

Inhaltsverzeichnis

0.1	Einführung	2
0.1.1	Notation	2
0.1.2	Geschichtliches	3
0.2	Mathematischer Rahmen der Quantenmechanik	4
0.2.1	Fourier-Transformationen	5
0.2.2	Hilbert-Raum der Vektoren	5
0.2.3	Liouville-Raum der Operatoren	5
0.2.4	Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie	6
0.2.5	Kommutator und Antikommutator	6
0.3	Der Photoeffekt	6
0.4	Der Compton-Effekt	9
0.5	Wellen und Teilchen	17
0.5.1	De-Broglie-Wellenlänge	17
0.6	Grundkonzepte der Quantenmechanik	18
0.6.1	Postulate für reine und abgeschlossene Quantensysteme	18
0.6.2	Die Schrödinger-Gleichung	19
0.6.3	Messung von Quantensystemen	23
0.6.4	Darstellungen	23
0.6.5	Heisenbergsche Unschärferelation	25
0.6.6	Quantentheoretische Bilder und Zeitentwicklung	25
0.7	Der Harmonische Oszillator	28
0.7.1	Zerlegung des Hamiltonoperators	28
0.7.2	Die Wellenfunktion in Ortsdarstellung	29
0.7.3	Eigenwerte des quantenmechanischen harmonischen Oszillators (Rechnung)	30
0.8	Drehimpuls	40
0.8.1	Kommutator und Antikommutator	40
0.8.2	Gesamtdrehimpuls	41
0.8.3	Aufsteiger und Absteiger	41
0.8.4	Der Spin	42
0.9	Das Wasserstoffatom	42

0.9.1	Radiale Bewegungsgleichung	42
0.9.2	Dimensionslose radiale Bewegungsgleichung	43
0.10	Spin-Bahn-Kopplung und Clebsch Gordan Koeffizienten	43
0.11	Versteckte Variablen ? Bell'sche Ungleichungen	43
0.12	Relativistische Quantenmechanik	43
0.12.1	Vierervektoren	43
0.12.2	Operatoren	44
0.12.3	Die Klein-Gordon-Gleichung	44
0.12.4	Die Dirac-Gleichung	45
0.13	Wichtige Operatoren und Kommutatoren	47
1	Autoren	49
2	Bildnachweis	51

Lizenz

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported License, see <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>

Einführung in die Theoretische Physik - Ein Lehrbuch in mehreren Bänden, 12. Teil

0.1 Einführung

0.1.1 Notation

In der Quantenmechanik werden viele, leicht unterschiedliche Notationen verwendet. In diesem Buch soll die folgende Notation Anwendung finden:

Dirac-Notation (abstrakte Darstellung):

Allgemeine Abhängigkeit eines Zustandes von einem Parameter: $|\psi, t\rangle$ nicht $|\psi(t)\rangle$

Das benutzte quantentheoretische Bild wird durch einen Index an Zustand und Operator angegeben: $|\psi, t\rangle_X$ bzw. \hat{A}_X mit $X = S$ (Schroedinger), H (Heisenberg), I (Dirac)

Darstellung eines Operators in einer bestimmten Basis $|x\rangle$:
 $\langle x|\psi,t\rangle = \psi(x,t)$ bzw. $\langle p|\psi,t\rangle = \psi(p,t)$

0.1.2 Geschichtliches

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts glaubten die Physiker, die Physik sei im Wesentlichen abgeschlossen. Die Physiker hatten zwei große Theorien, die Mechanik und die Elektrodynamik und die etwas dazwischen angesiedelte Theorie der Thermodynamik. Die Wechselwirkungen zwischen Materie und Strahlung wurden mithilfe des Lorentzschen Kraftgesetzes erklärt.

Zwar gab es einige ungeklärte Punkte, einige nicht erklärbare Beobachtungen, doch man gewöhnte sich langsam daran, sie zu ignorieren.

Diese Punkte waren:

- Es gab kein Gesetz, welches das Energiespektrum des schwarzen Strahlers zutreffend beschrieb.
- Die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität von Festkörpern und Gasen konnte nicht erklärt werden.
- Es gab Widersprüche bei der Interpretation der Maxwell'schen Gleichungen, und
- der negative Ausgang des Michelson-Morley-Versuchs (1887) war unverständlich.

Und genau aus diesen scheinbar "letzten Problemen der Physik" heraus entstand fast das gesamte neue physikalische Weltbild.

Die beiden letztgenannten Probleme wurden von [A. EINSTEIN](#) durch die Spezielle Relativitätstheorie (1905) gelöst. Die übrigen Probleme wurden nach und nach durch die ebenso revolutionären Vorstellungen der Quantenmechanik behoben.

Für das erste Problem fand Max Planck eine Lösung, indem er seine Theorie von der Quantisierung der Energie aufstellte. Die Energie einer elektromagnetischen Welle ist eine ganzzahlige Vielfache von hf , wobei h eine neue Konstante darstellt. Einstein verallgemeinerte diese Theorie zu einer Teilchentheorie des Lichts mit Photonen (siehe [Der Photoeffekt](#)), welche alle die Energie hf besitzen. Ein Lichtstrahl ist gemäß dieser Theorie ein Strom von Lichtteilchen. Allerdings zeigt Licht gleichzeitig Wellenverhalten, wie in der klassischen Elektrodynamik

beschrieben. Diese Doppelnatur des Lichts bezeichnet man als Welle-Teilchen-Dualismus.

Die ersten Probleme waren also bereits gelöst, allerdings waren die Lösungen einerseits schwer mit den vorhandenen Theorien in Einklang zu bringen, andererseits sah man nun, auf welchen wackeligen Füßen die bisherigen Theorien standen.

Den nächsten Knacks erlitten die etablierten Theorien bereits 1911 als Ernest Rutherford seinen Streuversuch durchführte und dabei feststellte, dass das Atom zum größten Teil leer ist und nur einen kleinen positiv geladenen Kern besitzt, welcher von einer Elektronenhülle umkreist wird. Negativ geladene Elektronen, die um einen positiv geladenen Atomkern laufen, stellen gegeneinander bewegte elektrische Ladungen dar. Solche müssen nach der klassischen Elektrodynamik ständig elektromagnetische Wellen abstrahlen und damit Energie verlieren. Die Atome wären nicht stabil, müssten also in Sekundenbruchteilen zusammenfallen. Zusammen mit den Untersuchungen der Emissions- und Absorptionsspektren der Atome, welche bis dahin noch nicht erklärt waren und welche gegen eine kontinuierliche Energieabgabe der Elektronen sprachen, entwickelte Bohr daraus sein Atommodell mit quantisierten Elektronenbahnen.

Die Theorie der Lichtquanten von Max Planck und Albert Einstein und das Bohrsche Atommodell konnten jedoch nur Teilbereiche der Quantentheorie erklären und sie standen noch nicht auf einem gemeinsamen theoretischen Unterbau. Dies änderte sich 1923 als de Broglie seine Theorie über den Wellencharakter von Teilchen aufstellte, welche allerdings noch keine eindeutigen Vorhersagen ermöglichte und wenig später (1925) Schrödinger und Heisenberg ihre beiden äquivalenten Formulierungen der Quantenmechanik herausgaben.

Im Folgenden werden zunächst die für die Quantenphysik grundlegenden Phänomene besprochen.

0.2 Mathematischer Rahmen der Quantenmechanik

Wie jede physikalische Theorie hat auch die Quantentheorie die Aufgabe, das Ergebnis von Experimenten vorherzusagen und in das existierende Weltbild einzubinden. Die Mathematik dient gerade in der Quantenphysik als wichtiges Hilfsmittel Zusammenhänge, jenseits der alltäglichen Erfahrung, zu erfassen und zu verstehen. Der Rahmen der sich hierbei für die Quantentheorie bewährt hat, ist die Theorie des Hilbert-Raumes und die Wahrscheinlichkeitstheorie. Der Zusam-

menhang zwischen den mathematischen Größen und der physikalischen Realität soll hier aufgeführt werden.

0.2.1 Fourier-Transformationen

In der Quantenmechanik sind die Fourier-Transformationen ein wichtiges Hilfsmittel. Mit ihrer Hilfe lässt sich zwischen verschiedenen Räumen, z.B. dem Orts- und dem Impulsraum transformieren.

Definition: Fouriertransformation Die Fouriertransformierte $\mathcal{F}(f)$ einer Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist definiert durch: $\hat{f}(t) = \mathcal{F}(f(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixt} dx$, Die Rücktransformation ist entsprechend: $f(x) = \mathcal{F}^\dagger(\hat{f}(t)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(t) e^{ixt} dt$,

0.2.2 Hilbert-Raum der Vektoren

Jedem quantenmechanischen Zustand wird im Allgemeinen ein Vektor zugeordnet, der nach der Diracschen Notation *Ketvektor* oder schlicht *Ket* genannt wird. Die Gesamtheit dieser Kets bildet einen d -dimensionalen Vektorraum, den sog. *Hilbert-Raum*.

Definition: Hilbert-Raum Der d -dimensionale Hilbertraum \mathcal{H} ist ein linearer Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen \mathbb{C} , auf dem ein hermitesches *Skalarprodukt* definiert ist.

Linearität: Mit $|u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$ und $\lambda, \delta \in \mathbb{C}$ gilt: $|\lambda v + \delta u\rangle = \lambda|v\rangle + \delta|u\rangle$ (Superpositionsprinzip)

Metrik: Zwei Vektoren $|u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$ ist als *Skalarprodukt* (auch **inneres Produkt**) eine komplexe Zahl der Form $\langle u|v\rangle$ zugeordnet. Es besitzt folgende Eigenschaften:

0.2.3 Liouville-Raum der Operatoren

Definition: Liouville-Raum: Der Liouville-Raum \mathbb{L} ist ein linearer Vektorraum über dem Körper der komplexen Zahlen \mathbb{C} , dessen Elemente $|A\rangle, |B\rangle$ die linearen Operatoren auf einem Hilbert-Raum \mathcal{H} sind.

0.2.4 Grundlagen der Wahrscheinlichkeitstheorie

0.2.5 Kommutator und Antikommutator

Der Kommutator zweier Operatoren ist definiert durch: $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = -[\hat{B}, \hat{A}]$ Entsprechend definiert man den Antikommutator $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} = \{\hat{B}, \hat{A}\}$

0.3 Der Photoeffekt

Im Jahre 1887 entdeckte **H.R. HERTZ** bei seinen bahnbrechenden Versuchen mit elektromagnetischen Wellen, dass ultraviolettes Licht eine Funkenentladung beeinflusst. Er beauftragte seinen Assistenten **W. HALLWACHS** mit der Untersuchung dieser Erscheinung, der daraufhin 1888 den "lichtelektrischen Effekt" (Hallwachs-Effekt, Photoeffekt) entdeckte und untersuchte. Das Ergebnis: Negativ geladene Metallkörper entladen sich bei Bestrahlung mit ultraviolettem Licht, positiv geladene nicht.

P. LENARD verlegte diese Versuche ins Vakuum und schaltete dadurch den störenden Einfluss der Luft aus. Er wies nach, dass die von dem Licht aus einer Metalloberfläche ausgelösten negativen Ladungen aus Elektronen bestehen. Genauere Untersuchungen (1902) zeigten:

1. Die Geschwindigkeit der ausgelösten Elektronen ist unabhängig von der Intensität des Lichtes. Höhere Lichtintensität vergrößert lediglich die Zahl der pro Zeiteinheit ausgelösten Elektronen.
2. Die Geschwindigkeit der ausgelösten Elektronen hängt nur von der Frequenz des Lichtes ab und steigt mit zunehmender Frequenz.
3. Bei abnehmender Frequenz des Lichtes verschwindet der Effekt plötzlich bei einer Grenzfrequenz f_G .
4. Auch bei Strahlung von sehr geringer Intensität ("Helligkeit") tritt der Effekt praktisch sofort ein, nämlich in weniger als 10^{-8} Sekunden.

Alle diese Eigenschaften sind mit der Wellennatur des Lichtes nicht zu vereinbaren. Mit der in Jahrhunderten durch Interferenz- und Beugungserscheinungen gefestigten Vorstellung, das Licht sei eine Welle, kann der Photoeffekt nicht erklärt werden.

Die Erklärung gab EINSTEIN im Jahr 1905: In einem Lichtstrahl ist die Energie nicht (wie in einer Welle) kontinuierlich verteilt, sondern in einer endlichen Anzahl von voneinander getrennten (diskreten) "Energiequanten" konzentriert, die nur als Ganzes und nur einzeln absorbiert werden können. Die Energie E eines "Lichtquants" ist der Frequenz f des Lichtes proportional.

$$E = hf.$$

Der Proportionalitätsfaktor h ist das [plancksche Wirkungsquantum](#):

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$\hbar c \approx 197 \text{ nm eV}$$

Wenn die Energie eines einzelnen Lichtquants nicht ausreicht, ein Elektron aus dem Metall herauszulösen (die "Austrittsarbeit" aufzubringen), dann vermögen es auch noch so viele Lichtquanten nicht.

Ist die Energie des Lichtquants größer als die Austrittsarbeit, dann wird der Überschuss dem Elektron als kinetische Energie mitgegeben.

Hochpräzise Messungen von [MILLIKAN](#) (1916) bestätigten die Theorie Einsteins vollkommen.

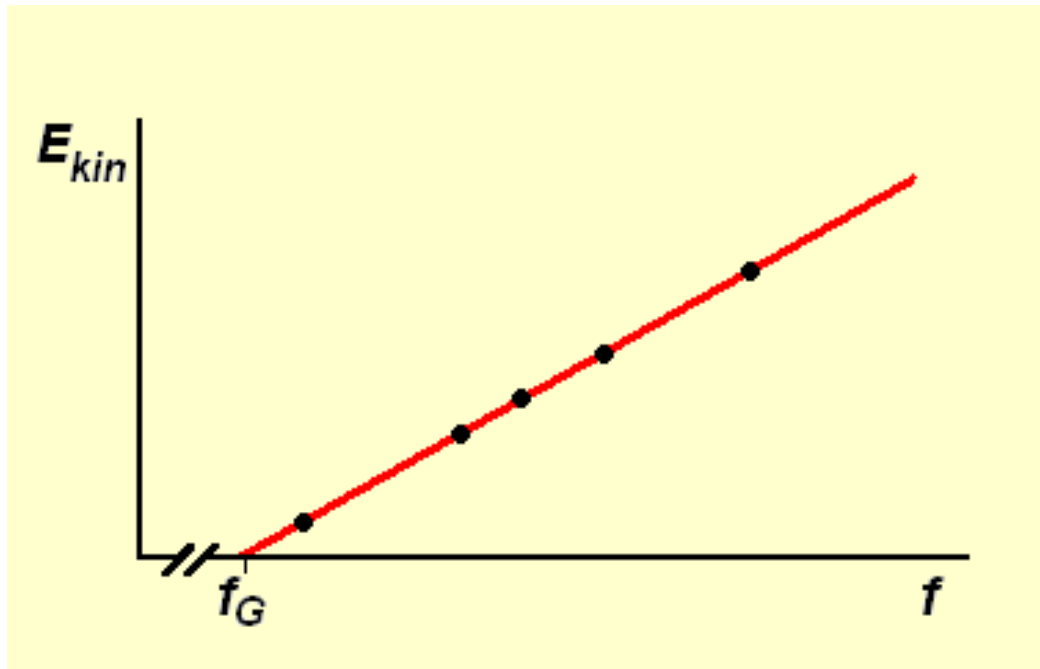


Abbildung 1

Der Erklärung des Photoeffekts (wie auch der des Compton-Effekts - siehe unten) haftet etwas Zwiespältiges an: Einerseits werden die Lichtquanten - auch Photonen genannt - als **Korpuskeln** betrachtet, andererseits werden ihnen eine Frequenz und eine Wellenlänge zugeordnet, also Eigenschaften, die nur bei einer Welle Sinn haben. Dazu kommt, dass es beim Licht Phänomene gibt, nämlich Interferenz und Beugung, die nur durch die Welleneigenschaft des Lichts erklärt werden können. Wir haben es also hier mit einem "Dualismus" von Welle und Korpuskel zu tun, der zwei im Grunde unverträgliche Erklärungsmodelle verbindet. Die Erklärung des Photoeffekts hat einen hohen Preis: Sie ist nur möglich, wenn wir dem Licht zwei einander widersprechende, zwei einander ausschließende Eigenschaften zuschreiben, nämlich sowohl Welle als auch Korpuskelstrom zu sein. Dagegen hilft auch nicht der Erklärungsversuch, das Wellenmodell des Lichtes beschreibe lediglich die Dichteverteilung der Photonen, denn einer elektromagnetischen Welle wie dem Licht kommt zweifellos eine eigenständige Realität zu: elektrische und magnetische Felder sind physikalische Realitäten mit beobachtbaren Eigenschaften. Mit anderen Worten: hier liegt noch immer ein ungelöstes Problem von gewaltiger Tiefe vor, das nicht durch Gewöhnung beseitigt wird.

0.4 Der Compton-Effekt

Der Compton-Effekt (A. H. Compton, 1921) ist die Streuung von harten Röntgen- oder Gammastrahlen an den Elektronen von Materie. Dabei werden Elektronen aus der Materie herausgelöst. Die seitlich vor- oder rückwärts gestreuten Strahlen erfahren dabei eine mit dem Streuwinkel ψ ($0 < \psi \leq 180^\circ$) zunehmende Vergrößerung ihrer Wellenlänge. Die kinetische Energie der gestoßenen Elektronen nimmt mit ihrem Streuwinkel ϕ ($0 < \phi < 90^\circ$) und der Wellenlänge der Strahlung ab.

Zur Untersuchung des Compton-Effekts wird ein kleiner Körper aus z. B. Paraffin oder Graphit mit **monochromatischem** Röntgenlicht bestrahlt und die Wellenlänge der gebeugten Strahlung mit dem Röntgen-**Spektrometer** untersucht. Die herausgeschlagenen Elektronen können z. B. mit der **Nebelkammer** beobachtet werden.

Wie sich zeigt, kann dieser Effekt quantitativ zutreffend gedeutet werden als elastischer, im Allgemeinen nicht zentraler Stoß zwischen je einem Lichtquant (Photon) der Strahlung und einem Elektron des bestrahlten Stoffes, wobei die aus der klassischen Mechanik bekannten Erhaltungssätze für Energie und Impuls gelten. Der Compton-Effekt ist eine starke Stütze der Quantentheorie und der Speziellen Relativitätstheorie.

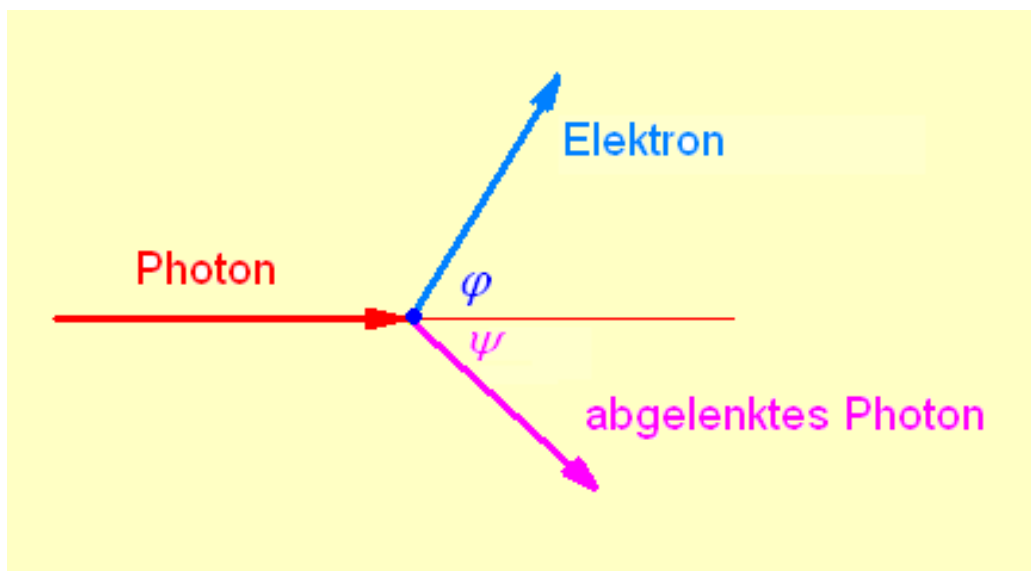


Abbildung 2

Nach der Quantentheorie beträgt die Energie eines Photons der Frequenz f

$$E_{\text{Ph}} = h f,$$

wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist.

Nach der Speziellen Relativitätstheorie besitzt ein Energiequantum E die Masse

$$m = \frac{E}{c^2}.$$

Demnach hat ein Photon der Frequenz f (und der Wellenlänge $\lambda = c/f$) die Masse

$$m_{\text{Ph}} = \frac{h f}{c^2} = \frac{h}{\lambda c}.$$

Für den Impuls $p = m v$ ergibt sich für das Photon daraus

$$p_{\text{Ph}} = m_{\text{Ph}} c = \frac{E}{c^2} c = \frac{E}{c} = \frac{h f}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Von dem gestoßenen Elektron wird angenommen, dass es vor dem Stoß ruht und nicht an ein Atom gebunden ist. Seine kinetische und seine potentielle Energie seien also null. (Dass diese Annahme tatsächlich berechtigt ist, wird später gezeigt werden.)

Dann lautet die Energiebilanz

$$E_{\text{Ph}} = E_e + E'_{\text{Ph}} \quad \text{oder} \quad h f = E_e + h f',$$

wobei E' die Energie des Photons und f' seine Frequenz nach dem Stoß ist.

Da das Elektron nach dem Stoß eine sehr hohe Geschwindigkeit v haben kann, müssen wir seine relativistische Massenveränderung berücksichtigen. Dann beträgt seine kinetische Energie

$$E_{\text{kin}} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - m_0 c^2 = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right),$$

wobei m_0 die Ruhemasse des Elektrons und $\beta = v/c$ ist.

Somit lautet die Energiebilanz

$$hf = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) + hf' \quad (1)$$

Die Impulsbilanz stellen wir für die beiden Komponenten des Impulses getrennt auf: Für den Impuls in Stoßrichtung gilt

$$p_{\text{Ph}} = p_e \cos \varphi + p'_{\text{Ph}} \cos \psi \quad \text{oder} \quad \frac{hf}{c} = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \beta^2}} \cos \varphi + \frac{hf'}{c} \cos \psi,$$

wofür man mit $\beta = v/c$ auch schreiben kann

$$\frac{hf}{c} = \frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \cos \varphi + \frac{hf'}{c} \cos \psi \quad (2)$$

Für den Impuls senkrecht zu Stoßrichtung gilt entsprechend

$$0 = -\frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \sin \varphi + \frac{hf'}{c} \sin \psi \quad (3)$$

Aus den Gleichungen (2) und (3) wird zunächst ψ wie folgt eliminiert:

Aus Gleichung (2) folgt

$$\frac{hf}{c} - \frac{hf'}{c} \cos \psi = \frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \cos \varphi \quad (1.1)$$

Aus Gleichung (3) folgt

$$\frac{hf'}{c} \sin \psi = \frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \sin \varphi \quad (3.1)$$

Durch Quadrieren und Addieren dieser beiden Gleichungen ergibt sich

$$\frac{h^2 f^2}{c^2} - \frac{2h^2 f f'}{c^2} \cos \psi + \frac{h^2 f'^2}{c^2} = \frac{m_0^2 c^2 \beta^2}{1 - \beta^2} \quad (4)$$

Aus Gleichung (1) findet man für den in Gleichung (4) rechts stehenden Ausdruck

$$\frac{m_0^2 c^2 \beta^2}{1 - \beta^2} = m_0^2 c^2 \left\{ \left[\frac{h}{m_0 c^2} (f - f') + 1 \right]^2 - 1 \right\}$$

Nach Einsetzen in (4) und einigen Umformungen ergibt sich

$$f' = \frac{f}{1 + \frac{hf}{m_0 c^2} (1 - \cos \psi)} = \frac{f}{1 + \frac{2hf}{m_0 c^2} \sin^2 \frac{\psi}{2}}. \quad (5)$$

Ersetzt man darin f' durch c/λ' und f durch c/λ , so erhält man schließlich

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \psi) = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\psi}{2}. \quad (6)$$

Hier fällt auf, dass die Änderung der Wellenlänge nur vom Streuwinkel, nicht aber von der Wellenlänge (und damit auch nicht von der Frequenz) abhängt. Das bedeutet aber *nicht*, dass auch die Frequenzänderung von der Frequenz unabhängig ist. Die letzte Gleichung kann nämlich auch wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{c}{f'} - \frac{c}{f} = c \frac{f - f'}{f f'} = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\psi}{2},$$

woraus folgt

$$\Delta f = f f' \frac{2h}{m_0 c^2} \sin^2 \frac{\psi}{2},$$

und wenn sich f und f' nicht zu sehr unterscheiden (sowie innerhalb nicht allzu großer Intervalle), ist annähernd

$$\Delta f \sim f^2 \quad \text{und} \quad \frac{\Delta f}{f} \sim f.$$

Praktisch beobachtbar sind nur die *relative* Frequenz- bzw. Wellenlängenänderungen der Röntgenstrahlung. Da aber $\Delta\lambda$ sehr klein ist (siehe Gleichung (6)), erhält man nur dann einen beobachtbaren Effekt, wenn auch λ sehr klein ist. Daher ist der Compton-Effekt nur bei harten Röntgen- und Gammastrahlen beobachtbar. Dann aber sind die Photonen so energiereich, dass die Bindungsenergie auch der Elektronen auf tiefen Schalen und ihre kinetische Energie vernachlässigbar klein sind. Die Elektronen verhalten sich also gegenüber diesen Photonen wirklich wie freie und ruhende Elektronen.

Die in Gleichung (5) auftretende Größe

$$\frac{h}{m_0c}$$

hat die Dimension "Länge" und wird als Compton-Wellenlänge λ_C (des Elektrons) bezeichnet. Sie ist die Wellenlänge einer Strahlung, deren Photonen die Masse eines (ruhenden) Elektrons besitzen. Es ist

$$\lambda_C = 2,426 \cdot 10^{-12} \text{m}.$$

Diese Wellenlänge liegt im Gebiet der Gamma-Strahlung. Auch diese Tatsache weist darauf hin, dass der Compton-Effekt nur bei harter Röntgen- und Gammastrahlung beobachtet werden kann: Wir haben den Compton-Effekt ja als elastischen Stoß zwischen einem Photon und einem Elektron aufgefasst. Die Theorie des elastischen Stoßes zeigt aber, dass bei einem solchen Stoß nur dann ein nennenswerter Anteil der Energie des Photons auf das Elektron übertragen wird, wenn das Massenverhältnis von Photon und Elektron nicht allzu klein ist. Das ist aber nur bei entsprechend kleinen Wellenlängen der Fall.

Bezeichnen wir die kinetische Energie des Elektrons nach dem Stoß mit E_e , so kann man Gleichung (1) nach Division mit hf wie folgt schreiben

$$1 = \frac{f'}{f} + \frac{E_e}{hf},$$

woraus für das Verhältnis der Elektronenenergie (nach dem Stoß) zur Photonenenergie (vor dem Stoß) folgt

$$\frac{E_e}{hf} = 1 - \frac{f'}{f}$$

und mit Gleichung (5)

$$\frac{E_e}{hf} = \frac{\frac{2hf}{m_0c^2} \sin^2 \frac{\psi}{2}}{1 + \frac{2hf}{m_0c^2} \sin^2 \frac{\psi}{2}}. \quad (7)$$

Mit der oben eingeführten Compton-Wellenlänge kann diese Gleichung auch so geschrieben werden:

$$E_e = hf \frac{2\lambda_C \sin^2 \frac{\psi}{2}}{\lambda + 2\lambda_C \sin^2 \frac{\psi}{2}}. \quad (8)$$

Für $\lambda = \lambda_C$ und $\psi = 180^\circ$ (zentraler Stoß zweier Teilchen gleicher Masse) folgt aus Gleichung (8)

$$E_e = \frac{2}{3}hf.$$

Das Elektron übernimmt also nur 2/3 der Energie des Photons, und nicht – wie nach der klassischen Mechanik zu erwarten wäre – die gesamte Energie. Dies erklärt sich relativistisch daraus, dass beim Stoß das Elektron Masse gewinnt und das Photon Masse verliert, sodass die beiden Teilchen nicht mehr gleiche Massen haben.

Mit

$$E_e = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right)$$

lassen sich durch eine etwas mühsame Rechnung aus Gleichung (7) β (und daraus v) bestimmen:

$$\beta = \frac{v}{c} = \frac{2k \sin \frac{\Psi}{2} \sqrt{1 + (k^2 + 2k) \sin^2 \frac{\Psi}{2}}}{1 + 2(k^2 + k) \sin^2 \frac{\Psi}{2}},$$

wobei zur Vereinfachung

$$\frac{hf}{m_0 c^2} = k$$

gesetzt wurde.

Schließlich bleibt noch der Winkel ϕ zu berechnen. Dividiert man die Gleichung (3) durch Gleichung (2), so findet man nach einigen einfachen Umformungen

$$\tan \phi = \frac{\frac{hf'}{c} \sin \Psi}{\frac{hf}{c} - \frac{hf'}{c} \cos \Psi} = \frac{f' \sin \Psi}{f - f' \cos \Psi}$$

Setzt man für f' den Wert aus Gleichung (5) ein, so erhält man schließlich

$$\tan \phi = \frac{\sin \Psi}{1 - \cos \Psi + \frac{2hf}{m_0 c^2} \sin^2 \frac{\Psi}{2}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{hf}{m_0 c^2}\right) \tan \frac{\Psi}{2}} = \frac{\cot \frac{\Psi}{2}}{1 + \frac{hf}{m_0 c^2}}.$$

Führt man hier wieder die Compton-Wellenlänge ein, so erhält man

$$\tan \phi = \frac{1}{1 + \lambda_C \frac{f}{c}} \cot \frac{\Psi}{2} = \frac{1}{1 + \lambda_C \frac{1}{\lambda}} \cot \frac{\Psi}{2} = \frac{\lambda}{\lambda + \lambda_C} \cot \frac{\Psi}{2}.$$

Wenn also ψ zwischen 0° und 180° variiert ($\psi/2$ also zwischen 0° und 90°), dann variiert ϕ zwischen 90° und 0° . Die Elektronen werden also stets nach vorn oder schräg nach vorn weggestoßen.

Ein besonders einfacher Sonderfall – der aber doch die typischen Charakteristika des allgemeinen Falles zeigt – ergibt sich für $\lambda = \lambda_C$. Dann wird

$$\tan \phi = \frac{1}{2} \cot \frac{\psi}{2}$$

und

$$E_e = hf \frac{2 \sin^2 \frac{\psi}{2}}{1 + 2 \sin^2 \frac{\psi}{2}}.$$

Für die Energie des Photons nach dem Stoß findet man daraus

$$hf' = hf - E_e = hf \left(1 - \frac{2 \sin^2 \frac{\psi}{2}}{1 + 2 \sin^2 \frac{\psi}{2}} \right) = hf \frac{1}{1 + 2 \sin^2 \frac{\psi}{2}}.$$

Aus diesen Formeln wurden für $\psi = 0, 15^\circ, 30^\circ \dots 180^\circ$ die dazu gehörigen Werte von ϕ , E_e und hf' berechnet. Ihre Darstellung in Polarkoordinaten zeigt die folgende Abbildung:

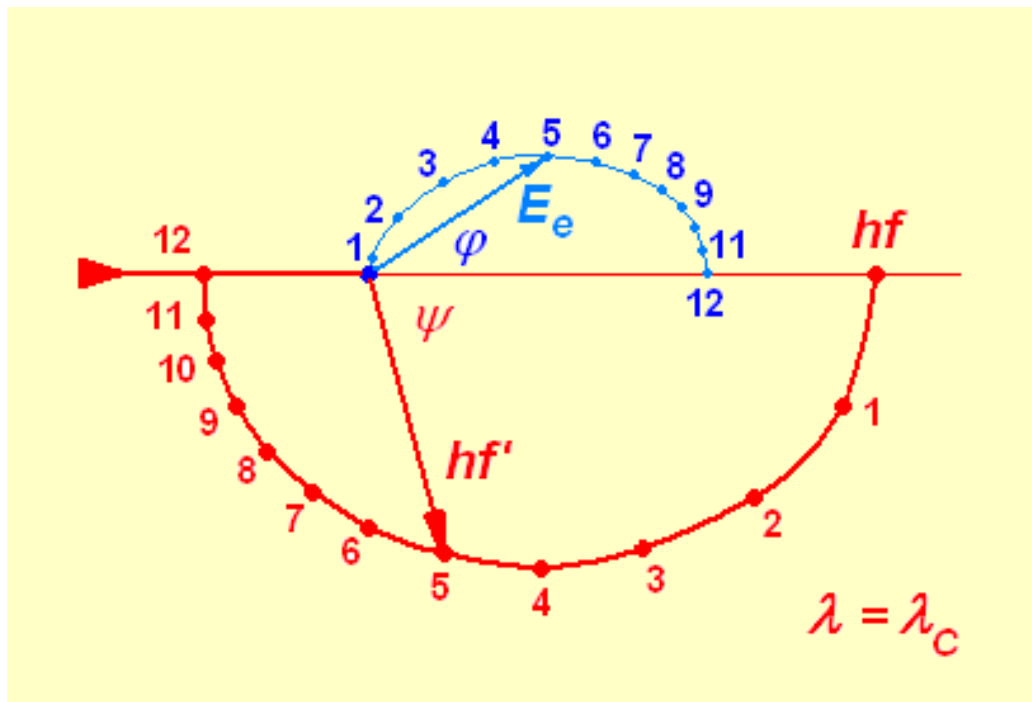


Abbildung 3

0.5 Wellen und Teilchen

0.5.1 De-Broglie-Wellenlänge

Untersuchungen (Photoeffekt und Doppelspaltversuch) ergaben, dass das Licht sowohl Wellen, als auch Teilcheneigenschaften besitzt. Für Photonen gilt:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

De Broglie übertrug dies 1923 auf beliebige Teilchen:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

mit dem relativistischen Impuls:

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

ergibt sich daraus die sogenannte De-Broglie-Wellenlänge:

$$\lambda = \frac{h \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{mv}$$

Damit besitzt jedes Teilchen sowohl Wellen als auch Teilcheneigenschaften. Dies wurde 1927 durch Experimente bestätigt.

0.6 Grundkonzepte der Quantenmechanik

In diesem Abschnitt soll, nachdem im [letzten Abschnitt der mathematische Rahmen](#) erläutert wurde, der physikalische Rahmen der Quantentheorie abgesteckt werden. Zunächst werden die Postulate der (nicht-relativistischen) Quantenmechanik [axiomatisch](#) eingeführt. Hierbei spielt der Begriff der [Messung](#) eine besondere Rolle. Daran schließt sich dann eine Betrachtung der verschiedenen Bilder und Darstellungen der Quantentheorie an.

0.6.1 Postulate für reine und abgeschlossene Quantensysteme

Im folgenden wird die theoretische Begründung der quantenphysikalischen Phänomene auf einige wenige Grundannahmen zurückgeführt. Diese Postulate bilden das axiomatische Grundgerüst für die nicht-relativistische Quantenmechanik. Eine Verallgemeinerung auf relativistische Phänomene erfolgt im Kapitel über die [Klein-Gordon-Gleichung](#).

Postulat 1 (reiner Zustand): Ein abgeschlossenes Quantensystem, das sich in einem reinen Zustand befindet wird durch einen normierten Zustandsvektor $|\psi\rangle$, auf einem komplexen, unitären Hilbert-Raum beschrieben. Da es sich bei $|\psi\rangle$ um einen reinen Zustand handelt, beschreiben vom Zustandsvektor linear abhängige Vektoren den selben Zustand. Daher wird jedem quantenmechanischen Zustand ein eindimensionaler Teilraum des Hilbertraumes zugeordnet. Diesen Teilraum bezeichnet man als *Strahl*.

Der Hilbertraum ist ein linearer Vektorraum, deshalb folgt daraus, dass eine Linearkombination von Zustandsvektoren wiederum einen Zustandsvektor bildet. Das nennt man das Superpositionsprinzip.

Postulat 2 (Projektionsmessung, von Neumann Messung): Die durch eine Projektionsmessung an einem Quantensystem experimentell messbaren physikalischen Größen (z.B. Energie, Ort, Drehimpuls) werden durch hermitesche Operatoren auf \mathcal{H} beschrieben. Diese Operatoren werden als **Observablen** bezeichnet. Mögliche Ergebnisse einer an einem Quantensystem durchgeführten Messung der Observablen sind die **Eigenwerte** dieses Operators. Diese ergeben sich mit der **Wahrscheinlichkeit**: $W(a) = \frac{\langle \psi | P_a | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ Bei einer idealen Messung (ideal bezieht sich hier auf den Unterschied zwischen Experiment und Theorie) der Observablen geht der Zustand $|\psi\rangle$ des Systems in den zum Meßwert a_i gehörenden **Eigenzustand** $|a_i\rangle$ über.

Postulat 3 (Zeitentwicklung): Die Zeitentwicklung eines Quantensystems von t_0 nach t , lässt sich durch einen **unitären Zeitentwicklungsoperator** $U(t, t_0)$ beschreiben. Er hat folgende Eigenschaften: $U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0)$, $U(t = t_0, t_0) = 1$, $U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$ Im Schrödinger-Bild genügt die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle_S$ der **Schrödinger-Gleichung**: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle_S = \hat{H}_S |\psi, t\rangle_S$ mit $|\psi, t\rangle_S = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle_S$ Dabei entspricht der Hamiltonoperator der klassischen Hamiltonfunktion für N Teilchen: $\hat{H} = \sum_i^N [\frac{1}{2m_i} (\vec{p}_i - e\vec{A}(\vec{r}_i))^2 + V(\vec{r}_i)] + \sum_{i < j} U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ Hinweis: Die Festlegung der Schrödingergleichung als fundamentale Gleichung der Quantenmechanik ist eine beliebige. Ebensogut kann die gesamte Quantenmechanik auch aus der Heisenberg- oder Dirac-Gleichung (bzw. aus beliebigen anderen Bildern) entwickelt werden.

0.6.2 Die Schrödinger-Gleichung

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist die grundlegende Gleichung der Quantenmechanik. Aus ihr folgen die Unschärferelation, die Drehimpulsquantelung und viele weitere Dinge die die Quantenmechanik ausmachen. Für ein Teilchen der Masse m (etwa ein Elektron) im Potential V (etwa das eines Atomkerns) lautet sie:

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

Dabei ist $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ der Laplace-Operator und \hbar das Plancksche Wirkungsquantum. Der Ausdruck auf der linken Seite wird Hamilton-Operator H genannt:

$$H := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t)$$

Die Lösung $\psi(\vec{r}, t)$ dieser partiellen Differentialgleichung ist die **Wellenfunktion** die das Teilchen im Potential V beschreibt. Was sagt diese Wellenfunktion aber aus?

Statistische Interpretation

Die Wellenfunktion kann so verstanden werden, dass sie die Verteilung der Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung das Teilchen an einem bestimmten Ort anzutreffen, beschreibt. Da ψ im Allgemeinen eine komplexe Zahl ist, wird das Betragsquadrat $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeit genommen. Dies bringt einige Forderungen mit sich, die wir an die Wellenfunktion stellen müssen:

- An irgendeinem Ort muss sich das Teilchen befinden, daher muss die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 ergeben: $\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$ bei Integration über den gesamten Raum. Dies ist die Normierungsbedingung
- Um diese Bedingung zu erfüllen muss ψ *quadratintegabel* sein, das heißt dieses Integral muss überhaupt bestimmt sein.
- Daraus folgt auch, dass ψ im Unendlichen auf 0 abfällt, was uns noch bei einigen Rechnungen zugute kommt.

Uns kommt eine Eigenschaft der Schrödinger-Gleichung zugute, die die Erfüllung der ersten Bedingung vereinfacht: sie ist linear! Damit lässt sich eine beliebige quadratintegable Wellenfunktion normieren: Ist $\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = a$, dann erfüllt die Funktion $\psi'(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\psi(\vec{r}, t)$ ebenfalls die Schrödinger-Gleichung (wie man sich leicht durch Einsetzen klar machen kann), und zusätzlich die Normierungsbedingung.

Es seien noch zwei übliche Größen der Statistik erwähnt:

- Der Erwartungswert einer Größe Q : $\langle Q \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) Q \psi(\vec{r}, t)$, dabei ist ψ^* das komplex konjugierte ψ . Der Erwartungswert gibt die Mittelung einer Größe gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit an. Zu beachten ist, dass diese Mittelung keineswegs dem wahrscheinlichsten Wert entsprechen muss.
- Die Standardabweichung: $\sigma_Q^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$. Sie gibt an, wie weit ein Wert gestreut ist.

Freies Teilchen

Zum besseren Verständnis der Schrödinger-Gleichung betrachten wir nun zunächst ein freies Teilchen ($V = 0$). Damit ergibt sich für die Schrödinger-Gleichung:

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

Diese Gleichung hat Lösungen der Form:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

wobei

$$A = \text{konst}$$

und

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2 \cdot m}$$

ein Vergleich dieser letzten Gleichung mithilfe der Einstein-De-Broglie-Beziehung ergibt eine Übereinstimmung mit:

$$E = \frac{p^2}{2 \cdot m}$$

Da die Schrödinger-Gleichung eine Differentialgleichung zweiter Ordnung und in ψ linear und homogen ist, gilt für sie das Superpositionsprinzip, d.h. jede Linearkombination von Lösungen ist wieder eine Lösung. Solche Überlagerungen kann man als Integral darstellen:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \cdot g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)}$$

Beschränkt man sich auf den Eindimensionalen Fall ergibt sich:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

Setzt man die Zeit $t = 0$ ergibt sich:

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot g(k) e^{ikx}$$

Vergleicht man dies mit einer Fourier-Transformation, so sieht man das $g(k)$ die Fourier-Transformierte von $\Psi(x, t = 0)$ ist:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \Psi(x, t = 0) e^{-ikx}$$

Daraus folgt, das diese beiden letzten Gleichungen nicht nur für ein freies Teilchen, sondern für jedes Teilchen, in einem beliebigen Potential, gelten.

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Wenn man ein zeitlich konstantes Potential $V(\vec{r})$ annimmt, lässt sich die Schrödinger-Gleichung mit Hilfe eines Separationsansatzes $\Psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot f(t)$ vereinfachen:

$$-f(t) \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \phi(\vec{r}) f(t) = \phi(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)$$

Teilt man durch $\phi(\vec{r}) \cdot f(t)$ sind die Variablen \vec{r} und t getrennt, stehen also nur noch auf je einer Seite der Gleichung:

$$-\frac{1}{\phi(\vec{r})} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = \frac{1}{f(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t)$$

Es lässt sich also jede Seite als konstant in "ihrer" Variablen auffassen:

$$-\frac{1}{\phi(\vec{r})} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = \text{const.} = E$$

$$\frac{1}{f(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \text{const.} = E$$

Dabei nennen wir die Konstante E . Warum, werden wir später noch sehen. Betrachten wir zunächst die zweite Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t) = \frac{E}{i\hbar} f(t)$$

Diese einfache Differentialgleichung wird gelöst durch $f(t) = \exp(\omega t)$, wobei man durch Einsetzen ω erhält, womit der Zeitanteil der Wellenfunktion im Falle eines zeitunabhängigen Potentials lautet:

$$f(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

Nun zum Ortsanteil. Dieser ist bekannt als **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung**:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

Für zeitunabhängige Potentiale haben wir die Lösung des Problems somit darauf vereinfacht, nur noch den Ortsanteil bestimmen zu müssen.

0.6.3 Messung von Quantensystemen

0.6.4 Darstellungen

Ortsdarstellung und Ortsoperator

Impulsdarstellung und Impulsoperator

Der Impulsoperator

Die klassische Mechanik soll als Grenzfall in der (nichtrelativistischen) Quantenmechanik enthalten sein. Daher definieren wir den Erwartungswert des Impulses in der Ortsdarstellung, welche ja normalerweise auch in der klassischen Mechanik verwendet wird, als:

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle$$

Dieser Ausdruck lässt sich weiter auswerten, was schließlich auf den Impulsoperator führen wird:

$$\frac{1}{m} \langle p \rangle = \frac{d}{dt} \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) = \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{d}{dt} \psi^*(\vec{r}, t)$$

Nun lässt sich die Schrödinger-Gleichung einsetzen, wobei zu beachten ist, dass $H^* = H$:

$$= \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{1}{i\hbar} H \psi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{1}{-i\hbar} H \psi^*(\vec{r}, t)$$

Da das Potential reell ist und mit der Wellenfunktion vertauscht, bleibt:

$$= \int d^3 r \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{-\hbar}{2mi} \Delta \psi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t) \vec{r} \frac{+\hbar}{2mi} \Delta \psi^*(\vec{r}, t)$$

Nun benutzen wir, dass $\vec{\nabla} \left(\psi^* \vec{r} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{r} \vec{\nabla} \psi^* \right) = \psi^* \vec{r} \Delta \psi - \psi \vec{r} \Delta \psi^* + \left(\vec{\nabla} \psi^* \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi - \left(\vec{\nabla} \psi \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi^*$ und den Gaußschen Satz: $\int_V d^3 r \vec{\nabla} \phi = \int_{\partial V} d\vec{f} \phi$:

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left[- \int \vec{f} \left(\psi^* \vec{r} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{r} \vec{\nabla} \psi^* \right) + \int d^3 r \left(\vec{\nabla} \psi^* \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi - \int d^3 r \left(\vec{\nabla} \psi \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi^* \right]$$

Da aber die Wellenfunktion quadratintegrierbar sein soll, muss sie im Unendlichen auf 0 fallen, daher verschwindet das Oberflächenintegral.

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

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2mi} \int d^3r \left[\left(\vec{r} \vec{\nabla} \psi^* + \psi^* \vec{\nabla} \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi - \left(\vec{r} \vec{\nabla} \psi + \psi \vec{\nabla} \vec{r} \right) \vec{\nabla} \psi^* \right] \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \int d^3r \left[\psi^* \vec{\nabla} \vec{r} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \vec{r} \vec{\nabla} \psi^* \right] \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \int d^3r \left[-\vec{\nabla} (\psi^* \psi) + 2\psi^* \vec{\nabla} \psi \right]
\end{aligned}$$

Der Ausdruck links kann wieder mit dem Gaußschem Satz aufgelöst und mit 0 interpretiert werden. Damit erhalten wir schließlich:

$$\langle p \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t)$$

Dieser Ausdruck hat wieder genau die Form eines Erwartungswertes! Allerdings ist der Ausdruck, dessen Erwartungswert berechnet wird, ein Operator. Dies ist der **Impulsoperator**:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

0.6.5 Heisenbergsche Unschärferelation

0.6.6 Quantentheoretische Bilder und Zeitentwicklung

In **Postulat 3** wurde als Zustandsgleichung für die zeitliche Entwicklung eines Quantensystems, die sog. **Schrödinger-Gleichung** angegeben. Dies entspricht der Darstellung der Quantenmechanik in einem speziellen *Bild*, in diesem Fall im **Schrödinger-Bild**. Wegen der **Invarianz** aller physikalischen Größen unter **unitären Transformationen**, gibt es jedoch eine unendliche Anzahl **äquivalenter** Bilder mit denen die Quantenmechanik beschrieben werden kann. Neben dem angesprochenen **Schrödinger-Bild**, sind das **Heisenberg-** und das **Dirac-Bild** noch von besonderem Interesse. In diesem Abschnitt sollen deswegen die verschiedenen quantenmechanischen Bilder und die entsprechenden Transformationen besprochen werden.

Zeitentwicklungsoperator

Unter Ausnutzung des **Zeitentwicklungsoperators** $\hat{U}(t, t_0)$ ergibt sich die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung:

$$|\psi, t\rangle_S = \hat{U}(t, t_0) |\psi, t_0\rangle_S$$

eingesetzt wird daraus die zur Schrödingergleichung äquivalente Operatorgleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$$

Die Entwicklung des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ um t_0 bei einer infinitesimalen Änderung der Zeit $t = t_0 + \Delta t$ ergibt:

$$\hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) = \hat{U}(t_0, t_0) + \frac{d}{dt} \hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) \Big|_{t_0} \cdot (t_0 + \Delta t - t_0) + O(2) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}(t) + O(2)$$

Die Terme höherer Ordnung können vernachlässigt werden. \hat{U} kann nun als Produkt dieser infinitesimalen unitären Operatoren dargestellt werden:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t_0 - \Delta t) \hat{U}(t_0 - \Delta t, t_0 - 2\Delta t) \dots \hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0)$$

Daraus folgt dann sofort die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators.

Schrödinger-Bild

Das Schrödinger-Bild zeichnet sich dadurch aus, dass in ihm quantenmechanische Zustände zeitabhängig sind, während die Operatoren nur *explizit* von der Zeit abhängen können. Ist der Zustand eines Quantensystems zu einem Zeitpunkt bekannt, so ergibt sich die dynamische Entwicklung des Systems eindeutig durch Lösen der Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle_S = \hat{H}(t) |\psi, t\rangle_S$$

Es gilt also: Sei $|\psi_S(t)\rangle$ gegeben. Nun ergibt sich die Wahrscheinlichkeit X zu finden:

$$|\langle X | \psi_S(t) \rangle|^2$$

Wenden wir nun den Zeitentwicklungsoperator U auf den Zustand an:

$$|\psi_S(t_1)\rangle = U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$$

Damit ergibt sich für unsere Wahrscheinlichkeit:

$$|\langle X|\psi_S(t_1)\rangle|^2 = |\langle X|U(t, t_0)|\psi_S\rangle|^2$$

Heisenberg-Bild und Heisenberg-Gleichung

Man erhält das Heisenberg-Bild aus dem Schrödinger-Bild durch eine unitäre Transformation mit dem Zeitentwicklungsoperator $U^\dagger(t, t_0)$:

$$|\psi_H\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$$

Für eine Observable A ergibt sich:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

Nun spielt man ein wenig mit der Wellenfunktion

$$|\phi_H\rangle = A_H|\psi_H\rangle$$

und der Schrödingergleichung

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

und kommt so auf folgende Herleitung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dA_H}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt}(U^\dagger A_S U) \\ &= i\hbar \left(\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A_S U + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} (A_S) U + U^\dagger A_S \frac{\partial U}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

mit $i\hbar \frac{d}{dt}U = H_S U$ und $i\hbar \frac{d}{dt}U^\dagger = -U^\dagger H_S$ folgt:

$$\begin{aligned}
&= i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger A_S H_S U - U^\dagger H_S A_S U \\
&= i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger [A_S, H_S] U
\end{aligned}$$

mit $UU^\dagger = U^\dagger U = 1 + O(dt)$

$$= U^\dagger (A_S U U^\dagger H_S - H_S U U^\dagger A_S) U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U$$

mit $H_H = U^\dagger H_S U$ folgt daraus die Bewegungsgleichung, auch Heisenberg-Gleichung genannt, also das 4. Quantenpostulat im Heisenberg-Bild:

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t}$$

Dirac-/ Wechselwirkungs-Bild

0.7 Der Harmonische Oszillator

Betrachten wir den Hamiltonoperator: $\langle p | \hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \langle /p |$ und suchen wir die dazugehörigen Eigenfunktionen und Eigenwerte. $\langle p |$ Es gibt zwei grundsätzliche Lösungswege. Zum einen könnten wir den Operator in die Ortsdarstellung der Schrödingergleichung einsetzen und die resultierende Differentialgleichung mit den entsprechenden Randbedingungen lösen. Der zweite Weg zeigt eine grundsätzliche Herangehensweise an Probleme in der Quantenmechanik auf und nutzt die Operatordarstellung. Dieser Lösungsweg wird hier gerechnet. $\langle /p |$

0.7.1 Zerlegung des Hamiltonoperators

Zunächst führen wir drei Operatoren ein:

$\langle p | a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (x + \frac{i}{m\omega} p) \langle /p |$ $\langle p | a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (x - \frac{i}{m\omega} p) \langle /p |$ $\langle p | N = a a^\dagger \langle /p |$ Zu beachten ist, daß a, a^\dagger keine hermiteschen Operatoren sind, N allerdings schon. Man nennt Operatoren, die in ähnlicher Weise wirken wie a, a^\dagger Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren, bzw. auch Ab- und Aufsteigeoperatoren. Warum

und worauf auf- und abgestiegen wird, werden wir im nächsten Kapitel sehen. <p>Zuvor müssen wir uns aber einige Eigenschaften klarmachen</p> <ol type="i"> [a, a†] = 1 <p>Beweis: [a, a†] = $\frac{m\omega}{2\hbar} [x + \frac{i}{m\omega} p, x - \frac{i}{m\omega} p] = \frac{m\omega}{2\hbar} (-\frac{i}{m\omega} [x, p] + \frac{i}{m\omega} [p, x]) = \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{-i}{m\omega} 2i\hbar = 1$ </p> Der Hamiltonoperator lässt sich nun darstellen als $\hat{H} = \hbar\omega (aa^\dagger - \frac{1}{2})$. Wir können jetzt schon das Energiespektrum dieses Systems bestimmen! Nehmen wir an den Grundzustand |0⟩ mit Energie E₀ zu kennen, das heißt

$$\hat{H} |0\rangle = \hbar\omega (aa^\dagger - \frac{1}{2}) |0\rangle = E_0 |0\rangle.$$

Wenden wir nun den Operator a† auf diese Gleichung an und benutzen den Kommutator von oben, so erhalten wir

$$a^\dagger \hat{H} |0\rangle = \hbar\omega (a^\dagger aa^\dagger - \frac{1}{2} a^\dagger) |0\rangle = \hbar\omega (aa^\dagger a^\dagger - a^\dagger - \frac{1}{2} a^\dagger) |0\rangle = (\hat{H} - \hbar\omega) a^\dagger |0\rangle = E_0 a^\dagger |0\rangle.$$

Wir definieren nun den Zustand |1⟩ = a† |0⟩, und bringen ein ħω auf die andere Seite. Damit erhalten wir

$$\hat{H} |1\rangle = (E_0 + \hbar\omega) |1\rangle,$$

was die Schrödingergleichung für den ersten angeregten Zustand ist. Dieser hat also die Energie E₀ + ħω. Da das gleiche Argument wieder auf den ersten Zustand angewandt werden kann, ist die Energie für den n-ten Zustand:

$$E_n = E_0 + n \cdot \hbar\omega$$

Wir haben also gesehen, dass a† der Operator ist, der einen Zustand in den nächst höheren übergehen lässt, also a† |n⟩ = |n + 1⟩. Der Operator a tut das gleiche in umgekehrter Richtung, er senkt die Energie ab. Daher heißen diese Operatoren **Erzeuger/Vernichter**, sie erzeugen/vernichten ein Energiequant.

Nun können wir noch die Energie E₀ des Grundzustands |0⟩ bestimmen. Da es per Definition keinen Zustand unterhalb des Grundzustands gibt, gilt a |0⟩ = 0. Nutzen wir wieder die Kommutatorbeziehung von oben aus, erhalten wir

$$\hat{H} |0\rangle = \hbar\omega (aa^\dagger - \frac{1}{2}) |0\rangle = \hbar\omega (a^\dagger a + \frac{1}{2}) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle.$$

0.7.2 Die Wellenfunktion in Ortsdarstellung

Die ursprüngliche Differentialgleichung lässt sich zwar nicht ohne weiteres lösen, mit dem oben hergeleiteten Formalismus lässt sich aber relativ leicht ein Konstruktionsschema für die Wellenfunktion in Ortsdarstellung angeben.

Dazu nutzen wir die Eigenschaft des Grundzustands aus, dass sich kein Energiequant vernichten lässt:

$$a|0\rangle = 0.$$

Der Einfachheit zuliebe betrachten wir nur eine Raumdimension, der Impulsoperator wird also im Ortsraum $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$. Setzen wir dies also in die Definition von a ein ergibt sich die Differentialgleichung

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right) \psi_0(x) = 0.$$

Diese Gleichung lässt sich durch Separation der Variablen lösen:

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx,$$

was nach Integration die Wellenfunktion des Grundzustand liefert:

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

Der Faktor A entsteht als Integrationskonstante und dient der Normierung der Wellenfunktion. Um ihn zu bestimmen wird das uneigentliche Integral $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ benötigt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \stackrel{!}{=} 1,$$

womit, bis auf eine komplexe Phase, A bestimmt ist als $A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$.

Vom Grundzustand aus kann man nun schrittweise die Wellenfunktionen der angeregten Zustände berechnen. Dazu muss nur der Operator a^\dagger n -mal auf ψ_0 angewandt werden, um den n -ten Zustand zu erreichen. Zum Beispiel entsteht so der erste angeregte Zustand:

$$\psi_1(x) = a^\dagger \psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right) \psi_0(x) = 2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

0.7.3 Eigenwerte des quantenmechanischen harmonischen Oszillators (Rechnung)

In diesem Artikel wird gezeigt, wie die Energie-Eigenwerte des [quantenmechanischen harmonischen Oszillators](#) in einer [Dimension](#) berechnet werden können. Die Rechnung versteht sich auch als ein repräsentatives Beispiel für die Lösung quantenmechanischer Probleme mit Hilfe der Methode der [zweiten Quantisierung](#), etwa die Bestimmung von Drehimpulswerten oder in der [Festkörperphysik](#).

Problemstellung und Vorgehensweise

Allgemeines

Wir bestimmen die **Energie-Eigenwerte** des eindimensionalen **quantenmechanischen harmonischen Oszillators**, also sämtliche Eigenwerte ε des Eigenwertproblems

$$H|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle,$$

wobei der **Hamiltonoperator** H gegeben ist durch $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$, P ist der **Impulsoperator**, X der **Ortsoperator**. Dabei werden wir wie folgt vorgehen:

Einführung von Auf- und Absteigern

Zunächst werden wir zueinander **adjungierte lineare Operatoren** a und a^+ einführen, mit denen sich der **Hamiltonoperator** H schreiben lässt als

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

Untersuchung des Operators $N := a^+a$

Anstelle der **Eigenzustände** von H untersuchen wir die Eigenzustände von $N := a^+a$. Es lässt sich leicht zeigen, dass wir alle Eigenzustände von H aus denen von N konstruieren können, ebenso können wir die Eigenwerte von H leicht aus denen von N gewinnen. Wir konzentrieren uns daher auf das **Eigenwertproblem**

$$N|\psi_n^j\rangle = n|\psi_n^j\rangle.$$

Wir haben dabei die Eigenzustände von N mit zwei Indizes "nummeriert": Der untere Index gibt den zu $|\psi_n^j\rangle$ gehörigen Eigenwert an und durchläuft die (noch unbekannte) Menge aller Eigenwerte. Auch wenn die Wahl des Buchstabens bereits die spätere Erkenntnis andeutet, dass es sich bei den Eigenwerten von N um **natürliche Zahlen** handelt, so ist an dieser Stelle noch keinerlei Einschränkung vorgenommen; die Menge der Eigenwerte und damit der Index n kann durchaus eine kontinuierliche Größe sein. Gleiches gilt für den oberen Index j , der dazu dient, Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert zu unterscheiden, ohne ein neues Symbol verwenden zu müssen. Da der Eigenzustand $|\psi_n^j\rangle$ durch die Angabe der beiden Indizes n und j bereits vollständig bestimmt ist, ist es in der Literatur vielfach üblich, das Symbol ψ komplett wegzulassen und den Zustand einfach nur durch

$$|\psi_n^j\rangle =: |n, j\rangle$$

zu kennzeichnen. Dieser Konvention werden wir uns aber nicht anschließen.

Bestimmung der Eigenwerte von N

Um die Eigenwerte von N zu bestimmen, werden wir die Zustände $a|\psi_n^j\rangle$ und $a^+|\psi_n^j\rangle$ genauer untersuchen: wir werden sehen, dass $a|\psi_n^j\rangle$ unter bestimmten Bedingungen ein Eigenzustand zum Eigenwert $n - 1$ und $a^+|\psi_n^j\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $n + 1$ ist, darüber hinaus werden wir zeigen, dass $n = 0$ ein Eigenwert von N ist, indem wir in der Ortsdarstellung eine konkrete Wellenfunktion des zu 0 gehörigen Eigenvektors $|\psi_0\rangle$ ermitteln; Da, wie wir sehen werden, alle Eigenwerte von N nicht-negativ sind, ist dann schon bewiesen, dass alle $n \in \mathbb{N}_0$ zum Eigenwertspektrum von N gehören:

1. 0 ist Eigenwert, wie wir durch explizite Angabe eines Eigenzustandes $|\psi_0\rangle$ zu diesem Eigenwert sehen werden.
2. $|\psi_1\rangle := a^+|\psi_0\rangle$ ist ein Eigenzustand zum Eigenwert $0 + 1 = 1$, also ist auch die Zahl 1 aus dem Eigenwertspektrum von N . Ebenso ist $a^+|\psi_1\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $1 + 1 = 2$, also ist auch 2 Eigenwert von N .

Sukzessive folgt so, dass alle natürlichen Zahlen zum Eigenwertspektrum von N gehören (formal vollziehen wir den Beweis mit Hilfe der [vollständigen Induktion](#)). Induktiv werden wir abschließend zeigen, dass N keine weiteren Eigenwerte besitzt. Damit ist das Eigenwertspektrum von N und somit auch das von H vollständig bestimmt. Es sei angemerkt, dass wir die Rechnung in demjenigen [Hilbertraum](#) \mathcal{H} durchführen, der der Bewegung eines [spinlosen](#) Teilchens in einer Dimension zugeordnet ist. Wir werden daher die Begriffe [Eigenzustand](#) und [Eigenvektor](#) synonym verwenden.

Die Rechnung im Detail

Schritt 1: Umschreiben des Hamiltonoperators

Zunächst führen wir die [Operatoren](#) a und a^+ ein. Aus Gründen, die später klar werden, nennen wir a^+ den *Aufsteigeoperator*, a den *Absteigeoperator* (übliche Bezeichnungen sind auch Erzeuger und Vernichter.). Sie sind definiert durch:

$$\begin{aligned} a &:= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \\ a^+ &:= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P. \end{aligned}$$

Sowohl a als auch a^+ sind lineare Operatoren, da P und X linear sind. Man beachte in allen nachfolgenden Rechnungen, dass der Einsoperator, definiert durch

$$\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

stets unterdrückt wird: so schreiben wir z.B. stets $[X, P] = i\hbar$ anstatt $[X, P] = i\hbar\mathbf{1}$. Diese Unterdrückung gestaltet Rechnungen übersichtlicher und ist an gängige Konventionen in üblicher Quantenmechaniklehrbücher angepasst. Die Operatornatur des Kommutators $[\cdot, \cdot]$ sollte dabei aber nicht aus den Augen verloren werden! Widmen wir uns aber nun der Bestimmung der Eigenwerte von H . Wie bereits in der Einleitung angedeutet, zeigen wir zunächst:

Satz 1: Der Hamiltonoperator ist gegeben durch $H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$.

Beweis: Den Beweis führen wir direkt durch Einsetzen, wobei wir ausnutzen, dass die Menge der linearen Operatoren auf H einen (nichtkommutativen) Ring bildet:

$$\begin{aligned} a^+ a &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - i \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \cdot \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + i \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + i \frac{1}{2\hbar} X P - i \frac{1}{2\hbar} P X + \frac{1}{2m\omega\hbar} P^2 \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{i}{2\hbar} [X, P] + \frac{1}{2m\hbar\omega} P^2 \end{aligned}$$

Bekanntlich ist $[X, P] = i\hbar$, so dass insgesamt folgt:

$$a^+ a = \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2m\hbar\omega} P^2$$

oder

$$\hbar\omega a^+ a = \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + \frac{1}{2m} P^2}_{=H} - \frac{1}{2} \hbar\omega$$

und somit ist alles gezeigt.

Wir führen nun das Eigenwertspektrum des Hamiltonoperators auf das Eigenwertspektrum des Operators $N := a^+ a$ zurück:

Satz 2: Jeder Eigenvektor von H ist auch Eigenvektor von N und umgekehrt. Weiterhin gilt: Alle Eigenwerte ε von H sind durch $\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ gegeben, wenn n die Eigenwerte von N durchläuft.

Beweis: Sei $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von N zum Eigenwert n . Dann gilt:

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right) |\psi\rangle \\ &= \hbar\omega N|\psi\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} |\psi\rangle \\ &= \hbar\omega n|\psi\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} |\psi\rangle \\ &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |\psi\rangle, \end{aligned}$$

$|\psi\rangle$ ist also ein Eigenvektor von H , wie behauptet. Aus der Rechnung folgt weiterhin direkt, dass jede Zahl der Form $\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$ mit einem Eigenwert n von N ein Eigenwert des Hamiltonoperators H ist. Sei nun umgekehrt $|\phi\rangle$ ein Eigenvektor

von H zum Eigenwert ε . Wegen $N = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$ folgt mit einer analogen Rechnung, dass $|\phi\rangle$ auch Eigenvektor von N ist. H und N besitzen also die gleichen Eigenzustände, da jeder Eigenzustand von N auch Eigenzustand von H ist und umgekehrt. Bleibt noch zu zeigen, dass jeder Eigenwert von H von der Form $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ mit einem Eigenwert n von N ist. Sei dazu ε ein Eigenwert von H . Dann existiert dazu eine Eigenfunktion $|\psi_\varepsilon\rangle$. Nun ist $|\psi_\varepsilon\rangle$ aber auch Eigenfunktion von N , wie weiter oben gezeigt. Damit gilt:

$$\varepsilon = H|\psi_\varepsilon\rangle = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})|\psi_\varepsilon\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|\psi_\varepsilon\rangle,$$

da $|\psi_\varepsilon\rangle \neq 0$ folgt $\varepsilon = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, wie behauptet.

Der letzte Satz garantiert uns, dass wir sämtliche Eigenvektoren sowie das gesamte Eigenwertspektrum von H aus den Eigenvektoren bzw. Eigenwerten von N rekonstruieren können. Wenn wir alle Eigenvektoren und -Werte von N kennen, ist das Problem der Bestimmung des Eigenwertspektrums des eindimensionalen harmonischen Oszillators im Prinzip gelöst. Daher werden wir nun das Eigenwertproblem

$$N|\psi_n^j\rangle = n|\psi_n^j\rangle$$

genauer untersuchen, wobei wir konsequent die bereits in der Einführung beschriebene Notation verwenden werden: der Zustand $|\psi_n^j\rangle$ steht in allen nachfolgenden Rechnungen stets für einen Eigenzustand von N zum Eigenwert n , auch wenn dies keine explizite Erwähnung findet! Per Definition eines Eigenzustandes ist damit auch $|\psi_n^j\rangle \neq 0$. Wir zeigen zunächst die folgende wichtige Tatsache:

Satz 3: a^+ ist adjungiert zu $a: a^+ = a^\dagger$

Beweis: Dies erkennt man sofort aus den Regeln zur Bildung des adjungierten Operators zu einem Operator, der [Linearkombination](#) anderer linearer Operatoren ist:

$$\begin{aligned} a^\dagger &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \right)^\dagger \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X^\dagger - i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P^\dagger \end{aligned}$$

Da X und P selbstadjungiert sind (d.h. $X^\dagger = X, P^\dagger = P$), ist die Behauptung gezeigt.

Schritt 2: Bestimmung der Eigenwerte von N

Aus Satz 3 folgt sofort:

Satz 4: Alle Eigenwerte von N sind reell und nicht negativ.

Beweis: n ist reell, da der Operator $N = a^+a$ selbstadjungiert ist:

$$N^\dagger = (a^+a)^\dagger = a^\dagger(a^+)^\dagger = a^\dagger(a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = a^+a = N$$

Nun berechnen wir die Norm des Zustandes $a|\psi_n^j\rangle$

$$\begin{aligned} \|a|\psi_n^j\rangle\|^2 &= \langle a|\psi_n^j\rangle, a|\psi_n^j\rangle \rangle \\ &= \langle |\psi_n^j\rangle, a^+a|\psi_n^j\rangle \rangle \\ &= \langle \psi_n^j | a^+a | \psi_n^j \rangle \\ &= \langle \psi_n^j | N | \psi_n^j \rangle \\ &= n \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle \end{aligned}$$

Man beachte, dass wir im zweiten Schritt benutzt haben, dass $a^+ = a^\dagger$, im vorletzten Schritt haben wir $N|\psi_n^j\rangle = n|\psi_n^j\rangle$ verwendet. Wegen $\langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle \geq 0$ und $\|a|\psi_n^j\rangle\|^2 \geq 0$ folgt sofort $n \geq 0$.

Wir untersuchen nun den Zustand $a|\psi_n^j\rangle$ etwas genauer. Da wir in den nachfolgenden Rechnungen häufiger die Kommutatoren $[a, N]$, $[a^+, N]$ und $[a, a^+]$ benötigen werden, wollen wir diese Ausdrücke an dieser Stelle berechnen. Zunächst rechnet man mit Hilfe der Definition von a und a^+ unter Benutzung der Linearität des Kommutators und dem bekannten Postulat $[X, P] = i\hbar$ sofort nach, dass gilt:

$$[a, a^+] = 1.$$

Damit lässt sich der Kommutator von a und N direkt ermitteln:

$$\begin{aligned} [a, N] &= [a, a^+a] = aa^+a - a^+aa \\ &= (aa^+ - a^+a)a \\ &= [a, a^+]a \end{aligned}$$

Es folgt $[a, N] = a$. Ganz analog lässt sich beweisen, dass

$$[a^+, N] = -a^+$$

gilt. Wir haben nun alle nötigen Vorbereitungen für die nächsten beiden Sätze und für einen großen Schritt in Richtung der Lösung unseres Problems getroffen.

Satz 5: Existiert zu $n = 0$ ein Eigenzustand $|\phi_0\rangle$, so ist $a|\phi_0\rangle = 0$. Ist $n \neq 0$, so ist der Zustand $a|\psi_n^j\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $n - 1$.

Beweis: Die erste Behauptung folgt direkt aus dem Beweis zum vorangegangenen Satz. Ist nämlich $n = 0$, so gilt: $\|a |\psi_n^j\rangle\|^2 = n \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle = 0$, der Nullvektor ist aber der einzige Vektor mit einer Norm von 0, also ist $a |\psi_n^j\rangle = 0$. Sei nun $n \neq 0$. Um zu zeigen, dass $a |\psi_n^j\rangle$ Eigenzustand zum Eigenwert $n - 1$ ist, müssen wir beweisen:

- $a |\psi_n^j\rangle$ genügt der Eigenwertgleichung $N(a |\psi_n^j\rangle) = (n - 1)(a |\psi_n^j\rangle)$
- Es ist $a |\psi_n^j\rangle \neq 0$.

Zum Beweis der ersten Behauptung untersuchen wir den Ausdruck $N(a |\psi_n^j\rangle)$. Da $|\psi_n^j\rangle$ Eigenzustand von N ist, wäre es günstig, a mit N vertauschen zu können. Dies ist zwar nicht möglich, aber wir können die zuvor berechneten Kommutatoren ausnutzen, denn es gilt:

$$[a, N] = aN - Na \implies Na = aN - [a, N].$$

Der Kommutator $[a, N]$ ist aber bekannt: wie wir zuvor gezeigt haben, ist $[a, N] = a$, und es folgt:

$$\begin{aligned} N(a |\psi_n^j\rangle) &= (Na) |\psi_n^j\rangle = (aN - [a, N]) |\psi_n^j\rangle \\ &= (aN - a) |\psi_n^j\rangle \\ &= (aN) |\psi_n^j\rangle - a |\psi_n^j\rangle \\ &= aN |\psi_n^j\rangle - a |\psi_n^j\rangle \\ &= n \cdot a |\psi_n^j\rangle - a |\psi_n^j\rangle \\ &= (n - 1)(a |\psi_n^j\rangle), \end{aligned}$$

wie behauptet. $\|a |\psi_n^j\rangle\| \neq 0$ folgt aus dem Beweis von Satz 4. Dort wurde gezeigt, dass die Norm von $a |\psi_n^j\rangle$ durch

$$\|a |\psi_n^j\rangle\| = n \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle$$

gegeben ist. Da $|\psi_n^j\rangle$ als Eigenvektor per Definition nicht der Nullvektor ist und damit auch eine von 0 verschiedene Norm aufweist, ist auch $n \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle$ und damit $\|a |\psi_n^j\rangle\|$ von 0 verschieden, es gilt also $|\psi_n^j\rangle \neq 0$.

Der letzte Satz gibt Aufschluss darüber, warum der Operator a auch Absteigeoperator genannt wird: a erzeugt aus einem Eigenvektor zum Eigenwert n einen

Eigenvektor zu dem um 1 verminderten Eigenwert $n - 1$. Eine ganz analoge Eigenschaft besitzt auch der Aufsteigeoperator a^+ : Dieser erzeugt aus einem Eigenvektor zum Eigenwert n einen Eigenvektor zu dem um 1 erhöhten Eigenwert $n + 1$, wie der nachfolgende Satz und sein Beweis zeigen! Man beachte, dass wir allerdings im Falle des Aufsteigeoperators die Einschränkung $n \neq 0$ fallen lassen können.

Satz 6: Der Zustand $a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $n + 1$.

Beweis: Der Beweis verläuft vollkommen analog zum Beweis von Satz 5. Wir bestimmen zunächst die Norm von $a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle$. Wenn wir berücksichtigen, dass gilt:

$$[a, a^+] = 1 \implies aa^+ - a^+a = 1 \implies aa^+ = 1 + a^+a,$$

so finden wir:

$$\begin{aligned} \|a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle\|^2 &= \langle \psi_n^j | aa^+ | \psi_n^j \rangle \\ &= \langle \psi_n^j | 1 + a^+a | \psi_n^j \rangle \\ &= \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle + \langle \psi_n^j | N | \psi_n^j \rangle \\ &= \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle + n \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle \\ &= (n + 1) \langle \psi_n^j | \psi_n^j \rangle. \end{aligned}$$

Da $n \geq 0$ gilt, ist $n + 1 > 0$ für alle Eigenwerte n von N . Da $\left| \psi_n^j \right\rangle$ ein Eigenvektor ist, ist seine Norm stets von 0 verschieden, daher ist auch $\|a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle\| \neq 0$, folglich ist $a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle$ nicht der Nullvektor. Nun zeigen wir, dass $a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle$ die Eigenwertgleichung

$$N(a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle) = (n + 1)(a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle)$$

erfüllt:

$$\begin{aligned} N(a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle) &= (Na^+) \left| \psi_n^j \right\rangle = (a^+ + a^+N) \left| \psi_n^j \right\rangle \\ &= a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle + a^+(N \left| \psi_n^j \right\rangle) = a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle + na^+ \left| \psi_n^j \right\rangle \\ &= (n + 1)(a^+ \left| \psi_n^j \right\rangle). \end{aligned}$$

Bei der Rechnung haben wir verwendet, dass

$$[a^+, N] = -a^+ \implies a^+N - Na^+ = -a^+ \implies Na^+ = a^+N + a^+.$$

Damit ist alles gezeigt.

Die immense Bedeutung des letzten Satzes ergibt sich anhand folgender Überlegung: können wir zeigen, dass die Zahl 0 ein Eigenwert des Operators N darstellt, so können wir mit Hilfe des letzten Satzes beweisen, dass alle natürlichen Zahlen im Eigenwertspektrum von N enthalten sind. Ist nämlich 0 ein Eigenwert, dann auch 1, schließlich ist $|\psi_1\rangle := a^+|\psi_0\rangle$ nach Satz 6 ein Eigenzustand zum Eigenwert 1. Mit der gleichen Argumentation ist dann auch $|\psi_2\rangle := a^+|\psi_1\rangle$ ein Eigenzustand zum Eigenwert 2 usw., oder allgemeiner: ist irgendeine beliebige natürliche Zahl n Eigenwert von N , so ist auch $n + 1$ Eigenwert von N , wir müssen ja lediglich a^+ auf $|\psi_n^i\rangle$ anwenden, um einen Eigenzustand zu $n + 1$ zu erhalten. Der letzte Satz liefert uns also letztlich den *Induktionsschluss* für einen Induktionsbeweis, den wir im folgenden führen werden.

Theorem 1: Sei $n \in \mathbb{N}_0$ beliebig. Dann gehört n zum Eigenwertspektrum von N .

Beweis: Wie angekündigt, führen wir den Beweis mittels der vollständigen Induktion. *Induktionsanfang:* $n = 0$. Wir müssen beweisen, dass 0 im Eigenwertspektrum von N enthalten ist. Dazu betrachten wir das gesamte Problem im Ortsraum. Mit Hilfe von Satz 5 finden wir leicht eine *notwendige Bedingung* an einen möglichen Eigenzustand $|\psi_0\rangle$ zum Eigenwert 0: Er muss der Bedingung

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

genügen. Der Operator a ist aber in der Ortsdarstellung durch

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P$$

gegeben, wobei $X = x$ der Ortsoperator und $P = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ der Impulsoperator ist. Die Bedingung $a|\psi\rangle = 0$ wird dann nach wenigen leichten Umformungen zu der linearen Differenzialgleichung

$$m\omega x\psi + \hbar\frac{d\psi}{dx} = 0$$

oder

$$\frac{d\psi}{dx} = -\frac{m\omega x\psi}{\hbar}.$$

Wie aus der Mathematik bekannt (durch "Trennung der Variablen"), besitzt diese einzig die Lösungsschar

$$\psi_0(x) = Ae^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

Der Einfachheit halber können wir sogar $A = 1$ wählen (auch wenn ψ dann i.A. nicht normiert ist), dann ist ψ_0 mit Sicherheit nicht die Nullfunktion, und wir

müssen nun nur noch zeigen, dass diese Funktion tatsächlich Eigenfunktion zum Eigenwert 0 des Operators N ist. Wegen

$$N = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

und

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

in der Ortsdarstellung lässt sich dies sofort durch Einsetzen von ψ_0 in die Gleichung

$$N\psi_0 = 0\psi_0 = 0,$$

verifizieren. Damit ist der Induktionsanfang getan. *Induktionsschluss:* $n \rightarrow n + 1$.

Sei nun $n \in \mathbb{N}_0$ ein Eigenwert des Operators N , $|\psi_n^j\rangle$ ein zugehöriger Eigenzustand. Nach Satz 6 ist $a^+ |\psi_n^j\rangle$ Eigenzustand zu $n + 1$, also ist mit n auch $n + 1$ ein Eigenwert von N und es ist alles gezeigt.

Schritt 3: Ausschluss weiterer Eigenwerte

Wir wissen nun, dass alle natürlichen Zahlen zum Eigenwertspektrum von N gehören. Nun müssen wir uns die Frage stellen, ob es noch weitere Eigenwerte geben kann. Wegen Satz 4 kommen nur noch positive reelle Zahlen in Frage, zu untersuchen wären als mögliche weitere Eigenwerte also noch positive, nicht-natürliche Zahlen. Der nächste Satz zeigt, dass keiner dieser Zahlen zum Eigenwertspektrum von N gehört.

Theorem 2: N besitzt keine nicht-natürlichen Eigenwerte.

Beweis: Sei $\nu > 0$ irgendeine reelle Zahl. Ist ν nicht-natürlich, so gibt es eine natürliche Zahl n mit

$$n < \nu < n + 1,$$

sowohl n also auch $n + 1$ gehören aber nach Theorem 1 zum Eigenwertspektrum von N . Wir zeigen nun induktiv, dass zwischen einer natürlichen Zahl n und ihrem Nachfolger $n + 1$ kein Eigenwert liegen kann. *Induktionsanfang:* $n = 0$. Angenommen, es gäbe einen Eigenwert ν von N mit $0 < \nu < 1$. Dann gäbe es zu ν einen Eigenzustand $|\psi_\nu^j\rangle$ und $a|\psi_\nu^j\rangle$ wäre wegen $\nu \neq 0$ nach Satz 6 Eigenzustand zum Eigenwert $\nu - 1$. Wegen $\nu < 1$ ist aber $\nu - 1 < 0$, Widerspruch zu Satz 4. *Induktionsschritt:* $n \rightarrow n + 1$. Sei der Satz für ein $n \in \mathbb{N}$ bereits bewiesen. Nach Induktionsvoraussetzung gibt es dann keinen Eigenwert ν von N mit $\nu \in]n, n + 1[$. Angenommen, es gäbe einen Eigenwert ν von N mit $n + 1 < \nu < n + 2$. Dann gäbe

es zu v einen Eigenzustand $|\psi_v^j\rangle$, wegen $v \neq 0$ wäre nach Satz 5 $a|\psi_v^j\rangle$ aber ein Eigenzustand zum Eigenwert $v - 1 \in]n, n + 1[$, was aber einen Widerspruch zur Induktionsvoraussetzung darstellt.

Ergebnis

Zusammen mit Satz 2 folgt aus den letzten beiden Theoremen abschließend:

Eigenwertspektrum des harmonischen Oszillators. Der Hamilton-Operator H des eindimensionalen harmonischen Oszillators, $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$ besitzt das Eigenwertspektrum $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N}$.

Literatur

- [Claude Cohen-Tannoudji](#) u.a.: Quantenmechanik. Band 1.

0.8 Drehimpuls

$$\begin{aligned}\hat{L} &:= \hat{x} \times \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla \\ \hat{L}_1 &= \frac{\hbar}{i} x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \hat{L}_2 &= \frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\hbar}{i} x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \\ \hat{L}_3 &= \frac{\hbar}{i} x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\hbar}{i} x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}\end{aligned}$$

0.8.1 Kommutator und Antikommutator

Der Kommutator zweier Operatoren ist definiert durch: $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = -[\hat{B}, \hat{A}]$ Entsprechend definiert man den Antikommutator $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} = \{\hat{B}, \hat{A}\}$

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 \hat{L}_2 &= \left(\frac{\hbar}{i} x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \left(\frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\hbar}{i} x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(x_2 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_3} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 x_2 \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - x_3^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + x_1 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_3} \right) \\ \hat{L}_2 \hat{L}_1 &= \left(\frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\hbar}{i} x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \left(\frac{\hbar}{i} x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{\hbar}{i} x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(x_2 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_3} - x_3^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} - x_1 x_2 \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + x_1 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_3} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)\end{aligned}$$

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1 = -\hbar^2 \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = -i\hbar \left(\frac{\hbar}{i} x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\hbar}{i} x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = i\hbar \hat{L}_3$$

Analog erhält man $[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1$ und $[\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2$

mit den Regeln

$$[A, B] = -[B, A] \text{ und } [A, A] = 0$$

kennt man somit alle Kommutatoren der Drehimpulsoperatoren.

0.8.2 Gesamtdrehimpuls

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$$

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2^2 = \hat{L}_2 \hat{L}_1 \hat{L}_2 + [\hat{L}_1, \hat{L}_2] \hat{L}_2 = \hat{L}_2^2 \hat{L}_1 + \hat{L}_2 [\hat{L}_1, \hat{L}_2] + [\hat{L}_1, \hat{L}_2] \hat{L}_2 = \hat{L}_2^2 \hat{L}_1 + i\hbar (\hat{L}_1 \hat{L}_3 + \hat{L}_3 \hat{L}_1)$$

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2^2] = i\hbar (\hat{L}_2 \hat{L}_3 + \hat{L}_3 \hat{L}_2) = i\hbar \{ \hat{L}_2, \hat{L}_3 \}$$

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_2^2] = \hat{L}_2 [\hat{L}_3, \hat{L}_2] + [\hat{L}_3, \hat{L}_2] \hat{L}_2 = -i\hbar \{ \hat{L}_2, \hat{L}_1 \}$$

Entsprechend errechnet man:

$$[\hat{L}_2, \hat{L}_3^2] = i\hbar \{ \hat{L}_3, \hat{L}_1 \}$$

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_3^2] = -i\hbar \{ \hat{L}_3, \hat{L}_2 \}$$

Somit gelangt man schliesslich zu:

$$[\hat{L}_1, \hat{L}^2] = [\hat{L}_1, \hat{L}_1^2] + [\hat{L}_1, \hat{L}_2^2] + [\hat{L}_1, \hat{L}_3^2] = i\hbar \{ \hat{L}_2, \hat{L}_3 \} - i\hbar \{ \hat{L}_3, \hat{L}_2 \} = 0$$

Analog gilt:

$$[\hat{L}_2, \hat{L}^2] = 0$$

und

$$[\hat{L}_3, \hat{L}^2] = 0$$

Der Gesamtdrehimpuls vertauscht also mit jeder Komponente des Drehimpulses.

0.8.3 Aufsteiger und Absteiger

$$\text{Aufsteiger } \hat{L}_+ := \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$$

$$\text{Absteiger } \hat{L}_- := \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$$

$$[\hat{L}^2, L_{\pm}] = [\hat{L}^2, L_1] \pm i [\hat{L}^2, L_2] = 0 \pm i \cdot 0 = 0$$

$$[\hat{L}_3, L_{\pm}] = [\hat{L}_3, L_1] \pm i [\hat{L}_3, L_2] = i\hbar\hat{L}_2 \pm \hbar\hat{L}_1 = \pm\hbar(\hat{L}_1 \pm iL_2) = \pm\hbar L_{\pm}$$

0.8.4 Der Spin

0.9 Das Wasserstoffatom

0.9.1 Radiale Bewegungsgleichung

Bevor das konkrete Problem des Wasserstoffatoms gelöst werden kann, müssen zunächst ein paar allgemeine Betrachtungen zu kugelsymmetrischen Potentialen durchgeführt werden. Analog zur klassischen Mechanik wird sich eine Drehimpulserhaltung feststellen und das Problem auf die eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem effektiven Potential zurückführen lassen.

Klassisch lässt sich das Impulsquadrat in einen Dreh- und Radialimpulsanteil zerlegen

$$\vec{p}^2 = \left(\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{r}\right)^2 + \left(\frac{\vec{r} \times \vec{p}}{r}\right)^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}$$

Bei der Übertragung dieser Zerlegung auf die Quantenmechanik ist eine Symmetrisierung zu beachten

$$\vec{p}^2 = \left(\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r}\right) \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p}\right) + \frac{1}{r^2} L^2$$

Nach weiteren Umformungen erhält man für den Radialimpulsoperator

$$p_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right]_+$$

was in der Ortsdarstellung folgende Gestalt annimmt

$$p_r = -\frac{i\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

$$p_r^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)$$

Der Hamiltonoperator eines kugelsymmetrischen Potentials lässt sich hiermit nun folgendermaßen formulieren

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r).$$

Bereits mit dem Wissen, dass die Ortseigenfunktionen des L^2 -Operators die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sind

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

bietet sich folgender Separationsansatz für die Ortswellenfunktion an

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Setzt man dies nun in die stationäre Schrödingergleichung $H\Psi = E\Psi$

ein folgt für den Radialanteil

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r}.$$

Setzt man nun noch die Ortsdarstellung des Radialimpulsoperators ein ergibt

sich die Radialgleichung

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

welche formal identisch ist mit der Schrödingergleichung eines Teilchens im effektiven Potential

$$V_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$$

welches analog wie in der klassischen Mechanik einen Drehimpulsabhängigen repulsiven Zentrifugalterm enthält.

0.9.2 Dimensionslose radiale Bewegungsgleichung

Nach diesen allgemeinen Vorüberlegungen kann nun das konkrete Wasserstoffproblem angegangen werden. Im cgs-System ist das Coulomb-Potential des Wasserstoffkerns

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

Sinnvollerweise geht man bei der Lösung zu einem dem Problem angepassten Einheitensystem über und macht die Differentialgleichung dimensionslos über

$$\rho = \frac{r}{a_0} \quad \epsilon = \frac{E}{E_{\text{ion}}}$$

mit dem Bohrschen Radius

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

und der Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms

$$E_{\text{ion}} = \frac{e^2}{2a_0}.$$

Nach Einsetzen ergibt sich damit die folgende Radialgleichung

$$u''(\rho) + \left[\epsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0.$$

0.10 Spin-Bahn-Kopplung und Clebsch Gordan Koeffizienten

0.11 Versteckte Variablen ? Bell'sche Ungleichungen

0.12 Relativistische Quantenmechanik

0.12.1 Vierervektoren

Einführung in Vierervektoren ...

0.12.2 Operatoren

In der Relativistischen Quantenmechanik gebräuchliche Operatoren sind:

Der Viererimpuls: $p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) = i\hbar \partial^\mu$

0.12.3 Die Klein-Gordon-Gleichung

Die Klein Gordon Gleichung ist ein Versuch eine zur [Schrödinger-Gleichung](#) äquivalente Formulierung für die Relativistische Quantenmechanik zu finden.

Zunächst noch einmal die Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)^2 \Psi(x)$$

Es gilt:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

sowie

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Im relativistischen Fall verwendet man Vierervektoren:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) = i\hbar \partial^\mu$$

Desweiteren gilt:

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

Daraus folgt:

$$\frac{E^2}{c^2} = \left(i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 = m^2 c^2 + \vec{p}^2 = m^2 c^2 + (-i\hbar \nabla)^2$$

Angewand auf die Wellenfunktion ergibt sich:

$$-\hbar^2 \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x) = m^2 c^2 \psi(x) - \hbar^2 \nabla^2 \psi(x)$$

$$0 = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi$$

Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung ausgedrückt mit dem **D'Alembert-Operator** lautet sie wie folgt:

$$0 = \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi$$

mit der Compton Wellenlänge: $\frac{\hbar}{mc}$ ergibt sich:

$$0 = \left(\square + \left(\frac{1}{\lambda} \right)^2 \right) \psi$$

0.12.4 Die Dirac-Gleichung

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik wird die Theorie des Elektrons mit 2 Komponenten behandelt, in der Relativistischen Quantenmechanik benötigen wir einen N-Komponenten-Spinor:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \vdots \\ \psi_N(x) \end{pmatrix}$$

Wir suchen nun eine, analog zur Schrödingergleichung und im Gegensatz zur Klein-Gordon-Gleichung, Wellengleichung erster Ordnung, der Form: $i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_D \psi$ muss hierbei ein hermitescher Operator sein, ausserdem besteht in der Relativistik eine bestimmte Symmetrie zwischen Zeit und Raum, deshalb muss der Hamilton-Operator eine Ableitung nach \vec{x} besitzen, da auf der linken Seite eine Ableitung nach t steht. Damit hat man den Ansatz:

$$H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta m$$

mit

$$\vec{p} = i\nabla$$

Hierbei sind $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ und β hermitesche Operatoren im "Spinorraum". Damit ergibt sich:

$$\left(\mathbf{1} i \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta m \right) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

(1)

Wenn:

$$\alpha^0 = \beta, \{\alpha^\mu, \alpha^\nu\} = 0$$

für

$$\mu \neq 0$$

und

$$\alpha^0 \alpha^0 = \alpha^1 \alpha^1 = \alpha^2 \alpha^2 = \alpha^3 \alpha^3 = 1$$

ergibt sich:

$$\mathbf{1} \left(\left(i \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - |\vec{p}|^2 - m^2 \right) \psi = 0$$

Gleichung (1) wird nun von links mit $i \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m$ multipliziert:

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k < l} \{\alpha^k, \alpha^l\} p^k p^l - \sum_k \{\alpha^k, \beta\} m p^k \right] \psi = 0$$

Mit:

$$\{\alpha^k, \alpha^l\} = 0, \{\alpha^k, \beta\} = 0, (\alpha^k)^2 = 1, \beta^2 = 1$$

ergibt sich die Dirac-Gleichung:

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - \sum_k (p^k)^2 - m^2 \right] \psi = 0$$

Es wird vorausgesetzt, dass es $\vec{\alpha}$ und β gibt, die diese Eigenschaften erfüllen, dies ist der Fall für eine Dimension des "Spinorraums" $N \geq 4$. Üblicherweise ist $N = 4$.

In elektromagnetischen Feldern gilt die Transformation $i \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} - e\phi$ und $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$

Für die kovariante Schreibweise verwenden wir die Gamma-Matrizen:

$$\gamma^\mu := (\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3), \gamma^0 := \beta, \gamma^n := \beta \alpha^n$$

und

$$D_\mu := \partial_\mu + ieA_\mu$$

Damit:

$$(i\gamma^\mu D_\mu - 1m) \psi = 0$$

Und mit $\mathcal{D} := \gamma^\mu D_\mu$ dann die Feynman-Schreibweise:

$$(i\mathcal{D} - 1m) \psi = 0$$

0.13 Wichtige Operatoren und Kommutatoren

Hier sind alle gebräuchlichen Operatoren aufgelistet.

[Zeitentwicklungsoperator](#)

Der **universelle Schlussoperator**:

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{i} 0$$

Der universelle Schlussoperator geht auf verzweifelte Studenten zurück. Er projiziert jede Wellenfunktion auf ein einfach zu handhabendes Objekt. Ist also gewissermaßen ein uneigentlicher Operator, da die Normierung verloren geht.

Der **Impulsoperator**:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Der Impulsoperator in der relativistischen Quantenmechanik: $p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) = i\hbar \partial^\mu$

Der **Hamilton-Operator**:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}^2 + V(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(x)$$

mit $\vec{\nabla}^2 = \Delta$ (Laplace-Operator)

Der **Energie-Operator**:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

In der Relativistischen Quantenmechanik gebräuchliche Operatoren sind:

Der Viererimpuls: $p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) = i\hbar \partial^\mu$

[Kategorie: Buch](#) [Kategorie: Physik](#) [Kategorie: Theoretische Physik](#)

[fr: Physique_Quantique](#)

Kapitel 1

Autoren

Edits	User
1	Baumfreund-FFM
1	Berni
1	Blauer elephant
1	Bodo Thiesen
2	C.lingg
1	Daniel B
11	Dirk Huenniger
1	Floppa
47	Heinzo
2	Heuler06
12	Jupp
2	Klaus Eifert
2	Macumba
2	Nowotoj
2	Schoenix
11	Shelmton
2	Shogun
8	Siegfried Petry
1	Sundance Raphael
3	Tinara
33	Wkoopman
1	Xeltok

Kapitel 2

Bildnachweis

In der nachfolgenden Tabelle sind alle Bilder mit ihren Autoren und Lizenzen aufgelistet.

Für die Namen der Lizenzen wurden folgende Abkürzungen verwendet:

- GFDL: Gnu Free Documentation License. Der Text dieser Lizenz ist in einem Kapitel dieses Buches vollständig angegeben.
- cc-by-sa-3.0: Creative Commons Attribution ShareAlike 3.0 License. Der Text dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/> nachgelesen werden.
- cc-by-sa-2.5: Creative Commons Attribution ShareAlike 2.5 License. Der Text dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/2.5/> nachgelesen werden.
- cc-by-sa-2.0: Creative Commons Attribution ShareAlike 2.0 License. Der Text der englischen Version dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/2.0/> nachgelesen werden. Mit dieser Abkürzung sind jedoch auch die Versionen dieser Lizenz für andere Sprachen bezeichnet. Den an diesen Details interessierten Leser verweisen wir auf die Onlineversion dieses Buches.
- cc-by-sa-1.0: Creative Commons Attribution ShareAlike 1.0 License. Der Text dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/1.0/> nachgelesen werden.
- cc-by-2.0: Creative Commons Attribution 2.0 License. Der Text der englischen Version dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by/2.0/> nachgelesen werden. Mit

dieser Abkürzung sind jedoch auch die Versionen dieser Lizenz für andere Sprachen bezeichnet. Den an diesen Details interessierten Leser verweisen wir auf die Onlineversion dieses Buches.

- cc-by-2.5: Creative Commons Attribution 2.5 License. Der Text dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://creativecommons.org/licenses/by/2.5/deed.en> nachgelesen werden.
- GPL: GNU General Public License Version 2. Der Text dieser Lizenz kann auf der Webseite <http://www.gnu.org/licenses/gpl-2.0.txt> nachgelesen werden.
- PD: This image is in the public domain. Dieses Bild ist gemeinfrei.
- ATTR: The copyright holder of this file allows anyone to use it for any purpose, provided that the copyright holder is properly attributed. Redistribution, derivative work, commercial use, and all other use is permitted.

Bild	Autor	Lizenz
1		GFDL
2		GFDL
3		GFDL