

Emission und Absorption

- Materie besteht aus Molekülen
 - einheitslos derselben Sorte
 - Zustände n mit diskreten Energien E_n (Entartungen $E_n = E_m$, $n \neq m$ erlaubt)
 - kein konkretes Modell
- Jedes Molekül kann Übergänge machen:
 - Spontane Emission: $n \rightarrow m$, ($E_n > E_m$)

W'keit pro Zeiteinheit: A_{nm}

- induzierte Emission bzw. Absorption in Anwesenheit von Strahlung:
 $n \rightarrow m$ ($E_n > E_m$ bzw. $E_n < E_m$)

W'keit pro Zeiteinheit: $B_{nm} u(\omega_{nm})$

mit: $u(\omega)$: spektrale Energiedichte

$\omega_{nm} = \omega_{mn} > 0$: Frequenz, durch n, m bestimmt

- Beachte:

- A_{nm} , B_{nm} Eigenschaften des Moleküls
- $B_{nm} = 0$ für $E_n > E_m$ nicht a priori aus-

Doppelspalt - Experiment :

www.hitachi.com/rd/research/eu/doubleslit.html



Aus: The New Yorker Magazine

Teilchen mit klassischer Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

entspricht Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ mit Bewegungsgleichung

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

(Schrödinger - Gl.). Für Wellen fester Frequenz,

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar},$$

wird

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\vec{x})) \psi = 0.$$

Der Weg der Entdeckung:

$$\frac{\text{Wellenoptik}}{\text{Strahlenoptik}} = \frac{\text{Wellenmechanik}}{\text{Mechanik}}$$

↙
Fermat
Eikonalgleichung

↖
Euler-Maupertuis
Hamilton-Jacob.

Schrödinger - Gl. : $\psi = \psi(\vec{x}, t)$

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

Für Wellen fester Frequenz, $\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot e^{-iEt/\hbar}$:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(\vec{x})) \psi = 0$$

Der Weg zur Entdeckung:

- skalare Wellenoptik: Eine Lichtwelle fester Freq. $\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-i\omega t}$ ist Lsg. von

$$\Delta \psi + k^2 \psi = 0 \quad (k\vec{x}) = \omega \frac{n(\vec{x})}{c}$$

Zerlegung $\psi = A e^{iS}$

$$\rightarrow \begin{cases} \Delta A - A(\vec{\nabla} S)^2 + A k^2 = 0 \\ A \Delta S + 2\vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S = 0 \end{cases} \quad (*)$$

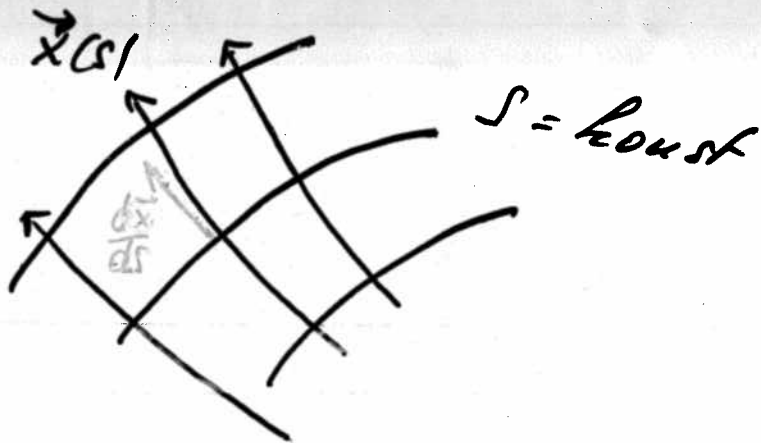
- Strahlenoptik ist gute Näherung in Gebieten, wo $A(\vec{x})$ wenig variiert über eine Wellenlänge $2\pi/k$:

$$\left| \frac{\Delta A}{A} \right| \ll k^2$$

Dort wird (*) zu

$$(\vec{\nabla} S)^2 = k^2$$

Eine Lösung $S(\vec{x})$ beschreibt Bündel von Strahlen als Orthogonaltrajektorien zu den Niveauflächen von S



$$\frac{d\vec{x}}{ds} = \frac{\vec{\nabla} S}{|\vec{\nabla} S|}$$

(s: Bogenlänge)

$$\vec{k} \equiv k \frac{d\vec{x}}{ds} = \vec{\nabla} S$$

Bewegungsgleichung der Wellenmechanik (Schrödinger-Gl.)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi :$$

liefert Zustand $\psi(\vec{x}, t)$ zur Zeit t bei gegebenem $\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, 0)$.

Statistische Deutung: normiere ψ , sodass

$$\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = 1$$

(und damit $\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = 1$); dann ist

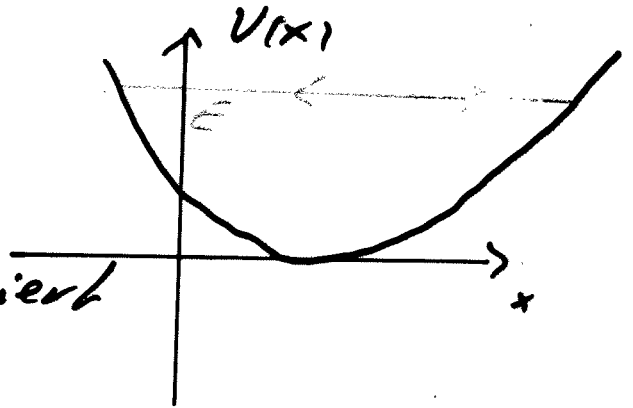
$$\int_{\Omega} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Teilchen (bei Messung seines Orts) in $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ befindet.

Matrizenmechanik

Hamiltonsches System : • klassisch

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$



Bahnkurven charakterisiert
durch E oder

$$n(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx \quad (20)$$

Schwingungsfrequenz

$$\omega(n) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn}$$

- quantentheoretisch zulässig (Sommerfeld),
falls

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

(Zustand)

- klassische Observablen $a(p, x)$ längs Bahn

$$a(t) = a(p(t), x(t)) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(n) e^{i\mu_n \omega(t)}$$

- quantenmechanische Observable:

Matrix

$$A = (A_{nn'} e^{i\omega_{nn'}t})$$

- $C = AB$ ist Matrixprodukt
(aus Ritz'schem Kombinationsprinzip)

- Quantifizierungsvorschrift mehrdeutig

($n \rightsquigarrow -n$)

$$H_{nn}(n) \rightarrow \begin{cases} \omega_{n, n-m} \\ \omega_{n+m, n} \end{cases}$$

$$A_{nn}(n) \rightarrow \begin{cases} A_{n, n-m} \\ A_{n+m, n} \end{cases}$$

- Realitätsbedingung

$$A_{n-m, n} = \overline{A_{n, n-m}}$$

$$A = A^*$$

Matrizenmechanik

Observablen: Matrizen $A(t) = (A_{nn'}(t))$

Bewegungsgl. (Heisenberg-Gl.)

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

mit

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

Insbesondere für Ort X , Impuls P

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar} [H, X], \quad \dot{P} = \frac{i}{\hbar} [H, P]$$

Rechnung führt auf

$$D := \frac{i}{\hbar} [P, X] = ?$$

• Heisenberg: $D_{nn} = 1$ *

• Born, Jordan; Dirac

$$D_{nn'} = 0 \quad (n \neq n') \quad **$$

* aus Uminterpretation der Sommerfeld-Bdgl.

** aus $\dot{D} = 0$, in Anlehnung an $\dot{d} = 0$
für $d = \{p, x\}$

Quantenmechanisches System

charakterisiert durch:

- einen Hilbertraum \mathcal{H}
- selbst-adjungierte Operatoren $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
($A = A^*$)
- [• einen ausgezeichneten Operator $H = H^*$
(Hamiltonoperator)]

mittels Zuordnungen

1) Zustände \rightarrow Vektoren $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ mit
 $\|\psi\| = 1$, bis auf $|\psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\psi\rangle$.

2) Ja/Nein-Observablen \rightarrow Orthogonale Projektoren
Eintreten eines Ereignisses
Ergebnis: 1/0

$$P = P^* = P^2$$

• W'keit des Ereignisses

$$\langle \psi | P | \psi \rangle$$

• Mögliche Ergebnisse

EW von $P: \lambda = 0, 1$

• Zustand mit deterministischem Ergebnis

EV von P

$$P|\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

3) Beliebige Observablen \rightarrow Selbst-adjungierte Operatoren

$$A = A^*$$

• Erwartungswert der Messung

$$\langle \psi | A | \psi \rangle$$

• Mögliche Messergebnisse

$$\lambda \in \sigma(A)$$

$$(\sigma(A) \supset \{ \text{EW von } A \})$$

$$\lambda \in \sigma(A) \Leftrightarrow \forall \varepsilon > 0 \exists \psi_\varepsilon \in \mathcal{B} : \|\psi_\varepsilon\| = 1 \text{ und } \|(A - \lambda)\psi_\varepsilon\| \leq \varepsilon$$

Spektralsatz Sei $A = A^*$. Dann gibt es eine eindeutige Zuordnung

$\{ \text{Funktionen } f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \} \rightarrow \{ \text{Operatoren auf } \mathcal{H} \}$

$$f \mapsto f(A)$$

mit den Eigenschaften

- Linearität in f
- $(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A)$
- $\overline{f(A)} = f(A)^*$
- $f(A) = I$ für $f(x) = 1$
- $f(A) = A$ für $f(x) = x$
- Stetigkeit in f

Sei $P_I(x)$ die charakteristische Funktion von $I \subset \mathbb{R}$

Wahrscheinlichkeitsinterpretation der QM

$$W_\psi(I) = \langle \psi | P_I(A) | \psi \rangle$$

ist die W'keit, dass A im Zustand $|\psi\rangle$ einen Messwert $a \in I$ annimmt.

Beispiele auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

1) "Teilchen ist in $\mathbb{R} \subset \mathbb{R}$ "

entspricht

$$P_{\mathbb{R}} : \psi(x) \mapsto \underbrace{P(x)}_{\substack{\text{charakteristische} \\ \text{Funktion von } \mathbb{R}}} \psi(x)$$

charakteristische
Funktion von \mathbb{R}

2) "Ort x des Teilchens"

entspricht

$A = x$, d.h. Multiplikation mit x

$$x : \psi(x) \mapsto x \psi(x)$$

$$\sigma(x) = \mathbb{R}, \quad \{ \text{EW von } x \} = \emptyset$$

Verallgemeinerte EV (oder Eigenzustände)

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (x_0 \in \mathbb{R}) \\ \notin L^2(\mathbb{R})$$

$$\text{Trotzdem: } |x_0\rangle \equiv |\psi_{x_0}\rangle$$

$$x|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{I}$$

Unschärfe einer Observablen A im Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle_\psi = \langle \psi | (A - \langle A \rangle_\psi)^2 | \psi \rangle$$

Heisenbergsche Unschärferelation

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle_\psi \langle (\Delta B)^2 \rangle_\psi \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle_\psi|^2$$

Dynamik : Schrödinger-Bild

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_t\rangle = H |\psi_t\rangle$$

mit Propagator

$$e^{-itH/\hbar} : |\psi_0\rangle \mapsto |\psi_t\rangle.$$

Erwartungswerte als Funktion von t : $\langle A \rangle_t$

$$\langle e^{-itH/\hbar} \psi | A | e^{-itH/\hbar} \psi \rangle = \langle \psi | e^{itH/\hbar} A e^{-itH/\hbar} | \psi \rangle$$

Heisenberg-Bild

$$A \mapsto A(t) = e^{itH/\hbar} A e^{-itH/\hbar}$$

($|\psi\rangle$ unabh. von t)

Das freie Teilchen

Lösung von

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi$$

zur Anfangsbedingung $\psi(\vec{x}, t=0)$ ist

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3y g(\vec{x}-\vec{y}, t) \psi(\vec{y}, 0)$$

mit

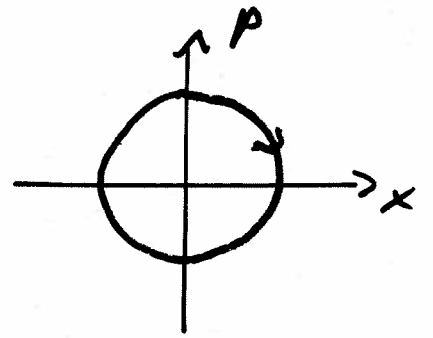
$$g(\vec{x}, t) = e^{-i \frac{3\pi}{4} \operatorname{sgn} t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{3/2} e^{i \frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}}$$

Der 1-dim. harmonische Oszillator
klassische Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\omega}{2} (p^2 + x^2)$$

mit Bahnen

$$x(t) + ip(t) = (x(0) + ip(0)) e^{-i\omega t}$$



quantenmechanischer Hamiltonoperator

$$H = \frac{\omega}{2} (p^2 + x^2) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{d\zeta^2} + \zeta^2 \right)$$

($p = -i\hbar d/dx$, $\zeta = x/\sqrt{\hbar}$). Mit

$$a := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (x + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\zeta + \frac{d}{d\zeta} \right)$$

$$a^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (x - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\zeta - \frac{d}{d\zeta} \right)$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$N := a^\dagger a$$

ist

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

Eigenwerte E (bzw. n) von H (bzw. N)

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

Beh: $n = 0, 1, 2, \dots$

Eigenwerte n von N :

- $n \geq 0$

- $n = 0$ ist EW mit EV $|\psi_0\rangle$

$$N|\psi_0\rangle = 0 \Leftrightarrow a|\psi_0\rangle$$

$$\Leftrightarrow \psi_0(z) = \pi^{-1/4} e^{-z^2/2}$$

- $n \in \mathbb{N}$ sind EW mit EV $|\psi_n\rangle$

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\psi_0\rangle$$

$$\psi_n(z) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(z) e^{-z^2/2}$$

$H_n(z)$: Hermite Polynome

(führender Term $(2z)^n$)

Translationen um $s \in \mathbb{R}$

- Im Ortsraum

$$e^{-ips/\hbar} : \psi(x) \mapsto \psi(x-s)$$

- Im Impulsraum

$$e^{ixs/\hbar} : \psi(x) \mapsto e^{ixs/\hbar} \psi(x)$$

- Im Phasenraum um $\alpha \in \mathbb{C}$

$$V(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a}$$

$$= e^{i\sqrt{2\hbar}[(\operatorname{Im}\alpha)x - (\operatorname{Re}\alpha)p]/\hbar}$$

ist Translation um Δx und Δp mit

$$\Delta x + i\Delta p = \sqrt{2\hbar} \alpha$$

bzw.

$$V(\alpha) = e^{i\sqrt{2\hbar}(\operatorname{Im}\alpha)x/\hbar} \cdot e^{-i\sqrt{2\hbar}(\operatorname{Re}\alpha)p/\hbar}$$

$$\cdot e^{-i(\operatorname{Re}\alpha)(\operatorname{Im}\alpha)}$$

$$(e^{X+Y} = e^X e^Y e^{-[X,Y]/2} \text{ falls } [[X,Y], Y] = 0)$$

- Verschiebungsoperatoren

$$V(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a} \quad (\alpha \in \mathbb{C}),$$

$$\alpha a^\dagger - \bar{\alpha} a = i \sqrt{\frac{2}{\hbar}} [(\operatorname{Im} \alpha) x - (\operatorname{Re} \alpha) p]$$

$V(\alpha)$ ist Translation im Phasenraum $\mathbb{R}^2 \cong \mathbb{C}$ um

$$\Delta x + i \Delta p = \sqrt{2\hbar} \alpha.$$

- Eigenschaften:

- $V(\alpha)^\dagger = V(\alpha)^{-1} = V(-\alpha)$,
- $V(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger} e^{-\bar{\alpha} a} e^{-|\alpha|^2/2}$
- $a V(\alpha) = V(\alpha) (a + \alpha)$.

- Kohärente Zustände:

$$|\alpha\rangle := V(\alpha) |\psi_0\rangle \quad (\alpha \in \mathbb{C}) \quad (\rightarrow |0\rangle = |\psi_0\rangle)$$

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

* folgt aus

$$e^{X+Y} = e^X e^Y e^{-[X,Y]/2}$$

$$\text{für } [[X,Y], X] = [[X,Y], Y] = 0.$$

Klassische Dynamik kohärenter Zustände

$$e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\alpha_t\rangle$$

mit $\alpha_t = \alpha e^{-i\omega t}$.

Beweis: $e^{-iHt/\hbar} |n\rangle = e^{-i\omega(n+1/2)t} |n\rangle$

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \cdot e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

\uparrow
 $= |\alpha_t|^2$

$$= e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\alpha_t\rangle$$

Symmetrien und Erhaltungssätze in der Hamiltonschen Mechanik

$H = H(x)$: Hamiltonfunktion,
erzeugt Fluss ϕ^t , d.h.

$$x(t) = \phi^t(x) \text{ erfüllt } \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial x}$$

$F = F(x)$: Observable, erzeuge Fluss ψ^λ .

Dann ist

$$\left. \frac{d}{dt} F(\phi^t(x)) \right|_{t=0} = \{H, F\} = -\{F, H\} = -\left. \frac{d}{d\lambda} H(\psi^\lambda(x)) \right|_{\lambda=0}.$$

Äquivalent sind also:

- F ist eine Erhaltungsgrösse:

$$F(\phi^t(x)) = F(x), \quad \forall x \in \mathcal{P}, t \in \mathbb{R}$$

- $\{H, F\} = 0$

- ψ^λ ist eine Symmetrie von H :

$$H(\psi^\lambda(x)) = H(x), \quad \forall x \in \mathcal{P}, \lambda \in \mathbb{R}$$

Symmetrien und Erhaltungssätze

$H = H^*$: Hamiltonoperator

$A = A^*$: bel. Observable

erzeugen 1-param. unitäre Gruppen:

$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi_0\rangle$: Lösung von $i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$
zum Anfangszustand $|\psi_0\rangle$

$|\varphi(t)\rangle = e^{-\frac{iAt}{\hbar}} |\varphi_0\rangle$: Lsg. von $i\hbar \frac{d|\varphi\rangle}{dt} = A|\varphi\rangle$
zum selben Anf.zs. $|\varphi_0\rangle$

Dann ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \Big|_{t=0} &= \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [H, A] | \psi_0 \rangle \\ &= - \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [A, H] | \psi_0 \rangle \\ &= - \frac{d}{d\lambda} \langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle \Big|_{\lambda=0} \end{aligned}$$

- Drehung $R \in O(3)$ induziert eine unitäre Abbildung

$$U(R) : \psi(\vec{x}) \mapsto \psi(R^T \vec{x})$$

auf $L^2(\mathbb{R}^3)$. Die Zuordnung

$$R \mapsto U(R)$$

ist eine unitäre Darstellung.

- 1-parametrische Gruppe $R(\lambda) \in SO(3)$ der Drehungen mit Achse \vec{e} , Winkel λ induziert $U(\lambda) = U(R(\lambda))$

Erzeugende:

$$i\hbar \frac{d}{d\lambda} U(\lambda) \Big|_{\lambda=0} = \vec{L} \cdot \vec{e}$$

mit

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$$

Drehimpuls

In Polarkoordinaten bzgl. \vec{e}_3 ,

$$\vec{x} \leftrightarrow (r, \theta, \varphi)$$

wirkt $R \in O(3)$

$$R : (r, \theta, \varphi) \mapsto (r, \theta', \varphi')$$

mit $\theta' = \theta'(\theta, \varphi)$, $\varphi' = \varphi'(\theta, \varphi)$

Folglich

$$(U(R)\psi)(r, \theta', \varphi') = \psi(r, \theta, \varphi)$$

ist auch eine Abb. auf $L^2(\Omega)$

($\Omega \ni (\theta, \varphi)$ Einheitskugel)

Ebenso $\vec{L} \cdot \vec{e}$.

Beispiel. $\vec{e} = \vec{e}_3$

$$\theta' = \theta, \quad \varphi' = \varphi + \lambda$$

$$(U(\lambda)\psi)(\theta, \varphi) = \psi(\theta, \varphi - \lambda)$$

$$L_3 = \vec{L} \cdot \vec{e}_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Das Zweikörperproblem

Nach Separation der Schwerpunkts-
Bewegung (frei) verbleibt Relativ-
Bewegung

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|) :$$

Zentralkraftproblem.

$$[H, \vec{L}^2] = 0$$

Eigenwerte von H ?

Zuerst Eigenwertproblem von \vec{L}^2
lösen. Eigenräume von \vec{L}^2 invar-
riant unter H . Dann Eigenwertpro-
blem von H auf diesen lösen
(reduziertes Eigenwertproblem).

Drehimpuls $\vec{L} =: \hbar \vec{M}$

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2 \quad (*)$$

\vec{M}^2 ist Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3)$; (*) ist Δ in Polarkoordinaten.

$\Omega = S^2$ Einheitskugel = $\{\vec{e} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{e}| = 1\}$

$$L^2(\Omega) = \left\{ \gamma: \Omega \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\Omega} d\sigma |\gamma(\vec{e})|^2 < \infty \right\}$$

Hilbertraum mit Skalarprodukt

$$(\gamma, z) = \int_{\Omega} d\sigma \overline{\gamma(\vec{e})} z(\vec{e}).$$

Definition: $\gamma_{\ell}: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ heißt Kugelfunktion zum Index $\ell = 0, 1, 2, \dots$, falls γ_{ℓ} die Einschränkung auf Ω eines homogenen, harmonischen Polynoms $u_{\ell}(\vec{x})$ ist: vom Grad ℓ

$$u_{\ell}(r\vec{e}) = r^{\ell} \gamma_{\ell}(\vec{e}).$$

$$\mathcal{Y}_{\ell} := \{ \text{Kugelfunktionen zum Index } \ell \} \\ \subset L^2(\Omega)$$

Satz.

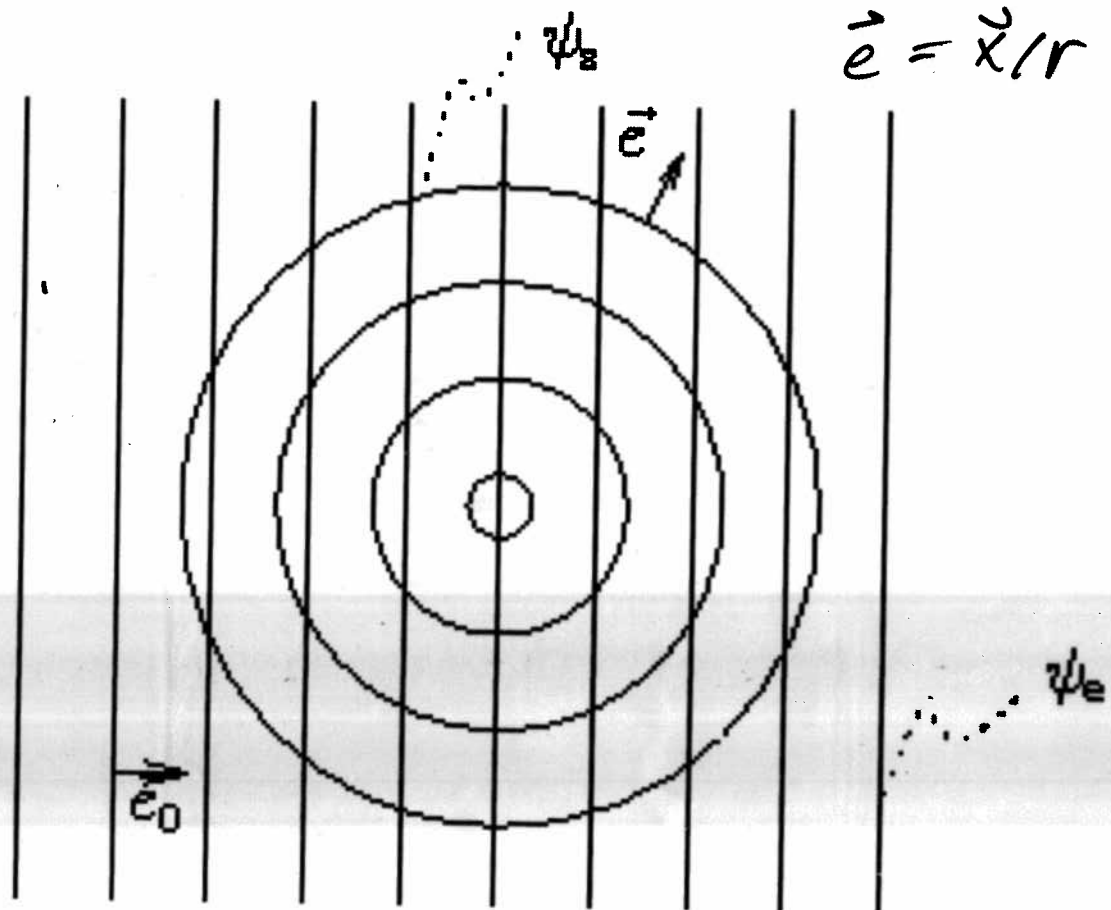
$$a) \Delta^2 Y_\ell = \ell(\ell+1)Y_\ell$$

$$b) (Y_\ell, Y_{\ell'}) = 0 \quad \text{für } \ell \neq \ell'$$

$$c) \dim Y_\ell = 2\ell + 1$$

$$d) L^2(\Omega) = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} Y_\ell$$

Streu Zustände



$$\psi(k, \vec{x}) = \underbrace{\psi_e(k, \vec{x})}_{\substack{\nearrow \\ \text{einfallende Welle}}} + \underbrace{\psi_s(k, \vec{x})}_{\text{Streuwellen}}$$

$$\psi_e(k, \vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{e}_0 \cdot \vec{x}}$$

$$\psi_s(k, \vec{x}) = \frac{f(k, \vec{e})}{r} e^{ikr} + O(r^{-2}) \quad (r \rightarrow \infty)$$

(asymptotische Bedingung:
Streuwellen rein auslaufend)

Differentieller Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \vec{e}) = |f(k, \vec{e})|^2$$

Totaler Streuquerschnitt

$$\sigma(k) = \int_{S^2} |f(k, \vec{e})|^2 d\vec{e}$$

Optische Theorem

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(k, \vec{e}_0)$$

Vorwärtsrichtung

Partialwellenzersetzungen

$$\bullet e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\tilde{j}_l(kr)}{kr} P_l(\cos\theta)$$

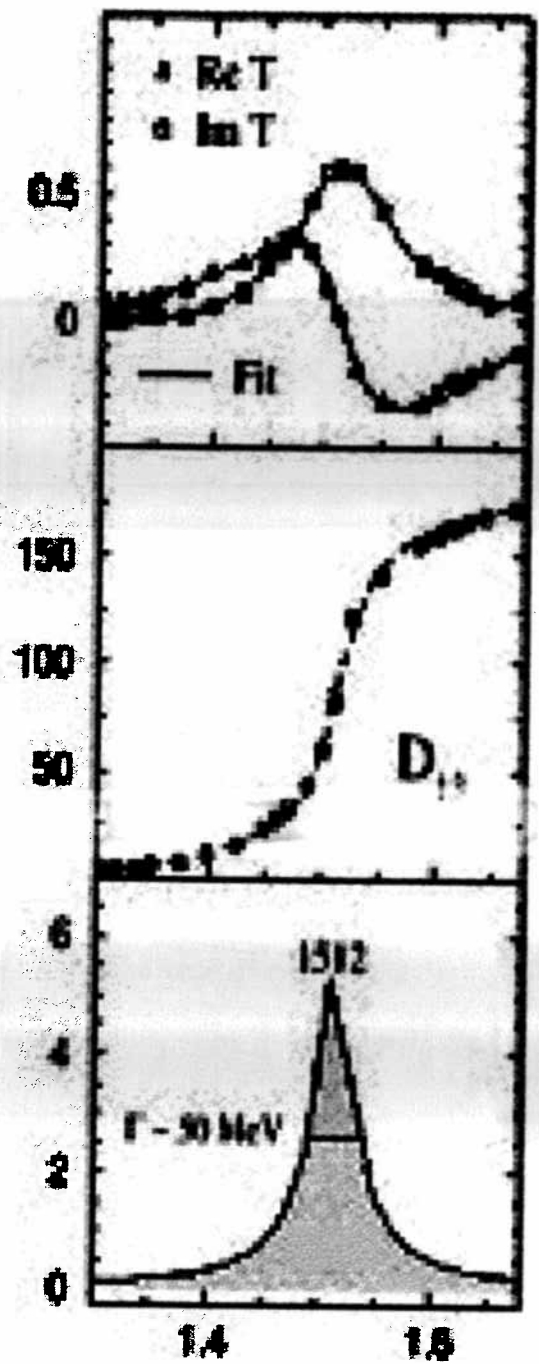
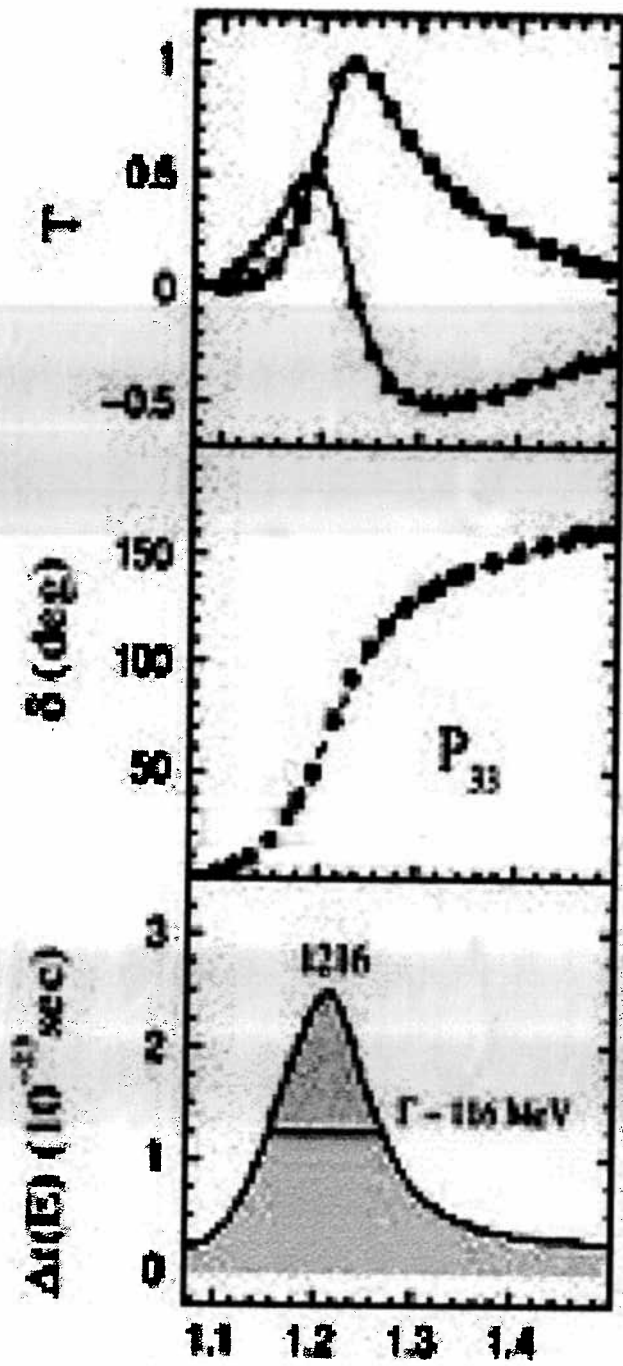
$$\tilde{j}_l(p) = \frac{1}{2i} \left(e^{i(p - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(p - \frac{l\pi}{2})} \right) + O(p^{-1})$$

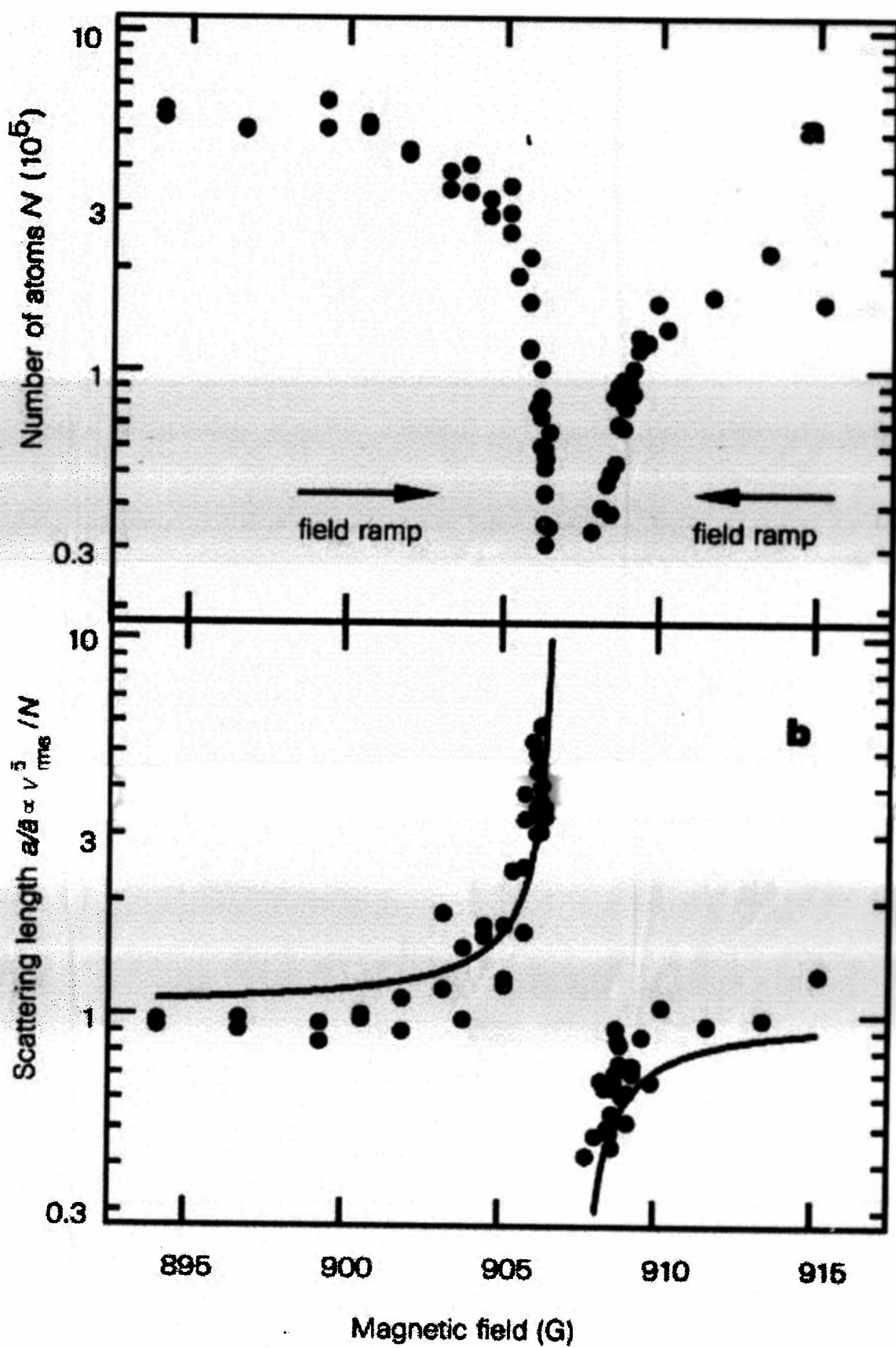
$$\bullet \psi(k, \vec{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{u_l(k, r)}{kr} P_l(\cos\theta) \quad (p \rightarrow \infty)$$

$$u_l(k, r) = \frac{1}{2i} \left(e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + 2\delta_l)} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) + O(r^{-1})$$

$$\propto \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) + O(r^{-1})$$

→ Streuphase δ_l kann aus einer (beliebig normierten) in $r=0$ regulären Lösung der radialen Schrödingergleichung bestimmt werden.





Resonanzen : Energie $\varepsilon = k^2$, wo
Streuquerschnitt

$$\sigma_{\ell}(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}(k)$$

besonders gross.

Streuphase $\delta_{\ell}(k) = e^{2i\delta_{\ell}(k)}$, ($k > 0$)
definiert durch Partialwellenentwicklung

$$2i\alpha_{\ell}(k, r) = S_{\ell}(k) \tilde{h}_{\ell}^2(kr) - \tilde{h}_{\ell}^2(kr),$$

$(r > R_0)$

wobei

u_{ℓ} : reguläre Lösung der radialen
Schrödingergl. mit Potential
 $V(r)$ ($V(r) = 0$, $r > R_0$)

\tilde{h}_{ℓ} : Lösung der rad. SG. mit
freien
Asymptotik

$$\tilde{h}_{\ell}^2(\rho) = e^{i(\rho - \frac{\ell\pi}{2})} (1 + O(\rho^{-1}))$$

einer auslaufenden Welle

• $u_\ell(k, r)^*$ ist analytisch in $k = \varepsilon^2$:

a) $u_\ell(k, r) = u_\ell(-k, r) \quad (k \in \mathbb{C})$

b) $u_\ell(k, r) = \overline{u_\ell(\bar{k}, r)}$

* mit $r^{-(\ell+1)} u_\ell(k, r) \rightarrow 1, (r \rightarrow 0)$

• $\tilde{h}_\ell(p)$ ist analytisch in $p \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$

Also: ($r > R_0$)

$$2i u_\ell(k, r) = f_\ell^+(k) \tilde{h}_\ell(kr) - f_\ell^-(k) \overline{\tilde{h}_\ell(kr)}$$

mit Koeffizienten $f_\ell^\pm(k)$ (Jost-Fkt.)
analytisch in $k \in \mathbb{C}$

Also

$$S_\ell(k) = \frac{f_\ell^+(k)}{f_\ell^-(k)}$$

analytisch bis auf Pole

Aus a) und $\tilde{h}_\ell(-p) = (-1)^\ell \overline{\tilde{h}_\ell(p)}$:

$$S_\ell(-k) = S_\ell(k)^{-1}$$

Störungsrechnung

- H^0 : ungestörter Hamiltonoperator mit einem bekannten, isolierten, nicht-entarteten Eigenwert E^0 und Eigenvektor ψ^0 ($\|\psi^0\|=1$)

- $H = H^0 + \epsilon H'$: gestörter H. operator (ϵ : Kopplungskonstante, klein)

Eigenwert von H

$$E = E^0 + \epsilon E^1 + \epsilon^2 E^2 + \dots$$

mit

$$E^1 = \langle \psi^0 | H' | \psi^0 \rangle$$

$$E^2 = \langle \psi^0 | H' (1 - P_0) (E_0 - H_0)^{-1} (1 - P_0) H' | \psi_0 \rangle$$

mit P_0 Projektor auf Eigenraum zu E_0

$$P_0 = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$$

- Ist E^0 ein entarteter Eigenwert mit Vielfachheit n^0 , so spaltet E i.A. auf

$$E_k = E^0 + \varepsilon E_k' + \dots \quad (k=1, \dots, n^0)$$

wobei E_k' Eigenwerte des Operators ($n^0 \times n^0$ Matrix)

$P_0 H' P_0$ auf Eigenraum zu E

sind

- Ist Eigenraum von H^0 identisch mit Eigenraum einer Symmetrie S von H^0 , ($[S, H^0] = 0$) und

$$[S, H'] = 0$$

so gelten die Formel des nicht-entarteten Falls.

$SO(3)$ und $so(3)$

- $so(3)$ besteht aus "infinitesimalen Drehungen"

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} R(t) \right|_{t=0}$$

wobei $R(t) \in SO(3)$ dif. bar mit $R(0) = I$

Bsp: $R(t)$ 1-param. Gruppe. Dann $R(t) = e^{\Omega t}$.

- $so(3)$ ist (reelle) Lie-Algebra: reeller Vektorraum mit dem antisymm. Produkt

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_1 \Omega_2 - \Omega_2 \Omega_1, ;$$

zudem

$$R \Omega R^{-1} \in so(3) \quad (\Omega \in so(3), R \in SO(3))$$

- $\Omega \in so(3)$ ist von der Form $\Omega = \Omega(\vec{\omega})$:

$$\Omega(\vec{\omega}) \vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x} \quad \text{für ein } \vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$$

$$\rightarrow [\Omega(\vec{\omega}_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2)$$

bzw. mit $\Omega_i := \Omega(\vec{e}_i)$

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad \& \quad \text{zykl.}$$

Darstellungen

- Def. U ist eine Darstellung von $SO(B)$ auf dem Vektorraum \mathcal{B} , falls

$$U: SO(B) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{B}) = \{ \text{lin. Abb. } \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B} \}$$
$$R \mapsto U(R)$$

ein Homomorphismus ist

$$U(R_1)U(R_2) = U(R_1 R_2), \quad U(1) = 1.$$

Ist \mathcal{B} ein Hilbertraum und $U(R)^{-1} = U(R)^*$, so heißt U unitär.

- Jede Darstellung von $SO(B)$ induziert eine von $so(B)$ durch

$$U(\Omega) = \left. \frac{d}{dt} U(R(t)) \right|_{t=0} \quad (\Omega, R(t) \text{ wie vorher})$$

$$\rightarrow U([\Omega_1, \Omega_2]) = [U(\Omega_1), U(\Omega_2)]$$

Dabei ist $U(R)$ durch $U(\Omega)$ bestimmt:

$$U(e^{\Omega t}) = e^{U(\Omega)t}$$

(Nicht jede Darstellung von $so(B)$ muss aus einer von $SO(B)$ stammen!)

- $U(\mathbb{R})$ unitär $\rightarrow U(\mathbb{R})^* = -U(\mathbb{R})$
Selbstadjungiert sind

$$M(\vec{\omega}) := iU(\mathbb{R}(\vec{\omega})) , \text{ insb. für } \vec{\omega} = \vec{e}_i :$$

$$M_i = iU(\mathbb{R}_i)$$

$$\rightarrow [M_1, M_2] = iM_3 \quad \& \text{ cycl.}$$

- Eine Darstellung heißt irreduzibel falls $\{0\}$, \mathcal{B} die einzigen invarianten Teilräume sind.
- Jede (endlich dim.) Darstellung zerfällt in eine direkte Summe irreduzibler.
- Heute: Klassifiziere alle iD_s der $so(3)$
(damit sind auch die der $SO(3)$ erfasst).

SU(2) und su(2)

- $SU(2) = \{ V \text{ kompl. } 2 \times 2 \text{ Matrix} \mid V^* V = 1, \det V = 1 \}$
mit Lie-Algebra (infinitesimale Elemente)

$$su(2) = \{ A \text{ kompl. } 2 \times 2 \text{ Matrix} \mid A^* + A = 0, \operatorname{sp} A = 0 \}$$

$$[A_1, A_2] = A_1 A_2 - A_2 A_1$$

Zudem

$$V A V^* \in su(2), \quad (A \in su(2), V \in SU(2))$$

- $A \in su(2)$ ist von der Form $A = A(\vec{a})$

$$A(\vec{a}) = \frac{-i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - i a_2 \\ a_1 + i a_2 & -a_3 \end{pmatrix} = \frac{-i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

mit $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$.

$$\rightarrow [A(\vec{a}), A(\vec{b})] = A(\vec{a} \wedge \vec{b})$$

bzw. mit $A_i = A(\vec{e}_i)$

$$[A_1, A_2] = A_3 \quad \& \quad \text{zykl.}$$

$\rightarrow su(2)$ und $so(3)$ sind isomorph über

$$su(2) \rightarrow so(3), \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega})$$

Die iDs der $su(2)$ sind die D_j 's ($j=0, \frac{1}{2}, 1, \dots$)

- Jede Ds von $SU(2)$ induziert eine von $SU(2)$ durch

$$U(A) = \frac{d}{dt} U(V(t)) \Big|_{t=0}$$

falls $A = \frac{d}{dt} V(t) \Big|_{t=0}$, ($V(0) = 1$). Dabei

ist $U(V)$ durch $U(A)$ bestimmt:

$$U(e^{At}) = e^{U(A)t}$$

- Bsp: fundamentale Ds der $SU(2)$: $\mathcal{B} = \mathbb{C}^2$,
 $U(V) = V$, bzw. $U(A) = A$. Entspricht $D_{1/2}$.

- Satz Jeder Ds D_j ($j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$) der $SU(2)$ entspricht eine, U_j , der $SU(2)$. Dabei gilt

$$U_j(-V) = (-1)^{2j} U_j(V).$$

$$A \in \text{su}(2) \Leftrightarrow A = A(\vec{a}) = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_j a_j \equiv -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

$\vec{a} \in \mathbb{R}^3$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3 \quad \& \quad \text{zykl.}$$

Lie-Algebra Isomorphismus

$$\text{su}(2) \rightarrow \text{so}(3)$$

$$A(\vec{a}) \mapsto R(\vec{a}), \quad R(\vec{a})\vec{x} = \vec{a} \wedge \vec{x}$$

insb. $A_j := A(\vec{e}_j) = -\frac{i}{2} \sigma_j \mapsto R_j = R(\vec{e}_j)$

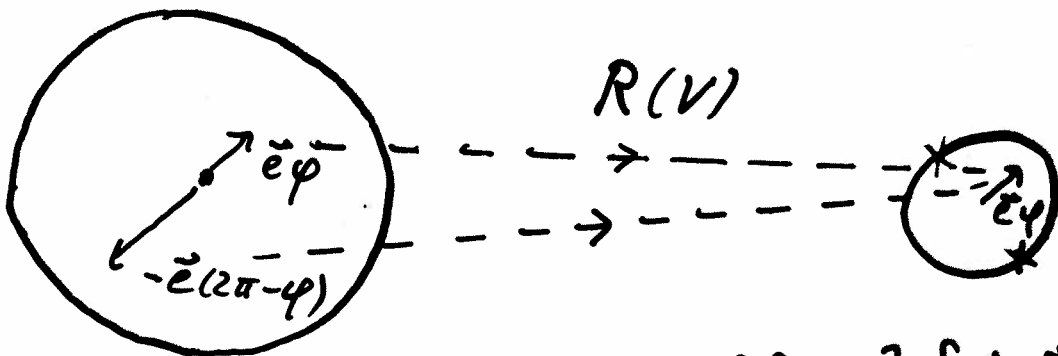
Gruppen Homomorphismus

$$\text{SU}(2) \rightarrow \text{SO}(3)$$

$$V \mapsto R, \quad V A(\vec{a}) V^* = A(R\vec{a})$$

$$\text{Kern} = \{\pm 1\}, \quad R(-V) = R(V)$$

$$\text{SO}(3) \cong \text{SU}(2) / \{\pm 1\}$$

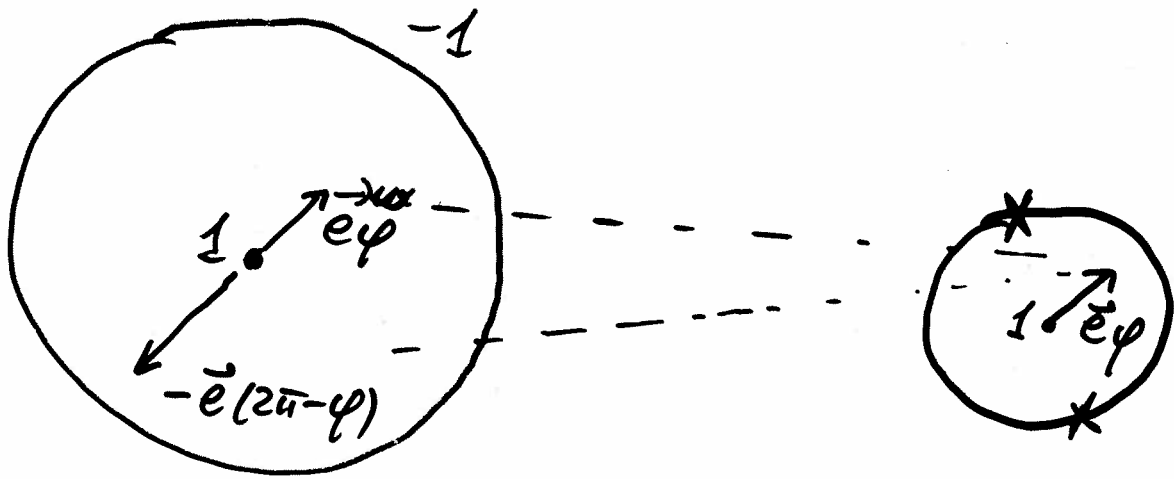


$$\text{SU}(2) \cong \{ \vec{x} = \vec{e} \varphi \mid |\varphi| \leq 2\pi \}$$

mit Rand \cong 1 Punkt

$$\text{SO}(3) \cong \{ \vec{x} = \vec{e} \varphi \mid |\varphi| \leq \pi \}$$

mit identifizierten Diagonalpunkten



$$SU(2) \cong \{ \vec{x} = \vec{e}_\varphi \mid |\varphi| \leq 2\pi \}$$

mit Rand \equiv 1 Punkt

$$V = 1 \cos \frac{\varphi}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{e}) \sin \frac{\varphi}{2}$$

$$SO(3) \cong \{ \vec{x} = \vec{e}_\varphi \mid |\varphi| \leq \pi \}$$

mit identifizierten
Diametralpunkten

$$R = R(\vec{e}, \varphi)$$

$$= R(-\vec{e}, 2\pi - \varphi)$$

Irreduzible Darstellung D_j :

Ausgezeichnete Basis* (orthonormiert)

$$\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$$

mit

$$M^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle$$

$$M_3 |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

$$M_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} |j, m\pm 1\rangle$$

für $M_{\pm} = M_1 \pm iM_2$

Basis eindeutig bis auf Phase von $|j, j\rangle$.

* Normalbasis

$$\dim D_j = 2j+1$$

Zusammengesetzte Systeme:

Tensorprodukt

Klassisch: Systeme 1, 2 mit Zuständen /
Zustandsräumen $z_i \in \mathcal{L}_i$, ($i=1, 2$).

Zusammengesetztes System

$$(z_1, z_2) \in \mathcal{L}_1 \times \mathcal{L}_2 \quad (\text{kart. Prod.})$$

Quantenmechanisch: Aus $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ wird
nicht $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, sondern
das Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

"Praktische" Definition: $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist ein
Hilbertraum

• mit Abbildung

$$\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

$$(\psi_1, \psi_2) \mapsto \psi_1 \otimes \psi_2$$

Bilinear: linear in ψ_1 und in ψ_2

→ Neben "typischen Tensoren" $\psi_1 \otimes \psi_2$
enthält $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ auch Superpositionen

$$\psi_1 \otimes \psi_2 + \psi_1 \otimes \psi_2$$

- Skalarprodukt

$$(\psi_1 \otimes \psi_2, \varphi_1 \otimes \varphi_2) := (\psi_1, \varphi_1) (\psi_2, \varphi_2)$$

und (Anti-) Linearität.

Tensorprodukt von Operatoren A_i auf
 \mathcal{H}_i :

$$A_1 \otimes A_2 \text{ auf } \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2,$$

definiert durch

$$(A_1 \otimes A_2) (\psi_1 \otimes \psi_2) = A_1 \psi_1 \otimes A_2 \psi_2$$

und Linearität.

Satz Die endlich dimensionalen D_j , \mathcal{D}_j ,
der $SO(3)$ sind parametrisiert durch

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

Es gilt

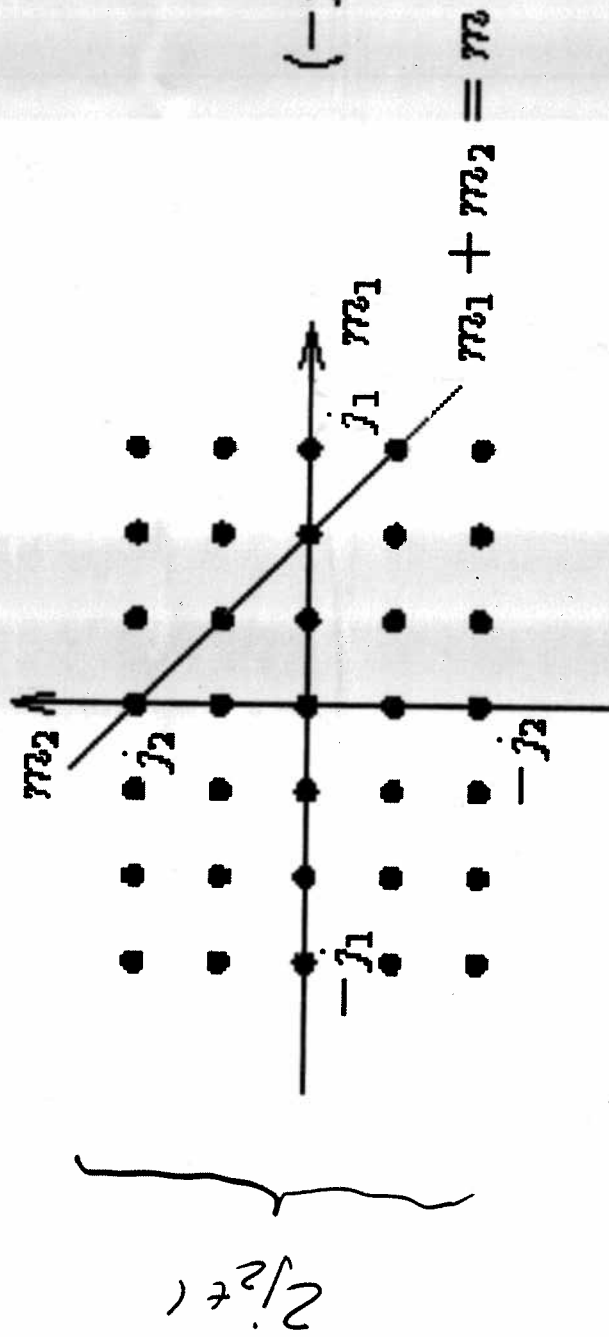
$$\dim \mathcal{D}_j = 2j+1$$

$$\vec{M}^2 \psi = j(j+1) \psi \quad (\psi \in \mathcal{D}_j)$$

Bemerkung Von $SO(3)$ stammen nur die
 D_j mit j ganzzahlig

Clebsch-Gordan Reihe:

$$D_{j_1} \oplus D_{j_2} = D_{|j_1 - j_2|} \oplus D_{|j_1 - j_2 + 1|} \oplus \dots \oplus D_{j_1 + j_2}$$



$$(-j_i \leq m_i \leq j_i, i = 1, 2)$$

$$(j_1 > j_2)$$

Spin: Freiheitsgrad mit $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$
 und (fundamentale) Darstellung
 $U(V) = V$ der $SU(2) \ni V$
 (\rightarrow Darst. ist $D_{1/2}$)

Drehimpuls (Spin) $\vec{J} = \hbar \vec{M}$

mit $\vec{M} \cdot \vec{e}$ Erzeugende der Drehungen
 um Achse \vec{e} :

$$\vec{M} \cdot \vec{e} = i A(\vec{e}) = \frac{1}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{e}$$

(aufgrund des Isomorphismus $so(3) \rightarrow su(2)$,
 $\Omega(\vec{e}) \rightarrow A(\vec{e})$)

$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ Pauli-Matrizen

$$M_3 = \frac{\sigma_3}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Normalbasis $|j = \frac{1}{2}, m\rangle$ ($m = \pm 1/2$) ist
 Standardbasis für \mathbb{C}^2 :

$$|\vec{e}_3\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\vec{e}_3^-\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Orbit und Spin

Hilbertraum eines Elektrons

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

↑
Orbit

↑
Spin

mit Darstellung

$$U(U) = U(R(U)) \otimes V$$

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}), \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

Gesamt Drehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes 1 + 1 \otimes \vec{S}$$

↑
Orbit Drehimpuls

↑
Spin Drehimpuls

Basen für \mathbb{C}^3

- Kartesische Basis

$$\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$$

- Normalbasis der fundamentalen Darstellung $\cong \mathcal{D}$, der $so(3) \subset SO(3)$

$$|j=1, m\rangle, \quad m = -1, 0, 1$$

und zwar

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_1 + i\vec{e}_2)$$

$$|1, 0\rangle = -\vec{e}_3$$

$$|1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_1 - i\vec{e}_2)$$

- Normalkomponenten $x_m^{(1)} = \vec{x} \cdot |1, m\rangle$ eines Vektors $\vec{x} = \sum x_i \vec{e}_i \in \mathbb{R}^3$:

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + ix_2), \quad x_0^{(1)} = -x_3, \quad x_{-1}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - ix_2)$$

- Transformation der Normalbasis unter Drehungen

$$R|1, m\rangle = \sum_{m'} U_{m'm}^{(1)}(R) |1, m'\rangle$$

26 Hilbertraum mit Darstellung $U(V)$
der $SU(2) \ni V$. Def.

$$\vec{W} = \sum_j W_j \vec{e}_j$$

ist Vektoroperator, falls

$$U(V)(\vec{W} \cdot \vec{e}) U(V)^{-1} = \vec{W} \cdot R \vec{e}$$

(alle $\vec{e} \in \mathbb{R}^3$, $V \in SU(2)$) mit $R = R(V)$,
d.h.

$$U(V)W_j U(V)^{-1} = \sum_{i=1}^3 R_{ij} W_i$$

Beispiele. $\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}, S$

Zeeman-Effekt (Theorie ohne Spin)

Aufspaltung der Energieniveaus (Terme) eines Atoms im äusseren Magnetfeld $B_{\vec{z}}$

$$H = H_0 + \mu_B B M_3$$

mit

H_0 : ungestörtes Atom, rotations-symmetrisch

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (\text{Bohrsches Magneton})$$

$$\vec{L} = \hbar \vec{M} \quad \text{Bahndrehimpuls}$$

Jedem Term E_0 entspricht Eigenraum; dieser trägt eine i. A. irreduzible Darstellung D_j der $SO(3)$.

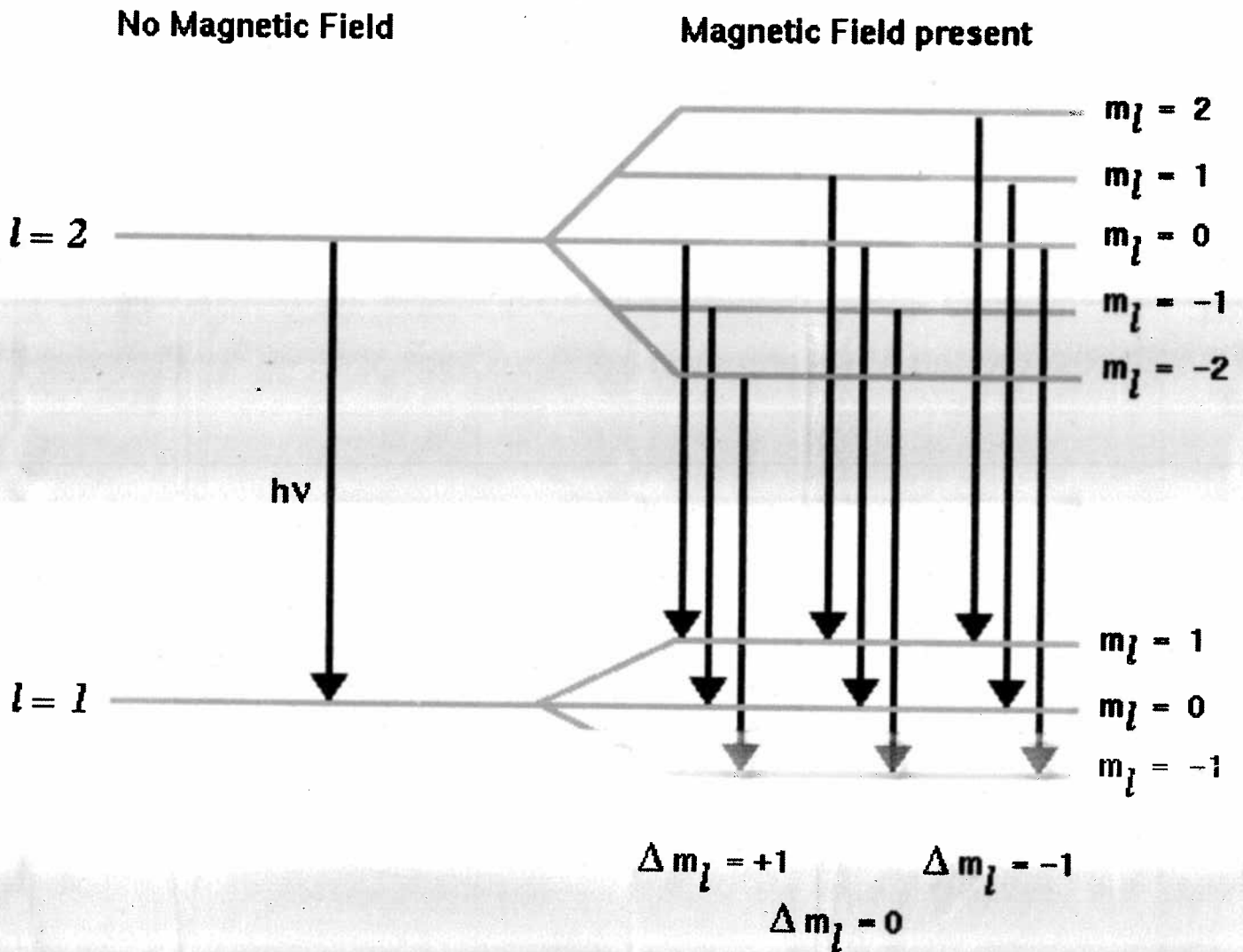
$$\rightarrow \text{Aufspaltung: } E_0 \rightarrow E_0 + \mu_B B m = E_{0m} \\ (m = -j, \dots, j)$$

Folgerung:

- j ganzzahlig
- Aufspaltung universell: $\Delta E_{0m} = \mu_B B$
(unabh. vom Term)

Beobachtung: Nein (anomaler Zeeman-Effekt)

Normaler Zeeman-Effekt



Spectrum without magnetic field



Spectrum with magnetic field present

Anomaler Zeeman-Effekt:

- Aufspaltung eines Terms

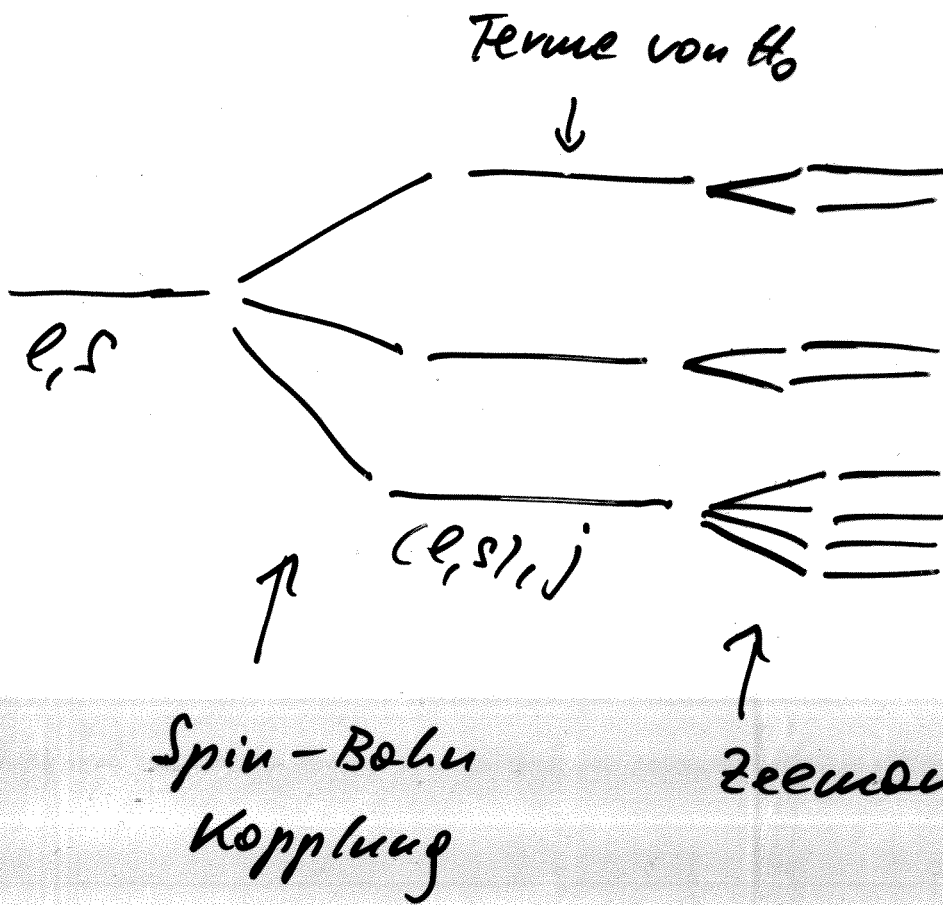
$$\Delta E_m = g \mu_B B m \quad (m = -j, \dots, j)$$

mit

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

- Übergänge genügen den Auswahlregeln

$$j \rightarrow j+1, \dots, |j-1|, \quad m \rightarrow m, m \pm 1$$



Hamilton-Operator: $H = H_0 + H_1$

- H_0 rotationsymm. (inkl. Spin-Bahn Kopp!)

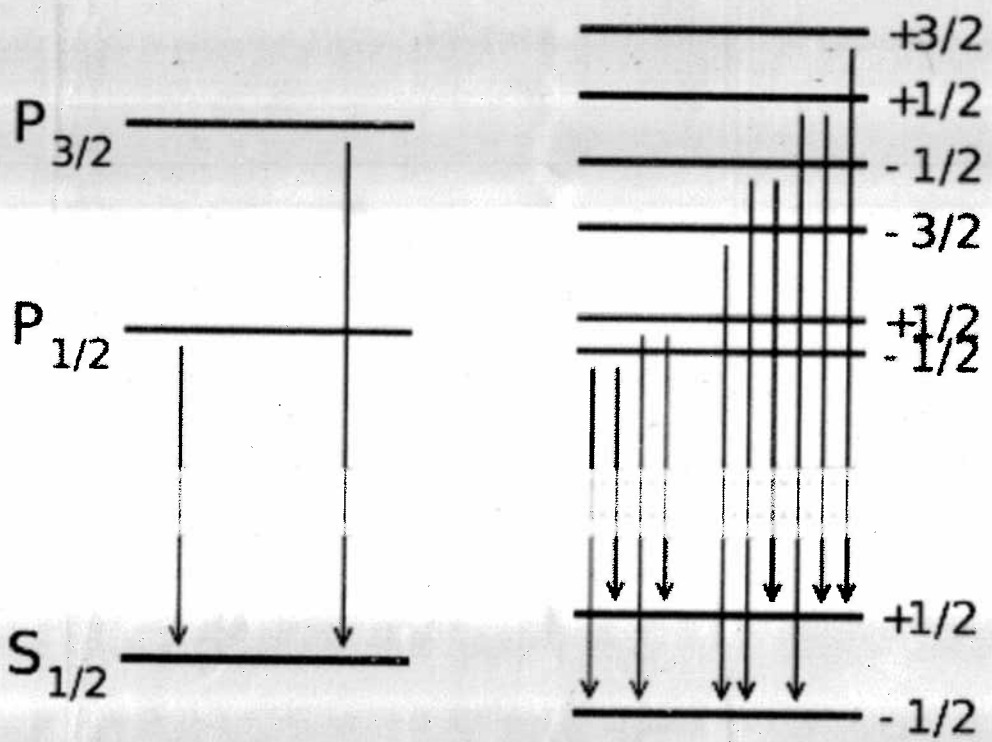
$$[H_0, \vec{J}] = 0 \quad \text{exakt.}$$

$[H_0, \vec{L}^2] = 0$, $[H_0, \vec{S}^2] = 0$ annähernd
(nur falls H_0 unter separaten Drehungen
in Orts- und Spin-Raum invariant
ist)

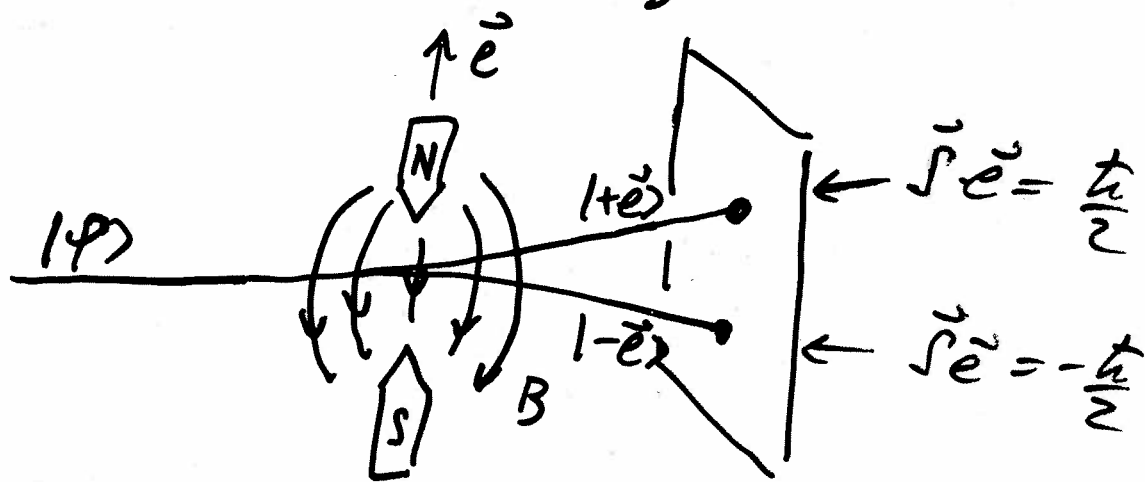
- $H_1 = \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S}) = \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{J} + (g_0 - 1) \vec{S})$

g_0 : gyromagnetischer Faktor der e^- .

Anomaler Zeeman-Effekt



Stern-Gerlach Anordnung



liefert eine Messung des Spins in Richtung \vec{e}

$$\vec{S} \cdot \vec{e} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{e}$$

QM-Observable $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Eigenvektoren $|\pm \vec{e}\rangle$ von $\vec{\sigma} \cdot \vec{e}$: Zustände, in denen der Messwert $(\pm \hbar/2)$ mit Sicherheit angenommen wird.

Bsp: • $\vec{e} = \vec{e}_3$: $|\vec{e}_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|- \vec{e}_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

• $\vec{e} = \vec{e}_1$: $|\vec{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $|- \vec{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

$$|\vec{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\vec{e}_3\rangle + |- \vec{e}_3\rangle), \quad |- \vec{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\vec{e}_3\rangle - |- \vec{e}_3\rangle)$$

sind kohärente Superpositionen von $|\vec{e}_3\rangle, |- \vec{e}_3\rangle$.

Allgemeines QM-System

- (Reine) Zustände

$$|\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad P = |\psi\rangle\langle\psi|$$

(bis auf Phase) Projektor, $\text{Dim} = 1$

Dem klassischen Begriff der statistischen Mischung entsprechend

- Gemischte Zustände.

Dichtematrizen, d.h. Operatoren P mit

$$P = P^*, \quad P \geq 0, \quad \text{tr} P = 1$$

Spektroldarstellung:

$$P = \sum_k w_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

mit $w_k \geq 0$, $\sum_k w_k = 1$

→ Interpretation:

P ist die (inkohärente) Mischung der reinen Zustände $|\varphi_k\rangle$ mit W'keiten w_k .

Beispiel: Spin $\frac{1}{2}$:

Vollständig gemischter Zustand

$$P = \frac{1}{2} |\vec{e}_3\rangle\langle\vec{e}_3| + \frac{1}{2} |-\vec{e}_3\rangle\langle-\vec{e}_3| = \frac{1}{2} \mathbb{1}$$

ist verschieden von jedem reinen Zustand $|\psi\rangle$.

Denn: Messung des Spins in Rfz \vec{e}

• In P :

$$+\frac{\hbar}{2} \text{ mit W'heit } \frac{1}{2} |\langle\vec{e}|\vec{e}_3\rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle\vec{e}|-\vec{e}_3\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$-\frac{\hbar}{2} \quad " \quad = \frac{1}{2}$$

unabhängig von \vec{e}

• In $|\psi\rangle$

$$+\frac{\hbar}{2} \text{ mit W'heit } |\langle\vec{e}|\psi\rangle|^2$$

$$-\frac{\hbar}{2} \quad " \quad |\langle-\vec{e}|\psi\rangle|^2$$

abhängig von \vec{e}

Gemischter Zustand

$$P = \sum_k w_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

- Präparation von P : Präpariere $|\varphi_k\rangle$ mit W'keit w_k
- Erwartungswert von A im Zustand P

$$\langle A \rangle_P = \sum_k w_k \langle \varphi_k | A | \varphi_k \rangle$$

$$= \text{tr}(PA)$$

Insbesondere: ja/nein-Observable (Ereignis)

($A = A^2$): W'keit des Eintretens

$$W = \text{tr}(PA)$$

- Dynamik: $|\varphi_k\rangle \mapsto |\varphi_k(t)\rangle$ mit

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi_k(t)\rangle = H |\varphi_k(t)\rangle$$

$$\rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} P = \sum_k w_k (H |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| - |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| H)$$

$$= [H, P]$$

(Liouville-von Neumann)

zeitabhängige Störungsrechnung:

$$H(t) = H_0 + H_1(t)$$

↑ Störung

$$H_0 |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle, \quad H_1 |\psi_1\rangle = E_1 |\psi_1\rangle$$

Übergangsw'keit $0 \rightarrow 1$ in 1. Ordnung
Störungsrechnung

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_0)t} \langle \psi_1 | H_1(t) | \psi_0 \rangle \right|^2$$

$$\omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} \quad : \quad \pm \text{Bohrsche Frequenz.}$$

Bsp: H_0 : Atom bei $\vec{x}=0$

$H_1(t)$: WW infolge e.m. Strahlung
(Dipolnäherung, $\vec{E}(t) \equiv \vec{E}(\vec{x}=0, t)$)

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \vec{E}(\omega_{10}) \cdot \langle \psi_1 | \vec{D} | \psi_0 \rangle \right|^2$$

mit $\vec{E}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \vec{E}(t)$

$$\vec{D} = \sum_k e_k \vec{x}_k \quad : \quad \text{Dipolmoment.}$$

Feld $\vec{E}(t) = \vec{E}(\vec{x}=0, t)$ reell

$$\hat{\vec{E}}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \vec{E}(t) = \overline{\hat{\vec{E}}(-\omega)}$$

$$\begin{aligned} \vec{E}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \hat{\vec{E}}(\omega) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \left(\hat{\vec{E}}(\omega) e^{-i\omega t} + \overline{\hat{\vec{E}}(\omega) e^{-i\omega t}} \right) \end{aligned}$$

Welle beschrieben durch $\hat{\vec{E}}(\omega)$, ($\omega \geq 0$)

Polarisation: $\hat{\vec{E}}(\omega) = \hat{E}(\omega) \vec{e}$, ($\vec{e} \perp \vec{e}_3$)
 $\overline{\hat{\vec{E}}(-\omega)} = \overline{\hat{E}(\omega)} \vec{e}$

Übergang $0 \rightarrow 1$, $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$

- Absorption $E_1 > E_0$

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2} |\hat{E}(\omega_{10})|^2 |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

- Emission $E_1 < E_0$

$$W_{10} = \frac{1}{\hbar^2} |\hat{E}(\omega_{01})|^2 |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

- Ungestörter Hamiltonoperator H_0 mit normierbarem Eigenzustand $|\psi_0\rangle$

$$H_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle, \quad \langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$$

und Kontinuierliche Eigenzustände $|\psi(E)\rangle$

$$H_0|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle, \quad \langle\psi(E)|\psi(E')\rangle = \delta(E-E')$$

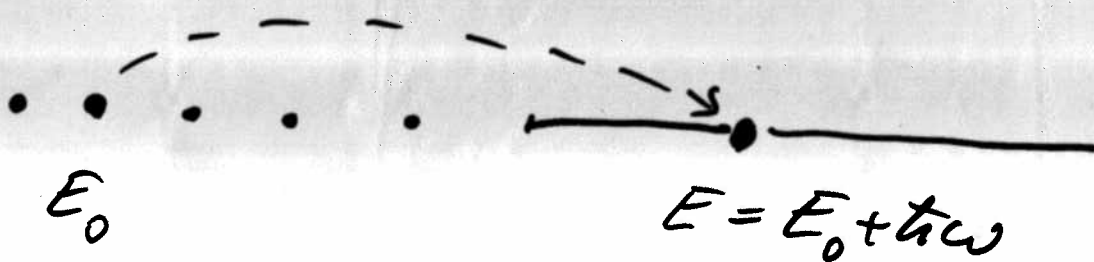
- Monochromatische Störung

$$H_1(t) = H_1 e^{-i\omega t} + H_1^* e^{i\omega t}, \quad (\omega > 0)$$

bzw.

$$H_1(t) = H_1 = H_1^*, \quad (\omega = 0)$$

induziert Übergänge ins Kontinuum



mit der W'irkungsrate

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle\psi(E_0 + \hbar\omega)|H_1|\psi_0\rangle|^2$$

(Goldene Regel)

Ausgangspunkt für Übergangsraten

$$H(t) = H_0 + H_1(t)$$

H_0 : Atom, \sim (bei $\vec{x} \approx 0$)
Eigenzustände $|\psi_i\rangle$, ($i=0,1$)

$$H_0 |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$$

$$E_1 - E_0 =: \hbar \omega_{10}$$

$H_1(t)$: Wechselwirkung Strahlung \leftrightarrow
Atom in Dipolnäherung

$$\begin{aligned} H_1(t) &= -\frac{1}{c} \vec{A}(\vec{x}=0, t) \cdot \sum_{\vec{k}} e_{\vec{k}} \frac{\vec{p}_{\vec{k}}}{m} \\ &= -\frac{1}{c} \vec{A}(0, t) \cdot \frac{i}{\hbar} [H_0, \vec{D}] \end{aligned}$$

Goldene Regel: Übergänge von $|\psi_0\rangle$ (Energie E_0) zu einem Kontinuum von Endzuständen $|\psi_1\rangle$ (Energie E_1) infolge Störung H_1 erfolgen mit Rate

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_1 | H_1 | \psi_0 \rangle|^2 \delta(E_1 - E_0),$$

zu summieren über alle ausgewählten Endzustände $|\psi_1\rangle$.

Auch:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_1 | H_1 | \psi_0 \rangle|^2 \rho(E_0)$$

wobei $\rho(E_0)$ Zustandsdichte der ausgewählten Endzust. $|\psi_1\rangle$,

sofern

$$|\langle \psi_1 | H_1 | \psi_0 \rangle|^2$$

davon unabhängig ist (ansonsten: Mittelwert)

Alternative Schreibweise

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{d}{d\lambda} \langle \psi_0 | H, P_{(-\infty, \lambda)} (H_0) H, |\psi_0 \rangle \rangle_{\lambda = E_0 + i\epsilon}$$

mit dem spektralen Projektor

$$P_{(-\infty, \lambda)} (H_0) = \int_{-\infty}^{\lambda} |\psi(E)\rangle \langle \psi(E)| dE$$

$$+ \underbrace{\sum_{\substack{i \\ E_i < \lambda}} |\psi_i\rangle \langle \psi_i|}_{\text{unabh. von } \lambda \text{ und } E_0 + i\epsilon}$$

unabh. von λ und $E_0 + i\epsilon$

Klassische Feld im Hohlraum V

Eigenschwingungen

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}_\alpha(\vec{x}) e^{\pm i\omega_\alpha t}$$

mit

$$\left. \begin{aligned} -\Delta \vec{A}_\alpha &= \left(\frac{\omega_\alpha}{c}\right)^2 \vec{A}_\alpha \\ \operatorname{div} \vec{A}_\alpha &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ in } V$$

$$\vec{A}_{\alpha \parallel} = 0 \quad \text{auf } \partial V$$

$-\Delta$ (mit Randbedingung) ist selbstadjungiert auf divergenzfreien Vektorfeldern mit Skalarprodukt

$$(\vec{A}_1, \vec{A}_2) = \int_V d^3x \vec{A}_1(\vec{x}) \cdot \vec{A}_2(\vec{x})$$

$$\rightarrow (\vec{A}_\alpha, \vec{A}_\beta) = 0 \quad (\alpha \neq \beta)$$

Normierung: $(\vec{A}_\alpha, \vec{A}_\beta) = 4\pi c^2 \delta_{\alpha\beta}$

• Modendichte:

$$N(\omega) = \# \{ \text{Moden mit Frequenzen} \leq \omega \}$$

$$\frac{dN}{d\omega} = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2$$

Quantisierung

$$H = \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$$

mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a_{\alpha}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\alpha}}} (\omega_{\alpha} q_{\alpha} + i p_{\alpha})$$

$$a_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\alpha}}} (\omega_{\alpha} q_{\alpha} - i p_{\alpha})$$

- erfüllen $[a_{\alpha}, a_{\beta}] = 0 = [a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\beta}^{\dagger}]$

$$[a_{\alpha}, a_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta}$$

- wirken auf Vakuum $|0\rangle$,

$$a_{\alpha} |0\rangle = 0$$

und auf die Zustände

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (a_1^{\dagger})^{n_1} (a_2^{\dagger})^{n_2} \dots |0\rangle$$

$$(n_{\alpha} \in \mathbb{N}, \sum_{\alpha} n_{\alpha} < \infty)$$

Beispiel: Kerker mit periodischen
Randbedingungen:

$$\rho = (\vec{k}, \vec{e}) \quad \text{mit } \vec{k} \text{ quantisiert}$$

$\vec{k} \perp \vec{e}$

\vec{e} : 2 mögliche Polarisierungen

$$\vec{A}_\rho(\vec{x}) = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} \vec{e} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

Zerlegung nach Eigenschwingungen

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} q_{\alpha}(t) \vec{A}_{\alpha}(\vec{x})$$

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{c} \sum_{\alpha} p_{\alpha}(t) \vec{A}_{\alpha}(\vec{x})$$

Feldenergie

$$\frac{1}{8\pi} \int_V d^3x (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (p_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2)$$

$=: H$

- Maxwell-Gl. \equiv kanonische Bewegungsgleichungen zu H
- F im Feld \equiv ω -viele unabhängige kanonische Oszillatoren

Atom (bei $\vec{x}=0$) im quantisierten
Strahlungsfeld in Dipolnäherung

$$H = H_0 + H_1 \quad \text{auf } \mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{at}} \otimes \mathcal{H}_{\text{str}}$$

$$H_0 = H_{\text{at}} + H_{\text{str}} \quad (\text{ungestört})$$

$$H_1 = -\frac{1}{c} \vec{A}(\vec{0}) \cdot \frac{i}{\hbar} [H_{\text{at}}, \vec{D}] \quad (\text{Kopplung})$$

• Zustände von H_{at} : $H_{\text{at}} |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$
($i=0, 1$)

• Übergänge zwischen Eigenzuständen
von H_0 : Von

$$|\varphi_0\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |n_1, n_2, \dots\rangle$$

nach

$$|\varphi_i\rangle = |\varphi_i\rangle \otimes |n'_1, n'_2, \dots\rangle$$

Energien $H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$

$$E_0 = \varepsilon_0 + \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} n_{\alpha}$$

$$E_i = \varepsilon_i + \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} n'_{\alpha}$$

• V gross: E_i liegt in Quasi-Kontinuum von Eigenwerten

- $$a_{\alpha}^{\dagger} |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha} + 1, \dots\rangle$$

$$a_{\alpha} |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_{\alpha}} |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots\rangle & (n_{\alpha} > 0), \\ 0 & (n_{\alpha} = 0) \end{cases}$$

- Feld operator

$$\vec{A}(\vec{x}) = \sum_{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}}} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) \vec{A}_{\alpha}(\vec{x})$$

Nachtrag: Bei unpolarisierter, von allen Richtungen einfallender Strahlung ist

$$P = u(\omega_{10}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \frac{1}{3} |\langle \psi_1 | \vec{D} | \psi_0 \rangle|^2$$

wobei $|\vec{d}|^2 = \vec{d} \cdot \vec{d}$.

Denn: Fortpflanzungsrichtung \vec{e}_0
 Polarisationen \vec{e}_1, \vec{e}_2 } $\vec{e}_0, \vec{e}_1, \vec{e}_2$
 Dreibein

$$\underbrace{\frac{1}{4\pi} \int d\epsilon_0}_{\text{Mittelung über } \vec{e}_0} \quad \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 |\vec{d} \cdot \vec{e}_i|^2}_{\text{Mittelung über Polarisationen}}$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int d\epsilon_0 \frac{1}{2} (|\vec{d}|^2 - |\vec{d} \cdot \vec{e}_0|^2)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int d\epsilon_0 \frac{1}{2} (|\vec{d}|^2 - \frac{1}{3} |\vec{d}|^2) = \frac{1}{3} |\vec{d}|^2$$

Äusseres, klassisches elektromagnetisches Feld der Polarisation \vec{e} mit spektraler Energiedichte $u(\omega)$, bewirkt atomare Übergänge $0 \rightarrow 1$ mit Rate

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = u(\omega_{10}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

(Absorption)

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = u(\omega_{01}) \cdot \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\langle \psi_1 | \vec{D} \cdot \vec{e} | \psi_0 \rangle|^2$$

(Emission)

Atom im quantisierten Strahlungsfeld:

Übergänge $0 \rightarrow 1$ mit Photonen:

• Absorption

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} u(\omega_{10}) \cdot \frac{1}{3} |\langle \psi_1 | \vec{D} | \psi_0 \rangle|^2$$

• Emission

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left(u(\omega_{01}) + \frac{\hbar \omega_{01}^3}{\pi^2 c^3} \right) \cdot \frac{1}{3} |\langle \psi_1 | \vec{D} | \psi_0 \rangle|^2$$

spontane Emission

Zum Vergleich (Einstein): A, B-Koeffizienten

• Absorption

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = B_{01} u(\omega_{10})$$

• Emission

$$\Gamma_{0 \leftarrow 1} = B_{10} u(\omega_{10}) + A_{10}$$

mit $B_{01} = B_{10}$, $\frac{A_{10}}{B_{10}} = \frac{\hbar \omega_{10}^3}{\pi^2 c^3}$ ✓!

Das Thomas-Fermi Atommodell (oder Ion)

(Einheiten: $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, $|e| = 1$)

- fester Kern bei $\vec{x} = 0$ der Ladung Z ,
- Hülle von N Elektronen, beschrieben durch Dichte $n(\vec{x})$,
- Energie der Dichte: Funktional

$$E[n] =$$

$$= \int d^3x \gamma \frac{2}{5} n(\vec{x})^{5/3} - \int d^3x \frac{Z n(\vec{x})}{|\vec{x}|} + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \frac{n(\vec{x}) n(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|}$$

mit $\gamma = (3\pi^2)^{2/3}$

1. Term: kinetische Energie der Elektronen, als ob Zusammenhang $n \rightarrow E_0/V$ lokal gelten würde
2. Term: Anziehung Elektronen \leftrightarrow Kern
3. Term: Abstossung der Elektronen (ignoriert Korrelationen)

- Gesucht: Minimisierende Dichte $n(\vec{x})$ für $E[n]$ unter Nebenbedingungen

- $n(\vec{x}) \geq 0$, • $\int d^3x n(\vec{x}) = N$

- Lösung bestimmt durch

$$\delta E \equiv \frac{d}{dt} E[n + t \delta n] \Big|_{t=0^+} \geq 0$$

für alle mit den Nebenbedingungen verträglichen Variationen $\delta n(\vec{x})$:

- $\delta n(\vec{x}) \geq 0$ falls $n(\vec{x}) = 0$

- $\int d^3x \delta n(\vec{x}) = 0$

- Euler-Lagrange Gl.

$$\delta n(\vec{x})^{2/3} = (\mu - \phi(\vec{x}))_+ \quad (1)$$

(TF - Gleichung)

mit

$$\phi(\vec{x}) = -\frac{Z}{|\vec{x}|} + \int d^3y \frac{n(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \quad (2)$$

(elektrisches Potential des Atoms)

(1, 2): selbstkonsistentes Gleichungspaar

- sphärisch symmetrische Lösungen
Ansatz:

$$(u - \phi(r))_+ =: \frac{z}{r} \chi(r)$$

mit $\chi(r) \geq 0$, $\chi(0) = 1$. Dann:

$$\Delta u = \frac{z}{4\pi r} \chi''(r), \quad (r > 0, \chi > 0)$$

→ TF-Gleichung:

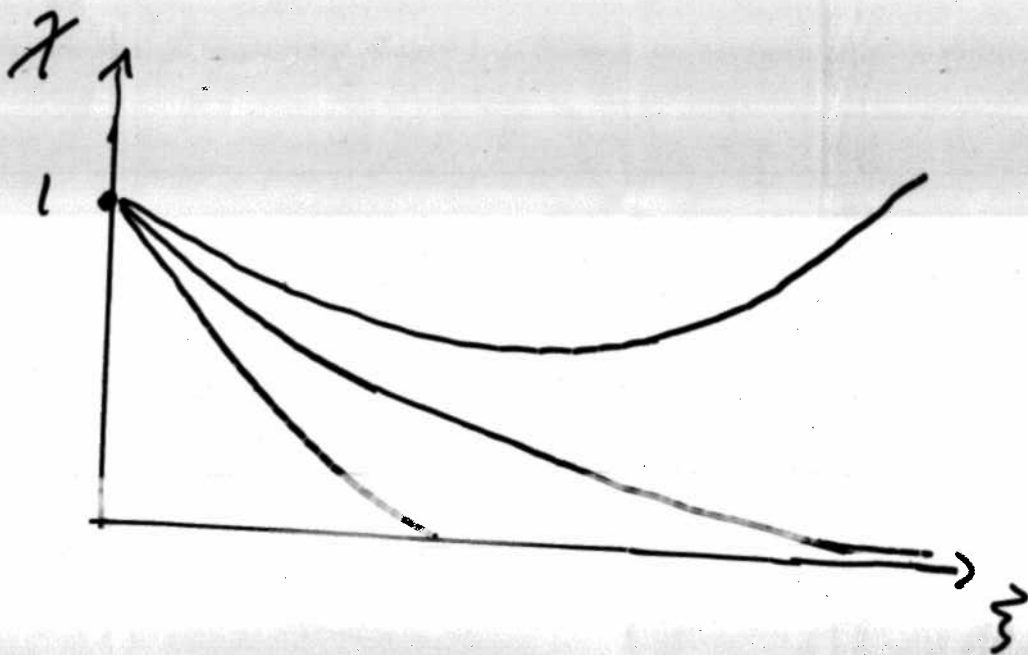
$$\chi''(r) = \frac{4}{3\pi} z^{-1/2} r^{-1/2} \chi(r)^{3/2},$$

$$(r > 0, \chi > 0)$$

Lösungen von

$$\chi''(\xi) = \xi^{-4/2} \chi(\xi)^{3/2}$$

($\chi > 0, \xi \geq 0$) mit $\chi(0) = 1$ parametrisiert durch $\chi'(0)$:



Falls $\chi(\xi) = 0$ für $\xi < \infty$, so $\chi'(\xi) \neq 0$
(ansonsten $\chi \equiv 0$)

\mathcal{H} : 1-Teilchen - Hilbertraum

(Bsp: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2j+1}$: Spin; Teilchen
auf $\Psi = \Psi(\mathbf{z}), \mathbf{z} = (\mathbf{x},$

$$\bigoplus^N \mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ Faktoren}}$$

wirkt die Permutationsgruppe $\mathcal{S}_N \ni \sigma$:
Darstellung

$$P_\sigma : \Psi_1 \otimes \dots \otimes \Psi_N \mapsto \Psi_{\sigma^{-1}(1)} \otimes \dots \otimes \Psi_{\sigma^{-1}(N)}$$

(Bsp:

$$(P_\sigma \Psi)(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N) = \Psi(\mathbf{z}_{\sigma^{-1}(1)}, \dots, \mathbf{z}_{\sigma^{-1}(N)})$$

Unterräume von $\bigoplus^N \mathcal{H}$:

- Hilbertraum von N Bosonen

$$\mathcal{H}_s^{(N)} = \{ \Psi \mid P_\sigma \Psi = \Psi \} \quad \forall \sigma \in \mathcal{S}_N$$

(symmetrische Zustände)

- Hilbertraum von N Fermionen

$$\mathcal{H}_a^{(N)} = \{ \Psi \mid P_\sigma \Psi = (\text{sgn } \sigma) \Psi \}$$

(antisymmetrische Zustände)

Spin-Statistik-Zusammenhang

Teilchen mit Spin $j \in \{0, 1, \dots\}$: Bosonen

" " " $j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$: Fermionen

Projektoren $\bigoplus^N \mathcal{H} \rightarrow \bigoplus^N \mathcal{H}$ auf $\mathcal{H}_s^{(N)}$, $\mathcal{H}_a^{(N)}$

$$Y = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} P_{\sigma}, \quad A = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} (\text{sgn } \sigma) P_{\sigma}$$

erhalten $Y = Y^{\times} = Y^2$, $A = A^{\times} = A^2$

- 1-Teilchen Hamilton-Operator h auf \mathcal{H}

$$h|\varphi_k\rangle = \varepsilon_k|\varphi_k\rangle$$

mit $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots$

- N gleiche, aber unterscheidbare, unabhängige Teilchen: Hamiltonoperator

$$H = \sum_{k=1}^N h_k = \sum_{k=1}^N \underbrace{1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes h \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1}_{k\text{-te Stelle}}$$

auf $\otimes^N \mathcal{H}$. Eigenwertproblem

$$H|\varphi_{\alpha_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{\alpha_N}\rangle = E|\varphi_{\alpha_1} \otimes \dots \otimes \varphi_{\alpha_N}\rangle$$

$$\text{mit } E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{\alpha_i}$$

- N Fermionen: Hilbertraum $\mathcal{H}_a^{(N)} \subset \bigoplus^N \mathcal{H}$

$$|\Psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} (\text{sgn } \sigma) |\varphi_{\alpha_{\sigma(1)}} \otimes \dots \otimes \varphi_{\alpha_{\sigma(N)}}\rangle$$

hängt (bis auf's Vorzeichen) nur von Menge $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ ab (nicht von Reihenfolge)

$$\langle \Psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}} | \Psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}} \rangle = \begin{cases} 0 & (\alpha_i = \alpha_j \text{ für ein } i \neq j) \\ 1 & (\alpha_i \neq \alpha_j \text{ für alle } i \neq j) \end{cases}$$

- Besetzungszahlbasis

$$|n_0, n_1, \dots\rangle = |\Psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}}\rangle,$$

wobei $n_\alpha = \#\{j \mid \alpha_j = \alpha\}$ erhalten

$$n_\alpha = 0 \text{ oder } 1, \quad \sum_{\alpha} n_\alpha = N.$$

- $H |n_0, n_1, \dots\rangle = E |n_0, n_1, \dots\rangle$

mit $E = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \epsilon_{\alpha}$

- Grundzustand: $n_0 = \dots = n_{N-1} = 1, n_N = n_{N+1} = \dots = 0$

$$E_0 = \sum_{\alpha=0}^{N-1} \epsilon_{\alpha}$$

(ϵ_{N-1} : Fermi-Energie)

- N Bosonen : Hilbertraum $\mathcal{H}_S^{(N)} \subset \bigoplus^N \mathcal{H}$

$$|\psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}}\rangle \equiv |n_0, n_1, \dots\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! n_0! n_1! \dots}} \sum_{\sigma \in S_N} |\psi_{\alpha_{\sigma^{-1}(1)}} \otimes \dots \otimes \psi_{\alpha_{\sigma^{-1}(N)}}\rangle$$

mit $n_\alpha = \#\{j \mid \alpha_j = \alpha\}$.

- $\langle \psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}} \mid \psi_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}} \rangle = 1$

- n_α erfüllen

$$n_\alpha \in \mathbb{N}, \quad \sum_{\alpha} n_\alpha = N$$

- $H |n_0, n_1, \dots\rangle = E |n_0, n_1, \dots\rangle$ mit

$$E = \sum_{\alpha} n_\alpha E_\alpha$$

Grundzustand freier Fermionen im Gefäß
(Spin $\frac{1}{2}$, N Teilchen, Volumen V)

- Dichte $n = \frac{N}{V}$

- Energie E_0

$$\frac{E_0}{V} = \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(3\pi^2)^{2/3}}_{=: \gamma} \cdot \frac{3}{5} n^{5/3}$$

- Zustand: Alle 1-Teilchenzustände mit $|\vec{k}| \leq k_F$ besetzt:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \gamma^{1/2} n^{1/3}$$

Atom-Modell ($\hbar = 2m = |e| = 1$)

$$H = \sum_{k=1}^N \left(p_k^2 - \frac{Z}{|\vec{x}_k|} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$
$$\equiv \sum_{k=1}^N h_k + \sum_{i < j} w_{ij}$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)} = \mathcal{A} \left(\underbrace{\bigoplus^N \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)}_{l\text{-Teilchen HAR } \mathcal{H}} \right)$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \psi(\vec{z}), \vec{z} = (\vec{x}, \sigma), \int d\vec{z} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x}$

Quantenmechanischer Grundzustand(e)

$$E_0 = \min_{\|\psi\|=1} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

Hartree-Fock Näherung

$$E_{HF} = \min_{\psi \in SD} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

↑
 ψ ist Slater-Determinante

Slater-Determinante:

$$|\psi\rangle = \sqrt{N!} A |\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_N\rangle$$

mit $|\varphi_\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$
↳ (Orbitale)

- $|\psi\rangle$ invariant (bis auf Phase)

unter unitären Transformationen
unter den Orbitalen:

$$|\varphi'_\alpha\rangle = \sum_{\beta=1}^N U_{\alpha\beta} |\varphi_\beta\rangle, \text{ bzw.}$$

$$\varphi'_\alpha(\mathbf{z}) = \sum_{\beta} U_{\alpha\beta} \varphi_\beta(\mathbf{z})$$

→ $|\psi\rangle$ bestimmt durch N -dimensionalen Unterraum

$$M = [\varphi_1, \dots, \varphi_N] \subset \mathcal{H}$$

- Erwartungswert von H

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_k \langle \varphi_k | h | \varphi_k \rangle +$$

$$+ \sum_{i < j} \underbrace{\langle \varphi_i \otimes \varphi_j | w | \varphi_i \otimes \varphi_j \rangle}_{\text{Direkter Term}} - \underbrace{\langle \varphi_j \otimes \varphi_i | w | \varphi_i \otimes \varphi_j \rangle}_{\text{Austausch-Term}}$$

Direkter Term

Austausch-Term

$$\rightarrow = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} = \frac{1}{2} \sum_{i,j}$$

Hartree-Fock Gleichungen

$$h_{HF} |\varphi_\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \quad (\alpha = 1, \dots, N)$$

Bzw.

$$\left(\vec{p}_1^2 - \frac{Z}{|\vec{x}_1|} \right) \varphi_\alpha(\vec{z}_1)$$

$$+ \sum_B \int d\vec{z}_2 \overline{\varphi_B(\vec{z}_2)} \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} (\varphi_\alpha(\vec{z}_1) \varphi_B(\vec{z}_2) - \varphi_B(\vec{z}_1) \varphi_\alpha(\vec{z}_2))$$

$$= \epsilon_\alpha \varphi_\alpha(\vec{z}_1)$$

Bestimmen die Orbitale $|\varphi_\alpha\rangle$, damit Slater-Determinante

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (|\varphi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_N\rangle)$$

ein stationärer Punkt der Energie

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

ist. Insbesondere wenn $|\Psi\rangle$ Minimierer von

$$E_{HF} = \min_{|\Psi\rangle \in S} \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

ist.

Energien des GZ in Ry

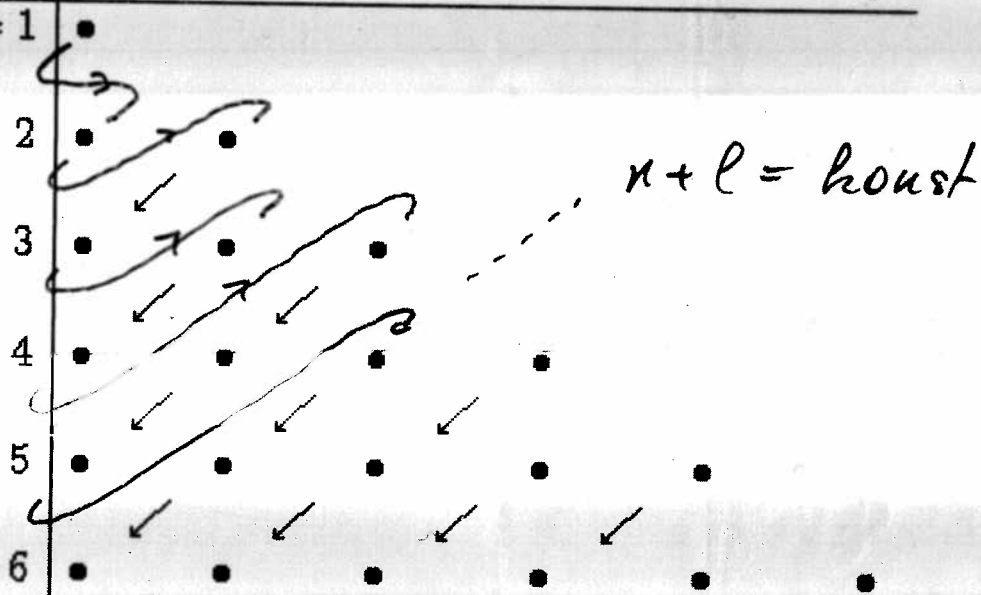
einfacher
Variations-
↓ ansatz
 E_{QMI}

Atom	E_{HF}	E_0 (exakt)	E_{QMI}
He	-5.724	-5.808	-5.685
Be	-29.146	-29.334	
Ne	-257.1	-257.86	

s p d f g

$2(2l + 1) =$	2	6	10	14	18	22
$l =$	0	1	2	3	4	5

$n = 1$



Atomkern, inst. Bestimmung von L, S, J im Grundzustand

H_{SM}

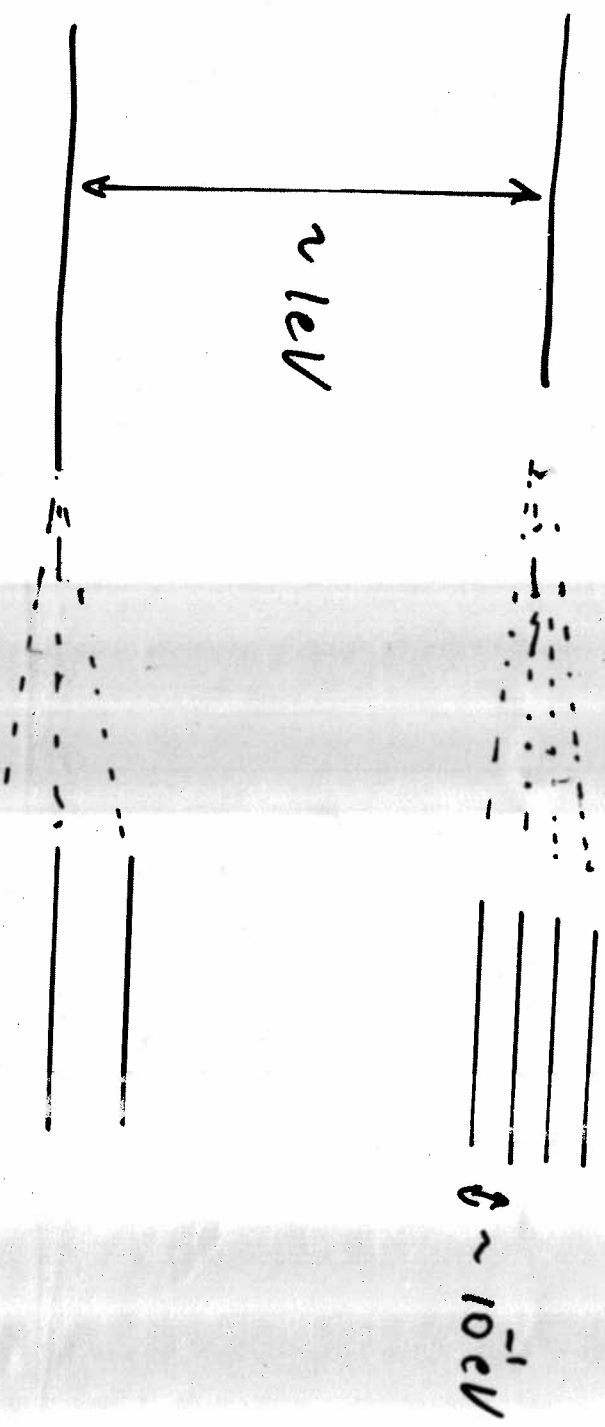
+ Korrekturen W



H

+ Spin-Bahn
Kopplung H_{SB}

\tilde{H}



Konfigurationen

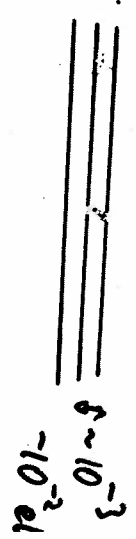
L, S -Multipletts

Terme

(1)

(2)

(3)



Aufspaltung einer Konfiguration

Beispiel: offene Schale $(p)^2$, z.B. C, S.

Entartung $\binom{6}{2} = 15$

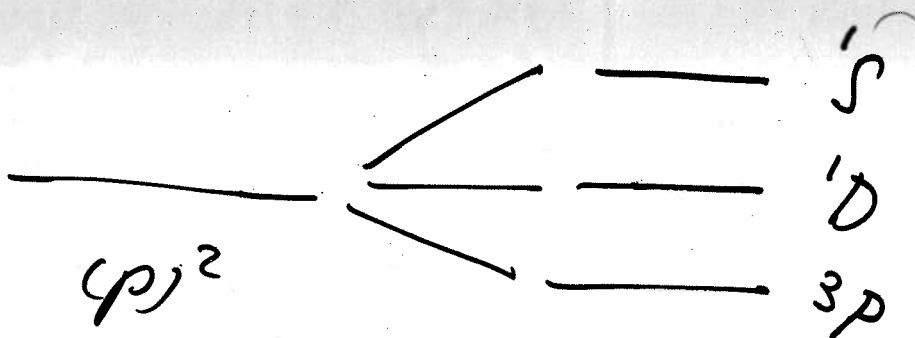
Vorkommende Darstellungen $D_L \oplus D_S$

$$(D_0 \oplus D_0) \oplus (D_1 \oplus D_1) \oplus (D_2 \oplus D_0)$$

$$= {}^1S \oplus {}^3P \oplus {}^1D$$

(Notation: ${}^{2S+1}L$)

Aufspaltung durch W



Konfiguration Multipletts

Ordnung der Multipletts \rightarrow Hund'sche Regeln.

Auand'sche Regeln

1. Das LS -Multipllett mit dem grössten S hat die kleinste Energie
2. Falls mehrere L mit dem gleichen S vorkommen, hat das grösste L die kleinste Energie

Für höchstens halb gefüllte Schalen

$$N \leq \frac{1}{2} \cdot 2(2l+1) = 2l+1$$

$$\parallel S = \frac{N}{2}, \quad L = l + (l-1) + \dots + (l-N+1) \parallel$$

enthält Zustand der Symbolreihe

$$l^+ (l-1)^+ \dots (l-N+1)^+$$

Speziell: halb gefüllte Schale $N = 2l+1$:

$$L = 0$$