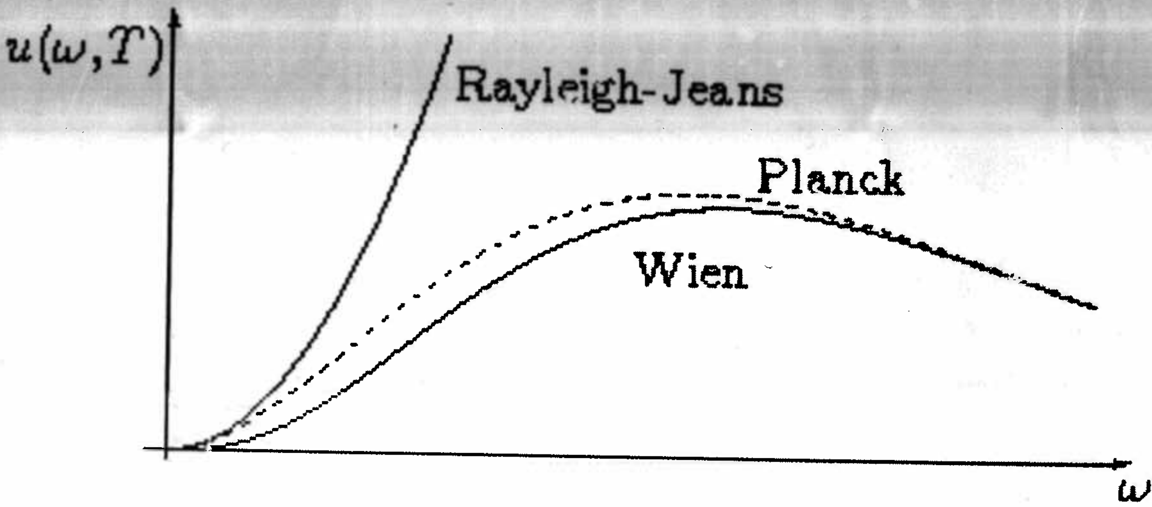
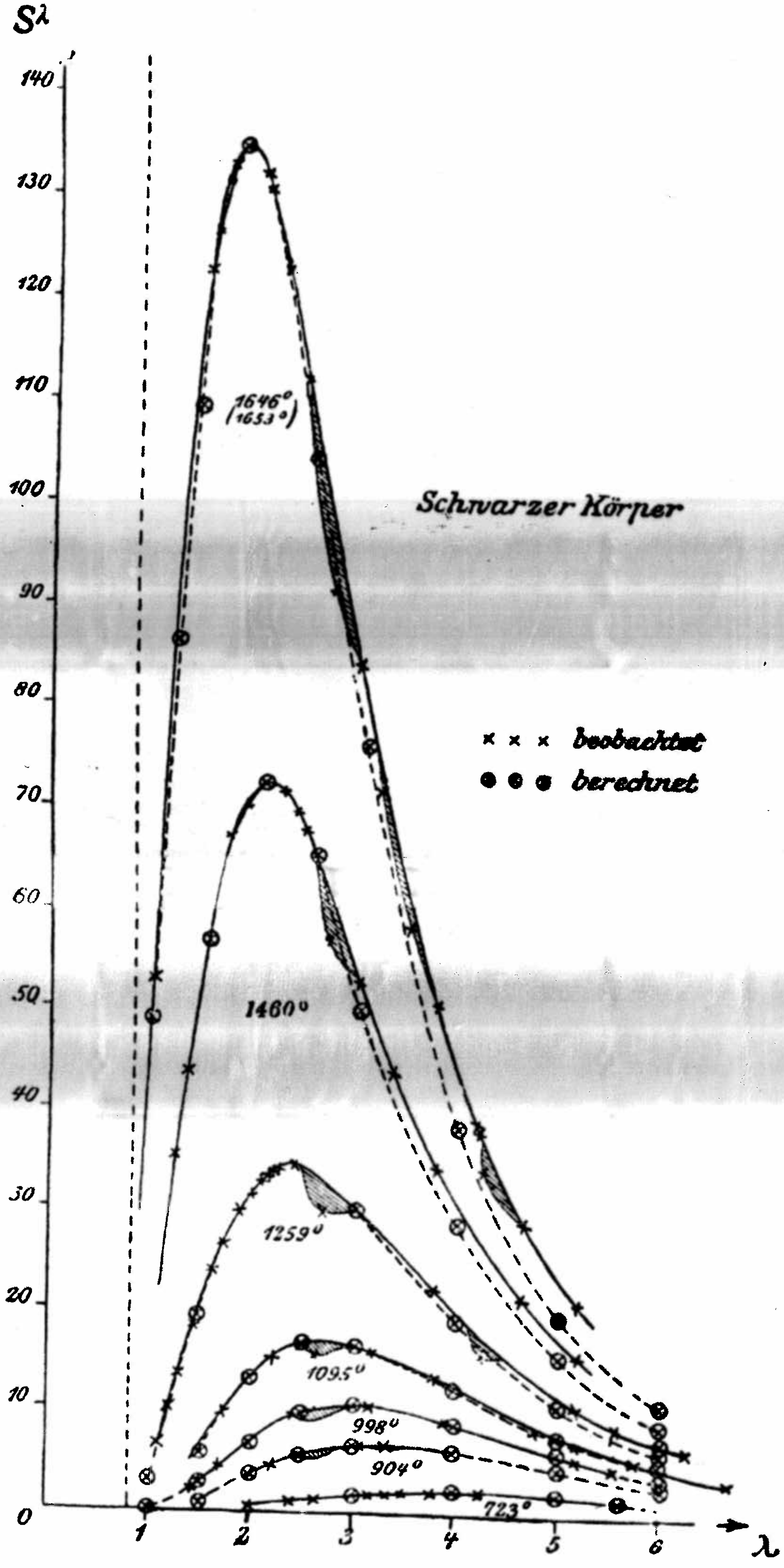
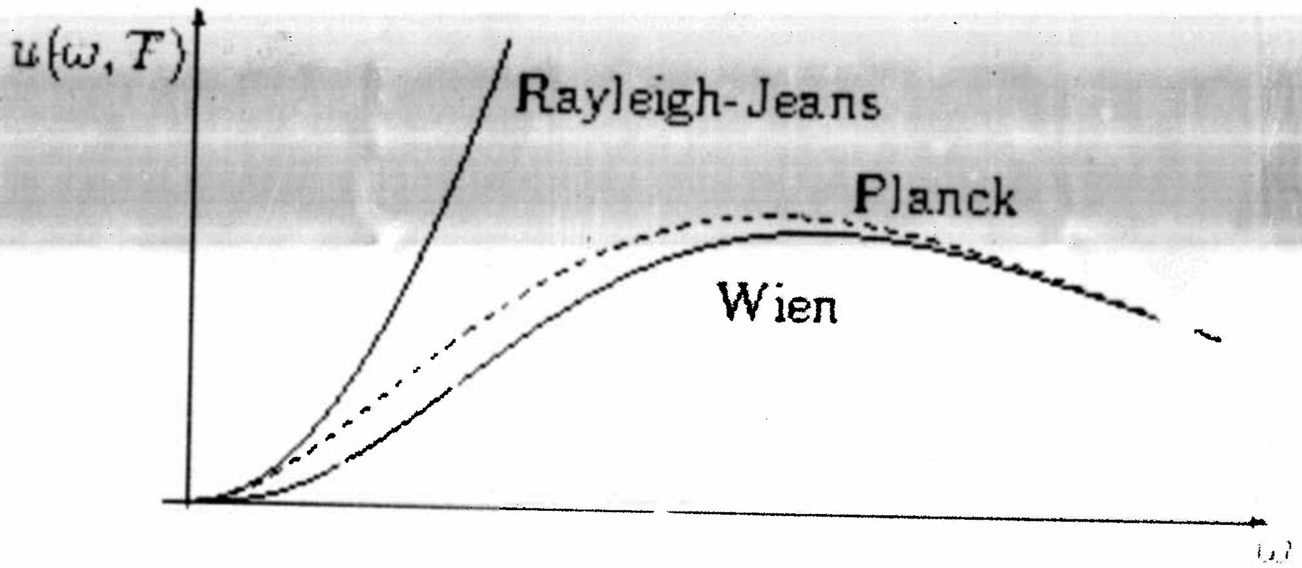


$u(\omega,T)$
Rayleigh-Jeans
Planck
Wien
ω



Sλ
140
130
120
110
100
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
1
2
3
4
5
6
λ
1646°
(1653°)
Schwarzer Körper
× × × beobachtet
● ● ● berechnet
1460°
1259°
1095°
998°
904°
723°



$u(\omega, T)$
Rayleigh-Jeans
Planck
Wien

Plancks Vorhaben

Bestimmung der <u>spektralen Energiedichte</u> $u(\omega,T)$ des elektromagnetischen Felds 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 $\ddot{f} + \omega^2 f = 0)$
- Anzahl ES mit Frequenzen $\leq \omega$

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

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

Plancks 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: $\overline{U}_{\omega_0} = \overline{E}_{\omega_0}$ ✓

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

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

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

$$V \cdot u(\omega, T)\, d\omega = \bar{U}_\omega\, dN \qquad \Big| \equiv \text{Energie aller Moden in } [\omega, \omega + d\omega$$

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

* W'keit, ein Hamiltonsches System bei Temperatur T mit Koordinaten p, q in $dp\,dq$ zu finden

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

$$Z(\beta) = \int dp\, dq\, e^{-\beta H(p,q)}, \qquad \beta = \frac{1}{kT}.$$

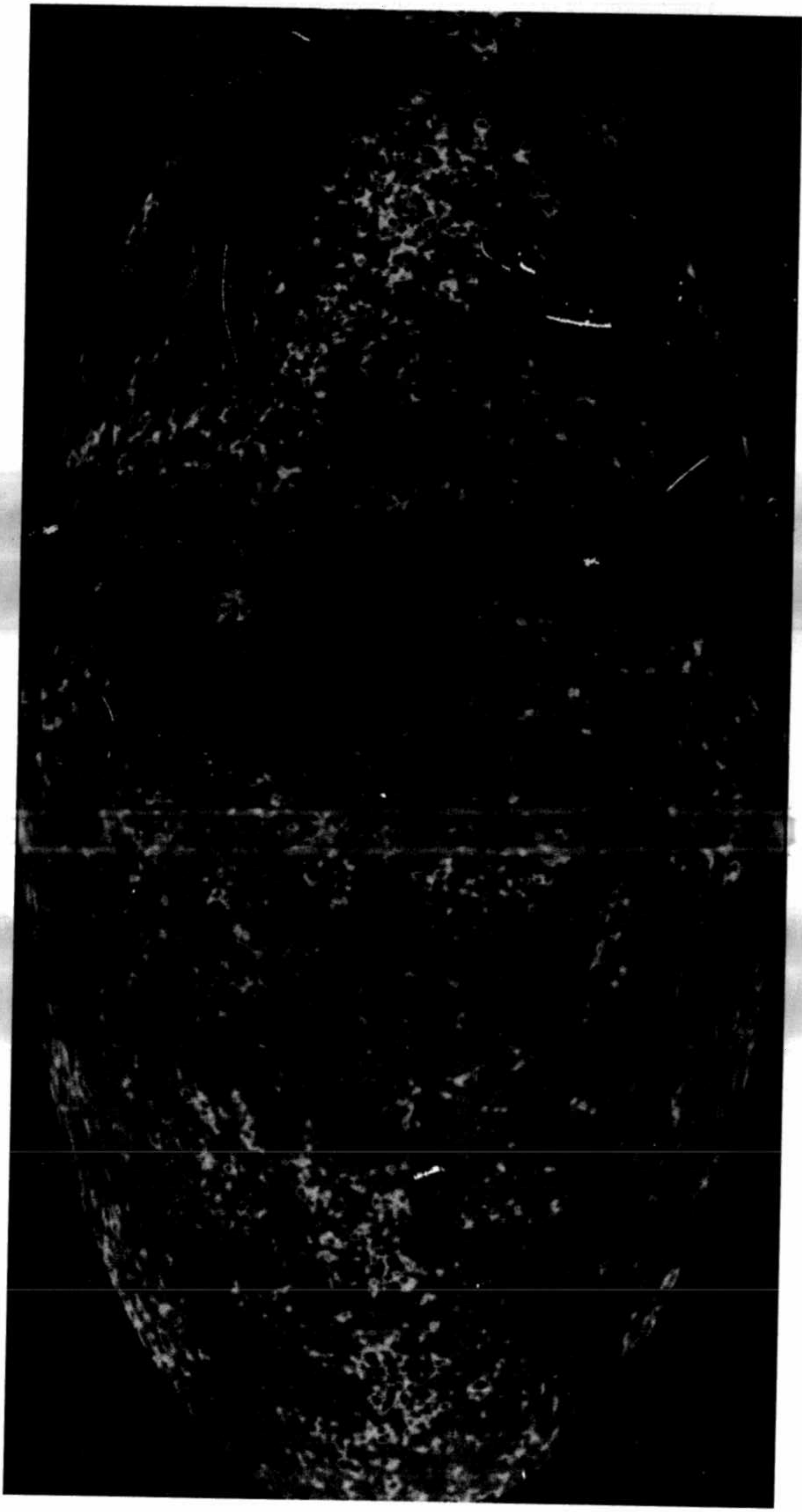
Mittlere Energie

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

Planck 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 $h = 6{,}55 \cdot 10^{-27}$ [erg · sec

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



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 $\hbar\omega$ bestünde.

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 Quantisierungsbedingung

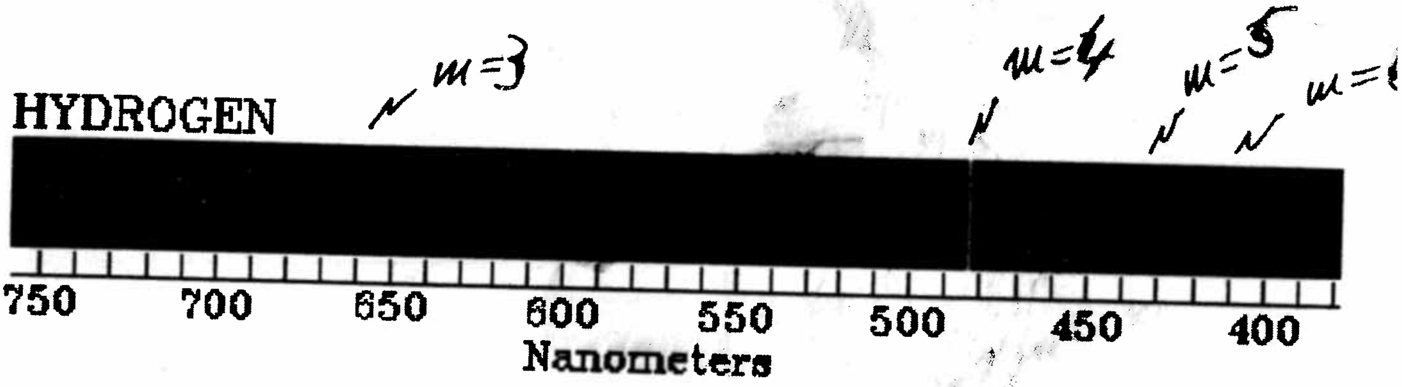
$$L_n = \hbar n.$$

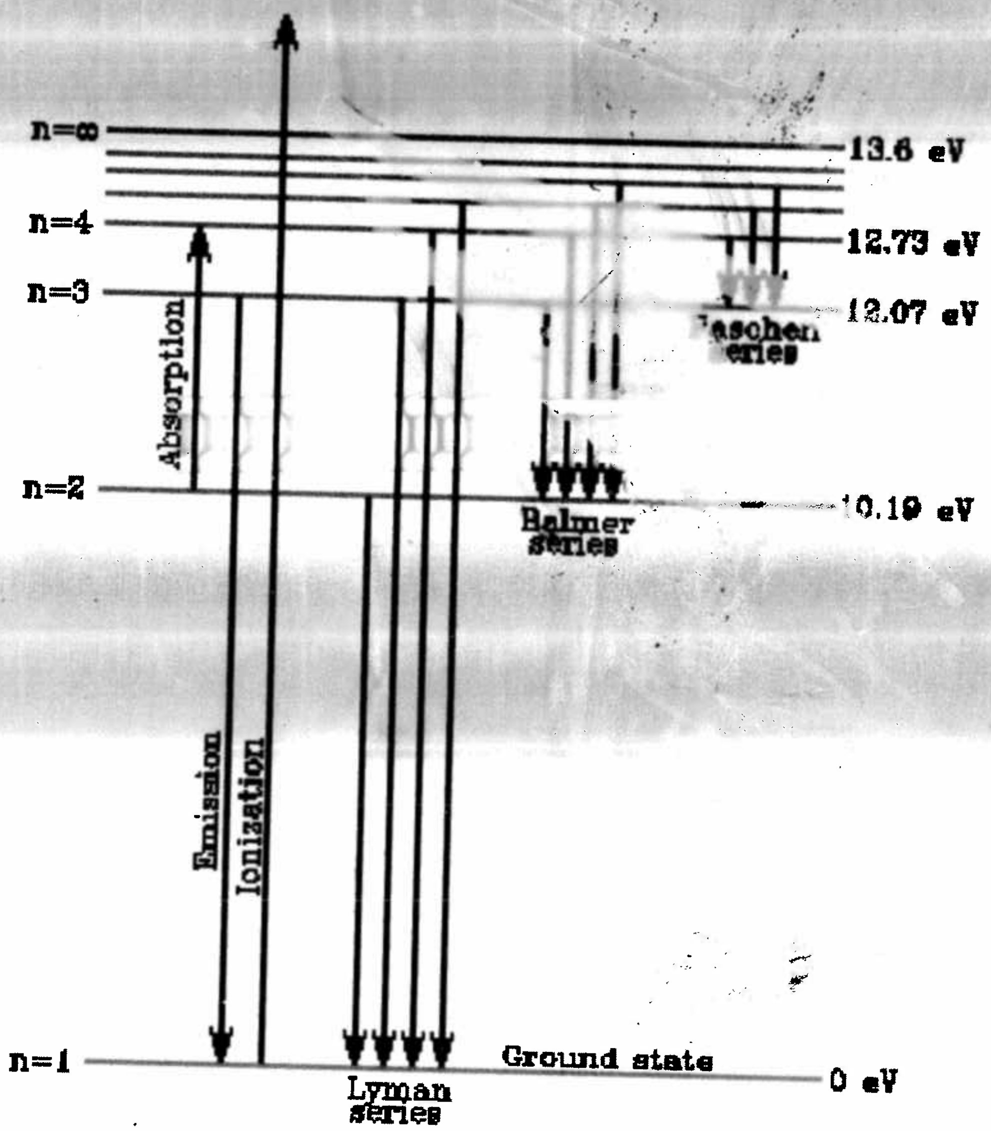
folglich

$r_n = a_0 n^2$ $\quad$ ($a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$: Bohr-Radius)

$E_n = -Ry \cdot n^{-2}$ $\quad$ ($Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2}$: Rydberg-Konst

$$\omega_n = \frac{2Ry}{\hbar n^3}$$


HYDROGEN
m=3
m=4
m=5
m=6
750
700
650
600
550
500
450
400
Nanometers


n=∞
n=4
n=3
n=2
n=1
13.6 eV
12.73 eV
12.07 eV
10.19 eV
0 eV
Absorption
Emission
Ionization
Paschen series
Balmer series
Lyman series
Ground state

Atome zeigen diskrete Lichtemissionsspektren.
Frequenzen beim H-Atom:

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

(Balmer 1885)

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

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

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

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

$$\to \quad E_n = -Ry\,\frac{1}{n^2} \qquad (Ry = R \cdot \hbar)$$

Quantisierung der Wirkung

Hamiltonsches System mit 1 Freiheitsgrad, (q,p)

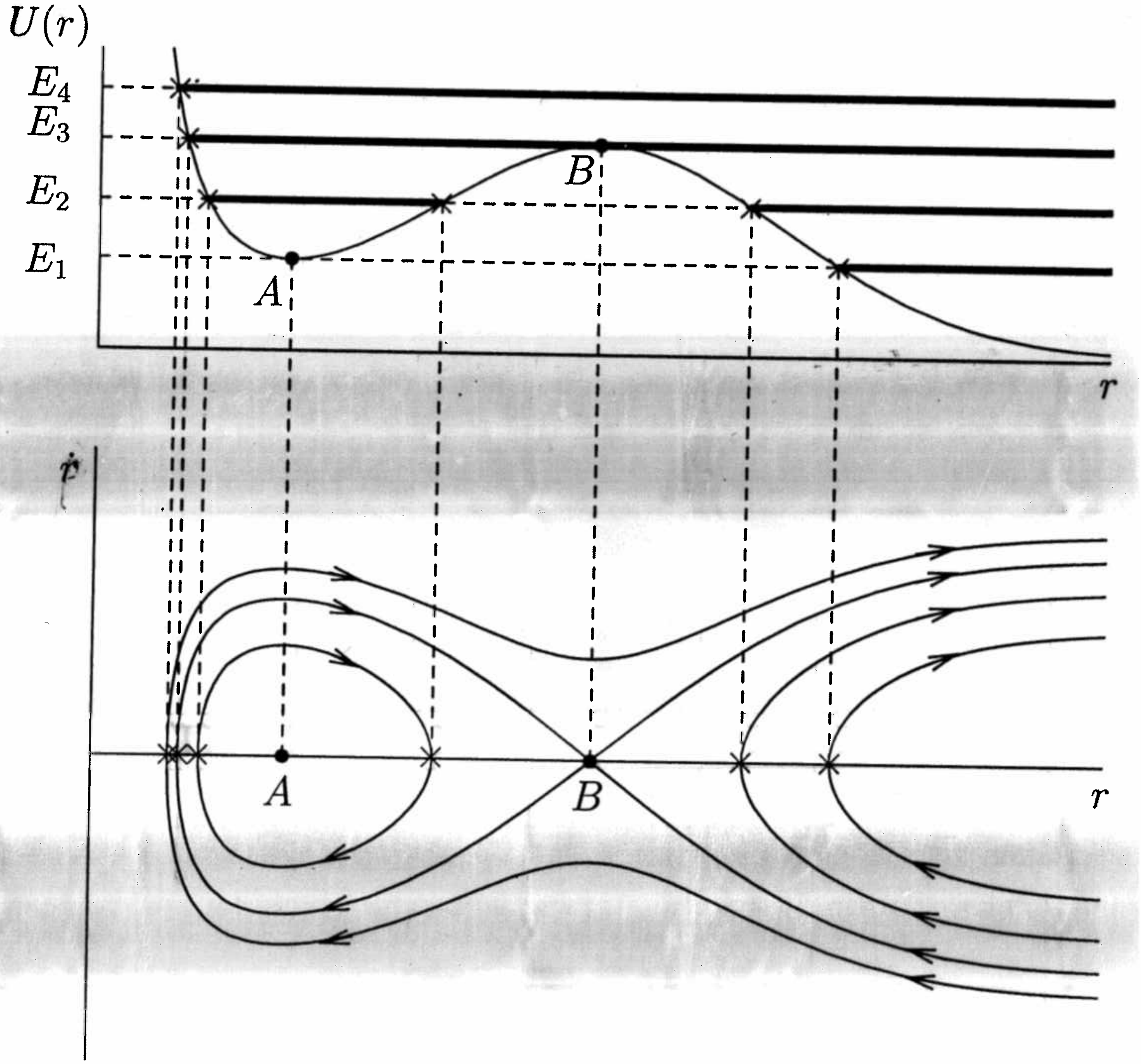
Gebundene Bahnen sind quantentheoretisc zulässig, falls Wirkung quantisiert ist:

$$\oint p\,dq = 2\pi n \hbar$$

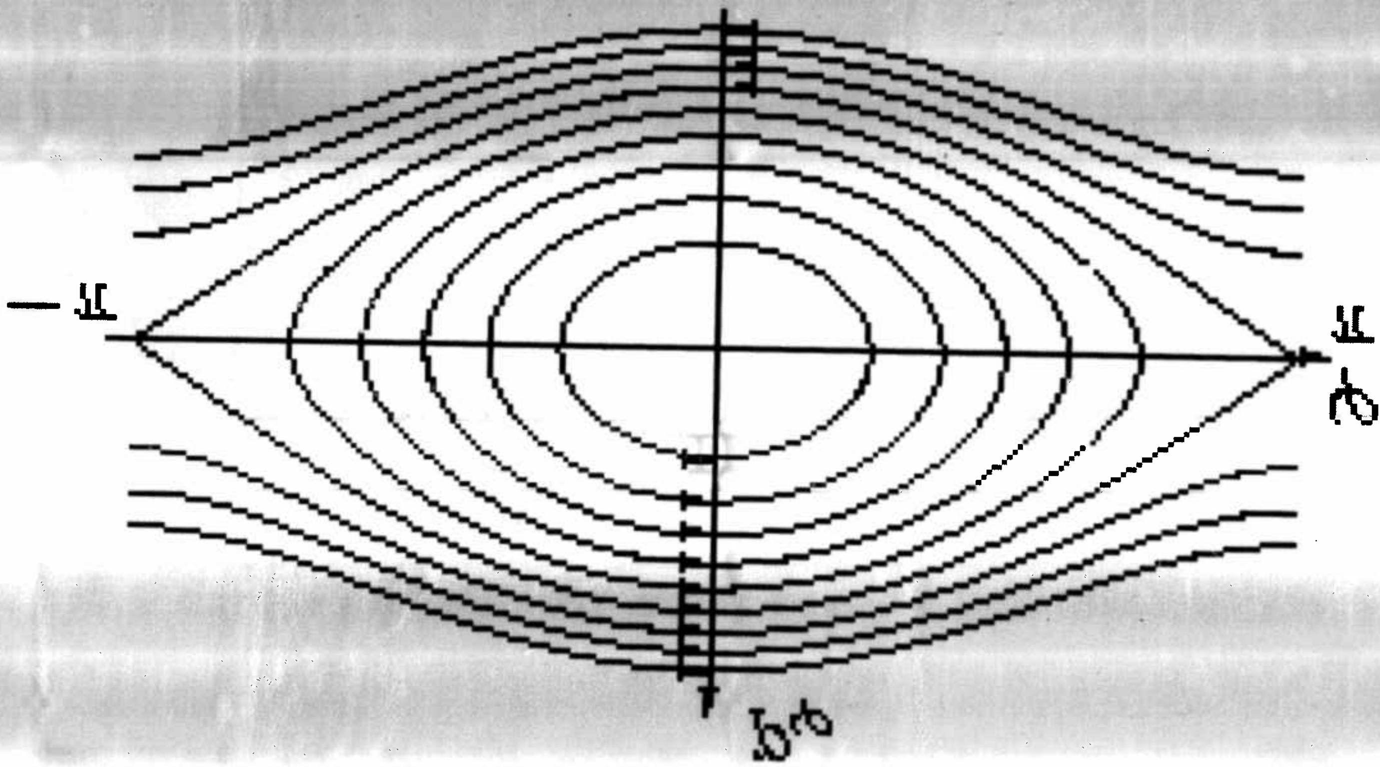
Integral über Bahnkurve

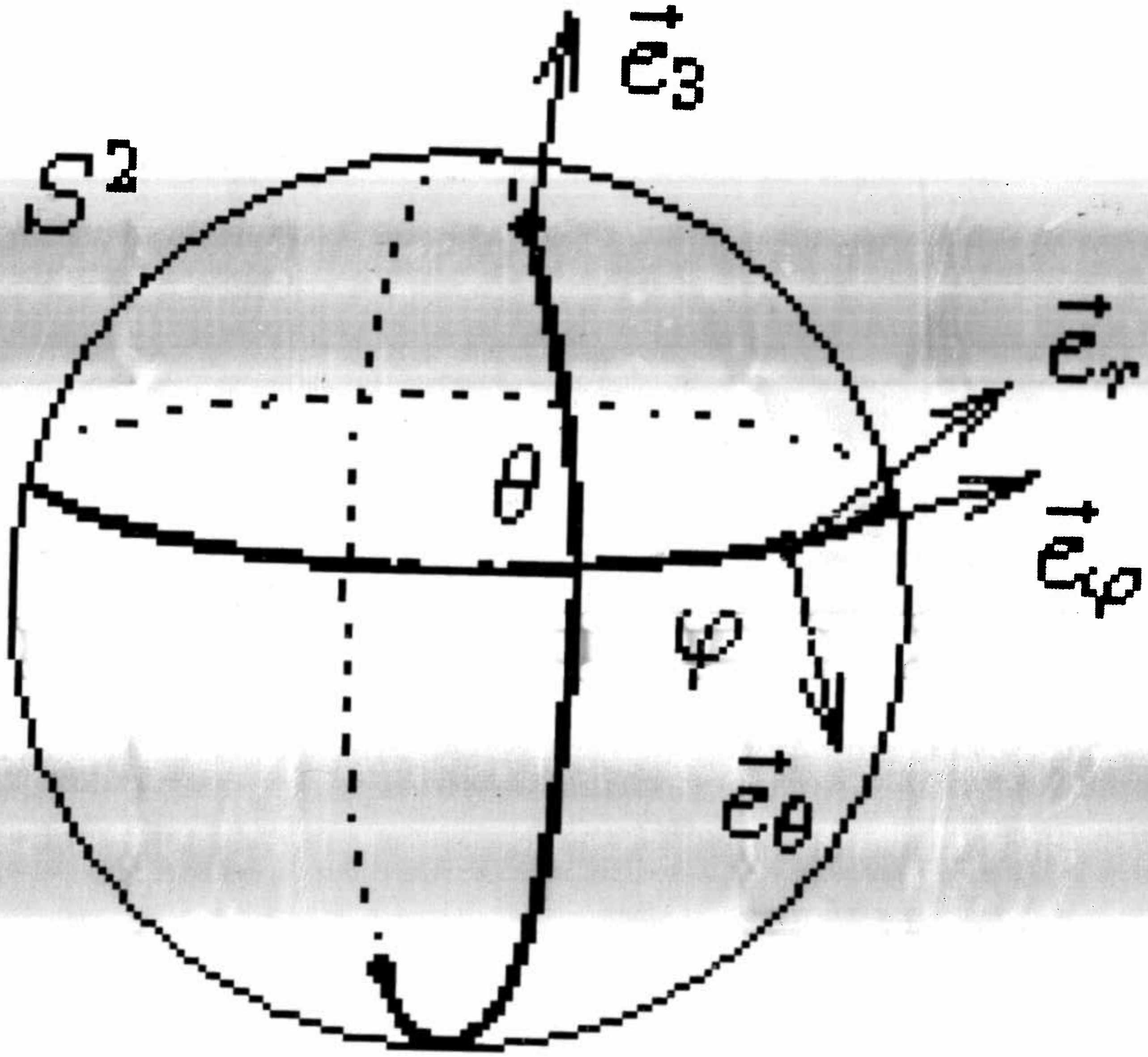
mit $n = 0, (\pm)1, (\pm)2, \ldots$ (Quantenzahl)
($\pm$ bei Rotationsbewegungen)

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



U(r)
E4
E3
E2
E1
A
B
r
ṙ
A
B
r




$\vec{e}_3$
S^2
$\vec{e}_r$
θ
$\vec{e}_\varphi$
φ
$\vec{e}_\theta$

Zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gl.

$$H\left(q_1, \dots q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \equiv \alpha_1$$

- Eine Lösung $S = S(q_1, \dots q_f, \alpha_1, \dots \alpha_f)$, die von f Parametern $\alpha_1, \dots \alpha_f$ (echt) abhängt, heisst <u>vollständig</u>. Dann, im $2f$-dimensionalen Phasenraum $(q_1, \dots q_f, p_1, \dots p_f)$: Bewegung verläuft auf Schnitt von f Flächen

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) \qquad (k = 1, \dots f)$$

Der Schnitt hat Dimension f. Jeder Punkt (q, p) liegt auf einem solchen Schnitt für passendes $\alpha = (\alpha_1, \dots \alpha_f)$. Die α_i sind <u>Erhaltungsgrössen</u>.

- Das System ist <u>vollständig separabel</u>, falls eine vollständige Lösung existiert der Form

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

Hamiltonsches System mit f Freiheitsgraden $(q_1 \ldots q_f, p_1 \ldots p_f)$ ist <u>vollständig separabel</u>, falls die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H\left(q_1 \ldots q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1} \ldots \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E$$

eine vollständig Lösung der Form

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

besitzt.

- Separationskonstanten $\alpha = (\alpha_1 = E, \alpha_2, \ldots \alpha_f)$ 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 $(q_1 \ldots q_f, p_1 \ldots p_f) \in \mathbb{R}^{2f}$ findet auf einem f-dimensionalen Torus statt, bestimmt durch $\alpha = (\alpha_1, \ldots \alpha_f)$

Quantisierungsbedingung: Zulässig sind Tori falls

$$W_k(\alpha) := \oint \underbrace{p_k}_{=\frac{\partial S_k}{\partial q_k}} dq_k = 2\pi n_k \hbar$$

$$(n_k = 0, (\pm) 1, (\pm) 2, ..)$$

für alle $k = 1, .. f$.

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

$$\alpha_1 = E_{n_1 ... n_f}$$

Umsetzung erfordert Berechnung der Integrale W_k.

2-Körpersystem im Schwerpunktssystem

- Relativvektor $\vec{x}$ in Polarkoord. (r, θ, φ)

$$\vec{x} = r\vec{e}_r$$

$$\dot{\vec{x}} = \dot{r}\vec{e}_r + r\dot{\theta}\vec{e}_\theta + r\sin\theta\,\dot{\varphi}\,\vec{e}_\varphi$$

- Kinetische Energie

$$T = \frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2 = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2)$$

- Kanonische Impulse $p_i = \partial T / \partial \dot{q}_i$

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}$$

- Drehimpuls $\quad (\vec{e}_r \wedge \vec{e}_\theta = \vec{e}_\varphi, \ \vec{e}_r \wedge \vec{e}_\varphi = -\vec{e}_\theta)$

$$\vec{L} = m\vec{x} \wedge \dot{\vec{x}}$$

$$= mr^2\dot{\theta}\,\vec{e}_\varphi - mr^2\sin\theta\,\dot{\varphi}\,\vec{e}_\theta$$

$$= p_\theta\,\vec{e}_\varphi - \frac{p_\varphi}{\sin\theta}\,\vec{e}_\theta \, ,$$

insbesondere $\quad (\vec{e}_3 \cdot \vec{e}_\theta = -\sin\theta)$

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

$$\vec{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}$$

- Hamilton-Funktion

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

mit $V = V(r)$ sphärisch symmetrisches Potential (unabh. von θ, φ!)

Bohr-Sommerfeld Quantisierung des 2-Körperproblems

$(V = V(r)$: Paarpotential$)$

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

$$W_\varphi(\alpha) = 2\pi \alpha_\varphi$$

$$|W_\varphi(\alpha)| + W_\theta(\alpha) = 2\pi \alpha_\theta$$

$$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}}\, dr$$

Quantisierung der Wirkungen $\rightarrow$ Quantisierung von Drehimpuls und Energie

$$\vec{L}\cdot\vec{e}_3 = \alpha_\varphi = n_\varphi \cdot \hbar \qquad (n_\varphi = 0, \pm 1, \ldots$$

$$\vec{L}^2 = \alpha_\theta^2 \,, \quad \alpha_\theta = (|n_\varphi| + n_\theta)\hbar \equiv l \cdot \hbar$$

$(n_\theta = 0, 1, \ldots)$

wobei wegen $|\vec{L}\cdot\vec{e}_3| \le |\vec{L}|$: $|n_\varphi| \le l$

$\uparrow$ $2l+1$ Mögl.

$E = E_{n_r, l}$ (mit Entartung)

$\uparrow$

hängt nur von 2 (statt 3) Quantenzahlen ab

Emission und Absorption

- Materie besteht aus Molekülen
  - einfachheitshalber 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: $n \to m$, ($E_n > E_m$)

    W'keit pro Zeiteinheit: A_{nm}
  - induzierte Emission bzw. Absorption in Anwesenheit von Strahlung:
    $n \to m$ ($E_n > E_m$ 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-
    geschlossen

Doppelspalt-Experiment:

www.hitachi.com/rd/research/em/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-Jacobi

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

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

Zerlegung $\quad \psi = Ae^{iS}$

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

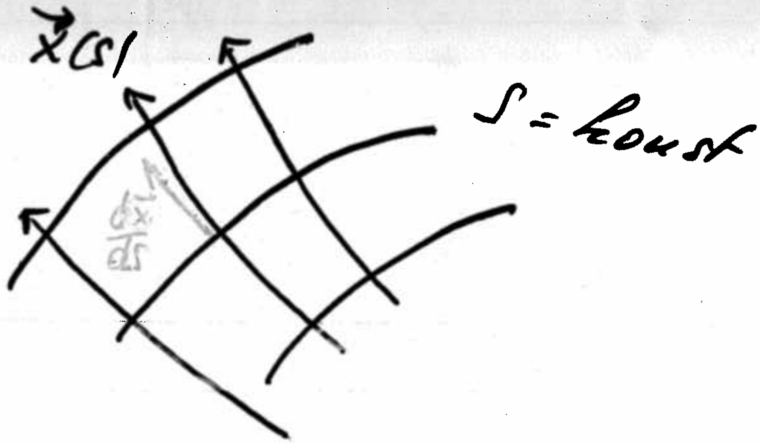
- Strahlenoptik ist gute Näherung in Gebieten, wo $A(\vec{x})$ wenig variiert über eine Wellenlänge $2\pi/k$:

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

Dort wird (*) zu

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

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



$$\frac{d\vec{x}}{ds} = \frac{\vec{\nabla} S}{|\vec{\nabla} S|} \qquad (s: \text{Bogenlänge})$$

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

Bewegungsgleichung der Wellenmechanik (Schrödinger-Gl.)

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

liefert <u>Zustand</u> $\psi(\vec{x},t)$ 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

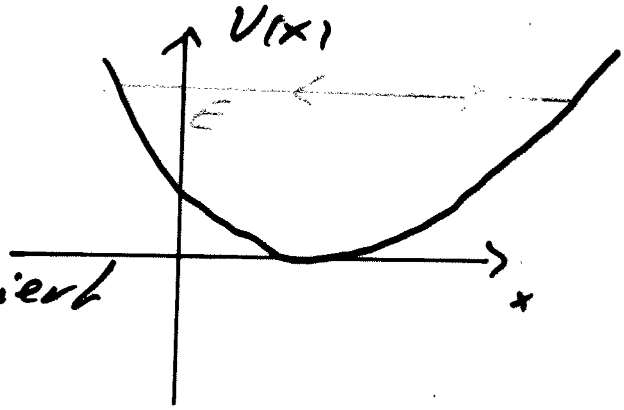
$$\int_\Omega |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

die <u>Wahrscheinlichkeit</u> 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

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

Schwingungsfrequenz

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

• quantentheoretisch zulässig (Sommerfeld), falls

$$n = 0, 1, 2, ..$$

(Zustand)

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

$$a(t) = a(p(t), x(t)) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(n)\, e^{imn\omega(t)}$$

Dabei gilt

- $$A_{-m}(n) = \overline{A_m(n)} \qquad (a \text{ reell})$$

- $$\dot{a}(t) = i\omega(n) \sum_m m A_m(n) e^{im\omega(n)t}$$

- für $c = ab$

$$C_m(n) = \sum_{m'} A_{m-m'}(n) B_{m'}(n)$$

• Korrespondenzprinzip : Strahlungsfrequenzen

klassisch | quantenth.

$$m\omega(n) = m \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn} \qquad \omega_{n,n-m} = \frac{E(n) - E(n-m)}{\hbar}$$

$(n \in \mathbb{R})$ | $(n \in \mathbb{N})$

• Quantisierung

$$m\omega(n) \longrightarrow \omega_{n,n-m}$$

$$A_m(n) \longrightarrow A_{n,n-m}$$

$$A_m(n) e^{im\omega(n)t} \longrightarrow A_{n,n-m} e^{i\omega_{n,n-m}t}$$

Eig.: einer Bahnkurve n | eines Paars $n, n-m$ von Zuständen

- quantenmechanische Observable:

<u>Matrix</u>

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

- $C = AB$ ist Matrixprodukt (aus Ritzschem Kombinationsprinzip)

- Quantisierungsvorschrift mehrdeutig ($m \rightsquigarrow -m$)

$$m\omega(n) \longrightarrow \begin{cases} \omega_{n,n-m} \\ \omega_{n+m,n} \end{cases}$$

$$A_m(n) \longrightarrow \begin{cases} A_{n,n-m} \\ A_{n+m,n} \end{cases}$$

- Reellitätsbedingung

$$A_{n-m,n} = \overline{A_{n,n-m}} \quad : \quad A = A^*$$

Matrizenmechanik

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

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

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

Rechnung führt auf

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

- Heisenberg : $D_{nn} = 1$ $\quad$ *
- Born, Jordan ; Dirac

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

* aus Uminterpretation der Sommerfeld-Bdg.

** 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 $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ $(A = A^*)$

[• einen ausgezeichneten Operator $H = H^*$ (Hamiltonoperator)]

mittels Zuordnungen

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

2) Ja/Nein-Observablen $\longrightarrow$ Orthogonale Projektoren
Eintreffen eines Ereignisses
Ergebnis : 1/0

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

• W'keit des Ereignisses	$\langle\psi\|P\|\psi\rangle$
• Mögliche Ergebnisse	EW von $P: \lambda = 0,$
• Zustand mit deterministischem Ergebnis	EV von P $P\|\psi\rangle = \lambda\|\psi\rangle$

3) Beliebige Observablen $\longrightarrow$ Selbst-adjungierte Operatoren

$$A = A^*$$

- Erwartungswert der Messung $\qquad \langle \psi | A | \psi \rangle$
- Mögliche Messergebnisse $\qquad \lambda \in \sigma(A)$

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

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

$$\|(A - \lambda)\psi_\varepsilon\| \leq \varepsilon$$

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

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

$$f \mapsto f(A)$$

mit den Eigenschaften

- Linearität in f
- $(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A)$
- $\bar{f}(A) = f(A)^*$
- $f(A) = 1$ 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.

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

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

entspricht

$$P_\Omega : \psi(x) \longmapsto \underbrace{P_\Omega(x)}_{\substack{\text{charakteristische} \\ \text{Funktion von } \Omega}} \psi(x)$$

2) "Ort x des Teilchens"

entspricht

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

$$x : \psi(x) \longmapsto x\psi(x)$$

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

Verallgemeinerte EV (oder Eigenzustände)

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \qquad (x_0 \in \mathbb{R})$$

$$\notin L^2(\mathbb{R})$$

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

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

$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$, $\int dx\, |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$

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

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

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

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

Heisenberg-Bild

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

($|\psi\rangle$ 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

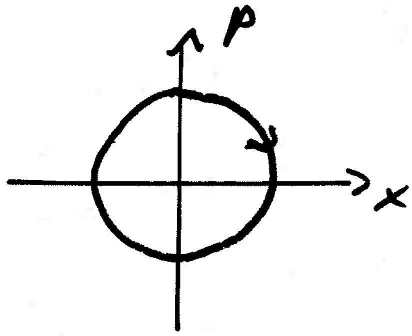
$$\psi(\vec{x},t) = \int d^3y \; g(\vec{x}-\vec{y},t)\, \psi(\vec{y},0)$$

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

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

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

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

$$[a, a^*] = 1$$

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

$$N := a^* a$$

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: $\quad n = 0, 1, 2, \ldots$

Eigenwerte n von N:

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

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

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

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

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

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

$H_n(\xi)$: Hermite-Polynome

(führender Term $(2\xi)^n$)

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

- Im Ortsraum

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

- Im Impulsraum

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

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

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

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

ist Translation um Δx und Δp mit

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

bzw.

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

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

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

• Verschiebungsoperatoren

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

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

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

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

• Eigenschaften:

i) $V(\alpha)^* = V(\alpha)^{-1} = V(-\alpha)$,

ii)* $V(\alpha) = e^{\alpha a^*} e^{-\bar{\alpha} a} e^{-|\alpha|^2/2}$,

iii) $a V(\alpha) = V(\alpha)(a+\alpha)$.

• Kohärente Zustände:

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

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

---

* folgt aus

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

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

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

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

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

Symmetrien und Erhaltungssätze in der Hamiltonschen Mechanik

$H = H(x)$: Hamiltonfunktion,
erzeugt Fluss ϕ^t, d.h.
$x(t) = \phi^t(x)$ erfüllt $\varepsilon \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial x}$

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

Dann ist

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

Äquivalent sind also:

- F ist eine Erhaltungsgrösse:

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

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

- φ^λ ist eine Symmetrie von H :

$$H(\varphi^\lambda(x)) = H(x) \quad , \quad \forall x \in \Gamma, \ \lambda \in \mathbb{R}$$

Symmetrien und Erhaltungssätze

$H = H^*$: Hamiltonoperator

$A = A^*$: bel. Observable

erzeugen 1-param. unitäre Gruppen:

$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\varphi_0\rangle$: Lösung von $i\hbar \frac{d|\varphi\rangle}{dt} = H|\varphi\rangle$

zum Anfangszustand $|\varphi_0\rangle$

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

zum selben Anf.zs. $|\varphi_0\rangle$

Dann ist

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) | A | \varphi(t) \rangle \Big|_{t=0}$$

$$= \langle \varphi_0 | \frac{i}{\hbar} [H, A] | \varphi_0 \rangle$$

$$= - \langle \varphi_0 | \frac{i}{\hbar} [A, H] | \varphi_0 \rangle$$

$$= -\frac{d}{d\lambda} \langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle \Big|_{\lambda=0}$$

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

$$U(R): \psi(\vec{x}) \longmapsto \psi(R^{-1}\vec{x})$$

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

$$R \longmapsto U(R)$$

ist eine unitäre Darstellung.

- 1-parametrige 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

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} \qquad \text{Drehimpuls}$$

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 <u>auch</u> eine Abb. auf $L^2(\Omega)$

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

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

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

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

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

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

Das Zweikörperproblem

Nach Separation der Schwerpunktsbewegung (frei) verbleibt <u>Relativbewegung</u>

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

Zentralkraftproblem.

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

Eigenwerte von H?

<u>Zuerst</u> Eigenwertproblem von $\vec{L}^2$ lösen. Eigenräume von $\vec{L}^2$ invariant unter H. <u>Dann</u> Eigenwertproblem von H auf diesen lösen (reduziertes Eigenwertproblem).

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

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

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

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

$L^2(\Omega) = \{ Y : \Omega \to \mathbb{C} \mid \int_\Omega de\, |Y(\vec{e})|^2 < \infty \}$

Hilbertraum mit Skalarprodukt

$$(Y, Z) = \int_\Omega de\, \overline{Y(\vec{e})}\, Z(\vec{e}).$$

Definition: $Y_\ell : \Omega \to \mathbb{C}$ heisst Kugelfunktion zum Index $\ell = 0, 1, 2, \ldots$, falls Y_ℓ die Einschränkung auf Ω eines homogenen, harmonischen Polynoms $u_\ell(\vec{x})$ vom Grad ℓ ist:

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

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

Satz.

a) $\vec{M}^2 Y_\ell = \ell(\ell+1) Y_\ell$

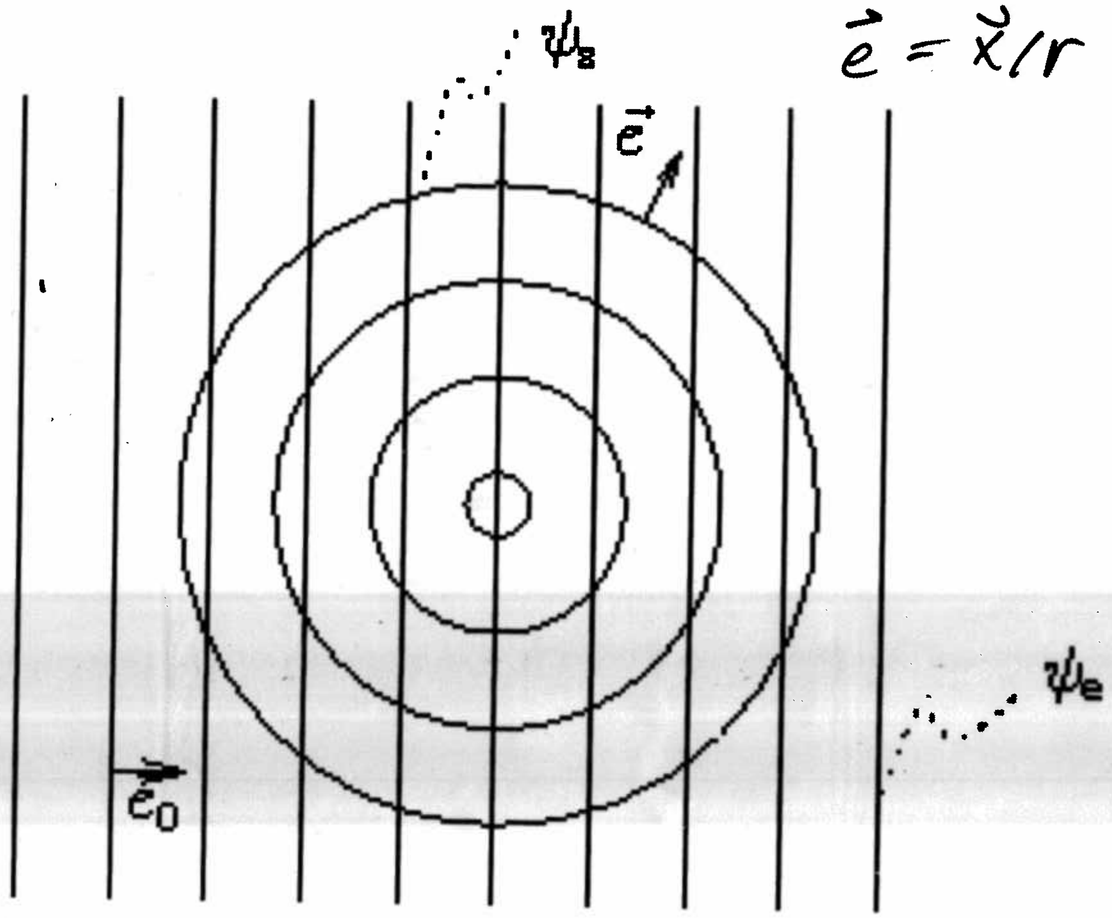
b) $(Y_\ell, Y_{\ell'}) = 0$ für $\ell \neq \ell'$

c) $\dim \mathcal{Y}_\ell = 2\ell+1$

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

Streuzustände

$\vec{e} = \vec{x}/r$



$$\psi(k,\vec{x}) = \psi_e(k,\vec{x}) + \underbrace{\psi_s(k,\vec{x})}_{\text{Streuwelle}}$$

einfallende Welle

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

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

(asymptotische Bedingung: Streuwelle rein auslaufend)

Differentieller Streuquerschnitt

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

Totaler Streuquerschnitt

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

Optische Theorem

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

Vorwärtsrichtung

Partialwellenzerlegungen

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

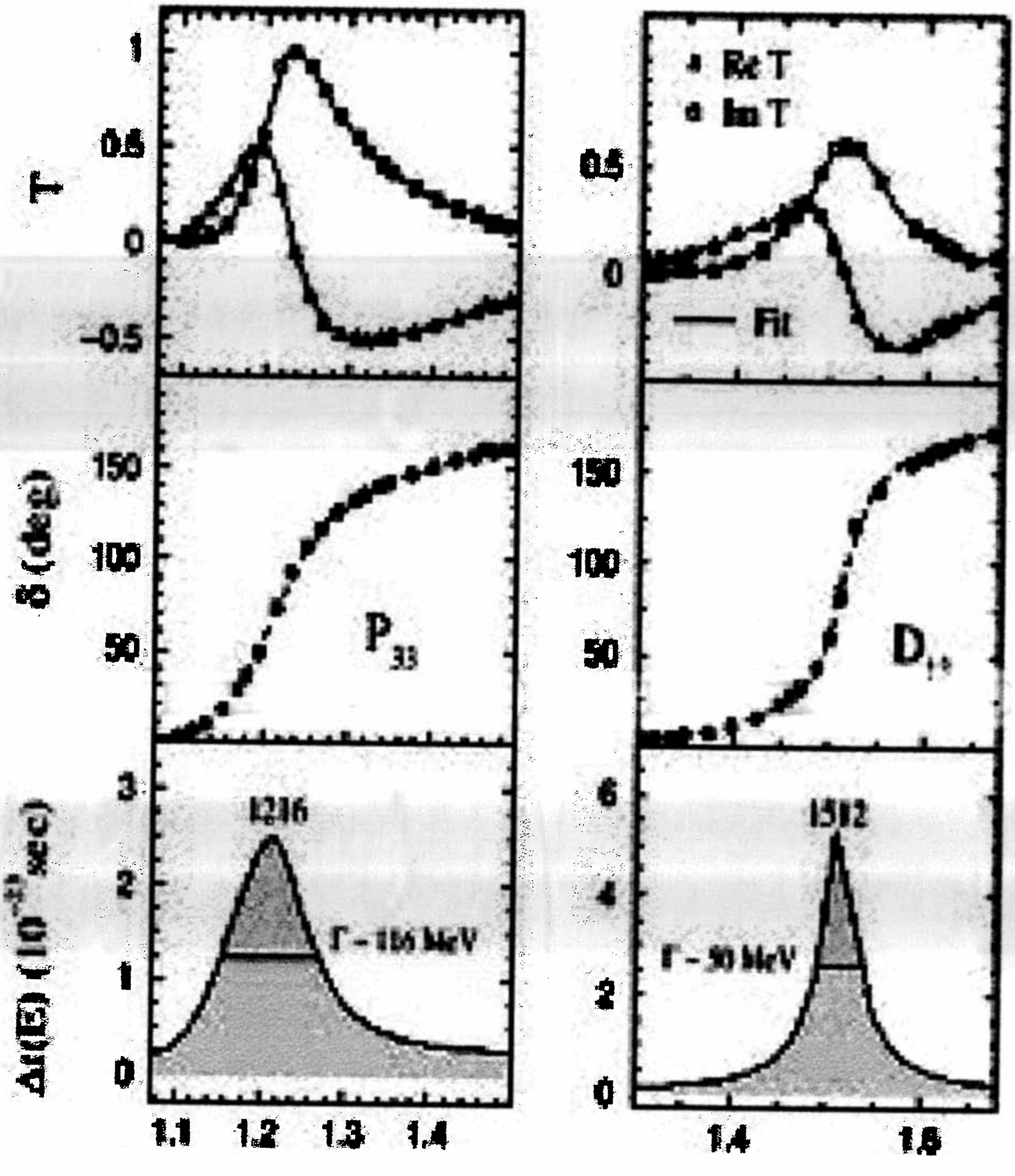
$$\tilde{j}_l(\rho) = \frac{1}{2i}\left(e^{i(\rho - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(\rho - \frac{l\pi}{2})}\right) + O(\rho^{-1})$$
$$(\rho \to \infty)$$

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

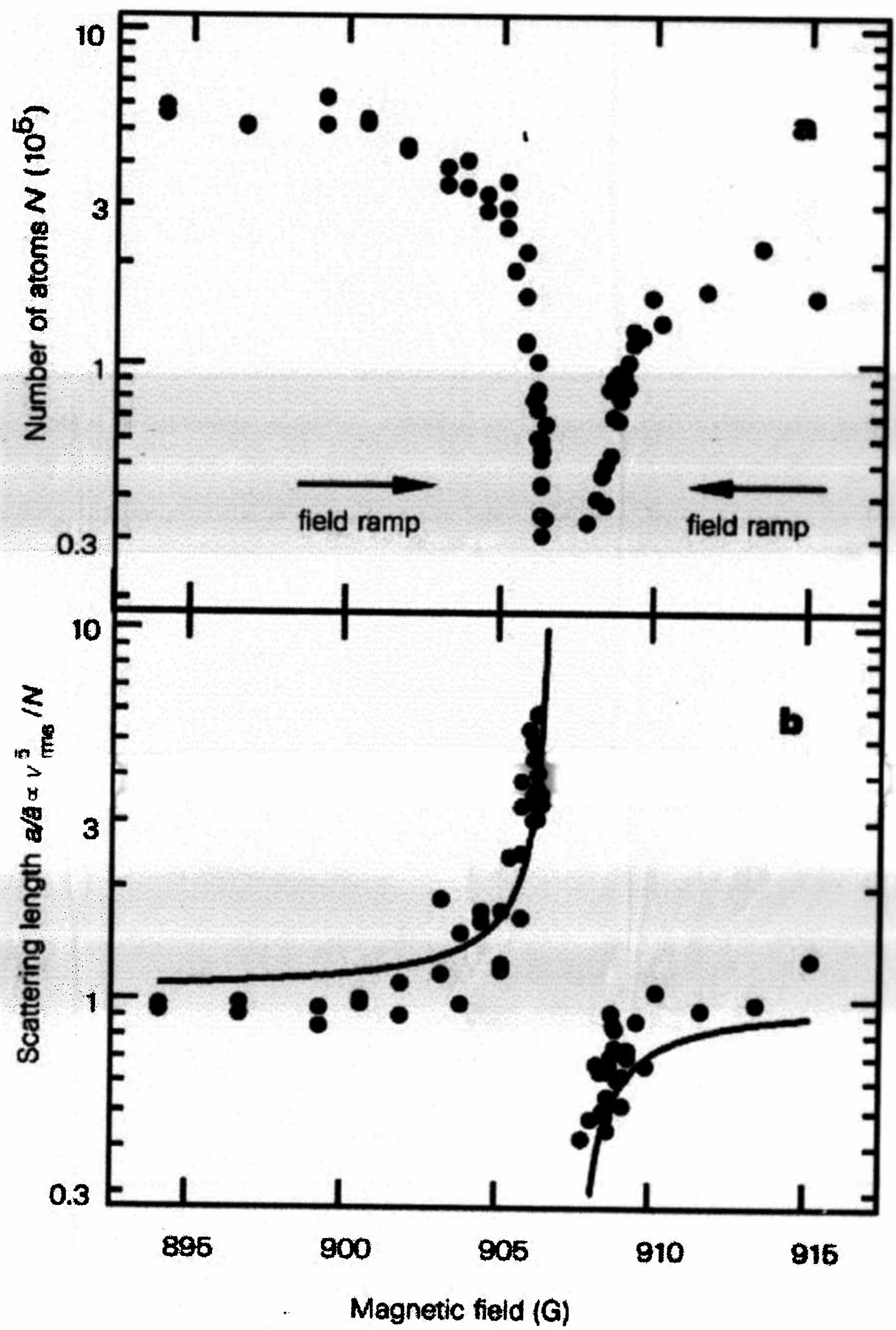
$$u_l(k,r) = \frac{1}{2i}\left(e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} + 2\delta_l)} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})}\right) + O(r^{-1})$$
$$(r \to \infty)$$

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

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



T
1
0.5
0
-0.5
δ (deg)
150
100
50
P33
Δt(E) (10^-23 sec)
3
2
1
0
1216
1.1
1.2
1.3
1.4
Re T
Im T
Fit
D13
6
4
1512
1.4
1.6



Number of atoms N (10^5)
a
field ramp
field ramp
Scattering length $a/\bar{a} \propto v_{rms}^5/N$
b
Magnetic field (G)

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

$$2i u_\ell(k,r) = S_\ell(k)\,\hat{h}_\ell(kr) - \hat{h}_\ell(kr)\,, \quad (r > R_0)$$

wobei

u_ℓ: reguläre Lösung der radialen Schrödingergl. mit Potential $V(r)$ $\quad (V(r)=0\,,\ r>R_0)$

$\hat{h}_\ell$: Lösung der freien rad. SG. mit Asymptotik

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

einer auslaufenden Welle

- $u_\ell(k,r)^*$ ist analytisch in $k = \mathbb{C}$:

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

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

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

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

Also: $\quad (r > R_0)$

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

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 $\tilde{h}_\ell(-p) = (-1)^\ell\, \overline{\tilde{h}_\ell(\bar{p})}$:

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

Störungsrechnung

- H^0: ungestörter Hamiltonoperator mit einem bekannten, isolierten, nicht-entarteten Eigenwert E^0 und Eigenvektor ψ^0 ($\|\psi^0\| = 1$)
- $H = H^0 + \varepsilon H'$: gestörter H. operator (ε : Kopplungskonstante, klein)

Eigenwert von H

$$E = E^0 + \varepsilon E' + \varepsilon^2 E' + \dots$$

mit

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

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

mit P_0 Projektor auf Eigenraum zu E_0

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

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

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

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

$$P_0 H' P_0 \qquad \text{auf Eigenraum zu } E$$

sind

- Ist Eigenraum von H^0 identisch mit Eigenraum eines 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"

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

wobei $R(t) \in SO(3)$ diff.'bar mit $R(0) = 1$

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

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

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

zudem

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

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

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

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

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

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

Darstellungen

- Def. U ist eine Darstellung von $SO(3)$ auf dem Vektorraum $\mathcal{H}$, falls

$$U: SO(3) \longrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{\text{lin. Abb. } \mathcal{H} \to \mathcal{H}\}$$
$$R \longmapsto U(R)$$

ein Homomorphismus ist

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

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

- Jede Darstellung von $SO(3)$ induziert eine von $so(3)$ durch

$$U(\Omega) = \frac{d}{dt}\, U(R(t))\Big|_{t=0} \qquad (\Omega, R(t) \text{ wie vorh}$$

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

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

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

(Nicht jede Darstellung von $so(3)$ muss aus einer von $SO(3)$ stammen!)

- $U(R)$ unitär $\rightarrow$ $U(\Omega)^* = -U(\Omega)$

Selbstadjungiert sind

$M(\vec{\omega}) := i\,U(\Omega(\vec{\omega}))$, insb. für $\vec{\omega} = \vec{e}_i$:

$$M_i = i\,U(\Omega_i)$$

$\rightarrow$ $[M_1, M_2] = i M_3$ & zykl.

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