

# Quantenmechanik für Lehramtskandidaten und Meteorologen

Alexander Shnirman

*Institut für Theorie der Kondensierten Materie, Karlsruher Institut für Technologie*

(Dated: 17. Januar 2014)

## Contents

<b>I. Motivation</b>	4
<b>II. Zustände in Quantenmechanik</b>	4
A. Hilbert-Raum	4
B. Einfachster Hilbertraum: Quantenbit oder Spin 1/2 oder Zwei-Niveau-System	6
C. Ein Teilchen in 1-D	6
<b>III. Die Observable</b>	7
A. Der Impuls-Operator	9
<b>IV. Schrödinger-Gleichung</b>	10
A. Erhaltung der Wahrscheinlichkeit	10
B. 3-D Teilchen	11
C. Stationäre Zustände	11
<b>V. Impuls-Darstellung einer Wellenfunktion</b>	12
A. Unschärfe-Relation	13
<b>VI. Wellenpakete</b>	16
<b>VII. Streuzustände und gebundene Zustände</b>	18
A. Randbedingungen	18
B. Streuzustände	19
C. Barriere	19
D. Gebundene Zustände	21
<b>VIII. Harmonischer Oszillator</b>	22
<b>IX. Drehimpuls</b>	24
A. Sphärische Koordinaten	25
B. Leiteroperatoren	26
C. Der Operator $L^2$	26
<b>X. Wasserstoffatom</b>	27

<b>XI. Spin 1/2</b>	28
<b>XII. Periodensystem der Elemente</b>	30
A. Pauli-Prinzip	30
<b>XIII. Spin 1/2, Dynamik</b>	31
A. Magnetisches Moment	31
B. Gyromagnetisches Verhältnis	31
C. Spin-Präzession	32

Literatur:

Griffiths, David J. (2004). Introduction to Quantum Mechanics (2nd ed.). Prentice Hall.

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Lalö: Quantenmechanik. 2. Auflage. De Gruyter, Berlin 1999

Franz Schwabl: Quantenmechanik Eine Einführung. 6. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2002

## I. MOTIVATION

Quantenmechanik wurde um 1925 von mehreren Wissenschaftlern entwickelt. U.a., W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, P. Jordan, W. Pauli, P. Dirac, J. von Neumann ....

Alte Quantentheorien:

1) 1900 - Strahlungsgesetz von Max Planck. Planck konnte das Strahlungsspektrum der schwarzen Körper nur mit Hilfe der Hypothese erklären, dass die Energie der elektromagnetischen Wellen gequantelt ist. Das Energie-Quantum lautet  $E = h\nu = \hbar\omega$ . Hier  $\hbar \equiv h/(2\pi) \approx 1.054 \times 10^{-34}$  J s.

2) 1905 - Photoeffekt, A. Einstein. Bei Bestrahlung mit kurzwelligem Licht werden aus der Oberfläche eines Metalls Elektronen herausgelöst. Die kinetische Energie eines Elektrons hängt von der Frequenz des Lichtes aber nicht von der Intensität ab.  $E_{\text{kin}} = \hbar\omega - W$ , wobei  $W$  die Austrittsarbeit ist.

3) Atommodell von Niels Bohr, 1913. Elektronen befinden sich in diskreten stationären Zuständen mit Energien  $E_n$ . Übergänge zwischen den Zuständen durch Ausstrahlung  $E_n - E_m = \hbar\omega$ .

4) de Broglie (1923)  $p = \hbar k$ . Z.B., für Photonen aus  $E = \hbar\omega = cp$  und  $\omega = ck$  folgt  $p = \hbar k$ . Wellen der Materie. Interferenz.

## II. ZUSTÄNDE IN QUANTENMECHANIK

### A. Hilbert-Raum

In der klassischen Mechanik der Zustand des Systems ist ein Punkt im Phasenraum. Z.B., für ein Teilchen kennen wir den Zustand wenn wir den Ortsvektor  $\vec{r}$  und den Impuls  $\vec{p}$

kennen. In der Quantenmechanik liegen die Zustände im Hilbertraum (nach David Hilbert genannt).

*a. Definition:* **Hilbertraum ist ein** (vollständiger)**Vektorraum mit Skalarprodukt.** (Skalarprodukt definiert die Norm eines Vektors und folglich Konvergenz. Die Vollständigkeit bedeutet, dass jede Cauchy-Folge konvergiert (zu einem Element des Raums).)

*b. Skalarprodukt:* In der Quantenmechanik werden (ausschließlich) komplexe Hilberträume benutzt (Vektorraum über  $\mathbb{C}$ ). Der Skalarprodukt in einem komplexen Hilbertraum hat die folgenden Eigenschaften: Skalarprodukt ist linear bezüglich des zweiten und *semilinear* bezüglich des ersten Arguments:

$$\begin{aligned}\langle g | \alpha u + \beta v \rangle &= \alpha \langle g | u \rangle + \beta \langle g | v \rangle \\ \langle \alpha u + \beta v | g \rangle &= \alpha^* \langle u | g \rangle + \beta^* \langle v | g \rangle ,\end{aligned}\tag{1}$$

wobei  $u, v, g$  die Vektoren des Hilbertraums sind und  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ . Motiviert durch Skalarprodukt-Bezeichnung  $\langle u | v \rangle$  definiert man die *ket*-Vektoren  $|v\rangle$  und die *bra*-Vektoren  $\langle u|$ .

*c. Superposition-Prinzip:* Wenn  $|u\rangle$  und  $|v\rangle$  zwei physikalischen Zustände sind, ist auch  $|g\rangle = \alpha |u\rangle + \beta |v\rangle$  ein physikalischer Zustand.

*d. Basis:* Mit Hilfe von Basisvektoren  $|n\rangle$  können alle Vektoren des Hilbertraums zerlegt werden:

$$|u\rangle = \sum_n c_n |n\rangle .\tag{2}$$

Weiteres es ist sehr bequem eine orthonormierte Basis zu wählen, d.h.,  $\langle m | n \rangle = \delta_{m,n}$ . Es ist auch nicht schlecht wenn die Vektoren  $|n\rangle$  eine klare physikalische Bedeutung haben. Z.B., verschiedene Positionen eines Teilchens.

*e. Normierung, Wahrscheinlichkeiten, globale Phase:* Alle physikalischen Zustände sind normiert, d.h.,  $\langle u | u \rangle = 1$ . Mit der Zerlegung (2) bedeutet das

$$\langle u | u \rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m | n \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1 .\tag{3}$$

Das ergibt die Interpretation der Normierung:  $|c_n|^2$  sind die Wahrscheinlichkeiten das System im Zustand  $|n\rangle$  zu finden. Normierung bedeutet, dass Summe aller Wahrscheinlichkeiten ist 1. Darüber hinaus der Zustand ist unverändert durch Multiplikation mit einer Phase. D.h., der Vektor  $e^{i\gamma} |u\rangle$  stellt den gleichen physikalischen Zustand wie  $|u\rangle$  dar.

## B. Einfachster Hilbertraum: Quantenbit oder Spin 1/2 oder Zwei-Niveau-System

Die Basis besteht nur aus zwei Zuständen:  $|0\rangle = |\uparrow\rangle$  und  $|1\rangle = |\downarrow\rangle$ . Ein beliebiger Zustand kann wie folgt zerlegt werden:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle , \quad (4)$$

wobei  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Da die globale Phase unwichtig ist können wir einen beliebigen Zustand durch zwei reelle Parameter (Winkeln) parametrisieren:

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad (5)$$

wobei  $\theta \in [0, \pi]$  und  $\varphi \in [0, 2\pi]$ .

Also klassisch kann ein Bit nur zwei Zustände haben, d.h., 0 und 1. Quantenmechanisch haben wir ein Kontinuum der Zustände parametrisiert durch  $\theta$  und  $\varphi$ . Jedoch, es gibt nur zwei linear-unabhängige Basiszustände,  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ . D.h., der Hilbertraum ist zweidimensional.

## C. Ein Teilchen in 1-D

Analog zum Quantenbit betrachten wir jetzt die, zunächst diskrete, Menge der Positionen eines Teilchens  $x_n$ . Zu diesen Positionen ordnen wir eine orthonormale Basis zu:  $|x_n\rangle$ , d.h.,  $\langle x_m | x_n \rangle = \delta_{mn}$ . Ein beliebiger Zustand lautet:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(x_n) |x_n\rangle . \quad (6)$$

Das Skalarprodukt zwischen den zwei Zuständen  $|\psi\rangle$  und  $|\phi\rangle$  lautet

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_n \phi^*(x_n) \psi(x_n) . \quad (7)$$

Die Normierung-Bedingung lautet

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n \psi^*(x_n) \psi(x_n) = \sum_n |\psi(x_n)|^2 = 1 . \quad (8)$$

Wir verallgemeinern jetzt für den Fall wo  $x_n$  zu einer kontinuierliche Koordinate  $x$  wird. Dann wird der Zustand  $|\psi\rangle$  durch die *Wellenfunktion* dargestellt, d.h.,  $\psi(x_n) \rightarrow \psi(x)$ . Die Normierung-Bedingung lautet jetzt

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2 = 1 . \quad (9)$$

Das Skalarprodukt lautet

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) \psi(x) . \quad (10)$$

Dieser Hilbertraum heißt  $L^2$  - der Raum von Quadrat-Integrierbaren Funktionen.

*f. Die Interpretation* :  $|\psi(x)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen im Ort  $x$  zu sein.

### III. DIE OBSERVABLE

In der klassischen Physik die Observable, d.h., die messbaren Größen sind, z.B., der Ort  $\vec{r}$ , der Impuls  $\vec{p}$ , die Energie  $E = H(\vec{r}, \vec{p})$  u.s.w. In der Quantenmechanik die Observable sind (Hermitische) lineare Operatoren.

*g. Beispiel: Ortsoperator:* Wir definieren den Operator  $\hat{x}$  sodass,  $|\phi\rangle = \hat{x} |\psi\rangle$  bedeutet  $\phi(x) = x\psi(x)$ . Im diskreten Fall bedeutet das

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(x_n) |x_n\rangle , \quad (11)$$

$$\hat{x} |\psi\rangle = \sum_n x_n \psi(x_n) |x_n\rangle . \quad (12)$$

Wenn der Zustand  $|\psi\rangle$  normiert ist, ist der Vektor  $\hat{x} |\psi\rangle$  nicht unbedingt normiert. Untersuchen wir das Matrixelement

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int dx x |\psi(x)|^2 . \quad (13)$$

Es ist klar, dass  $\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$  der Erwartungswert von  $x$  ist, weil  $|\psi(x)|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte ist das Teilchen im Ort  $x$  zu finden.

*h. Matrix-Elemente:* Operator  $A$  wirkend auf Zustand  $|u\rangle$  ergibt den Zustand  $|v\rangle$ :

$$|v\rangle = A |u\rangle . \quad (14)$$

Jeder Zustand lässt eine Zerlegung in der Basis  $|n\rangle$  zu:

$$|u\rangle = \sum_n u_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | u \rangle . \quad (15)$$

Beweis:  $\langle n | u \rangle = \langle n | \sum_m u_m |m\rangle = \sum_m u_m \langle n | m \rangle = \sum_m u_m \delta_{n,m} = u_n$ . Daraus folgt auch die Vollständigkeit-Relation  $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$  (Einheitsoperator). Dann gilt

$$|v\rangle = A |u\rangle = A \sum_m |m\rangle \langle m | u \rangle , \quad (16)$$

und

$$\langle n|v\rangle = \langle n|A|u\rangle = \sum_m \langle n|A|m\rangle \langle m|u\rangle , \quad (17)$$

oder

$$v_n = \sum_m A_{nm} u_m , \quad (18)$$

wobei  $A_{nm} \equiv \langle n|A|m\rangle$  sind die Matrixelemente des Operators  $A$ . Also jeder Operator ist definiert durch seine Matrix  $A_{nm}$  in der Basis  $|n\rangle$ .

*i. Hermitisch konjugierter Operator:* Der zu  $A$  Hermitisch konjugierte Operator  $A^\dagger$  ist definiert durch die Relation die für beliebige Zustände  $|\psi\rangle$  und  $|\phi\rangle$  gelten muss:

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle \equiv \langle \phi | A \psi \rangle . \quad (19)$$

Für die Matrixelemente bedeutet das

$$\langle m|A|n\rangle = \langle m|An\rangle = \langle A^\dagger m|n\rangle = \langle n|A^\dagger m\rangle^* = \langle n|A^\dagger|m\rangle^* . \quad (20)$$

Wir erhalten also  $(A^\dagger)_{mn} = (A_{mn})^*$ . D.h., Hermitische Konjugation ist äquivalent der Transposition zusammen mit der komplexen Konjugation.

*j. Selbstkonjugierte (Hermitische) Operatoren* Ein Operator heißt Hermitisch (nach Charles Hermite) wenn gilt  $A^\dagger = A$ . Für die Matrixelemente bedeutet das

$$A_{mn} = A_{nm}^* . \quad (21)$$

Zum Beispiel der Ortsoperator ist Hermitisch. Beweis:

$$\langle \phi | \hat{x} \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) (x \psi(x)) , \quad (22)$$

und

$$\langle \hat{x} \phi | \psi \rangle = \int dx (x \phi(x))^* \psi(x) . \quad (23)$$

Da  $x$  reell ist gilt  $\langle \phi | \hat{x} \psi \rangle = \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle$ . Noch ein Beispiel: der Operator  $\hat{k} = -i\partial/\partial x$ . Wir erhalten

$$\langle \phi | \hat{k} \psi \rangle = \int dx \phi^*(x) \left( -i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) , \quad (24)$$

und

$$\langle \hat{k} \phi | \psi \rangle = \int dx \left( -i \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^* \psi(x) . \quad (25)$$



Wir benutzen sie partielle Integration

$$\begin{aligned} \int dx \left( -i \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right)^* \psi(x) &= \int dx i \left( \frac{\partial \phi^*(x)}{\partial x} \right) \psi(x) \\ &= i \phi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int dx \phi^*(x) \left( -i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) . \end{aligned} \quad (26)$$

Der erste Term verschwindet, da die Funktionen  $\phi(x)$  und  $\psi(x)$  integrierbar sein müssen (gehören dem  $L^2$ ), d.h., sie müssen auf  $x \rightarrow \pm\infty$  verschwinden. Also wir haben bewiesen, dass  $\langle \phi | \hat{k} \psi \rangle = \langle \hat{k} \phi | \psi \rangle$ .

*k. Eigenzustände* Eigenzustand  $|v\rangle$  eines Operators  $\hat{A}$  ist definiert durch

$$\hat{A} |v\rangle = a |v\rangle , \quad (27)$$

wobei  $a \in \mathbb{C}$  der Eigenwert ist. Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass die reellen symmetrischen Matrizen eine vollständige Basis von Eigenvektoren besitzen. Genauso die Hermiteschen Operatoren besitzen eine vollständige Basis von Eigenvektoren. Das wird hier nicht bewiesen. Die Eigenwerte der Hermiteschen Operatoren sind reell. Beweis:

$$\langle v | A |v\rangle = \langle v | Av\rangle = \langle v | av\rangle = a . \quad (28)$$

Andererseits, da  $A^\dagger = A$  gilt

$$\langle v | A |v\rangle = \langle Av | v\rangle = \langle av | v\rangle = a^* . \quad (29)$$

Also  $a = a^*$ . Zwei Eigenvektoren eines Hermiteschen Operators mit unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal. Beweis: wir haben  $A |n\rangle = a_n |n\rangle$ , und  $A |m\rangle = a_m |m\rangle$ , und  $a_n \neq a_m$ .

$$\langle n | A |m\rangle = \langle n | Am\rangle = a_m \langle n | m\rangle . \quad (30)$$

Andererseits

$$\langle n | A |m\rangle = \langle An | m\rangle = a_n \langle n | m\rangle . \quad (31)$$

Da  $a_n \neq a_m$ , erhalten wir  $\langle n | m\rangle = 0$ .

## A. Der Impuls-Operator

Der Impuls-Operator lautet

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} . \quad (32)$$

Motivation: für eine ebene Welle  $\psi(x) = e^{ikx}$  (das ist nicht integrierbar!) gilt

$$\hat{p}\psi(x) = \hbar k\psi(x) , \quad (33)$$

und nach de Broglie gilt  $p = \hbar k$ . Als wir schon gezeigt haben, ist der Operator  $\hat{p}$  Hermitisch.

#### IV. SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

In der Quantenmechanik entwickeln sich die Zustände in der Zeit gemäß der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle , \quad (34)$$

wobei  $\hat{H}$  der Hamilton-Operator (a.k.a. Hamilton) ist. Für ein Teilchen in 1-D lautet der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}) . \quad (35)$$

Die Schrödinger-Gleichung dann lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) . \quad (36)$$

##### A. Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

Wir wollen zeigen, dass die Norm des Zustandes konstant bleibt. D.h., wenn zur  $t = 0$  gilt

$$\int dx |\psi(x,t)|^2 = 1 , \quad (37)$$

dann gilt das auch für alle späteren Zeiten  $t > 0$ . Wir erhalten

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dx |\psi(x,t)|^2 = \int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right\} . \quad (38)$$

Aus der Schrödinger-Gleichung folgt

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \right] \quad (39)$$

und

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* \right] . \quad (40)$$

(Die potentielle Energie  $V(x)$  ist natürlich reell). Dann erhalten wir

$$\int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right\} = \frac{i\hbar}{2m} \int dx \left\{ \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right\} = 0 . \quad (41)$$

Die letzte Gleichung ergibt sich durch gedoppelte partielle Integration. Jetzt untersuchen wir die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\} \right]. \quad (42)$$

Wir führen ein die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho \equiv |\psi|^2$  und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\}$ . Dann die Gleichung (42) ist die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \quad (43)$$

## B. 3-D Teilchen

Die Verallgemeinerung von 1-D auf 3-D ist ganz direkt. Es gibt drei Koordinaten  $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$  und drei Impulse  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ , wobei

$$p_i \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i}. \quad (44)$$

Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (45)$$

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t), \quad (46)$$

wobei

$$\vec{\nabla} \equiv \left( \frac{\partial}{\partial r_1}, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3} \right). \quad (47)$$

Die Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad (48)$$

wobei

$$\vec{j} \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \left( \vec{\nabla} \psi \right) - \left( \vec{\nabla} \psi^* \right) \psi \right\}. \quad (49)$$

## C. Stationäre Zustände

Eine besondere Rolle in der Quantenmechanik wird von Eigenzuständen des Hamilton-Operators gespielt. Der Hamilton entspricht der Observable Energie und muss Hermitisch

sein. Es existiert eine vollständige Basis des Hilbertraums die aus allen Eigenvektoren von  $H$  besteht.

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle . \quad (50)$$

Die reelle Eigenwerte  $E_n$  heißen Eigenenergien. Die Zeitentwicklung von einem Eigenzustand ist sehr einfach. Der Zustand

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \quad (51)$$

stellt eine Lösung der Schrödinger-Gleichung dar. Beweis:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) E_n |n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) H |n\rangle = H |\psi(t)\rangle . \end{aligned} \quad (52)$$

Also der Zustand ist stationär, da die globale Phase  $\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$  den physikalischen Zustand nicht ändert.

## V. IMPULS-DARSTELLUNG EINER WELLENFUNKTION

Wir betrachten die Fourier-Transformation einer Wellenfunktion  $\psi(x)$ .

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{g}(p) e^{ipx/\hbar} \quad (53)$$

oder mit  $p = \hbar k$

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} , \quad (54)$$

wobei  $g(k) = \tilde{g}(\hbar k)$ . Die inverse Fourier-Transformation lautet

$$g(k) = \int dx \psi(x) e^{-ikx} . \quad (55)$$

Normierung ergibt:

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \int \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 . \quad (56)$$

Untersuchen wir den Erwartungswert von  $\hat{p}$  (oder  $\hat{k} = \hat{p}/\hbar = -i\partial_x$ ).

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle &= \int dx \psi(x)^* (-i\hbar\partial_x) \psi(x) \\ &= \int dx \int \frac{dk_1}{2\pi} g^*(k_1) e^{-ik_1 x} (-i\hbar\partial_x) \int \frac{dk_2}{2\pi} g(k_2) e^{ik_2 x} \\ &= \int dx \int \frac{dk_1}{2\pi} \frac{dk_2}{2\pi} g^*(k_1) g(k_2) \hbar k_2 e^{i(k_2 - k_1)x} \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} |g(k)|^2 \hbar k = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\tilde{g}(p)|^2 p . \end{aligned} \quad (57)$$

Hier haben wir die Delta-Funktion benutzt die der folgenden Relation genügt:

$$\int dx e^{iqx} = 2\pi\delta(q) . \quad (58)$$

Also, man kann  $g(p)$  (genauer  $\tilde{g}(p)$ ) als Wellenfunktion in  $p$ -Darstellung betrachten.

*l. Delta-Funktion* Delta-Funktion ist der Limes einer sehr scharfen Glocke deren Integral eins ist. Die Haupteigenschaften:

$$\int dq \delta(q) = 1 . \quad (59)$$

Für eine stetige Funktion  $f(q)$  (Probe-Funktion) gilt

$$\int dq \delta(q - q_0) f(q) = f(q_0) . \quad (60)$$

### A. Unschärfe-Relation

*m. Gauss-Verteilung* Wir untersuchen eine besondere Wellenfunktion

$$\psi(x) = \mathcal{N} e^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/4b^2} . \quad (61)$$

Die Normierung-Konstante  $\mathcal{N}$  bestimmt man aus der Normierungs-Bedingung

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 . \quad (62)$$

Das ergibt

$$\mathcal{N}^2 \int dx e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \sqrt{2\pi b^2} = 1 . \quad (63)$$

Also es gilt

$$\mathcal{N} = (2\pi b^2)^{-1/4} . \quad (64)$$

Für den Erwartungswert  $\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle$  erhalten wir

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \mathcal{N}^2 \int dx x e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \int dy (y + x_0) e^{-y^2/2b^2} . \quad (65)$$

Der erster Term verschwindet wegen Symmetrie, wobei der zweite ergibt einfach  $\langle \psi | x | \psi \rangle = x_0$ . Jetzt untersuchen wir die Variation

$$(\Delta x)^2 \equiv \langle [x - \langle x \rangle]^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 . \quad (66)$$

Wir erhalten

$$(\Delta x)^2 = \mathcal{N}^2 \int dx (x - x_0)^2 e^{-(x-x_0)^2/2b^2} = \mathcal{N}^2 \int dy y^2 e^{-y^2/2b^2} = b^2 . \quad (67)$$

Also  $b$  ist die Breite der Verteilung. Wie sieht dieser Zustand in der  $p$ -Darstellung aus? Wir erhalten

$$\begin{aligned} g(k) &= \int dx \psi(x) e^{-ikx} = \mathcal{N} \int dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)x} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} \int dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)(x-x_0)} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} \int dy e^{-\frac{y^2}{4b^2}} e^{-i(k-k_0)y} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} \int dy e^{-\frac{(y+2i(k-k_0)b^2)^2}{4b^2}} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} \int dz e^{-\frac{z^2}{4b^2}} \\ &= \mathcal{N} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} 2b\sqrt{\pi} \\ &= \mathcal{N}_k e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-b^2(k-k_0)^2} , \end{aligned} \quad (68)$$

wobei die neue Normierung-Konstante lautet  $\mathcal{N}_k = (8\pi b^2)^{1/4}$ . Wir sehen, dass die Wellenfunktion in der  $p$ -Darstellung ist wieder eine Gaußglocke. Wir haben schon die Erfahrung gesammelt mit den Gauß-Verteilungen. Wir schreiben um wie

$$g(k) = \mathcal{N}_k e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4c^2}} , \quad (69)$$

wobei  $c^2 = 1/(4b^2)$ . Das ergibt

$$\langle p \rangle = \hbar \langle k \rangle = \hbar k_0 \quad (70)$$

und

$$(\Delta p)^2 = \hbar^2 (\Delta k)^2 = \hbar^2 c^2 = \frac{\hbar^2}{4b^2} . \quad (71)$$

Wir haben jetzt ein sehr wichtiges Ergebnis erhalten: für die Gauß-Wellenfunktion gilt

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} . \quad (72)$$

*n. Algebraischer Beweis* Wir betrachten zwei Hermitesche Operatoren  $A$  und  $B$  und den Zustand  $|\psi\rangle$ . Die Erwartungswerte von  $A$  und  $B$  im Zustand  $|\psi\rangle$  sind gegeben als

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad , \quad \bar{B} = \langle \psi | B | \psi \rangle . \quad (73)$$

Wir definieren

$$|a\rangle = (A - \bar{A}) |\psi\rangle \quad (74)$$

und

$$|b\rangle = (B - \bar{B}) |\psi\rangle . \quad (75)$$

Dann gilt

$$\langle a|a\rangle = \langle \psi| (A - \bar{A})^2 |\psi\rangle = \sigma_A^2 \quad (76)$$

und

$$\langle b|b\rangle = \langle \psi| (B - \bar{B})^2 |\psi\rangle = \sigma_B^2 . \quad (77)$$

Wir benutzen die bekannte Ungleichung von Schwarz

$$\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \geq |\langle a|b\rangle|^2 . \quad (78)$$

Das Skalarprodukt  $z = \langle a|b\rangle$  ist eine komplexe Zahl. Dann gilt

$$\begin{aligned} |z|^2 &= (\operatorname{Re}(z))^2 + (\operatorname{Im}(z))^2 \geq (\operatorname{Im}(z))^2 \\ &= \left( \frac{z - z^*}{2i} \right)^2 . \end{aligned} \quad (79)$$

Also

$$\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \geq \left( \frac{\langle a|b\rangle - \langle b|a\rangle}{2i} \right)^2 , \quad (80)$$

oder

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \langle \psi| \frac{AB - BA}{2i} |\psi\rangle^2 \quad (81)$$

Für  $A = \hat{x}$  und  $B = \hat{p}$  erhalten wir

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) |\psi\rangle = x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x\psi = i\hbar\psi . \quad (82)$$

Also

$$[x, p] = xp - px = i\hbar . \quad (83)$$

Schließlich

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (84)$$

## VI. WELLENPAKETE

Wir betrachten ein freies Teilchen, das zur  $t = 0$  im Zustand

$$\psi(x) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} \quad (85)$$

vorbereitet wurde. Der Hamilton-Operator des Teilchens lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} . \quad (86)$$

Zu einer späteren Zeit  $t > 0$  ergibt sich, dann, der Zustand

$$\psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{ikx} e^{-i\omega(k)t} , \quad (87)$$

wobei

$$\hbar\omega(k) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (88)$$

Hier kann man die ebene Welle  $e^{ikx}$  als (nicht normierbarer) Eigenzustand des Hamilton-Operators betrachten mit der Eigenenergie

$$E_k = \hbar\omega(k) . \quad (89)$$

*o. Gruppengeschwindigkeit* Wir nehmen an, dass  $g(k)$  um  $k_0$  konzentriert ist. Diese Situation heißt Wellenpaket, da wir ein Paket von ebenen Wellen haben. Dann gilt (für relevante  $k$ )

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots \quad (90)$$

und

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\approx \int \frac{dk}{2\pi} g(k) \exp \left\{ ik_0 x + i(k - k_0)x - i\omega(k_0)t - i \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0)t \right\} \\ &= e^{ik_0 x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} g(k) \exp \left\{ i(k - k_0) \left( x - \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} t \right) \right\} . \end{aligned} \quad (91)$$

Wir sehen, dass das Wellenpaket sich mit der Geschwindigkeit

$$v_g \equiv \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} \quad (92)$$

bewegt. Diese Geschwindigkeit heißt die Gruppengeschwindigkeit.



*p. Dispersion* Betrachten wir den nächsten Glied in der Entwicklung

$$\begin{aligned}\omega(k) &\approx \omega(k_0) + \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2\omega(k)}{\partial k^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \\ &= \omega(k_0) + v_g(k - k_0) + a(k - k_0)^2 + \dots\end{aligned}\quad (93)$$

Was ist die Rolle der Größe  $a$ ? Um das zu verstehen betrachten wir das Gauß'sche Beispiel

$$g(k) = \mathcal{N}_k e^{-b^2(k-k_0)^2} . \quad (94)$$

Das ergibt

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &\approx \mathcal{N}_k e^{ik_0x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-b^2(k-k_0)^2} e^{i(k-k_0)(x-v_g t)} e^{ia(k-k_0)^2 t} \\ &= \mathcal{N}_k e^{ik_0x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-(b^2 - iat)(k-k_0)^2} e^{i(k-k_0)\tilde{x}(t)} ,\end{aligned}\quad (95)$$

wobei  $\tilde{x}(t) \equiv x - v_g t$ . Wir "vollständigen das Quadrat" mit  $q \equiv k - k_0$ :

$$-(b^2 - iat)q^2 + iq\tilde{x} = -(b^2 - iat) \left( q - \frac{i\tilde{x}}{2(b^2 - iat)} \right)^2 - \frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)} . \quad (96)$$

Mit

$$z \equiv q - \frac{i\tilde{x}(t)}{2(b^2 - iat)} \quad (97)$$

ergibt sich

$$\psi(x, t) \approx \left[ \mathcal{N}_k e^{ik_0x - i\omega(k_0)t} \int \frac{dz}{2\pi} e^{-(b^2 - iat)z^2} \right] e^{-\frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)}} . \quad (98)$$

Wir erhalten wieder eine Gauß-Glocke mit

$$|\psi(x, t)|^2 \propto \left| e^{-\frac{\tilde{x}^2}{4(b^2 - iat)}} \right|^2 = e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2\left(\frac{b^4 + a^2 t^2}{b^2}\right)}} . \quad (99)$$

Also die neue Varianz ist gegeben durch

$$(\Delta x)^2 = b^2 + \frac{a^2 t^2}{b^2} , \quad (100)$$

wobei die Impuls-Varianz bleibt unverändert

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4b^2} . \quad (101)$$

Wir erhalten

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \frac{\hbar}{4} \left( 1 + \frac{a^2 t^2}{b^4} \right) . \quad (102)$$

Wir beobachten, dass das Wellenpaket zerfließt. Das heißt Dispersion. Für die Dispersion ist die Größe  $a = \frac{1}{2} \frac{\partial^2\omega(k)}{\partial k^2}$  verantwortlich. Das Licht im Vakuum mit  $\omega = ck$  hat keine Dispersion.

## VII. STREUZUSTÄNDE UND GEBUNDENE ZUSTÄNDE

Wir betrachten jetzt Teilchen in externem Potential  $V(\vec{r})$ . in 1-D ist der Hamilton-Operator gegeben durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (103)$$

und die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) . \quad (104)$$

Wir suchen nach den stationären Zuständen, sodass

$$\psi(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{Et}{\hbar}} . \quad (105)$$

Dann muss gelten

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) . \quad (106)$$

oder

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \quad (107)$$

Die einfachste Situation tritt dann auf, wenn das Potential stückweise konstant ist. D.h.  $V(x) = V_1$  für  $x_1 \leq x < x_2$ ,  $V(x) = V_2$  für  $x_2 \leq x < x_3$  usw. Dann, in jedem Intervall muss die folgende Gleichung gelöst werden

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = (E - V_n)\psi(x) . \quad (108)$$

Die Lösungen sind offensichtlich wieder die ebenen Wellen  $e^{ikx}$  mit

$$k = \pm \sqrt{\frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2}} . \quad (109)$$

Für  $E > V_n$  ergeben sich zwei reelle Wellenvektoren  $k$  (Wellennummer). Sonst, für  $E < V_n$ , sind die Wellenvektoren  $k$  rein imaginär.

### A. Randbedingungen

Wir brauchen Randbedingungen für jeden Punkt  $x_n$  wo das Potential springt. Die Randbedingungen sind einfach:  $\psi(x)$  und  $\partial\psi(x)/\partial x$  müssen stetig sein. Das folgt aus der Tatsache, dass die Schrödinger-Gleichung der zweiten Ordnung in der  $x$ -Ableitung ist. Wenn  $\partial\psi(x)/\partial x$  stetig ist, dann darf  $\partial^2\psi(x)/\partial x^2$  höchstens einen Sprung haben. Das ist genau was gebraucht wird in den Grenzpunkten zwischen den Intervallen.

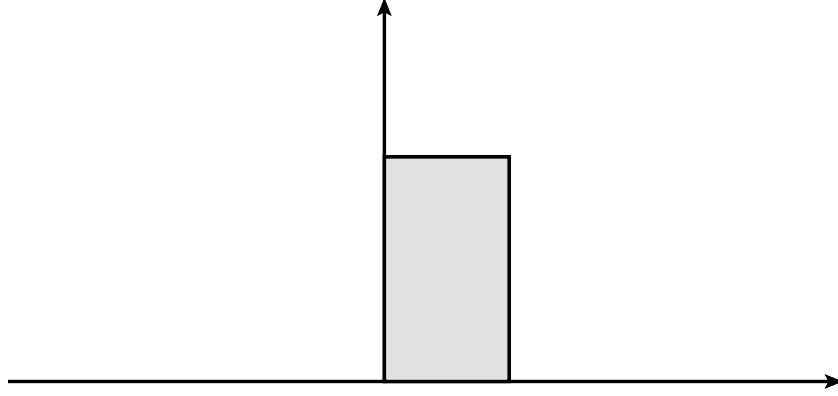


Abbildung 1: Barriere

## B. Streuzustände

In diesem Fall ergeben sich ebene Wellen für  $x \rightarrow \infty$  und/oder  $x \rightarrow -\infty$ . Solche Zustände sind nicht normierbar. Wir brauchen eine alternative Interpretation. Hier hilft uns die Stromdichte

$$j \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right\} . \quad (110)$$

Für die ebene Welle mit Amplitude eins  $\psi = e^{ikx}$  bekommen wir

$$j = \frac{\hbar k}{m} = v_g . \quad (111)$$

Man redet dann von einem Fluss von Teilchen mit Dichte  $\rho = |\psi|^2 = 1$  und Stromdichte  $j = \rho v_g = v_g$ . Die Frage ist dann welchen Anteil des Flusses wird nach vorne oder zurück gestreut.

## C. Barriere

Ein gutes Beispiel ist die Streuung auf einer rechteckigen Barriere (Fig. 1). Die potentielle Energie lautet  $V(x) = 0$  für  $x < 0$  (Bereich I) und  $x > a$  (Bereich III), und  $V(x) = V_0$  für  $0 \leq x \leq a$  (Bereich II). Wir suchen nach Lösungen mit  $E > 0$ . Dann der Wellenvektor in Bereichen I und III ist gegeben durch

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} . \quad (112)$$

Wir nehmen hier die positive Wurzel. Die negative Wurzel wird dann explizit berücksichtigt.  
Im Bereich II gilt

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} . \quad (113)$$

Für  $E > V_0$  ist  $k_2$  reell. Für  $0 < E < V_0$  ist  $k_2$  rein imaginär. Wir suchen nach einer Lösung die im Bereich I wie folgt aussieht

$$\psi_I(x) = e^{ik_1x} + re^{-ik_1x} , \quad (114)$$

wobei  $r$  der Reflexion-Koeffizient ist. So eine Lösung entspricht der Situation wo eine ebene Welle der Amplitude eins von der linken Seite auf die Barriere geschickt wird. Die reflektierte Welle hat, dann, die Amplitude  $r$ . Im Bereich *III* erwarten wir

$$\psi_{III}(x) = te^{ik_3(x-a)} . \quad (115)$$

Das entspricht dem Teil der Welle der transmittiert wurde. Letztendlich im Bereich II gilt

$$\psi_{II}(x) = Ae^{ik_2x} + Be^{-ik_2x} . \quad (116)$$

Unseres Ziel ist  $r$  und  $t$  zu Bestimmen. Die Randbedingungen ergeben folgendes. Aus  $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$  folgt

$$1 + r = A + B . \quad (117)$$

Aus  $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$  folgt

$$k_1(1 - r) = k_2(A - B) . \quad (118)$$

Aus  $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$  folgt

$$Ae^{ik_2a} + Be^{-ik_2a} = t . \quad (119)$$

Aus  $\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$  folgt

$$k_2(Ae^{ik_2a} - Be^{-ik_2a}) = k_3t = k_1t . \quad (120)$$

Aus den ersten zwei Randbedingungen (117,118) erhalten wir

$$A \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + B \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) = 2 . \quad (121)$$

Aus den letzten zwei Randbedingungen (119,120) erhalten wir

$$A = \frac{te^{-ik_2a}}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) , \quad B = \frac{te^{ik_2a}}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) , \quad (122)$$

und

$$B = A e^{2ik_2a} \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} . \quad (123)$$

Dann, aus (121) und (123) erhalten wir

$$A \left( 1 + \frac{k_2}{k_1} \right) + A e^{2ik_2a} \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} \left( 1 - \frac{k_2}{k_1} \right) = 2 . \quad (124)$$

$$A(k_1 + k_2) - A e^{2ik_2a} \frac{(k_1 - k_2)^2}{k_1 + k_2} = 2k_1 . \quad (125)$$

$$A(k_1 + k_2)^2 - A e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2 = 2k_1(k_1 + k_2) . \quad (126)$$

$$A = \frac{2k_1(k_1 + k_2)}{(k_1 + k_2)^2 - e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2} . \quad (127)$$

$$t = 2A e^{ik_2a} \frac{k_2}{(k_1 + k_2)} = \frac{4k_1 k_2 e^{ik_2a}}{(k_1 + k_2)^2 - e^{2ik_2a} (k_1 - k_2)^2} . \quad (128)$$

$$t = \frac{2k_1 k_2}{2k_1 k_2 \cos(k_2a) - i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2a)} . \quad (129)$$

Für  $E > V_0$  ( $k_2$  reell) ergibt sich

$$|t|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2a)} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k_2a)} . \quad (130)$$

Für  $E < V_0$  ( $k_2 = i\kappa$ ) ergibt sich

$$|t|^2 = \frac{4k_1^2 \kappa^2}{4k_1^2 \kappa^2 + (k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a)} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\kappa a)} . \quad (131)$$

Tief im Tunnel-Regime  $E < V_0$ , wenn gilt  $\kappa a \gg 1$  (d.h. die Breite der Barriere ist groß genug), ergibt sich die exponentiell kleine Tunnel-Wahrscheinlichkeit

$$|t^2| \approx \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa a} , \quad (132)$$

wobei

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} . \quad (133)$$

#### D. Gebundene Zustände

*Übung*

## VIII. HARMONISCHER OSZILLATOR

Der Hamilton-Operator lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} . \quad (134)$$

Wir suchen nach Eigenzustände. Probieren wir zunächst die Gauß-Funktion

$$\psi(x) = N e^{-\frac{x^2}{4b^2}} , \quad (135)$$

wobei  $N = (2\pi b^2)^{-1/4}$  und  $b$  noch zu bestimmen ist. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} H\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(-\frac{x}{2b^2}\psi\right) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2b^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{x}{2b^2}\right]^2\psi + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi . \end{aligned} \quad (136)$$

Wenn die zwei letzten Terme verschwinden, erhalten wir einen Eigenzustand. Also

$$\frac{\hbar^2}{4mb^4} = m\omega^2 \quad \rightarrow \quad b^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (137)$$

und die Eigenenergie lautet

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2b^2} = \frac{\hbar\omega}{2} . \quad (138)$$

Wir werden später zeigen, dass das der Grundzustand ist, d.h., der Zustand mit niedrigster Eigenenergie. In diesem Zustand  $\langle x \rangle = 0$  und  $(\Delta x)^2 = b^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ . Wir nennen diesen Zustand  $|0\rangle$ . Also

$$|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right\} , \quad (139)$$

$$H|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle . \quad (140)$$

*q. Algebraische Lösung* Wir definieren

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p \quad (141)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p \quad (142)$$

Wir berechnen

$$aa^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega}p^2 + \frac{i}{2\hbar}(px - xp) , \quad (143)$$

und

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega}p^2 - \frac{i}{2\hbar}(px - xp) . \quad (144)$$

Also, wir erhalten

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + a a^\dagger) , \quad (145)$$

und

$$a a^\dagger - a^\dagger a = \frac{i}{\hbar} (p x - x p) = 1 . \quad (146)$$

Schließlich gilt

$$H = \hbar \omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) . \quad (147)$$

Wir nennen den Operator  $N \equiv a^\dagger a$ . Aus (140) folgt  $N |0\rangle = 0$ . Wir erhalten

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger , \quad (148)$$

und

$$[N, a] = a^\dagger a a - a a^\dagger a = -a . \quad (149)$$

Operator  $N$  ist ein Hermitescher Operator und soll eine vollständige Basis der Eigenzustände haben. Wir fangen an mit dem Zustand  $a^\dagger |0\rangle$ . Wir erhalten

$$N a^\dagger |0\rangle = (a^\dagger + a^\dagger N) |0\rangle = a^\dagger |0\rangle . \quad (150)$$

Also,  $a^\dagger |0\rangle$  ist ein Eigenzustand des Operators  $N$  mit dem Eigenwert 1. Seine Norm erhalten wir aus

$$\langle a^\dagger 0 | a^\dagger 0 \rangle = \langle 0 | a a^\dagger |0\rangle = \langle 0 | (1 + N) |0\rangle = 1 . \quad (151)$$

Wir nennen

$$|1\rangle = a^\dagger |0\rangle . \quad (152)$$

Für den Zustand gilt

$$N |1\rangle = |1\rangle \quad , \quad H |1\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2} |1\rangle . \quad (153)$$

Analog untersuchen wir den Zustand  $a^\dagger |1\rangle$ . Wir erhalten

$$N a^\dagger |1\rangle = (a^\dagger + a^\dagger N) |1\rangle = 2 a^\dagger |1\rangle . \quad (154)$$

Wir normieren

$$\langle a^\dagger 1 | a^\dagger 1 \rangle = \langle 1 | a a^\dagger |1\rangle = \langle 1 | (1 + N) |1\rangle = 2 . \quad (155)$$

Also der normierte Zustand lautet

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle \quad \text{oder} \quad a^\dagger |1\rangle = \sqrt{2} |2\rangle . \quad (156)$$

Es ist klar, dass es sich eine Reihe der Zustände  $|n\rangle$  ergibt, sodass  $N|n\rangle = n|n\rangle$ . Durch das Normieren bekommen wir

$$\langle a^\dagger n | a^\dagger n \rangle = \langle n | a a^\dagger | n \rangle = \langle n | (1 + N) | n \rangle = n + 1 . \quad (157)$$

Also

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle . \quad (158)$$

Den Zustand  $|n\rangle$  erhält man aus dem Zustand  $|0\rangle$  durch

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle . \quad (159)$$

Als Nächstes untersuchen wir den Zustand  $a|n\rangle$ . Wir erhalten

$$a|n\rangle = \frac{a a^\dagger}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \frac{(N+1)}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle . \quad (160)$$

Insbesondere  $a|0\rangle = 0$ .

Den Operator  $a^\dagger$  nennt man "Erzeugungsoperator" und den Operator  $a$  wird als "Vernichtungsoperator" genannt (alternativ Aufsteige- und Absteigeoperatoren oder Leiteroperatoren).

Wir haben also gezeigt, dass es eine Leiter der stationären Zustände  $|n\rangle$  gibt, sodass

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle , \quad (161)$$

und

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle . \quad (162)$$

Das ist eine vollständige Basis im Hilbertraum ( $L_2$ ) (ohne Beweis).

## IX. DREHIMPULS

Wir betrachten jetzt Teilchen in 3-D. Insbesondere werden wir uns interessieren für quantenmechanische Zustände im zentralsymmetrischen Potential (wie im Kepler-Problem), d.h.,  $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ . In der klassischen Mechanik eine wichtige Rolle wurde vom Drehimpuls gespielt. Das war (neben Energie) einer der Erhaltungsgrößen. Wir untersuchen nun den Drehimpuls in der Quantenmechanik.

Der Drehimpuls-Operator lautet

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} . \quad (163)$$



Komponentenweise gilt

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) . \quad (164)$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) . \quad (165)$$

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (166)$$

Wir benutzen  $[r_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha,\beta}$  sowie  $[r_\alpha, r_\beta] = 0$  und  $[p_\alpha, p_\beta] = 0$ . Hier  $(r_1, r_2, r_3) = (x, y, z)$  und  $(p_1, p_2, p_3) = (p_x, p_y, p_z)$ . Wir untersuchen den Kommutator

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [(yp_z - zp_y), (zp_x - xp_z)] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z . \end{aligned} \quad (167)$$

Analog

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad \text{und} \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y . \quad (168)$$

### A. Sphärische Koordinaten

In sphärischen Koordinaten haben wir  $x = r \cos \theta \cos \phi$ ,  $y = r \cos \theta \sin \phi$ ,  $z = r \sin \theta$  und

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} \\ &= -r \cos \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial y} \\ &= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{L_z}{i\hbar} . \end{aligned} \quad (169)$$

Also

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} . \quad (170)$$

Es gilt auch (ohne Beweis)

$$L_x = i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) , \quad (171)$$

$$L_y = i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) , \quad (172)$$

Wir sehen, dass die  $r$ -Abhängigkeit der Wellenfunktion hier keine Rolle spielt, d.h., die Eigenfunktionen der  $\vec{L}$  Operatoren haben die Struktur

$$\psi(\vec{r}) = R(r)W(\theta, \phi) . \quad (173)$$

Die Eigenfunktionen des  $L_z$ -Operators sind einfach zu finden

$$L_z e^{im\phi} = \hbar m e^{im\phi} . \quad (174)$$

Es ist klar, dass  $m$  ganzzahlig ist  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Sonst wäre die Wellenfunktion nicht eindeutig. Wir nennen diese Zustände vorläufig  $|m\rangle$ .

## B. Leiteroperatoren

Die sogenannten Leiter-Operatoren

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y \quad (175)$$

spielen hier eine wichtige Rolle. Wir erhalten

$$[L_x, L_{\pm}] = [L_z, L_x \pm iL_y] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar L_{\pm} . \quad (176)$$

Das ergibt

$$L_z L_+ |m\rangle = (L_+ L_z + \hbar L_+) |m\rangle = \hbar(m+1) L_+ |m\rangle . \quad (177)$$

Also der Zustand  $L_+ |m\rangle = c |m+1\rangle$ , wobei die Konstante  $c$  noch zu bestimmen ist.

## C. Der Operator $L^2$

Wir definieren den Operator

$$L^2 = \vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 . \quad (178)$$

Man kann zeigen

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 . \quad (179)$$

*r. Eigenzustände von kommutierenden Operatoren* Betrachten wir zwei Hermitesche Operatoren  $A$  und  $B$  die miteinander vertauschen  $[A, B] = 0$ . Dann haben die beiden einen gemeinsamen Satz von Eigenzustände. **Beweis:** Betrachten wir den Zustand  $|a\rangle$ , sodass  $A|a\rangle = a|a\rangle$ . Dann gilt

$$AB|a\rangle = BA|a\rangle = Ba|a\rangle = aB|a\rangle . \quad (180)$$

Also,  $B|a\rangle$  ist auch ein Eigenzustand von  $A$  mit dem selben Eigenwert  $a$ . Falls  $|a\rangle$  nicht entartet ist (der einzelne Zustand mit dem Eigenwert  $a$ ), dann gilt  $B|a\rangle \propto |a\rangle$ , d.h.,  $|a\rangle$  ist Eigenzustand von  $B$ . Falls es eine Entartung gibt, d.h.,  $A|a_n\rangle = a|a_n\rangle$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ), dann liegt  $B|a_n\rangle$  im gleichen Subraum, d.h.,  $B|a_n\rangle = \sum_m |a_m\rangle \langle a_m| B|a_n\rangle$ . Die Matrix  $\langle a_m| B|a_n\rangle$  ist Hermitisch und lässt sich diagonalisieren. Das ergibt  $N$  Eigenzustände von  $B$  die alle gleichzeitig Eigenzustände von  $A$  mit dem Eigenwert  $a$  sind. Nun kann man die Eigenzustände mit zwei Quantenzahlen charakterisieren, und zwar  $a$  und  $b$ ,  $A|a, b\rangle = a|a, b\rangle$  und  $B|a, b\rangle = b|a, b\rangle$ . Wenn danach noch die Entartung gibt, d.h., es gibt mehrere Zustände die die gleichen  $a$  und  $b$  haben, muss man noch einen Operator  $C$  finden der mit  $A$  und  $B$  vertauscht. So geht's bis man den vollständigen Satz von kommutierenden Operatoren hat, so, dass es keine Entartung mehr gibt.

s.  $L^2$  und  $L_z$  als vollständiger Satz kommutierenden Operatoren Als vollständiger Satz der kommutierenden Operatoren wählen wir  $L^2$  und  $L_z$ . Die Zustände werden  $|l, m\rangle$  genannt. Es gilt (ohne Beweis)

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle . \quad (181)$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle . \quad (182)$$

Die Quantenzahl  $l$  ist positiv und ganzzahlig. Die Quantenzahl  $m$  kann die folgenden Werte annehmen

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l . \quad (183)$$

Die Eigenfunktionen sind die sogenannten Kugelfunktionen  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ .

## X. WASSERSTOFFATOM

Im Wasserstoffatom gibt es ein Proton mit Ladung  $+e$  und ein Elektron mit Ladung  $-e$ . Wie im Kepler-Problem gehen wir erst in das Schwerpunkt-Bezugssystem über. Dann mit der relativen Koordinate  $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$  lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}_r)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} , \quad (184)$$

wobei

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \quad (185)$$

die reduzierte Masse ist. In Kugelkoordinaten erhält man

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|}. \quad (186)$$

Mit dem Ansatz

$$\psi = R(r)Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (187)$$

ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung  $H\psi = E\psi$  die folgende Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|} \right] R(r) = ER(r). \quad (188)$$

Es ergeben sich die Eigenzustände mit Eigenenergien

$$E_n = -\frac{E_{\text{Ry}}}{n^2}, \quad (189)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ , wobei

$$E_{\text{Ry}} = \frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV} \quad (190)$$

die Rydberg Energie ist.

Für jede Quantenzahl  $n$  gibt es  $n^2$  Zustände. Die erlaubte Werte von  $l$  für gegebenes  $n$  sind  $l = 0, 1, \dots, n-1$ . Für jedes  $l$  gibt es  $2l+1$  Werte von  $m$ . Das Gesamtspektrum ist gegeben durch

$$|n, l, m\rangle. \quad (191)$$

Der vollständige Satz der kommutierenden Operatoren ist  $H, L^2, L_z$ .

## XI. SPIN 1/2

*t. Drehimpuls, Zusammenfassung* Die Algebra der Drehimpuls-Operatoren ist gegeben durch

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y. \quad (192)$$

Die Eigenzustände  $|l, m\rangle$  erfüllen die folgenden Relationen

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle. \quad (193)$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle. \quad (194)$$

Die Leiteroperatoren  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$  wirken wie folgt (ohne Beweis)

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle \quad (195)$$

$$L_- |l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle \quad (196)$$

Wir beobachten, dass  $L_+ |l, m=l\rangle = 0$  sowie  $L_- |l, m=-l\rangle = 0$ . Das ergibt die Einschränkung  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ .

*u. Spin* Für den Bahn-Drehimpuls gilt  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ , die Eigenfunktionen sind die Kugelfunktionen  $|l, m\rangle = Y_{l,m}(\theta, \phi)$ . Die Eigenfunktionen von  $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$  sind proportional zu  $e^{im\phi}$  und wir sehen, dass  $m \in \mathbb{Z}$ .

Jedoch, alle algebraischen Relationen könnte man auch mit halbzahligem  $m$  und  $l$  erfüllen. Z.B., mit  $l = 1/2$  hätte  $m = -1/2, 1/2$ . Genauso mit  $l = 3/2$  hätte man  $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ . Solche Wellenfunktionen existieren aber nicht in der Form  $\psi(\vec{r})$ . Man braucht einen anderen Hilbert-Raum (oder andere Darstellung). Den Drehimpuls, der kein Bahn-Drehimpuls ist nennt man Spin. Um vom Bahn-Drehimpuls unterscheiden zu können bezeichnet man den Spin-Operator  $\vec{S}$  statt  $\vec{L}$ . Die Quantenzahl  $l$  nennt man jetzt  $s$ . Die Quantenzahl darf halbzahlige oder ganzzahlige Werte annehmen:  $s = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, \dots$

Für  $s = 1/2$  ist der Hilbert-Raum besonders einfach. Die Basis besteht nur aus zwei Zuständen:  $|s = 1/2, m = 1/2\rangle = |\uparrow\rangle$  und  $|s = 1/2, m = -1/2\rangle = |\downarrow\rangle$ . Man stellt diese zwei Zustände als Objekte (Spinoren) mit zwei Komponenten dar:  $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  and  $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Die beiden Zustände sind Eigenzustände des Operators

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (197)$$

Wir erhalten

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle . \quad (198)$$

Der gesamt Spin-Operator lautet

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} , \quad (199)$$

wobei die Pauli-Matrizen sind gegeben durch

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (200)$$

Man kann sich überzeugen, dass alle Vertausch-Relationen erfüllt sind. Für die Leiter-

Operatoren erhalten wir

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2} \left( \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \hbar\sigma_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (201)$$

und

$$S_- = S_x - iS_y = \frac{\hbar}{2} \left( \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) = \hbar\sigma_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (202)$$

Ein beliebiger Zustand kann wie folgt zerlegt werden:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle, \quad (203)$$

wobei  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Da die globale Phase unwichtig ist können wir einen beliebigen Zustand durch zwei reelle Parameter (Winkeln) parametrisieren:

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (204)$$

wobei  $\theta \in [0, \pi]$  und  $\varphi \in [0, 2\pi]$ . Wir erhalten  $\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = \cos\theta$ . Auch  $\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle = \sin\theta\cos\varphi$  und  $\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle = \sin\theta\sin\varphi$ . Wir beobachten, dass  $\langle\vec{\sigma}\rangle$  in Richtung  $\theta, \varphi$  zeigt.

*v. Postulat:* Ein Elektron hat Spin 1/2. Der Hilbertraum ist ein direktes Produkt  $L_2 \otimes (\text{Spin} - 1/2)$ . Die Wellenfunktionen haben zwei Komponenten:  $\psi_\uparrow(\vec{r})$  und  $\psi_\downarrow$  oder in der Spinor-Form

$$|\psi, \sigma\rangle = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (205)$$

## XII. PERIODENSYSTEM DER ELEMENTE

### A. Pauli-Prinzip

Elektronen sind Fermionen. Jeder Zustand kann nur von einem einzelnen (oder von keinem) Fermion besetzt sein.

### XIII. SPIN 1/2, DYNAMIK

#### A. Magnetisches Moment

Eine drehende Ladung entspricht einer Strom-Schleife und, deswegen, einem magnetischen Moment. Das magnetische Moment einer Stromschleife ist ein Vektor senkrecht der Schleife mit der Amplitude

$$\mu = I \cdot A , \quad (206)$$

wobei  $I$  ist der Strom und  $A$  - die Fläche der Schleife. Für eine kreisartige Schleife mit einem Elektron mit Geschwindigkeit  $v$  und Radius  $r$  erhalten wir:  $I = qv/(2\pi r)$  und  $A = \pi r^2$ . Das ergibt

$$\mu = \frac{qvr}{2} . \quad (207)$$

In der Vektor-Form gilt

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2} (\vec{r} \times \vec{v}) = \frac{q}{2m} (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{q}{2m} \vec{L} . \quad (208)$$

Die Energie eines magnetischen Momentes im Magnetfeld lautet

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} . \quad (209)$$

#### B. Gyromagnetisches Verhältnis

Das Elektron hat den gesamt Drehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} . \quad (210)$$

Das Elektron hat die Ladung  $q = -e$ . Das mit dem Bahn-Drehimpuls verknüpfte magnetische Moment lautet

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} . \quad (211)$$

Hier  $\mu_B \equiv \frac{\hbar e}{2m}$  ist das sogenannte Bohr-Magneton. Der Spin ist auch ein Drehimpuls. Jedoch, für den Spin gilt

$$\vec{\mu}_S = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} , \quad (212)$$

wobei  $g = 2$  ist das sogenannte gyromagnetisches Verhältnis. Das gesamt magnetische Moment eines Elektrons lautet

$$\vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S}) . \quad (213)$$

Die Tatsache, dass für den Spin  $g = 2 \neq 1$  bedeutet, dass es zu naive ist den Spin als Drehung des Elektrons sich vorzustellen.

### C. Spin-Präzession

Der Hamilton-Operator eines Spind im Magnetfeld lautet

$$H = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{g\mu_B}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} . \quad (214)$$

Wir können immer die Richtung von  $\vec{B}$  als  $\vec{z}$  wählen. Dann erhalten wir

$$H = \frac{g\mu_B B}{2} \sigma_z = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z , \quad (215)$$

wobei

$$\omega_B = \frac{g\mu_B B}{\hbar} . \quad (216)$$

Die Eigenzustände und Eigenenergien des Hamilton-Operators lauten

$$H |\uparrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} |\uparrow\rangle , \quad (217)$$

und

$$H |\downarrow\rangle = \frac{\hbar\omega_B}{2} \sigma_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar\omega_B}{2} |\downarrow\rangle , \quad (218)$$

Für den Anfangszustand

$$|u(t=0)\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle \quad (219)$$

mit

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) , \quad \beta = e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (220)$$

erhalten wir

$$|u(t)\rangle = \alpha e^{-\frac{\omega_B t}{2}} |\uparrow\rangle + \beta e^{\frac{\omega_B t}{2}} |\downarrow\rangle . \quad (221)$$

Das ergibt

$$\begin{aligned} |u(t)\rangle &= e^{-\frac{\omega_B t}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + e^{\frac{\omega_B t}{2}} e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \\ &= e^{-\frac{\omega_B t}{2}} \left[ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + e^{i(\varphi+\omega_B t)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \right] . \end{aligned} \quad (222)$$

Da die Gesamtphase unwichtig ist ist der neue Zustand durch die zwei Winkeln

$$\theta(t) = \theta , \quad \phi(t) = \phi + \omega_B t \quad (223)$$

gegeben. Wir erhalten Präzession des Spins um die  $z$ -Achse (die Richtung des Magnetfeldes).