Theoretische Physik D
QUANTENMECHANIK II[1]

nach einer Vorlesung von Prof. W. „Turbo“ Hollik
im Sommersemester 95 an der Uni Karlsruhe

Gerrit Jahn

August ′95

[1]Es besteht keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit oder Richtigkeit der verwendeten Formeln und Herleitungen in diesem Skript. Benutzung auf eigene Gefahr!

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 0

Einleitung

Dieses Skript (noch ist es keines, da noch viele Vorlesungen fehlen) gibt die Vorlesung Theoretische Physik D (Quantenmechanik II), die Prof. Hollik im SS 1995 an der Uni Karlsruhe gehalten hat, wieder (oder versucht dies zumindest).

Das Skript wurde nicht von Prof. Hollik „authorisiert“, so daß dieser nicht für evtl. Fehler verantwortlich ist.

Ich werde im Gegensatz zu meinen bisherigen Skripte vermutlich nicht alle Herleitungen komplett übernehmen bzw. einarbeiten, da dies aufgrund der Masse des Stoffes und dessen Komplexität kaum zu machen ist. Von daher werden wohl einige Abschnitte gekürzt werden müssen, die ich aber evtl. später nachtragen werde. Ich werde mich aber trotzdem bemühen, die Vorlesung weitestgehend zu „erhalten“ ...

Z.B. sollte dieses einleitende Kapitel eine kleine Wiederholung aus Theorie C enthalten, die ich aber erst einmal weglassen werde. (Sollte ja eh alles bekannt sein (ähem!))

Merke: Wenn Dein Professor sagt, der Stoff der nächsten ein bis zwei Vorlesungen sei „im Grunde genommen eine Trivialiät“, wird's lustig. ☺

Ab sofort kann dieses Skript von meiner WWW-Page in Karlsruhe bezogen werden:

„http://www.uni-karlsruhe.de/~ub1g/index.html“

Falls Probleme, Anmerkungen oder Berichtigungen bzgl. des Skript bestehen sollten, bin ich via eMail erreichbar unter

„ub1g@rz.uni-karlsruhe.de“

Karlsruhe, August 1995,

Gerrit Jahn

0.1 Hilfsmittel

- Vollständigkeitsrelation im Hilbertraum. Die Vektoren $\big|\Psi\big\rangle$, die von der Größe χ „durchnumeriert“ werden, bilden eine Basis des Hilbertraums (sind *vollständig*), wenn sie die folgende Relation erfüllen

$$\sum\!\!\!\!\!\!\!\int \mathrm{d}\chi \big|\Psi\big\rangle\big\langle\Psi\big| = 1. \tag{0.1}$$

- Einfügen eines vollständigen Zustandes „$\big|\vec{x}\big\rangle\big\langle\vec{x}\big|$“, sofern die $\big|\vec{x}\big\rangle$ die Vollständigkeitsrelation (0.1) erfüllen …

$$\big\langle\Psi\big|\Phi\big\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int \mathrm{d}^3x' \big\langle\Psi\big|\vec{x}'\big\rangle\big\langle\vec{x}'\big|\Phi\big\rangle. \tag{0.2}$$

Kapitel 1

Quantenmechanische Streutheorie

1.1 Grundbegriffe

1.1.1 Theoretische Konzepte

Es wird davon ausgegangen, daß z.B. ein Teilchen (mit „Wellenvektor" $\vec{k}$) an einem Target (bzw. Potential) um den Winkel ϑ gestreut wird und danach mit $\vec{k}'$ „weiterfliegt". (s. Abb. 1.1)

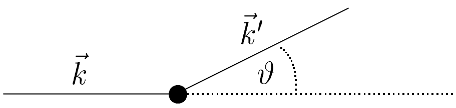

Abbildung 1.1: Die einfallende (ebene) Welle $\vec{k}$ wird am Target (Potential) um den Winkel ϑ gestreut.

Man hat nun prinzipiell zwei Fälle von Streuung zu unterscheiden:

- Elastische Streuung, d.h.: $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$. Das gestreute Teilchen behält also seine Energie gemäß (1.1) bei.

- Inelastische Streuung: $|\vec{k}| \neq |\vec{k}'|$. Der „Sreupartner" nimmt z.B. irgendwie Energie auf.

Im folgenden wird die elastische, nicht-relativistische Streuung betrachtet, d.h., der Energie-Impuls-Zusammenhang ist gegeben durch

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = E_k. \tag{1.1}$$

Die zeitabhängige Beschreibung des einlaufenden Wellenpakets ergibt sich aus der allgemeinen Lösung der Schrödingergleichung zu

$$\Psi_0(\vec{x},t) = \int \mathrm{d}^3k\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \cdot e^{-i\cdot\frac{E}{\hbar}\cdot t} A_{\vec{k}_0}(\vec{k}) \qquad \text{f. } t \to -\infty, \tag{1.2}$$

wobei $A_{\vec{k}_0}$ einen Peak bei $\vec{k} = \vec{k}_0$ hat. Die gestreute Welle besteht nun aus einem Anteil, der „gerade durch" geht, also wieder eine Welle der Form (1.2) und einem „Streuanteil", den man (für große Zeiten) nach Kugelwellen zerlegen kann ...

$$\Psi_s(\vec{x},t) = \int \mathrm{d}^3k\, \frac{e^{ikr}}{r} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}\cdot t} \cdot A_{\vec{k}_0}(\vec{k}) \cdot F(\vec{k},\hat{x}) \qquad \text{f. } t \to +\infty, \tag{1.3}$$

wobei $r = |\vec{x}|$ und $\hat{x} = \vec{x}/r$. Dabei steckt man noch die zusätzliche Annahme hinein, daß das Wellenpaket scharf bleibt, also keine quantenmechanische Dispersion auftritt. Der Faktor $F(\vec{k},\hat{x})$ beschreibt die Wechselwirkung (Einfluß des Potentials, Winkelabhängigkeiten, ...). Gl. (1.3) kann man (auf wohl recht komplizierte Art und Weise) umformen und erhält

$$(1.3): \qquad \Psi_s(\vec{x},t) \approx \frac{1}{r} \cdot \underbrace{F(\vec{k}_0,\hat{x})}_{\equiv f_E(\vartheta,\varphi)} \cdot \underbrace{\int \mathrm{d}^3k\, e^{ikr} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} A_{\vec{k}_0}(\vec{k})}_{\text{festgelegt durch } \Psi_0(\vec{x},t)}. \tag{1.4}$$

$f_E(\vartheta,\varphi)$ bezeichnet man als *Streuamplitude.*

Das Ziel der Streutheorie besteht nun darin, die Streuamplitude für ein gegebenes WW-Potential zu berechnen und daraus dann weitere Größen, wie z.B. Wirkungsquerschnitte, zu berechnen.

In der üblichen Vorgehenweise idealisiert man das einfallende „Teilchen" als ebene Welle mit scharfem Wellenvektor $\vec{k}(\vec{p})$. Somit erhält man einen stationären Energiezustand (d.h., das Integral in (1.2) entfällt) und kann die Zeitabhängigkeit abseparieren:

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \qquad & \Psi_0(\vec{x},t) = \Psi_k(\vec{x}) \cdot e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}, \qquad E_k = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \\ & \Psi_k(\vec{x}) = N \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Die Normierungskonstante erhält man aus

$$\int \mathrm{d}^3x\, \Psi_k(\vec{x})\Psi_{k'}(\vec{x}) = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}') \quad \rightsquigarrow N = (2\pi)^{-3/2}.$$

Aufgrund der Separierbarkeit der Zeitabhängigkeit braucht man nur noch die stationäre Schrödingergleichung zu lösen, die bei nichtverschwindendem Potential folgende Gestalt annimmt:

$$H\Psi(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right]\Psi(\vec{x}) = E_k\Psi(\vec{x}). \tag{1.6}$$

Sationär bedeutet auch, daß das Potential mit wachsendem $|\vec{x}|$ hinreichend schnell verschwindet, also

$$V(\vec{x}) \xrightarrow{\text{schnell}} 0 \quad \text{f. } |\vec{x}| > R,$$

wobei R die Reichweite des Potentials ist.

Gesucht ist nun gemäß den anfänglichen Überlegungen eine Lösung für große $r = |\vec{x}|$, die dann folgende Gestalt hat (mit fester Energie, wodurch das Integral auch in (1.4) entfällt):

$$\Psi_k(\vec{x}) = N\Bigg(e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \underbrace{\overbrace{f(\vartheta,\varphi)}^{\text{Streuamplitude}} \frac{e^{ikr}}{r}}_{=\Psi_s,\ \text{gestreute Welle}}\Bigg). \tag{1.7}$$

Die „Gesamt-Wellenfunktion“ für große Zeiten nach der eigentlichen Wechselwirkung setzt sich (auch gemäß den obigen Überlegungen) zusammen aus einem Anteil der urpsprünglichen ebenen Welle, die „gerade durch“ geht und einer Kugelwelle (zu fester Energie aus (1.3)), die am Target „erzeugt“ wird.

Diese „Lösung“ aus (1.7) erfüllt die Schrödingergleichung, wie man leicht feststellen kann. Die ebene Welle erfüllt sie sowieso und der Radialanteil muß die radiale Schrödingergleichung erfüllen, wobei zu beachten ist, daß das Potential in der Schrgl. verschwunden ist, da (1.7) nur asymptotisch, also für große r bzw. t gilt ...

$$\begin{aligned}
H_0\Psi_s &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi_s) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}\Psi_s \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}e^{ikr}\right) f(\vartheta,\varphi) + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{2mr^3}\cdot \overbrace{\vec{L}^2 f(\vartheta,\varphi)}^{r\text{-unabhängig}}}_{\sim\frac{1}{r^3}\to 0} \\
&= \underbrace{\frac{\hbar^2k^2}{2m}}_{=E_k}\cdot\frac{e^{ikr}}{r}\cdot f(\vartheta,\varphi) = E_k\cdot\Psi_s,
\end{aligned}$$

womit gezeigt ist, daß Ψ_s die Schrgl. erfüllt und somit Ψ_k aus Gl. (1.7) eine asymptotische Lösung des Streuploblems ist.

1.1.2 Zweiteilchen-Steuung, Reduktion auf Einteilchen-Streuung

Gegeben ist ein Potential V, welches vom Abstand $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ der beiden Teilchen abhängt, die Gesamtwellenfunktion ist gegeben durch $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$.

Führt man nun Schwerpunktskoordinaten und -Impulse ein, separiert das Problem letzlich (wie in der klassischen Mechanik) zu einem effektiven Einteilchenproblem ...

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$$
$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \qquad \vec{p} = \frac{m_1\vec{p}_1 + m_2\vec{p}_2}{m_1 + m_2}$$

Setzt man dies in den Hamiltonoperator des Zweiteilchensystems ($H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$) ein, so separiert dieser und man erhält

$$\rightsquigarrow H = H_S + H_r, \qquad H_S = \frac{\vec{P}^2}{2M}, \quad H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}),$$

wobei $M = m_1 + m_2$ die Gesamtmasse und $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{M}$ die reduzierte Masse ist. Aufgrund der Separierbarkeit der Hamiltonoperatoren erhält man für die Gesamtwellenfunktion eine Faktorisierung

$$\rightsquigarrow \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \Phi(\vec{R}) \cdot \psi(\vec{r})$$

mit

$$H_S\Phi(\vec{R}) = E_S \cdot \Phi(\vec{R}) \tag{1.8}$$
$$H_r\psi(\vec{r}) = E_r \cdot \psi(\vec{r}), \tag{1.9}$$

wobei (1.8) die freie Bewegung des Schwerpunkts beschreibt, welche im folgenden nicht weiter beachtet wird, da man sie leicht rechnerisch eliminieren kann und (1.9) ein effektives Einteilchen-Streuproblem eines Teilchens mit Masse μ am Potential $V(\vec{r})$ beschreibt. Aus diesem Grund wird im folgenden stets Einteilchen-Streuung behandelt.

1.1.3 Stromdichten und Wirkungsquerschnitt

Gegeben sei eine Einteilchenzustand mit stationärerer, normierter Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$.
Dann kann man eine Stromdichte (sog. Wahrscheinlichkeits-Stromdichte) wie folgt definieren

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - (\vec{\nabla}\Psi^*)\Psi\right] = \Re\left[\Psi^*\frac{\vec{p}}{m}\Psi\right], \tag{1.10}$$

wobei $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, wie immer (in der Ortsdarstellung).
Weiter kann man eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(\vec{x}, t)$ definieren

$$\varrho(\vec{x}, t) = \Psi^*\Psi. \tag{1.11}$$

Wendet man nun auf (1.10) den Nablaoperator $\vec{\nabla}$ an und setzt dann die Schrödingergleichung (und deren adjungierte) ein und benutzt noch (1.11), erhält man die

$$\boxed{\rightsquigarrow \vec{\nabla}\cdot\vec{j}+\frac{\partial\varrho}{\partial t}=0} \qquad \text{Kontinuitätsgleichung.} \tag{1.12}$$

Diese Gleichung gilt in völlig analoger Form in der Elektrodynamik, nur beschreibt sie hier die Erhaltung der *Wahrscheinlichkeit* und nicht die Ladungserhaltung, wie in der Elektrodynamik. Mit *Erhaltung der Wahrscheinlichkeit* ist gemeint, daß keine Teilchen erzeugt oder vernichtet werden, wie in der „Schrödingertheorie" üblich.

In (1.7) konnte man die Wellenfunktion aufspalten in zwei Teile, einen „einlaufenden" $\Psi_{\text{in}}=N\cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ und den Streuanteil Ψ_s. Die Stromdichte zu Ψ_{in} ergibt sich zu

$$\vec{j}_{\text{in}}=N^2\frac{\hbar\vec{k}}{m}=const. \tag{1.13}$$

Die Stromdichte zu Ψ_s erhält man durch Einsetzen von Ψ_s in (1.10) zu

$$\vec{j}_s=\frac{N^2\hbar}{m}\Re\left[f^*(\vartheta,\varphi)\cdot\frac{e^{ikr}}{ir}\vec{\nabla}f(\vartheta,\varphi)\cdot\frac{e^{ikr}}{r}\right].$$

Verwendet man nun $\vec{\nabla}$ in Kugelkoordinaten, erhält man

$$\rightsquigarrow \vec{j}_s=\frac{N^2\hbar}{m}|f(\vartheta,\varphi)|\Re\underbrace{\left[\frac{e^{ikr}}{ir}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r}\right]}_{\sim r^{-2}}\cdot\hat{e}_r+\hat{e}_\vartheta\cdot O(r^{-3})+\hat{e}_\varphi\cdot O(r^{-3}).$$

Der dominante Term für große r lautet somit

$$\begin{aligned}\vec{j}_s &= \hat{e}_r\cdot N^2\left(\frac{\hbar\left|\vec{k}\right|}{m}\right)|f(\vartheta,\varphi)|^2\cdot\frac{1}{r^2}+O\left(\frac{1}{r^3}\right)\\ &= \hat{e}_r\cdot|\vec{j}_{\text{in}}|\cdot\frac{|f(\vartheta,\varphi)|^2}{r^2}.\end{aligned}$$

Integriert man über die Stromdichte $\vec{j}_s$, erhält man

$$\int \mathrm{d}\vec{\sigma}\cdot j_s=\int \mathrm{d}\Omega\,|f(\vartheta,\varphi)|^2|\vec{j}_{\text{in}}|, \tag{1.14}$$

was nun unabhängig von r ist.

Bei einem Streuversuch mißt man unter dem Winkel ϑ innerhalb des Raumwinkels $\mathrm{d}\Omega$ in einem Detektor die Stromdichte $\vec{j}_s$. Mit Hilfe dieser Anschauung ergibt sich aus der Definition des *differentiellen Wirkungsquerschnitts* (auch *diff. Streuquerschnitt*)

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\text{Zahl der in den Detektor gestreuten Teilchen/d}\Omega\text{/Zeiteinheit}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen /Zeiteinheit/Fläche} \perp \vec{k}}$$

folgende Gleichung

$$\rightsquigarrow \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\vec{j}_s \cdot \hat{e}_r \cdot r^2 \mathrm{d}\Omega/\mathrm{d}\Omega}{|\vec{j}_{\mathrm{in}}|} = |f(\vartheta, \varphi)|^2,$$

also

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2} \tag{1.15}$$

Die Einheit des Streuquerschnitts ist m^2 und somit die der Streuamplitude m. Durch Integration über einen vollen Raumwinkel erhält man den totalen elastischen (bisher wurde nur elastische Streuung behandelt; daher auch der Index *el*) Wirkungsquerschnitt zu

$$\rightsquigarrow \sigma_{\mathrm{el}} = \int \mathrm{d}\Omega \frac{\mathrm{d}\sigma_{el}}{\mathrm{d}\Omega}. \tag{1.16}$$

1.1.4 Optisches Theorem

Mit der Stromdichte aus (1.13) ergibt sich

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{\mathrm{in}} = 0 \rightsquigarrow \oint_{\partial V} \mathrm{d}\vec{\sigma} \cdot \vec{j}_{\mathrm{in}} = 0, \tag{1.17}$$

womit (via (1.12)) folgt, daß diese Stromdichte die „Wahrscheinlichkeit“ innerhalb des Volumens V nicht verändert.

Da aber das Oberflächenintegral der „gestreuten Stromdichte“ über den gesamten Raum nicht verschindet, verschwindet auch die Summe der beiden Stromdichten (eine Art „Gesamtstromdichte“) nicht:

$$\oint_{\text{gesamter Raum}} \mathrm{d}\vec{\sigma} \cdot \vec{j}_s \neq 0 \rightsquigarrow \oint \mathrm{d}\vec{\sigma} \cdot (\vec{j}_{\mathrm{in}} + \vec{j}_s) \neq 0.$$

Um diesem Problem vorzubeugen muß man noch die Stromdichte berücksichtigen, die durch die Interferenz[1] der einlaufenden und der gestreuten Welle (Ψ_{in} und Ψ_s)

[1] Man stellt sich dabei vor, daß der „direkte“ Strahl mit der reinen „Streuwelle“ — der Kugelwelle, die am Streuzentrum entsteht und radial nach außen läuft — interferiert, wodurch in Worwärtsrichtung eine Schwächung des direkten Strahls auftritt, die letztlich die Wahrscheinlichkeitserhaltung gewährleistet; der neu hinzugekommene Strom $\vec{j}_{\mathrm{int}}$ beschreibt gerade diesen Interferenz-Term.

entsteht

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \vec{j}_{\text{in}} + \vec{j}_s + \vec{j}_{\text{int}} \\ &= \frac{N^2\hbar\left|\vec{k}\right|}{m}\left(\hat{e}_z + \frac{|f|^2}{r^2}\hat{e}_r + \Re\left[f\cdot\frac{e^{ik(r-z)}}{r}\right]\cdot(\hat{e}_r+\hat{e}_z)\right).\end{aligned}$$

Vernachlässigt wurden bei der Berechnung der Ableitungen (in den Strömen) die Terme der Ordnung $\frac{1}{r^3}$ und $\frac{e^{ik(r-z)}}{r^2}$.

Aus der Tatsache, daß die Gesamtwahrscheinlichkeit konstant bleiben sollte, folgt nun, daß das Oberflächenintegral über die Summe aller Stromdichten, der einfallenden, der gestreuten und der Interferenzstromdichte, verschwinden muß. Es bleibt aufgrund (1.17) noch übrig, zu zeigen, daß das O-Integral über den Rest verschwindet …

$$\int \mathrm{d}\vec{\sigma}\cdot(\vec{j}_{\text{int}}+\vec{j}_s) = 0 \tag{1.18}$$

Das O-Integral über $\vec{j}_s$ wurde bereits in (1.14) berechnet. Mit den Gleichungen (1.15) und (1.16) ergibt sich damit

$$\oint \mathrm{d}\vec{\sigma}\cdot\vec{j}_s = |\vec{j}_{\text{in}}|\cdot\int \mathrm{d}\Omega\,|f(\vartheta,\varphi)|^2 = |\vec{j}_{\text{in}}|\cdot\sigma_{\text{el}}. \tag{1.19}$$

Bleibt noch

$$\begin{aligned}\oint \mathrm{d}\vec{\sigma}\cdot\vec{j}_{\text{int}} &= |\vec{j}_{\text{in}}|\cdot\Re\left[\int r^2\mathrm{d}\Omega f(\vartheta,\varphi)\cdot e^{ik(r-z)}r(\hat{e}_z+\hat{e}_r)\cdot\overbrace{\hat{e}_r}^{\text{von }\mathrm{d}\vec{\sigma}}\right] \\ &= |\vec{j}_{\text{in}}|r\Re\left[\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\cos\vartheta\, e^{ikr(1-\cos\vartheta)}(\cos\vartheta+1)\cdot f(\vartheta,\varphi)\right]\end{aligned} \tag{1.20}$$

Dabei ist ϑ der Winkel zwischen $\hat{e}_r$ und $\hat{e}_z$. Läßt man nun den Radius r gegen Unendlich gehen, so ist mit „beliebigem“ $\varepsilon > 0 : q\ \cos\vartheta \simeq 1-\varepsilon$, so daß man erhält:

$$\begin{aligned}(1.20) \xrightarrow{r\to\infty} \ldots &= |\vec{j}_{\text{in}}|\cdot r\cdot 2\pi\cdot 2\cdot\Re\left[\underbrace{f(0)}_{\equiv f(\vartheta,\varphi)|_{\vartheta=0}}\cdot\int_{1-\varepsilon}^{1}\mathrm{d}x\, e^{ikr(1-x)}\right] \\ &= |\vec{j}_{\text{in}}|\cdot 4\pi r\Re\left[f(0)\cdot\frac{1}{ikr}\left(1-\underbrace{e^{ikr\varepsilon}}_{\to 0\text{ f. }r\to\infty}\right)\right].\end{aligned}$$

Letzteres ist wohl nur schwer zu zeigen. Man erhält also letztlich

$$\oint \mathrm{d}\vec{\sigma}\cdot\vec{j}_{\text{int}} = -\frac{4\pi}{k}\cdot\Im[f(0)]\cdot\vec{j}_{\text{in}}. \tag{1.21}$$

Setzt man nun noch das Ergebnis von (1.19) in (1.21) ein und fordert (1.18), ergibt sich das *Optische Theorem*:

$$\rightsquigarrow \boxed{\sigma_{\mathrm{el}} = \frac{4\pi}{k} \cdot \Im f(0)} \qquad \text{Optisches Theorem} \tag{1.22}$$

. Das Optische Theorem beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Wirkungsquerschnitt und der Streuamplitude „in Vorwärtsrichtung“.
Anmerkungen:

- Diese Form des Optischen Theorems ist nur eine Spezialisierung des allgemeinen Falls (inelastische Streuung) auf rein elastische Streuung. Der allgemeine Fall wird in den nächsten Abschnitten (s. 1.3.3) nochmals „erwähnt“.
- Das Optische Theorem gilt nur (bzw. hat nur Sinn für) für Potentiale endlicher Reichweite, also z.B. *nicht* für das Coulomb-Potential, da ansonsten der totale Wirkungsquerschnitt und und damit auch $f(0)$ divergiert.
- Da bei Streuung für den Wirkungsquerschnitt stets gilt $\sigma \neq 0$, ergibt sich gemäß (1.22) immer eine Streuamplitude mit nichtverschwindendem Imaginärteil in Vorwärtsrichtung.

Im folgenden werden Methoden vorgestellt, die Streuamplitude $f(\vartheta, \varphi)$ zu bestimmen. Es wird im wesentlichen unterschieden zwischen den beiden Möglichkeiten

1. Lösen der Schrödingergleichung mit Randbedingungen, was aber, wie aus Theorie C bekannt ist, nur bei bestimmten Problemstellung konkret durchführbar ist und
2. Überführen der Schrödingergleichung in eine äquivalente Integralgleichung, die dann iterativ gelöst wird.

1.2 Streutheorie mit Integralgleichungen

1.2.1 Greensche Funktion

Sei D ein linearer Differentialoperator und

$$D\Psi(\vec{x}) = f(\vec{x}),$$

mit vorgegebem $f(\vec{x})$ die zugehörige inhomogone Differentialgleichung. Diese Gleichung hat dann die allgemeine Lösung

$$\Psi(\vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}) + \int \mathrm{d}^3x' \, G(\vec{x}, \vec{x}')f(\vec{x}'), \tag{1.23}$$

wobei die *Greensche Funktion* des Operators D durch

$$D_{(x)}G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \tag{1.24}$$

definiert ist. $\Psi_0(\vec{x})$ ist eine Lösung der homogenen Gleichung

$$D\Psi_0(\vec{x}) = 0. \tag{1.25}$$

Die Greensche Funktion $\vec{G}(\vec{x}, \vec{x}')$ ist nicht eindeutig, da man zu ihr noch eine beliebige Lösung der homogenen Gleichung (1.25) dazuaddieren kann und so (1.24) immer noch erfüllt ist. Die Eindeutigkeit folgt aus den physikalischen Randbedingungen (hoffe ich???).

1.2.2 Integralgleichungen der Streutheorie

Vorgegeben ist ein stationäres Problem, ein Teilchen ohne Spin und ein Wechselwirkungspotential $V(\vec{x})$ mit endlicher Reichweite. Die Schrödingergleichung eines solchen Systems ist gegeben durch (1.6):

$$H\Psi(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right]\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}).$$

Setzt man nun $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ mit $E > 0$ und $U(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{x})$, dann erhält man

$$\left[\Delta + k^2\right]\Psi(\vec{x}) = U(\vec{x})\Psi(\vec{x}). \tag{1.26}$$

Gemäß den Überlegungen des vorigen Abschnitts über Greensche Funktionen, definiert man sich mittels $D := \Delta + k^2$ einen linearen Operator D, dessen Greensche Funktion analog (1.24) durch

$$(\Delta + k^2)G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \tag{1.27}$$

definiert ist. Falls $G(\vec{x},\vec{x}')$ bekannt ist, bekommt man also in „völliger Analogie[2]“ zu (1.23) als Lösung von (1.26):

$$\Psi(\vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}) + \int \mathrm{d}^3x'\, G(\vec{x},\vec{x}') \cdot U(\vec{x}')\Psi(\vec{x}'), \tag{1.28}$$

wobei $\Psi_0(\vec{x})$ eine Lösung der Gleichung (1.26) zu $U(\vec{x}) = 0$ ist.

Mit (1.28) hat man somit eine Integralgleichung zur Schrödingergleichung gefunden, die den Vorteil einer kompakten Integraldarstellung hat, die systematische Näherungsverfahren zum Finden der Lösung erlaubt.

Aus der Elektrodynmamik ist die Greensche Funktion aus (1.27) bekannt (es handelt sich im wesentlichen um die Greensche Funktion der Helmholtz-Gleichung):

$$G_\pm(\vec{x},\vec{x}') = G_\pm(\vec{x}-\vec{x}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}. \tag{1.29}$$

(Diese Gleichung wird in den Gln. (1.38) - (1.44) nochmals hergeleitet.) Man wählt i.allg. das „+“-Zeichen, da dieses eine auslaufende Kugelwelle beschreibt, was ja im vorliegenden Problem auch berechtigt ist. Mathematisch sind die Vorzeichen aber äquivalent.

Setzt man in (1.28) nun die Greensche Funktion aus (1.29) und die Lösung der homogenen, stationären Schrödingergleichung (eine ebene Welle mit fester Frequenz/Energie) ein und macht die zu (1.26) führenden Umbenennungen wieder rückgängig, erhält man *die* Integral-Gleichung der Streutheorie, die *Lippman-Schwinger-Gleichung* („LS-Gl.“):

$$\boxed{\Psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3x'\,\frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\cdot V(\vec{x}')\cdot\Psi(\vec{x}')}. \tag{1.30}$$

Berechnung der Streuamplitude

Das Potential $V(\vec{x}')$ sei um $\vec{x}' = 0$ lokalisiert und es werden große Abstände $|\vec{x}| =: r$ betrachtet. Weiter sei $r' := |\vec{x}'|$. Dann kann man den Betrag in (1.30) entwickeln und erhält

$$|\vec{x}-\vec{x}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{x}\cdot\vec{x}'} \approx r\left(1 - \frac{\vec{x} - \cdot\vec{x}'}{r^2}\right).$$

Mit dieser Näherung kann man nun das Integral aus (1.30) umformen

$$\int \mathrm{d}^3x'\,\frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\cdot V(\vec{x}')\cdot\Psi(\vec{x}')\frac{e^{ikr}}{r}\int \mathrm{d}^3r\,\frac{e^{-ik\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r}}}{1-\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r^2}}$$
$$\overset{„r \text{ groß}“}{\approx} \frac{e^{ikr}}{r}\int \mathrm{d}^3r\, e^{-ik\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{r}}. \tag{1.31}$$

[2]dabei tut man so, also „kenne“ man die Funktion $\Psi(\vec{x})$ auf der rechten Seite von (1.26)

Definiert man sich nun $\vec{k}' := k \cdot \frac{\vec{x}}{r} = k \cdot \hat{x}$, mit $\hat{x} = \hat{x}(\vartheta, \varphi)$, erhält man

$$\rightsquigarrow (1.31) = \frac{e^{ikr}}{r} \int \mathrm{d}^3x'\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} \cdot V(\vec{x}') \cdot \Psi(\vec{x}'). \tag{1.32}$$

Vergleicht man nun diese Gleichung (1.32) mit (1.7):

$$\Psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(\vartheta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r},$$

ergibt sich

$$\rightsquigarrow \boxed{f(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3x'\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} \cdot V(\vec{x}') \cdot \Psi(\vec{x}')}, \tag{1.33}$$

wobei das Ψ eine Lösung der LS-Gl. (1.30) ist.

1.2.3 Bornsche Näherung

Es wird die LS-Gleichung (1.30) iterativ gelöst: Man geht von einer ebenen Welle als „1. Lösung“ aus und setzt dies dann in die LS-Gl. ein, das Ergebnis davon wieder und so weiter ...

$$\Psi_1(\vec{x}) \quad = \quad e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \qquad \text{Start} \tag{1.34}$$

$$\rightsquigarrow \Psi_2(\vec{x}) \overset{(1.30)}{=} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3x'\, G_+(\vec{x} - \vec{x}')U(\vec{x}')\, \underbrace{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'}}_{=\Psi_1\vec{x}'} \tag{1.35}$$

$$\rightsquigarrow \Psi_3(\vec{x}) \overset{(1.30)}{=} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3x' \int \mathrm{d}^3x''\, G_+(\vec{x} - \vec{x}')U(\vec{x}') \cdot G(\vec{x}' - \vec{x}'')U(\vec{x}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''}. \tag{1.36}$$

Man bezeichnet dieses Verfahren als *Bornsche Näherung*. Setzt man die genäherten Wellenfunktionen aus den Gleichungen (1.34)- (1.36) in (1.33) ein, erhält man die Bornschen Näherungen für die Streuamplituden. Setzt man speziell (1.35) in (1.33) ein, erhält man die sog. *1. Bornsche Näherung*:

$$\rightsquigarrow \boxed{f_1(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}^3x'\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} \cdot V(\vec{x}')}. \tag{1.37}$$

Man erhält somit, daß die Streuamplitude in erster Näherung im wesentlichen einfach die Fouriertransfomierte $\tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}')$ des Potentials $V(\vec{x})$ ist.

Anmerkungen

- Die erste Bornsche Näherung ($f_1(\vartheta, \varphi)$) ist reell, was im Wiederspruch zum Optischen Theorem (1.22) steht. Dies wird erst durch das Hinzunehmen der höheren Ordnungen richtiggestellt.
- Jede Ordnung der Bornschen Näherung liefert einen Faktor V, so daß für geeignete Anwendungsmöglichkeiten ein schwaches Potential erforderlich ist (d.h. $V \ll E_0$, mit $E_0 =$ Energie der freien Bewegung).

Bestimmung von $G_\pm(\vec{x}-\vec{x}')$

Die definierende Gleichung der Greenschen Funktion lautete (s. (1.27))

$$(\Delta + k^2)G(\vec{x}-\vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}'), \qquad G_+(\vec{x}-\vec{x}') = G(\vec{x}-\vec{x}'). \tag{1.38}$$

Man macht nun einen Forurieransatz für $G_+(\vec{x}-\vec{x}')$:

$$G_+(\vec{x}-\vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{d}^3q\, \tilde{G}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}. \tag{1.39}$$

Die Delta-Funktion hat folgende Fourierdarstellung

$$\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{d}^3q\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')},$$

womit (1.38) zu

$$\rightsquigarrow \int \mathrm{d}^3q\, \underbrace{\left[(-\vec{q}^2 + k^2)\tilde{G}(\vec{q}) - \frac{1}{(2\pi)^3}\right]}_{=:(*)} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = 0 \tag{1.40}$$

wird. Das funktioniert allerdings nur, wenn $\vec{q}^2 \neq k^2$ (und was heißt das ???). Da in (1.40) die e-Funktion nicht zwangsläufig verschwindet, muß die eckige Klammer $(*)$ verschwinden, woraus sich unter Benutzung von (1.39) folgendes ergibt:

$$\rightsquigarrow G_+(\vec{x}-\vec{x}') = \left(\lim_{\varepsilon\to 0}\right) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{d}^3q\, \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{k^2 - \vec{q}^2 \pm i\varepsilon} \tag{1.41}$$

Dabei wurde der Trick angewandt, daß man „mal eben“ $\pm i\varepsilon$ im Nenner dazuzählt, damit die Pole nicht mehr auf der reellen Achse liegen und man nun integrieren kann.

Setzt man nun $q := |\vec{q}|$, $r := |\vec{x}-\vec{x}'|$ und bezeichnet mit θ den Winkel zwischen $\vec{q}$ und $\vec{x}-\vec{x}'$, erhält man für $G_\pm$ (Berechnung in Kugelkoordinaten):

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow G_\pm &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \mathrm{d}q\, q^2 \int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta\, \frac{e^{iqr\cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \\
&= \frac{1}{i4\pi^2 r} \int_0^\infty \mathrm{d}q\, q \cdot \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \\
&= \frac{1}{i4\pi^2 r} \left\{ \int_0^\infty \mathrm{d}q\, q \cdot \frac{e^{iqr}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} - \int_0^\infty \mathrm{d}q\, q \cdot \frac{e^{-iqr}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \right\} \\
&\overset{q'=-1}{=} \frac{1}{i4\pi^2 r} \left\{ \int_0^\infty \mathrm{d}q\, q \cdot \frac{e^{iqr}}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} + \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}q'\, q' \cdot \frac{e^{iq'r}}{k^2 - q'^2 \pm i\varepsilon} \right\} \\
&= \frac{1}{4\pi^2 ir} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\, \frac{q}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} e^{iqr}.
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Betrachtet wird nun nun G_+, also $+i\varepsilon$. Den Nenner kann man in folgender Weise umformen

$$k^2 - q^2 + i\varepsilon = \left(k - q + \frac{i\varepsilon}{2k}\right) \cdot \left(k + q + \frac{i\varepsilon}{2k}\right) + \underbrace{\frac{\varepsilon^2}{4}}_{\overset{\varepsilon \text{ klein}}{\approx} 0}$$

mit Nullstellen bei

$$q_1 = -k - i\frac{\varepsilon}{2k} \qquad\qquad q_2 = k + i\frac{\varepsilon}{2k}$$

Das G_+ wird somit zu

$$G_+ = \frac{1}{4\pi^2 ir} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q\, q \frac{e^{iqr}}{\left(k - q + \frac{i\varepsilon}{2k}\right)\left(k + q + \frac{i\varepsilon}{2k}\right)}, \tag{1.43}$$

was nun mit Hilfe des Residuensatzes berechnet wird. Der Integrationsweg wird über die positive imaginäre Achse gewählt, da dort für $\Im q \to \infty$ die e-Funktion im Zähler von G_+ verschwindet. Aus der linken Klammer im Nenner wird noch -1 ausgeklammert und somit wird aus (1.43)

$$\begin{aligned} G_+ &= -\frac{1}{4\pi^2 ir} \cdot 2\pi i \mathrm{Res}\left(\frac{q \cdot e^{iqr}}{\left(k + q + \frac{i\varepsilon}{2k}\right)}\right)_{q=q_2} \\ &= -\frac{1}{2\pi r} \cdot \left(k + \frac{i\varepsilon}{2k}\right) \frac{e^{ikr} \cdot e^{-\frac{\varepsilon r}{2k}}}{\left(2k + \frac{i\varepsilon}{k}\right)} \\ &\xrightarrow{\varepsilon \to 0} -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{e^{ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}, \end{aligned} \tag{1.44}$$

was mit der angegebenen Formel aus (1.29) übereinstimmt.

Anwendung

Streuung am Yukawa- und (im Grenzfall) Coulomb-Potential.

$$\text{Yukawa-Potential: } V(r) = V_0 \cdot \frac{e^{-\mu \cdot r}}{r}, \qquad \mu \geq 0.$$

Die Reichweite des Potentials wird durch den Parameter μ beschrieben und ergibt sich einfach zu $R = 1/\mu$. Für den Grenzfall $\mu = 0$ erhält man das Coulomb-Potential $V(r, \mu = 0) = V_0/r$.

Es wird nun die 1. Bornsche Näherung der Streuamplitude berechnet, die aufgrund der Drehsymmetrie um die Polarachse nicht vom Azimutwinkel φ abhängt ...

$$f_1(\vartheta) \overset{(1.37)}{=} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int\limits_0^{\infty} r^2 \mathrm{d}r \int \mathrm{d}\Omega\, V_0 \cdot \frac{e^{-\mu r}}{r} \cdot e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}}.$$

(Das ϑ ist der Winkel zwischen $\vec{k}$ und $\vec{k}'$.) Man legt nun die z-Achse in Richtung des Impulsübertrags $\vec{q} := \vec{k} - \vec{k}'$ und drückt das Skalarprodukt im Exponenten mit Hilfe des Polarwinkels θ aus. Die Integration über den Azimut ϕ liefert einfach einen Faktor 2π ...

$$\begin{aligned}
\vec{q} &:= \vec{k} - \vec{k}' \rightsquigarrow \vec{q} \cdot \vec{x} = qr\cos\theta \\
\rightsquigarrow f_1(\vartheta) &= -\frac{mV_0}{\hbar^2} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r \cdot e^{-\mu r} \underbrace{\int \mathrm{d}\cos\theta\, e^{iqr\cos\theta}}_{=\frac{1}{iqr}(e^{iqr}-e^{-iqr})} \\
&= -\frac{mV_0}{\hbar^2 iq}\left(\frac{1}{\mu - iq} - \frac{1}{\mu + iq}\right) \\
&= -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q^2 + \mu^2}
\end{aligned} \tag{1.45}$$

Anhand dieses Ergebnisses kann man auch die bereits auf S. 19 angesprochene Verletzung des Optischen Theorems erkennen, da $\Im f(0) = 0$.
Drückt man nun das q^2 wieder durch die k's aus

$$q^2 = (\vec{k} - \vec{k}')^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\vartheta = 4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2},$$

das hintere Gleichheitszwichen gilt, da elastische Streuung behandelt wird, also $k = k'$ ist, so erhält man

$$\rightsquigarrow f_1(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4k^2\sin^2\frac{\vartheta}{2} + \mu^2}. \tag{1.46}$$

Mit (1.15) wird der differentielle Wirkungsquerschnitt zu

$$\rightsquigarrow \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{(4k^2\sin^2\frac{\vartheta}{2} + \mu^2} \tag{1.47}$$

und damit, gemäß (1.16), durch Integration über $\mathrm{d}\Omega$

$$\rightsquigarrow \sigma_{\mathrm{el}} = \int \mathrm{d}\Omega\, \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4} \frac{4\pi}{\mu^2(\mu^2 + 4k^2)}. \tag{1.48}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist also endlich für ein von Null verschiedenes μ.

Setzt man nun für den Coulomb-Grenzfall den Parameter $\mu = 0$ (und setzt noch $|\vec{p}| = \hbar\left|\vec{k}\right|$ ein), wird aus (1.47) die berühmte *Rutherfordsche Streuformel*

$$\overset{\mu=0}{\rightsquigarrow} \left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{Coulomb}} \overset{(1.47)}{=} \frac{4m^2V_0^2}{16\,|\vec{p}|^4 \sin^4\frac{\vartheta}{2}}, \tag{1.49}$$

Anmerkungen:

- Der totale Wirkungsquerschnitt des Coulomb-Potentials divergiert, wie man entweder durch Integration von (1.49) oder durch „Einsetzen“ von $\mu = 0$ in (1.48)) sehen kann.

- Das quantenmechanische Ergebnis stimmt mit dem klassischen exakt überein, was man damit „erklären“ kann, daß der Faktor $\hbar$ „nicht mehr auftritt“.

- Die 1. Bornsche Näherung liefert bereits das exakte Ergebnis für die Wirkungsquerschnitte. Das liegt daran, daß alle höheren Ordnungen der Bornschen Näherung lediglich die Phase von $f(\vartheta)$ ändern, was aber nach der Betragsbildung letztlich wieder herausfällt.

- Man kann wohl sagen, daß bei allen Potentialen unendlicher Reichweite die Probleme in der Phase von $f(\vartheta)$ zu finden sind.

1.2.4 Darstellungsfreie Formulierung

Es wird die stationäre Schrödingergleichung betrachtet

$$(H_0 + V)\big|\Psi\big\rangle = E\big|\Psi\big\rangle, \qquad H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \tag{1.50}$$

$\big|\vec{k}\big\rangle$ sei ein freier Zustand, der die freie Schrgl.

$$H_0\big|\vec{k}\big\rangle = E\big|\vec{k}\big\rangle, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{1.51}$$

erfüllt. Schreibt man nun (1.50) um

$$(E - H_0)\big|\Psi\big\rangle = V\big|\Psi\big\rangle$$

und löst dies „formal“ nach $\big|\Psi\big\rangle$ auf, erhält man, wenn man gleich noch die Lösung der freien Gleichung (1.51) dazuaddiert, (in Anführungszeichen)

$$\big|\Psi\big\rangle = \big|\vec{k}\big\rangle + (E - H_0)^{-1} V \big|\Psi\big\rangle. \tag{1.52}$$

Man bezeichnet

$$G_E := (E - H_0)^{-1}, \qquad \text{mit } (E - H_0) G_E = \mathbf{1} \tag{1.53}$$

wobei dieser Ausdruck über seine Reihenentwicklung definiert ist (da ja $(E - H_0)$ keine Zahl, sondern ein Operator ist). Das G_E ist eine Analogon zur Greenschen Funktion in der Ortsdarstellung.

Das Problem liegt nun darin, daß G_E nicht definiert ist, falls $E \in \text{Spektrum}(H_0)$, welches sich über ganz $\mathbb{R}_+$ erstreckt. Dies sind aber gerade die interessanten Fälle! Man behilft sich nun damit, daß man einen Operator $R(z)$ definiert

$$R(z) := (z - H_0)^{-1} \overset{\text{symbolisch}}{\equiv} \frac{1}{z - H_0}, \tag{1.54}$$

der für jedes $z \in \mathbb{C}$ definiert ist, daß *nicht* im Spektrum des freien Hamiltonoperators liegt. Man definiert nun weiter die *Resolvente* von H_0

$$G_E^{\pm} = \lim_{z \to E \pm i\varepsilon} R(z) = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}, \qquad \varepsilon > 0, \text{ bel. klein.} \tag{1.55}$$

Es wird i.allg. das „+“-Zeichen gewählt, da dies einen „auslaufenden Streuzustand“ darstellt („natürliche Wahl“). Setzt man dies nun wieder (anstelle von G_E) in (1.52) „ein“, erhält man die darstellungsfreie Lippman-Schwinger-Gleichung (vgl. (1.30))

$$\rightsquigarrow \boxed{|\Psi\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + \imath\varepsilon} V |\Psi\rangle}. \tag{1.56}$$

Die Ortsdarstellung erhält man durch Multiplikation mit $\langle\vec{x}|$:

$$\langle\vec{x}|\Psi\rangle = \langle\vec{x}|\vec{k}\rangle + \langle\vec{x}|G_E^+ V|\Psi\rangle \sim (1.30),$$

denn es ist

$$\begin{aligned}
\langle\vec{x}|\Psi\rangle &= \Psi(\vec{x}) \\
\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle &= e^{ikx} \quad \text{da } \vec{k} \text{ Lsg. v. (1.51)} \\
\langle\vec{x}|G_E^+ V|\Psi\rangle &\overset{(0.2)}{=} \int d^3x' \, \underbrace{\langle\vec{x}|G_E^+|\vec{x}'\rangle}_{\sim G_+(\vec{x}-\vec{x}')} \cdot \underbrace{\langle\vec{x}'|V|\Psi\rangle}_{\overset{(*)}{=} V(\vec{x}')\Psi(\vec{x}')} .
\end{aligned}$$

$(*)$ gilt, da

$$\langle\vec{x}'|V|\Psi\rangle \overset{(0.2)}{=} \int d^3x'' \, \underbrace{\langle\vec{x}'|V|\vec{x}''\rangle}_{=V(\vec{x}')\delta^{(3)}(\vec{x}'-\vec{x}'')} \cdot \underbrace{\langle\vec{x}''|\Psi\rangle}_{=\Psi(\vec{x}'')} .$$

Die Lösung von (1.56), die sog. *Bornsche Reihe* erhält man wieder (analog zur Bornschen Näherung) via Iteration zu

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= |\vec{k}\rangle + G_E^+ V|\vec{k}\rangle + G_E^+ V G_E^+ V|\vec{k}\rangle + \cdots \\
&= (1 + G_E^+ V + G_E^+ V G_E^+ V + \cdots)|\vec{k}\rangle \qquad (1.57) \\
&\overset{\text{geom. Reihe}}{=} \underbrace{\frac{1}{1 - G_E^+ V}}_{=:\Omega^+} |\vec{k}\rangle. \qquad (1.58)
\end{aligned}$$

Dabei ist weiterhin zu beachten, daß die obige Anwendung der geometrischen Reihe als „Ergebnis“ der Summation nur formalen Charakter hat, der *Møller-Operator* Ω^+ ist nur über seine Reihe (1.57) definiert.

T-Operator

Der T-Operator ist wie folgt definiert

$$T_E := V\Omega^+ \overset{(1.58)}{=} V\frac{1}{1-G_E^+V}. \tag{1.59}$$

Man erhält dasselbe Ergebnis beim „formalen" Auflösen der Gleichung $T_e = V + T_E G_E^+ V$ nach T_E (woher auch immer die kommt???). Man kann diesen Operator über „sein" Matrixelement in Verbindung mit der Streuamplitude bringen …

$$\begin{aligned}\langle\vec{k}'|T_E|\vec{k}\rangle &=: T_E(\vec{k},\vec{k}')\\ f(\vartheta,\varphi) &\sim T_E(\vec{k},\vec{k}')\Big|_{|\vec{k}'|=|\vec{k}|} \qquad \text{elastische Streuung!},\end{aligned}$$

was man zeigen kann, indem man entwder T_E in seine Reihe entwickelt und in die Ortsdarstellung übergeht und dann mit der Bornschen Reihe für $f(\vartheta,\varphi)$ vergleicht; bzw. direkt …

$$\begin{aligned}\langle\vec{k}'|T_E|\vec{k}\rangle &\overset{(0.2)}{=} \int \mathrm{d}^3x'\,\langle\vec{k}'|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\underbrace{T_E|\vec{k}\rangle}_{\overset{(*)}{=}V|\Psi\rangle}\\ &= \int \mathrm{d}^3x'\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}\cdot V\underbrace{\langle\vec{x}'|\Psi\rangle}_{=\Psi(\vec{x}')} \overset{(1.33)}{\sim} f(\theta).\end{aligned}$$

Die Umformung $(*)$ gilt wegen (1.58) und (1.59).

Der Operator T_E ist wohl wichtig für die „formale Streutheorie", welche anscheinend die analytischen Eigenschaften der Streuamplitude beschreibt und aus der sich dann irgendwelche Dispersionsrelationen ergeben (wird schon stimmen …).

Zu den Eigenschaften von T_E: T_E als Funktion der Energie E ist singulär, wenn gilt

$$\det[\mathbf{1}-G_E^+V] = 0, \quad \det[\mathbf{1}-G_E^+V] = \frac{1}{\det[E-H_0]}\det[E-H_0-V]. \tag{1.60}$$

Für gegebenes Potential V, welches die in Abb. 1.2 beschriebene Form hat, gilt

- $E > 0$ ist Eigenwert von H_0 und von $H = H_0 + V$; diese E's sind reell und kontinuierlich, in (1.60) haben sowohl der Zähler als auch der Nenner dieselbe Nullstelle die sich dann „rauskürzt". Die Streuamplitude ist also für $E > 0$ nicht singulär.

- $E = E_n < 0$ aus diskretem Spekturm ist EW von H, aber nicht von H_0, da H_0 nur positive EW hat. In diesem Fall (und nur in diesem) ist also die T_E singulär und auch die Streuamplitude (als Funktion von E) hat damit Pole bei $E = E_n$, da $f_E \sim \frac{1}{E-E_n}$.

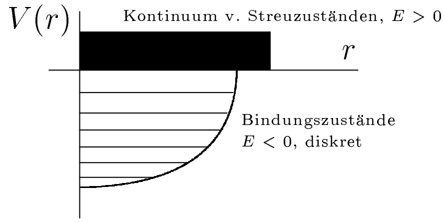

Abbildung 1.2: Bei Potentialen dieser Bauart lassen sich aus der Lage der Bindungszustände Pole der Streuamplitude berechnen

Betrachtet man nochmals die Wellenfunktion Ψ für $r \to \infty$, so erhält man gemäß (1.7)

$$\Psi \xrightarrow{r\to\infty} f_E \cdot \frac{e^{ikr}}{r}, \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Ist nun, wie oben bereits beschrieben, die Energie $E < 0$, so befindet man sich (im „vorliegenden") Fall in einem Bindungszustand und es gilt

$$\begin{aligned} E < 0: \qquad &\leadsto k \to i|k| = i \cdot \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ &\leadsto \Psi \xrightarrow{r\to\infty} f \cdot \frac{e^{-ikr}}{r} \end{aligned}$$

Daraus folgt nun (???), daß die Streuamplitude als Funktion von k: $f(k)$ Pole auf der positiven imaginären Achse hat, falls das Potential Bindungszustände hat. Die Umkehrung gilt *nicht*, d.h. nicht jeder Pol von f_E entspricht einem Bindungszustand im Potential (es könnte z.B. einen metastabilen Bereich (bei einem Potential wie in Abb. 1.3) mit $E > 0$ geben, in dem sich sog. Resonanzen (kurzlebige Bindungszustände, die „weiter hinten" noch ausführlicher behandelt werden) „bilden").

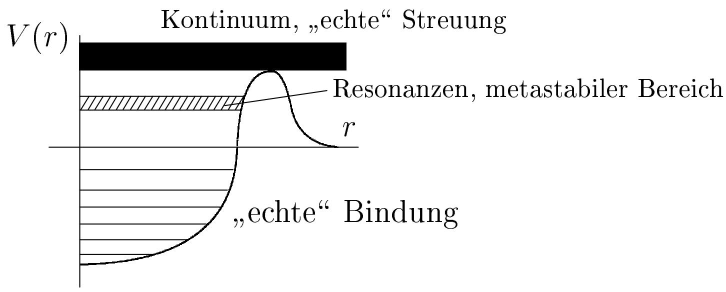

Abbildung 1.3: Bei einem derartigen Potential können für Energien $E > 0$ auch sog. Resonanzen auftreten, also kurzlebige Bindungszustände.

1.3 Partialwellenentwicklung

Es werden im folgenden die Wellenfunktionen bzw. „alles was man so braucht“, also Streuamplituden, Wirkungsquerschnitte, … nach den Eigenfunktionen des Drehimpulses $\vec{L}^2, L_z$ entwickelt.

1.3.1 sphärische Lösung der freien Schrödingergleichung

Die freie Schrödingergleichung lautet

$$H_0\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}), \qquad H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \tag{1.61}$$

Setzt man nun den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten und den Drehimpuls ein, erhält man die radiale Schrödingergleichung

$$H_0\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\cdot\Psi) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}\Psi = E\Psi. \tag{1.62}$$

Da die Kommutatoren zwischen H_0 und $\vec{L}^2, L_z$ verschwinden:

$$\left[H_0, \vec{L}^2\right] = [H_0, L_z] = 0,$$

folgt, daß H_0, $\vec{L}^2$ und L_z gemeinsame Eigenfunktionen haben. Es handelt sich dabei um eine Radialfunktion $R(r)$ und die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta,\phi)$:

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \Psi &= R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad \text{mit} && (1.63)\\
\vec{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1)Y_{lm} \qquad (l = 0,1,2,\dots) && (1.64)\\
L_z Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm} \qquad (m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l). && (1.65)
\end{aligned}$$

Setzt man die Formeln (1.63)-(1.65) in (1.62) ein, erhält man die Radialgleichung für $R(r)$

$$\rightsquigarrow \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\big(rR(r)\big) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0. \tag{1.66}$$

Setzt man nun

$$\varrho := kr, \qquad R(r) = R(\varrho/k) =: \chi(\varrho)$$

ein, erhält man aus (1.66) die *sphärische Bessel-Differentialgleichung*

$$\rightsquigarrow \boxed{\frac{\mathrm{d}^2\chi(\varrho)}{\mathrm{d}\varrho^2} + \frac{2}{\varrho}\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\varrho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\varrho^2}\right]\chi = 0}. \tag{1.67}$$

Diese Gleichung hat zwei linear unabhängige Lösungen:

1. sphärische Besselfunktionen

$$j_l(\varrho) \qquad \text{mit} \quad j_l(\varrho) \overset{\varrho\to 0}{\approx} \frac{\varrho^l}{(2l+1)!!}. \tag{1.68}$$

$$j_l(\varrho) \overset{r\to\infty}{\approx} \frac{1}{\varrho}\sin\left(\varrho - l\tfrac{\pi}{2}\right) \tag{1.69}$$

   Dabei bedeutet $(2n+1)!! = 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n+1)$ die *Doppelfakultät.*

2. sphärische Neumannfunktionen

$$n_l(\varrho) \qquad \text{mit} \quad n_l(\varrho) \overset{\varrho\to 0}{\approx} \frac{(2l+1)!!}{2l+1}\frac{1}{\varrho^l}. \tag{1.70}$$

$$n_l(\varrho) \overset{r\to\infty}{\approx} \frac{1}{\varrho}\cos\left(\varrho - l\tfrac{\pi}{2}\right) \tag{1.71}$$

Die physikalischen Randbedingungen lauten

$$\lim_{r\to 0} r\cdot R(r) = 0, \qquad \text{d.h. } R \overset{r\to 0}{=} const. \tag{1.72}$$

Aus dieser Bedingung folgt, daß die Neumannfunktionen n_l *keine* Lösung des Eigenwertproblems (1.61) sind, da sie für $\varrho\to 0$ divergieren. Als „Begründung" hierfür kann man anführen, daß die Neumannfunktionen keine Eigenfunktionen des freien Hamiltonoperators H_0 sind, denn wenn man diesen z.B. auf $n_0 = \frac{\cos kr}{kr}$ anwendet, erhält man (wegen dem Laplace-Operator Δ) im wesentlichen eine δ-Funktion.

Die Lösung des physikalischen Problems kann also nur aus den sphärischen Besselfunktionen j_l bestehen. Man kann sich die explizite Form der Besselfunktionen herleiten, indem man z.B. einen Ansatz für $l=0$ macht

$$j_0(\varrho) = \frac{u(\varrho)}{\varrho}. \tag{1.73}$$

Setzt man diesen Ansatz in (1.67) ein, erhält man

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(\varrho)}{\mathrm{d}\varrho^2} + u(\varrho) = 0 \rightsquigarrow u(\varrho) = \sin\varrho. \tag{1.74}$$

Und mit (1.73) erhält man dann

$$\rightsquigarrow j_0(\varrho) = \frac{\sin(\varrho)}{\varrho}.$$

(Für die Neumannfunktion n_0 erhält man mit der 2. Lösung von (1.74), dem Kosinus: $n_0(\varrho) = \cos(\varrho)/\varrho$.

Für $l >= 1$ gilt die Formel

$$j_l(\varrho) = (-1)^l\varrho^l - \left(\frac{1}{\varrho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varrho}\right)^l \frac{\sin\varrho}{\varrho}. \tag{1.75}$$

(Beweis durch vollständige Induktion.)

Normierte Eigenfunktionen von H_0

Somit ergeben sich letztlich die normierten Eigenfunktionen (=Lösungen von (1.62)) zu

$$\Psi_{klm}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \cdot j_l(kr) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi), \tag{1.76}$$

die *sphärischen freien Wellen*. Diese sind orthonormiert und vollständig

$$\int \mathrm{d}^3x\, \Psi^*_{klm}(\vec{x})\Psi_{k'l'm'}(\vec{x}) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta^{(1)}(k-k') \tag{1.77}$$

$$\sum_{l,m} \int \mathrm{d}k\, \Psi^*_{klm}(\vec{x})\Psi_{klm}(\vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}').$$

Entwicklung der ebenen Wellen nach den sphärischen

Mit Hilfe der Orthogonalität kann man nun die ebenen Wellen nach sphärischen Wellen entwickeln:

$$\begin{aligned} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} &= \sum_{l',m'} c_{l'm'}\Psi_{k'l'm'}(\vec{x}) \qquad \Big| \cdot\Psi_{klm}(\vec{x}),\ \int \mathrm{d}^3x \\ \rightsquigarrow c_{lm} &\overset{(1.77)}{=} \int \mathrm{d}^3x \Psi^*_{klm}(\vec{x}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \end{aligned}$$

Letzteres kann man wohl ausrechnen. Dazu legt man die z-Achse in $\vec{k}$-Richtung, wodurch die ϕ-Abhängigkeit entfällt und die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} in die Legendre-Polynome P_{lm} übergehen. Man erhält

$$\rightsquigarrow \boxed{e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \cdot (2l+1) \cdot j_l(kr) \cdot P_l(\cos\theta)}. \tag{1.78}$$

1.3.2 Streulösung für Potential $V \neq 0$

$V(\vec{x})$ sei ein Potential mit endlicher Reichweite, damit die in den vorigen Abschnitten (z.B. Kap. (1.2.3)) angesprochenen Probleme nicht auftreten. Aus der freien Schrödingergleichung (1.61) wird dann

$$[H_0 + V(\vec{x})]\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}). \tag{1.79}$$

Im folgenden werden der Einfachheit halber nur kugelsymmetrische Potentiale betrachtet: $V(\vec{x}) \to V(r)$.

Es gilt wieder

$$\left[H, \vec{L}^2\right] = [H, L_z] = 0, \qquad (H = H_0 + V(r)),$$

der Hamiltonoperator hat also wiederum dieselben Eigenfunktionen wie die L's, die gesuchte Lösung ist also wieder von der Form

$$\Phi_{klm}(\vec{x}) = R_{kl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Aus der Radialgleichung für $R_{kl}(r)$ und derselben Randbedingung wie im freien Fall (s. (1.72)) erhält man die Φ_{kl}, die sog. *Partialwellen.*
Man geht mit dem Ansatz

$$R_{kl}(r) = \frac{u_{kl}(r)}{r}$$

in die Radialgleichung ein

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2\right) u_{kl}(r) = \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_{kl}(r), \qquad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r). \quad (1.80)$$

Die asymptotischen Lösungen dieser Gleichung lauten

$$r \to \infty : \qquad \sin\bigl(kr - l\tfrac{\pi}{2}\bigr), \quad \cos\bigl(kr - l\tfrac{\pi}{2}\bigr).$$

Die allgemeine Lösung von (1.80) ist eine Linearkombination dieser beiden Lösungen

$$\begin{aligned} u_{kl}(r) &= a_{kl} \sin\bigl(kr - l\tfrac{\pi}{2}\bigr) + b_{kl} \cos\bigl(kr - l\tfrac{\pi}{2}\bigr) \\ &= c_{kl} \sin\bigl(kr - l\tfrac{\pi}{2} + \delta_l\bigr), \qquad \text{mit } c_{kl} = \sqrt{a_{kl}^2 + b_{kl}^2}. \end{aligned} \quad (1.81)$$

Der einzige Unterschied zum freien Problem liegt also in der Phasenverschiebung δ_l, der sog. *Streuphase.* Ein nicht unwesentlicher Punkt in der Streutheorie besteht nun auch darin, die Streuphasen bzw. aus den bekannten Streuphasen die Wirkungsquerschnitte, Streuamplitude, ... zu berechnen.

Aus der Lösung der Radialgleichung zu gegebenem Potential $V(r)$ mit den bekannten Randbedingungen (1.72) erhält man also i.allg. eine (bis auf die Normierung) eindeutige Lösung, die stetig differenzierbar sein sollte und asymptotisch wie (1.81) gehen sollte.

„In der Praxis" muß man z.B. für ein Potential, welches f. $r > R$ verschwindet, die Schrödingergleichung (bzw. die Radialgleichung) f. $r < R$ lösen und dann an die Lösung im „Außenraum", also an eine Lösung der freien Schrödingergleichung, „anschließen", d.h. sowohl der Funktionswert als auch die Ableitungen der Funktionen im Innen- und Außenraum müssen f. $r = R$ übereinstimmen, woraus sich dann die fehlenden Konstanten bzw. Koeffizienten ergeben.

Im folgenden seien die Streuphasen δ_l bestimmt. Die asymptotische Form der der Streulösung ist (wenn man die obigen „Ergebnisse" zusammenfaßt)

$$\Psi_a = \sum_l c_l \frac{\sin\bigl(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\bigr)}{r} \underbrace{\sum_m a_m Y_{lm}(\theta, \phi)}_{= P_l(\cos\theta) \ \text{bei } V(r)}. \quad (1.82)$$

Diese muß aber gemäß den anfänglichen Überlegungen mit (1.7)

$$(1.7): \qquad \Psi_k(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + f(\vartheta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{1.83}$$

übereinstimmen, so daß sich via Koeffizientenvergleich folgender Ausdruck für die Streuamplitude ergibt (den man aber auch allgemein ansetzen könnte, da die P_l vollständig sind)

$$\rightsquigarrow f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l \cdot P_l(\cos\theta). \tag{1.84}$$

In den nächsten paar Zeilen wird der Unterschied zwischen dem freien Problem und dem Fall mit Potential $V(r) \neq 0$ erarbeitet. (Nebenbei wird noch der Koeffizient b_l aus (1.84) bestimmt.) Dazu entwickelt man die ebene Welle aus (1.83) gemäß (1.78) und setzt noch den gefundenen Ausdruck für die Streuamplitude (1.84) ein und erhält

$$\begin{aligned} e^{ikz} \quad &+ \quad f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \quad \frac{1}{r}\sum_l \left[i^l(2l+1)\frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)}{k} + b_l e^{ikr} \right] P_l(\cos\theta) \\ &= \quad \frac{1}{r}\sum_l \left(\left[\frac{2l+1}{2k}(-1) + b_l \right] \underline{e^{ikr}} - \frac{2l+1}{2k} i^{2l-1} \underline{e^{-ikr}} \right) P_l(\cos\theta). \end{aligned} \tag{1.85}$$

Andererseits ist gemäß (1.82) die asymptotische Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \Psi_a \quad &= \quad \sum_l c_l \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{r} P_l(\cos\theta) \\ &= \quad \frac{1}{r}\sum_l \frac{1}{i} c_l \left[(-i)^{l+1} e^{i\delta_l} \underline{e^{ikr}} - i^{l-1} e^{-i\delta_l} \underline{e^{-ikr}} \right] P_l(\cos\theta). \end{aligned} \tag{1.86}$$

Vergleicht man nun in (1.85) und (1.86) die Koeffizienten der unterstrichenen e-Funktionen und löst diese nach b_l bzw. c_l auf, erhält man

$$c_l = \frac{2l+1}{k} \cdot i^l e^{i\delta_l}, \qquad b_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l \tag{1.87}$$

Somit wird aus (1.84)

$$\rightsquigarrow \boxed{f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) \cdot e^{i\delta_l} \sin\delta_l \cdot P_l(\cos\theta)}. \tag{1.88}$$

Das kann man auch schreiben als

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} P_l(\cos\theta). \tag{1.89}$$

Setzt man den Koeffizienten c_l aus (1.87) in (1.86) ein, erhält man somit letztlich die asymptotische Form der Wellenfunktion für den Fall $V(r) \neq 0$

$$\rightsquigarrow \Psi_a = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2k} \left((-i)\underline{e^{2i\delta_l}} \frac{e^{ikr}}{r} - i^{2l-1} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) P_l(\cos\theta). \tag{1.90}$$

Vergleicht man dies mit dem freien Problem (kein Potential), indem man (1.78) analog (1.85) entwickelt

$$e^{ikz} \approx \sum_{s} \frac{2l+1}{2k} \left((-i) \frac{e^{ikr}}{r} - i^{2l+1} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) P_l(\cos\theta), \tag{1.91}$$

läßt sich als Fazit sagen, daß der einzige Unterschied zwischen den beiden Fällen (mit/ohne Potential), also der Effekt des Potentials, darin besteht, daß die auslaufende Welle im Fall mit Potential eine Phasenverschiebung (vgl. Unterstreichung in (1.90) mit (1.91)) um $e^{2i\delta_l}$ hat.

1.3.3 Streuamplitude, Wirkungsquerschnitt

Gemäß (1.88) lautet die Entwicklung für die Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot e^{i\delta_l} \sin\delta_l \cdot P_l(\cos\theta). \tag{1.92}$$

Daraus erhält man den differentiellen (elastischen) Wirkungsquerschnitt mittels (1.15) zu

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta). \end{aligned} \tag{1.93}$$

Integriert man (1.93) über einen vollen Raumwinkel, erhält man den totalen (elastischen) Wirkungsquerschnitt, ausgedrückt durch die Streuphasen, unter Ausnutzung der Orthogonalität der Legendre-Polynome

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta \, P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \cdot \delta_{ll'}$$

zu

$$\rightsquigarrow \boxed{\sigma_{\mathrm{el}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot \sin^2\delta_l}. \tag{1.94}$$

Der Beitrag der einzelnen Partialwelle σ_l (zu festem l) ist demgemäß

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \qquad \sigma_l = (2l+1)\sin^2\delta_l \cdot \frac{4\pi}{k^2}.$$

Aus dieser Gleichung erhält man durch einfache Abschätzung die sog. „Unitaritätsschranke“

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} \cdot (2l+1).$$

Anmerkungen

- Anhand von z.B. Gl. (1.94) kann man erkennen, daß die Ergebnisse (in dem Fall die Wirkungsquerschnitte) einfach zu berechnen sind, sofern die Streuphasen δ_l bekannt sind.
- Demgemäß liegt die Hauptarbeit beim Lösen der Radialgleichung (s. voriges Kap. 1.3.2) und der nachfolgenden Berechnung der Streuamplituden (Bsp. s. S. 36 ff.).
- Dieses Verfahren (Lösen der Radialgleichung $\rightsquigarrow$ Bestimmung der Streuphasen) hat nur dann praktische Relevanz, wenn man nur wenige Streuphasen berechen muß, wenn also nur wenige l-Werte signifikant beitragen.

Abschätzung für l, halb-klassisch

Es wird nun abgeschätzt, wieviele Schritte l man „in der Praxis“ berechen muß. Ausgegangen wird von einem Potential, was außerhalb einer Kugel mit Radius R_0 verschwindet (das könnte z.B. klassisch eine Art „Pendel“ sein). Auf dieses Pendel trifft nun eine Welle mit Impuls $\hbar k$, der maximale Drehimpuls, der bei der Streuung auftritt ist also

$$l_{\max} \approx \hbar k \cdot R_0.$$

Für das quantenmechanische System muß also gelten

$$\hbar\sqrt{l_{\max}(l_{\max}+1)} \leq \hbar k R_0,$$

wodurch man durch „Auflösen“ nach $l_{\max}$ als ungefähren Wert

$$\rightsquigarrow l_{\max} \leq k \cdot R_0$$

erhält. Demgemäß ist also die Partialwellenmethode nur von Interesse für kleine Energien $k \sim \sqrt{E}$ oder für kleine Reichweiten R_0 der Potentiale. Für sehr kleine Energien kann es sein, daß man nur den Fall $l = 0, 1$ (s,p-Wellenstreuung) betrachten muß.

Nimmt man z.B. an, nur s- und p-Wellen seien relevant (also $l = 0, 1$), so erhält man gemäß (1.92) und (1.93)

$$
\begin{aligned}
\rightsquigarrow f(\theta) &= \frac{1}{k}\left[e^{i\delta_0}\sin\delta_0 + (2\cdot 1+1)e^{i\delta_1}\sin\delta_1 \cdot \underbrace{\cos\theta}_{=P_1(\cos\theta)}\right] \\
\rightsquigarrow \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el}}}{\mathrm{d}\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\
&= \frac{1}{k^2}\left[\sin^2\delta_0 + 6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos\theta + 9\sin^2\delta_1\cos^2\theta\right].
\end{aligned}
$$

Letzteres ist ein Polynom in $\cos\theta$. Aus der Messung (auch bei verschiedenen Energien $\sim k^2$) der Winkelabhängigkeit folgt daher leicht der Wert der s- und der p-Streuphasen, wenn man aus dem Optischen Theorem noch das globale Vorzeichen erhält ($\Im f(0) > 0$). Letztlich erhält man aus einer einfachen Messung die Streuamplitude als komplexe Größe und aus dieser alles weitere.

1.3.4 Ergänzungen

1. **Optisches Theorem** (f. elastische Streuung) Mit Hilfe der Partialwellenentwicklung kann man das Optische Theorem (verglichen mit der Herleitung aus Kap. 1.1.4) sehr elegant und kurz ableiten.

$$
\begin{aligned}
\Im f(0) &\overset{(1.92)}{=} \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \cdot \overbrace{P_l(\cos 0)}^{=1} \\
&= \frac{k}{4\pi}\cdot\underbrace{\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l}_{\overset{(1.94)}{=}\sigma_{\mathrm{el}}}
\end{aligned}
$$

Somit folgt (in Übereinstimmung mit (1.22)):

$$
\rightsquigarrow \boxed{\sigma_{\mathrm{el}} = \frac{4\pi}{k}\Im f(0)} \qquad \text{Optisches Theorem.}
$$

Bevor der nächsten Punkt betrachtet wird, müssen noch einige Dinge zum Optischen Theorem Erwähnung finden. In der obigen Fassung gilt es *nur* für elastische Streuung. Würde man den Wirkungsquerschnitt der absorptiven Streuung kennen, so könnte man auf völlig analoge Weise das allgemeine Optische Theorem folgern. Der absorptive Wirkungsquerschnitt ist jedoch einigermaßen umständlich *ohne* Kenntnis des allgemeinen Optische Theorems herzuleiten, so daß an dieser Stelle das allgemeine Optische Theorem einfach angegeben (und damit dann im nächsten Punkt der absorptive WQ berechnet) wird.

$$\rightsquigarrow \sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \Im f(0). \tag{1.95}$$

In dieser Form gilt das Optische Theorem für den totalen Wirkungsquerschnitt, der sich additiv zusammensetzt aus dem elastischen und dem absorptiven WQ ($\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{abs}}$).

2. **Streuung *mit* Absorption** Zunächst schreibt man den totalen elastischen WQ aus (1.94) um in

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left| \overbrace{1 - \underbrace{e^{2i\delta_l}}_{=:\delta_l(E)}}^{=4\sin\delta_l} \right|. \tag{1.96}$$

Dabei ist $\delta_l(E)$ das *Streumatrix-Element.*

Die **Verallgemeinerung auf Streuung mit Absorption**, die aber eigentlich immer noch „elastisch behandelt“ wird, geschieht durch Einführung eines Faktors η_l im Streumatrixelement $\delta_l(E)$:

$$\delta_l(E) = e^{2i\delta_l} \longrightarrow \eta_l \cdot e^{2i\delta_l}, \qquad 0 \leq \eta_l \leq 1.$$

Der Fall $\eta_l = 1$ beschreibt offenbar die elastische Streuung, während $\eta_l < 1$ eine „Dämpfung“ beschreibt. Das ist so zu verstehen, daß bei Streuung mit Asorption Teilchen aus der *elastischen Gesamtheit* „verschwinden“ (sie durchlaufen andere „Reaktionskanäle“).
Somit wird aus (1.96)

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left|1 - \eta_l e^{2i\delta_l}\right| P_l(\cos\theta), \tag{1.97}$$

da aus der Streuamplitude (s. (1.89)) folgendes wird

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \frac{\eta_l e^{2i\delta_l} - 1}{2i} P_l(\cos\theta). \tag{1.98}$$

Man kann nun leicht überprüfen (betragsquadrieren und über dΩ integrieren), daß aus dieser Gleichung (1.97) folgt.

Wie im vorigen Punkt bescrhieben, gilt das Optische Theorem in seiner allgemeinen Form für die inelastische Streuung, also für Streuung mit Absorption. Mit Hilfe des O.T. aus (1.95) wird nun der totale absorptive WQ berechnet ...

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{tot}} &\overset{(1.95)}{=} \frac{4\pi}{k} \cdot \Im f(0) \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \underbrace{\left(1 - \eta_l \cos 2\delta_l\right)}_{=1-\Re\left(\eta_l e^{2i\delta_l}\right)}.\end{aligned}$$

Somit erhält man letztlich aus $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{abs}}$

$$\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot (1-\eta_l)^2, \qquad (\sigma_{\text{abs}} \geq 0), \tag{1.99}$$

Extremfälle

- $\eta_l = 1$: Dann ist gemäß (1.99) der absorptive WQ $= 0$ und der totale entspricht dem elastischen WQ. Es handelt sich um rein elastische Streuung und es gelten alle Formeln der el. Streuung.
- $\eta_l = 0$ f. $l \leq L$. Es handelt sich in diesem Fall um ein total absorbierendes Potential (Streuzentrum), z.B. einen Atomkern. Man erhält aus (1.99)

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{L} (2l+1) \overset{(1.96)}{=} \sigma_{\text{el}}, \qquad \rightsquigarrow \sigma_{\text{tot}} = 2\sigma_{\text{el}}.$$

Man beachte, daß in der Quantenmechanik im Gegensatz zum klassischen Fall der elastische Wirkungsquerschnitt nie verschwindet, nicht einmal bei einem „vollständig“ absorbierendem Potential.

3. **Praktische Bestimmung der Streuphasen** δ_l Es muß die Radialgleichung mit nichtverschwindendem Potential (aber $V(r) = 0$ f. $r > R$) (1.80)

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}u^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) u = 0$$

gelöst werden.

(a) Lösung im Bereich $r < R$ mit der Randbedingung $u(0) = 0$ finden. Die i.allg. numerisch gefundene Lsg. ist bis auf eine Normierung (die aber letztlich herausfällt) eindeutig und heiße $u_i(r)$.

(b) Die Lösung f. $r > R$ ist aus Kap. 1.3.1 bekannt, es ist eine Linearkombination der sphärischen Bessel- und Neumman-Funktionen j_l bzw. n_l.

$$\begin{aligned} u_a(r) &= AF_l(r) - BG_l(r) \\ &\quad \text{mit } F_l(r) = kr \cdot j_l(kr),\ G_l(r) = kr \cdot n_l(kr), \end{aligned}$$

welche f. große r übergeht in

$$\begin{aligned} u_a(r) &\overset{r\to\infty}{\approx} A\sin\left(kr - l\tfrac{\pi}{2}\right) + B\cos\left(kr - l\tfrac{\pi}{2}\right) \\ &= C\sin\left(kr - l\tfrac{\pi}{2} + \delta_l\right) \end{aligned}$$

mit

$$\boxed{\tan\delta_l = -B/A}. \tag{1.100}$$

(c) Festlegung der B/A durch Anschlußbedingung f. $r = R$. Die u, u' müssen bei $r = R$ stetig ineinander übergehen:

$$\begin{aligned} u_i(R) &= u_a(R) = AF_l(R) - BG_l(R) \\ u_i'(R) &= u_a'(R) = AF_l'(R) - BG_l'(R) \end{aligned}$$

Dividiert man dies beiden GLeichungen durcheinander und löst sie dann nach B/A auf und setzt das in (1.100) ein, erhält man

$$\rightsquigarrow \tan\delta_l = -\frac{F_l'(R) - \frac{u'(R)}{u(R)}F_l(R)}{G_l'(R) - \frac{u'(R)}{u(R)}G_l(R)}. \tag{1.101}$$

4. **Streuung bei niedrigen Energien $k \to 0$**
Da $k \to 0$, geht auch (bei „vernünfitger", also endlicher Reichweite des Potentials) $kR \to 0$. Daher

$$F_l \overset{R\to 0}{\sim} k^{l+1}, \quad G_l \overset{R\to 0}{\sim} k^{-l}.$$

Dieselbe Proportinalität gilt für die Ableitungen von F_l, G_l, da nach R differenziert wird. Somit ist der Faktor u'/u aus (1.101) unabhängig von k und man erhält aus (1.101)

$$\rightsquigarrow \tan\delta_l \overset{k\to 0}{=} a_l \cdot k^{2l+1}. \tag{1.102}$$

Für sehr kleine k trägt nur die s-Welle ($l = 0$) bei und man erhält

$$l = l: \quad \tan\delta_0 = a_0 \cdot k. \tag{1.103}$$

Den Faktor a_0 nennt man *Streulänge*. Die zugehörige Streuamplitude lautet

$$f(\theta) = f_0(\theta) = \frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 = \frac{a_0}{1 - ia_0k}$$

und der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \sigma_0 = 4\pi \frac{a_0^2 + a_0^4 k^2}{(1 + a_0^2 k^2)^2} \xrightarrow{k \to 0} 4\pi a_0^2.$$

a_0 ist also so etwas wie die geometrische Querschnittsfläche des Potentials.

Man sieht leicht, daß die Streuamplitude $f_0(\theta)$ bei $k_0 = -i/a_0$ ein Pol hat, der für $a_0 < 0$ auf der positiven imaginärem Achse liegt, was man in Verbindung mit Bindungszuständen der Energie $E = E_B$ bringen kann, falls das Potential Bindungszustände zuläßt (s. S. 26)

$$E_B = \frac{-\hbar^2 |k_0|^2}{2m} \overset{k_0 \text{ im.}}{=} \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

Setzt man $k_0 = -i/a_0$ ein, erhält man als „Fazit" einen Bindungszustand mit Bindungsenergie

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m_a 0^2} \qquad \text{s-Zustand,}$$

falls das Potential Bindungszus. zuläßt. Aber **Vorsicht!**, diese Berechnung des Bindungszutands hängt von der Qualität der Näherung $\tan \delta_0 \approx a_0 k$ ab, die nur gut ist, falls $E_B \approx 0$ ist, also für große Streulängen.

Geometrische Bedeutung der Streulänge a_0
Die Lösung der Radialgleichung $u_l(kr)$ lautet für die s-Welle

$$u_0(kr) = \sin(kr + \delta_0) \overset{r \approx R}{\approx} \sin k(r + a_0) \overset{k \to 0}{\approx} k(r + a_0).$$

Sie beschreiben also eine Tangente an die Kurve $u_l(r)$ (???) im Punkte $r \approx R$. Man erhält z.B. bei einem abstoßenden Potential eine negative Streulänge (s. Abb. 1.4).

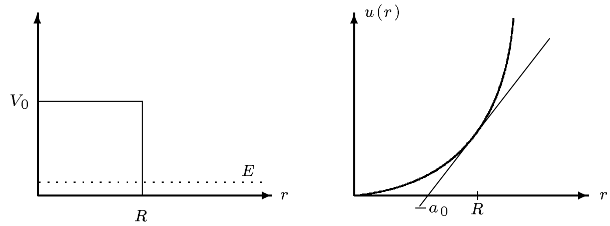

Abbildung 1.4: abstoßendes Potentiel $\rightsquigarrow$ negative Streulänge

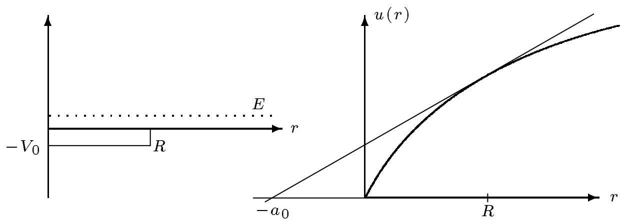

Abbildung 1.5: schwach attraktives Potential $\rightsquigarrow$ positive Streulänge

Bei einem schwach attraktiven Potential erhält man eine positive Streulänge, woraus man wohl schließen kann, daß es trotz $V < 0$ f. $r < R$ *keine* Bindungszustände gibt (s. Abb. 1.5).

Anders bei einem stark anziehenden Potential. Man erhält, da die Tangente erst „hinter dem Berg“ angelegt wird, eine negative Streulänge, die bei einem negativen Potential auf einen Bindungszustand schließen läßt (???) (s. Abb. 1.6). Man beachte, daß man mit Hilfe der „Streulängen-Methode“

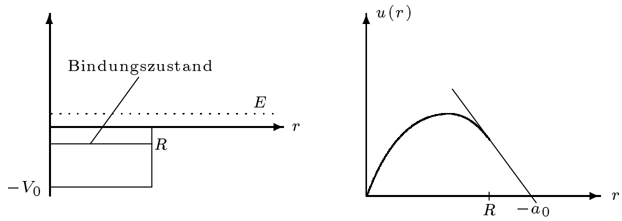

Abbildung 1.6: stark attr. Potential $\rightsquigarrow$ $a_0 < 0$, Bindungszust.

i. allg. keine exakten Ergebnisse erhält; sie liefert eher eine „schnelle“ Abschätzung f. kleine k, ob Bindungszustände vorhanden sind.

5. **Resonanzen**
Falls eine Streuphase beim Energiewert $E = E_0$ den Wert $\delta_l = \pi/2$ annehmen sollte, folgt daraus für eine kleine Umgebung von E_0

$$\tan\delta_l = \frac{\Gamma_l/2}{E_0 - E} \qquad \Gamma_l = const.$$

Und für die Streuamplitude (s. (1.88))

$$f_l(\theta) = e^{i\delta_l}\sin\delta_l \cdot \frac{2l+1}{k} P_l(\cos\theta) = \underbrace{\frac{\tan\delta_l}{1 - i\tan\delta_l}}_{=\frac{\Gamma_l/2}{E_0 - E - i\Gamma_l/2}},$$

die somit einen Pol bei $E = E_0 - i\Gamma/2$ hat. Somit erhält man für den Wirkungsquerschnitt (da aufgrund der „Größe" von $f_l(\theta)$ im wesentlichen nur dieser Term beiträgt)

$$\sigma \approx \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\Gamma_l^2/4}{(E-E_0)^2+\Gamma_l^2/4}, \tag{1.104}$$

die sog. *Breit-Wigner-Form.* Wenn $f.\Gamma_l \ll E_0$ (???) die Kurve σ_l gegen E die Form einer Gauß-Kurve hat, handelt es sich um eine Resonanz; Γ_l beschreibt die Breite dieser Resonanz. Die Phasenverschiebung von δ_l hat eine Art klassisches Analogon, denn auch in der Mechanik gibt es Resonanz bei Schwingungen, wenn die Phasenverschiebung $\pi/2$ beträgt.

<u>Anmerkungen</u>:

- Wenn eine Streuphase den Wert $\delta_l = \pi/2$ hat, ist die zugehörige Streuamplitude $f_l(E)$ rein imaginär.
- Der „maximale" Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\max}$, der dem Wert $\sigma_l(E_0)$, also dem WQ zu *dem l* an der Stelle der Resonanz entspricht, ist eine „obere Schranke der Partialwellenanalyse"
$$\sigma_l(E) = \sigma_{\max} = \frac{4\pi}{k_0}^2(2l+1), \qquad k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_0^2.$$
- Wie bereits beschrieben, liegen die Pole von f bei $E = E_0 - i\Gamma/2$. Trägt man $\Im E$ gegen $\Re E$ auf, erhält man, daß die Bindungszustände auf der (negativen) reellen Achse liegen, während die Resonanzen auf der positiven reellen Seite liegen, aber einen negativen Imaginärteil haben (??????).

Zeitverhalten von Resonanzen

Bisher wurde nur behandelt, unter welchen Umständen Resonanzen (die als „stationär" angenommen wurden), die ja so etwas wie temporäre Bindungszustände sind, „entstehen" können, während nun ihre Zeitverhalten behandelt wird.

Die Gesamtwellenfunktion (für ein u.a. auch resonantes System) sieht gemäß (1.83) (wenn man die Streuamplitude als Summe über die einzelnen Partialwellenanteile (f_l aus (1.92)) ausdrückt) wie folgt aus, wenn beim Index l die Resonanz auftritt

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{x},t) &= e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}\cdot\sum_{l'\neq l} f_{l'} \\ &\quad + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r}\cdot\frac{\Gamma_l/2}{E_0-E-i\Gamma_l/2}\cdot\frac{2l+1}{k}\cdot P_l(\cos\theta)}_{=:\Psi_{\text{res}}}.\end{aligned} \tag{1.105}$$

(Dabei ist $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.) Der hintere Summand Ψ_{res} beschreibt also die Resonanz und soll im weiteren ausführlicher betrachtet werden.

Wie bereits erwähnt, soll eine Resonanz, wenn ihre Amplitude gegen die

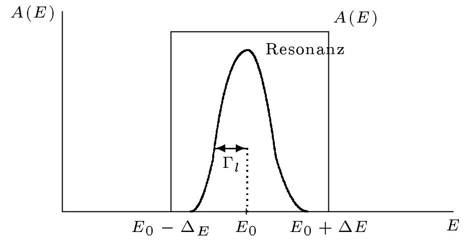

Abbildung 1.7: Zur Berechnung des Zeitverhaltens von Resonanzen

Energie E aufgetragen wird, Gaußform haben mit Maximum bei $k = k_0$ und der „Breite“ Γ_l. Legt man nun einen „Kasten“ um diesen Peak (s. Abb. 1.7) und nimmt diesen „Peak“ als Wellenpaket

$$\int \mathrm{d}E\, A(E)\Psi(E,\theta)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{1.106}$$

mit der Bedingung

$$E_0 \gg \Delta E \gg \Gamma_l$$

an und setzt in (1.106) nun das Ψ_{res} aus (1.105) ein, erhält man

$$\begin{aligned}(1.106) \quad &\approx \int\limits_{E_0-\Delta E}^{E_0+\Delta E} \mathrm{d}E\, \frac{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{E_0 - E - i\Gamma_l/2} \cdot \frac{2l+1}{k_0} \cdot \frac{e^{ik_0(E)r}}{r} \\ &\overset{k_0(E)\approx k_0=const.}{\approx} \underbrace{(2l+1)\cdot\frac{e^{ik_0r}}{k_0r}}_{\overset{?}{=}\Psi(E_0,\vec{x})} \cdot \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E\, \frac{e^{-i(E_0/\hbar)t}}{E_0 - E - i\Gamma_l/2}}_{=:\Phi(t)} .\end{aligned}$$

Man kann nun $\Phi(t)$ für $t \to 0$ betrachten, da Resonanzen nur kleine Zeiten „überleben“.

$$\Phi(t) \overset{t\to 0}{\approx} \underbrace{e^{-i(E_0/\hbar)t}}_{\substack{\text{stationär}\\ \text{mit } E=E_0}} \cdot \underbrace{e^{-\Gamma_l/2\hbar\cdot t}}_{\text{Dämpfung}} .$$

Aus dem Betragsquadrat $|\Phi|^2$ erhält man nun die Lebensdauer der Resonanz zu

$$|\Phi|^2 \rightsquigarrow \text{Lebensdauer } \tau = \hbar/\Gamma_l \Longleftrightarrow \tau \cdot \Gamma_l = \hbar.$$

Somit kann man (nun „offiziell“) eine Resonanz als einen temporären (quasistationären) bindungsartigen Zustand mit endlicher Lebensdauer bezeichnen.

Kapitel 2

Symmetrien in der Quantenmechanik

Auf die Bedeutung von Symmetrien in der Physik wird hier nicht mehr eingegangen, sie sollte aus der klassischen Theorie bekannt sein.

In der Quantenmechanik gibt es zwei Möglichkeiten, Symmetrien „auszunutzen“: entweder ist der Hamiltonoperator eines Systems bekannt und man kann unter Verwendung der Symmetrien von H die physikalischen Eigenschaften leichter herausarbeiten oder die empirischen Eigenschaften eines Systems sind bereits bekannt (und weisen Symmetrien auf), wodurch evtl. ein Ansatz für den Hamiltonoperator dieses Systems möglich wird, der dann „nur“ noch verarbeitet werden muß.

2.1 Transformationen von Observablen u. Zuständen

Zur Begriffsbildung (sollte man nach einer „vernünftigen“ Theorie C-Vorlesung schon einmal gehört haben …): eine *Observable* ist ein hermitescher Operator dessen Eigenfunktionen nicht nur orthogonal, sondern auch vollständig sind, also eine Basis bilden (d.h. sie erfüllen (0.1)); ein *Zustand* ist (äh) eben ein Zustand, ein Vektor im zugehörigen Zustandsraum, in der Ortsdarstellung z.B. kann ein Zustand durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ beschrieben werden, welche von diversen Quantenzahlen abhängen kann.

Betrachtet man eine Observable A und einen Zustand $|\Psi\rangle$ (im Hilbertraum $\mathcal{H}$) unter einer Transformation $\mathcal{T}$

$$A \to \mathcal{T}(A) =: A', \qquad |\Psi\rangle \to \mathcal{T}|\Psi\rangle =: |\Psi'\rangle,$$

so gilt, daß die Messung von A im Zustand $|\Psi\rangle$ dasselbe Ergebnis liefert, wie die Messung von A' im Zustand $|\Psi'\rangle$, *wenn* folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Spektren: Spektrum(A) = Spektrum(A'),
- Erwartungswerte: $\langle\Psi'|A'|\Psi'\rangle = \langle\Psi'|A|\Psi'\rangle$.
- Wahrscheinlichkeiten: $|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2 = |\langle\Psi'|\Phi'\rangle$.

Diese Bedingungen sind erfüllt, falls die Transformation $\mathcal{T}$ durch einen *unitärem* Operator U dargestellt wird, also einen Operator, für den gilt

$$UU^+ = U^+U = \mathbf{1}, \quad U^+ = U^{-1}.$$

Ausgedrückt durch U ergeben sich folgende Transformationen

$$\boxed{\begin{array}{rcl} |\Psi\rangle & \longrightarrow & U|\Psi\rangle =: |\Psi'\rangle \\ \langle\Psi| & \longrightarrow & \langle\Psi|U =: \langle\Psi'| \\ A & \longrightarrow & UAU^{-1} = UAU^+ =: A' \end{array}} \tag{2.1}$$

Es sei angemerkt, daß die Bedingungen auch von *antiunitärem* Operatoren $\hat{U}$ erfüllt werden, welche z.B. bei der Zeitumkehr auftreten. Der Unterschied zu den „normalen“ unitären Operatoren liegt in der Antilinearität …

$$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1, \quad \text{aber: anti-linear!}$$
$$\hat{U}(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha^*\hat{U}|\psi\rangle + \beta^*\hat{U}|\phi\rangle$$

Für die Eigenvektoren des Operators A, die im folgenden als $|\varphi_\lambda\rangle$ bezeichnet werden, gilt folgende Relation

$$\begin{aligned}
A|\varphi_\lambda\rangle &= a_\lambda|\varphi_\lambda\rangle \\
\rightsquigarrow U|\varphi_\lambda\rangle &= |\varphi'_\lambda\rangle, \quad \text{da} \\
A'|\varphi'_\lambda\rangle &= UA\underbrace{U^{-1}U}_{=\mathbf{1}}|\varphi_\lambda\rangle = U\underbrace{A|\varphi_\lambda\rangle}_{=a_\lambda|\varphi_\lambda\rangle} = a_\lambda|\varphi'_\lambda\rangle
\end{aligned}$$

Die Vertauschungsrelationen der Operatoren transformieren sich unter den betrachteten Transformationen „mit“:

$$\begin{aligned}
[A,B] &= C \longrightarrow [A',B'] = C', \quad \text{da} \\
[A',B'] &= UA\underbrace{U^{-1}U}_{=\mathbf{1}}BU^{-1} - UBU^{-1}UAU^{-1} \\
&= U[A,B]U^{-1} = UCU^{-1} = C'
\end{aligned}$$

bei den antiunitären Transformationen entsteht auf der rechten Seite ein $-C'$.

Von physikalische vorrangigem Interesse sind im Gegensatz zu den bisher betrachteten Transformationen von Observablen *und* Zuständen *entweder* die Transformationen von Observablen *oder* von Zuständen, da man ansonsten im wesentlichen „keine Änderung“ durch die Transformation hervorruft, die Änderung des einen wird durch die Änderung des anderen wieder kompensiert).

2.1.1 Gruppeneigenschaften von Transformationen

Wenn man die Verknüpfung zweier Transformationen wie folgt definiert

$$\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2 = \mathcal{T}_2(\mathcal{T}_1),$$

als Nachweinaderausführung, bilden diese eine Gruppe:

$\mathcal{T}_1 \circ (\mathcal{T}_2 \circ \mathcal{T}_3) = (\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2) \circ \mathcal{T}_3$	Assoziativität
I bewirkt nichts	Identität existiert
T^{-1} : mit $T \circ \mathcal{T}^{-1} = I$	Inverse existiert

Die „Transformations-Operatoren“ U auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ergeben sich aus den obigen $\mathcal{T}$s zu

$$\begin{aligned}
U(\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2) &= U(\mathcal{T}_1)U(\mathcal{T}_2) \\
U(I) &= \mathbf{1} \\
U(\mathcal{T}^{-1}) &= U(\mathcal{T})^{-1}
\end{aligned}$$

2.2 Symmetrien

Falls für eine Observable A die Relation

$$A' = A = U(\mathcal{T})^{-1} A U(\mathcal{T})$$

gilt, heißt A *invariant* unter der Transformation $\mathcal{T}$ oder *symmetrisch* bzgl. $\mathcal{T}$

Falls die Transformation $\mathcal{T}$ Element einer Gruppe ist, so bezeichnet man diese Gruppe als *Symmetriegruppe* von A. Es gilt die Beziehung

$$\boxed{A \text{ symmetrisch unter } \mathcal{T} \Longleftrightarrow [A, U(\mathcal{T})] = 0} \tag{2.2}$$

2.2.1 Diskrete Symmetrien

diskrete Symmetrie bedeutet, daß Anzahl der Transformationen $\mathcal{T}$ endlich ist, es gibt also endlich viele Abbildungen der $\mathcal{T}_i$ auf die $U(\mathcal{T}_i)$. Es folgen einige Beispiele

- Spiegelung $\vec{x} \to \vec{x}'$:

  $$\begin{aligned} P: \quad & \Psi(\vec{x}, t) \to P(\vec{x}, t) = \Psi(-\vec{x}, t), \\ & P^2 = \mathbf{1} \rightsquigarrow P = P^{-1} = P^+, \end{aligned}$$

  woraus folgt, daß P selbst eine Observable ist mit den Eigenwerten ± 1. Man bezeichnet P als *Paritäts-Operator*. Die Eigenfunktionen von P sind entweder symmetrisch $(+)$ oder antisymmetrisch (-1):

  $$\begin{aligned} P\Psi_+(\vec{x}, t) &= +\Psi_+(\vec{x}, t) = \Psi_+(-\vec{x}, t) \\ P\Psi_-(\vec{x}, t) &= -\Psi_-(\vec{x}, t) = \Psi_-(-\vec{x}, t) \end{aligned}$$

  Gemäß (2.2) gilt, wenn A symmetrisch unter P ist, daß der Kommutator von A und P verschwindet

  $$A \text{ invariant unter } P \overset{(2.2)}{\rightsquigarrow} [A, P] = 0,$$

  woraus folgt, daß A und P gemeinsame Eigenfunktionen haben, was wiederum bedeutet, daß die Eigenfunktionen von A *entweder* symmetrisch *oder* antisymmetrisch sind. Als Beispiel hierfür kann man den Hamilton-Operator des Harmonischen Oszillators anführen

  $$H_{HO} = \frac{\partial^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2,$$

  der eine quadratische Ortsabhängigkeit besitzt und daher invariant unter P ist. Die Lösungen des HO, die Hermit-Polynome sind daher auch symmetrisch *oder* antisymmetrisch (???).

- Permutations-Symmetrie bei Mehrteilchen-Systemen
  Es wird ein Zweiteilchen-System mit der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ betrachtet. der Permutationsoperator Π ist definiert als „Teilchenaustausch-Operator“:
  $$\Pi\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \Psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1), \tag{2.3}$$
  woraus wieder folgt
  $$\Pi^2 = \mathbf{1} \qquad \Pi = \Pi^+ = \Pi^{-1}.$$
  Der Permutations-Op. hat wie der Paritäts-Op. die Eigenwert ± 1, so daß sich wiederum eine Einteilung in zwei Klassen ergibt, die mit symmetrischen und die mit antisymmetrischen Wellenfunktionen. Verallgemeinert man diese Betrachtungen auf mehrere Teilchen, erhält man, daß die WF entweder *total antisymmetrische* oder *total symmetrisch* bzgl. Π sind. Zur ersten Klasse gehören z.B. die Fermionen, zur zweiten die Bosonen.

2.2.2 Kontinuierliche Symmetrien

Im vorigem Abschnitt wurden diskrete Symmetrien betrachtet (z.B. Permutations-Symmetrie oder Parität). Im folgenden werden Symmetrien betrachtet, die „kontinuierlich“ sind, d.h. die von kontinuierlichen Transformationen abhängen (z.B. Translation, Drehung, Zeitverschiebung).

Die Symmetrietransformation $\mathcal{T}$ hänge von einer abzählbaren Anzahl von Parametern α_i ab und werde wiederum durch unitäre Operatoren U auf dem Hilbertraum dargestellt:

$$\mathcal{T}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \longrightarrow U(\alpha_1, \dots, \alpha_n).$$

Betrachtet man nun infinitesimale „Änderungen“ $\alpha_i \to \delta_{\alpha_i}$, die klein genug sind, um U in eine Taylor-Reihe zu entwickeln, erhält man

$$U(\delta_{\alpha_1}, \dots, \delta_{\alpha_n}) = \mathbf{1} + iT_1\delta_{\alpha_1} + \dots + iT_n\delta_{\alpha_n} + O(\delta_{\alpha_i}^2). \tag{2.4}$$

Man bezeichnet die T_i, die im wesentlichen (bis auf ein i) als „Entwicklungskoeffizient“ 1. Ordnung in obiger Taylorreihe auftreten als *Erzeugende*. Diese T_i sind selbstadjungiert (also hermitesch) $T_i = T_i^+$. Aus (2.2) erhält man folgende Aussage: Wenn A symmetrisch unter der Transformation $U(\delta_{\alpha_1}, \dots, \delta_{\alpha_n})$ ist, dann gilt

$$[A, \mathbf{1} + i\sum_j \delta_{\alpha_j} T_j] \overset{(2.2)}{=} 0 \rightsquigarrow [A, T_i] = 0 \ (i = 1, 2, \dots, n). \tag{2.5}$$

Beispiele

- Räumliche Translation:

$$
\begin{aligned}
U\Psi(x) &= \Psi(x-a) \\
\Psi(x-a) &\overset{\text{Taylor}}{=} \Psi(\vec{x}-a)_{a=0} + \frac{\partial\Psi(x-a)}{\partial(x-a)} \cdot \left.\frac{\partial(x-a)}{\partial a}\right|_{a=0} \cdot a + \cdots \\
&= \Psi(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\Psi(x) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} i^n \hbar^{-n} \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n}_{=:\hat{p}} \Psi(x) \\
&= \underbrace{e^{-i\frac{a}{\hbar\cdot\hat{p}}}}_{=U(a)} \Psi(\vec{x}),
\end{aligned}
$$

woraus man ersehen kann, daß

$$
U(a) = e^{-i\frac{a}{\hbar\cdot\hat{p}}} \xrightarrow{\text{infinitesimal}} U = \mathbf{1} - i \cdot \frac{\mathrm{d}\delta_\alpha}{\mathrm{d}\hbar} \cdot \hat{p}.
$$

Damit erhält man, daß der Impulsoperator die Erzeugende der Translation ist.meskip
Man erhält nun aus

$$
U^{-1}XU \overset{\text{Def.}}{=} X - \delta_\alpha, \qquad X = \text{Orts-Operator}
$$

die kanonischen Vertauschungsregeln ...

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\delta_\alpha\hat{p}\right) X \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\delta_\alpha\hat{p}\right) &= X + \frac{i}{\hbar}\delta_\alpha(\hat{p}X - X\hat{p}) + O(\delta_\alpha^2) \\
&= X - \frac{i}{\hbar}\delta_\alpha[X,\hat{p}] \overset{!}{=} X - \delta_\alpha \\
\rightsquigarrow \boxed{[X,\hat{p}] = -i\hbar}. \qquad (2.6)
\end{aligned}
$$

An dieser Stelle ist erwähnentswert, daß man die Quantenmechanik auf zwei Wegen erschließen kann: man kann von den kanonischen Vertauschungsregeln ausgehen und erhält dann $\hat{p}$ als Erzeugende der Translation oder man definiert sich — wie gehabt — den Impuls und erhält daraus die Vertauschungsrelationen.

- Zeittranslation: $\big|\Psi\big\rangle \longrightarrow \big|\Psi(t-\delta_t)\big\rangle$
  Man erhält analog oben, daß der Hamiltonoperator die Ereugende der Zeittranslation ist ...

$$\big|\Psi(t-\delta_t)\big\rangle = \big|\Psi(t)\big\rangle + \frac{1}{i\hbar}\delta_t H\big|\Psi(t)\big\rangle = \underbrace{(1-\frac{i}{\hbar}\delta_t H)}_{=U(\delta_t)}\big|\Psi(t)\big\rangle.$$

  Um wieder auf den „anderen“ Zugang zur QM hinzuweisen, sei hier ein Postulat erwähnt, welches besagt, daß sich aus der Zeitentwicklung, die durch einen kontinuierlichen untären Operator mit der Erzeugenden H beschrieben wird, die Schrödingergleichung ergibt.

- Drehungen:
  Man erhält nach einiger Rechnerei, daß der Drehimpulsoperator die Erzeugende der Drehung ist.

2.2.3 Innere Symmetrien

Bei den inneren Symmetrien handelt es sich um Symmetrien, die zusätzlich zu den oben erwähnten „äußeren“, den raum-zeitlichen Symmetrien vorkommen, z.B. der *Isospin*: Eine Isospin-Transformation I, die im 2-dim. Isospinraumm, der durch $\big|p\big\rangle$ und $\big|n\big\rangle$ aufgespannt wird, eine Drehung darstellt ist eine Symmetrietransformaten mit den Pauli-Matrizen als Erzeugende bzw. mit $\frac{1}{2}\sigma_i$. Es gilt, daß der Kommutator von H und I verschwindet.

2.3 Erhaltungsgrößen

Der Zustand $\big|\Psi(t)\big\rangle$ habe eine zeitliche Entwicklung, die durch die Schrödingergleichung beschrieben werde

$$u\hbar\partial_t\big|\Psi(t)\big\rangle = H\big|\Psi(t)\big\rangle.$$

Dann ergeben sich die Erwartungswerte der Observablen A im Zustand $\big|\Psi(t)\big\rangle$ zu

$$\big\langle A\big\rangle = \big\langle\Psi(t)\big|A\big|\Psi(t)\big\rangle.$$

Bildet man davon die Zeitableitung, erhält man

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big\langle A\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle[H,A]\big\rangle + \frac{\partial}{\partial t}\big\langle A\big\rangle, \tag{2.7}$$

womit die folgende Definition naheliegt

Definition: Falls die totale Zeitableitung eines Erwartungswertes für alle Zustände $\big|\Psi(t)\big\rangle$ verschwindet, ist die Observable A eine Erhaltungsgröße.

Falls A nicht explizit zeitabhängig ist, gilt gemäß (2.7)

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \rightsquigarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big\langle A\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle[H,A]\big\rangle, \tag{2.8}$$

woraus sofort folgt, daß A erhalten ist, wenn der Kommutator mit H verschwindet. Wendet man diese Definition auf einige bisher bekannte Fälle an

- System mit diskreten Symmetrien $S \in (P, \Pi, \dots)$

  $$[H,S] = 0, \quad \text{mit} S = S^{,}$$

  ergibt, daß S erhalten ist.

- System mit kontinuierlichen Symmetrien $U(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, die durch T_k, $(k = 1, \dots n)$ erzeugt werden:

  $$[H,U] = 0 \rightsquigarrow [H,T_k] = 0\ \forall k,$$

  woraus folgt, daß die T_k erhalten sind.

<u>Spezialfälle</u>

- Hamilton-Operator:

  $$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0, \quad [H,H] = 0 \rightsquigarrow \big\langle H\big\rangle \text{ ist erhalten,}$$

  was bei einem Hamilton-Operator der Form

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

  bedeutet, daß die Energie erhalten ist.

- Impuls: $[H, p_k] = 0 \rightsquigarrow p_k$ sind erhalten, woraus die Impulserhaltung folgt.
- Drehimpuls: $[H, L_k] = 0 \rightsquigarrow L_k$ sind erhalten, was bedeutet, daß der Dehimpuls erhalten ist.
- Parität, Permutationen:

  $$[H, P] = 0, \qquad [H, \Pi] = 0.$$

  woraus die „Einteilung in Klassen“ folgt.

2.3.1 Zeitentwicklung eines Zustands $\big|\Psi(t)\big\rangle$

Durch Anwenden eines *Zeitentwicklungsoperators* $U(t, t_0)$ sei dem Zustand $\Psi(t_0$, der zu einer *festen* Zeit bekannt sei, festgelegt:

$$\big|\Psi(t)\big\rangle = U(t, t_0)\big|\Psi(t_0)\big\rangle, \qquad t_0 = const. \tag{2.9}$$

Setzt man dieses $\big|\Psi(t)\big\rangle$ in die Schrödingergleichung ein, erhält man

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0) = HU(t, t_0), \qquad U(t_0, t_0) = \mathbf{1},$$

woraus man durch formelles Auflösen eine Integralgleichung für U erhält

$$\rightsquigarrow U(t, t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\, H(t')U(t', t_0). \tag{2.10}$$

Sei nun H symmetrisch unter einer Gruppe von Transformationen $\mathcal{T}$, die durch unitäre Op. $U(\mathcal{T})$ im quantenmechanischen Zustandsraum beschrieben werden. Dann gilt

$$[H, U(\mathcal{T})] = 0. \tag{2.11}$$

Multipliziert man Gl. (2.10) von rechts mit $U(\mathcal{T})$ und von links mit $U^{-1}(\mathcal{T})$, ergibt sich unter Verwendung von (2.11) auf der rechten Seite

$$\underbrace{U^{-1}(\mathcal{T})U(t, t_0)U(\mathcal{T})}_{=:\bar{U}(t,t0)} = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\, H(t')\,\underbrace{U^{-1}(\mathcal{T})U(t', t_0)U(\mathcal{T})}_{=U(t',t_0)},$$

woraus mittels (2.10) folgt, daß das transformierte U dem usprünglichen entspricht

$$\overset{(2.10)}{\rightsquigarrow} \bar{U}(t, t_0) = U(t, t_0). \tag{2.12}$$

Aus der obigen Gleichung folgt sofort (durch Einsetzen des transf. $U(t, t_0$ und Multiplikation von links mit $U(\mathcal{T})$)

$$[U(t, t_0), U(\mathcal{T})] = 0 \ \forall \mathcal{T} \in G, \tag{2.13}$$

wobei G die Symmetriegruppe ist, die die Transformationen $\mathcal{T}$ „enthält“. Einige

Konsequenzen aus (2.9) und (2.13)

- diskrete Symmetrien, $U = S(P, \Pi)$, mit $S = S^+$ einer Observable. Es gilt: Wenn $\big|\Psi(t_0)\big\rangle$ Eigenzustand von S mit Eigenwert s ist, dann bleibt auch $\big|\Psi(t)\big\rangle$ Eigenzustand zum selben Eigenwert s, denn

$$\begin{aligned} S\big|\Psi(t_0)\big\rangle &= s\big|\Psi(t_0)\big\rangle \\ \underbrace{U(t,t_0)S\big|\Psi(t_0)\big\rangle}_{\stackrel{(2.13)}{=} SU(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle} &= \underbrace{sU(t,t_0)\big|\Psi(t_0)\big\rangle}_{=|\Psi(t)\rangle} \\ \rightsquigarrow S\big|\Psi(t)\big\rangle &= s\big|\Psi(t)\big\rangle. \end{aligned}$$

- kontinuierliche Symmetrien mit Erzeugenden $T_1, \ldots, T_N$ mit den Observablen $T_k = T_k^+$.

$$\begin{aligned} U(\mathcal{T}) = U(\alpha_1, \ldots, \alpha_N), \qquad & [H, U(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)] \stackrel{(2.13)}{=} 0 \text{ f. bel. } \alpha_i \\ \rightsquigarrow [U(t,t_0), U(\alpha_1, \ldots, \alpha_N] = 0 \ \forall \alpha_i & \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung geht für infinitesimale α_i über in

$$[U(t,t_0), T_k] = 0 \ \forall k = 1, \ldots, N,$$

da die α_i dann unabhängig wählbar sind. Damit erhält man dann völlig analog zum ersten Punkt (diskrete Symmetrien): Wenn $\big|\Psi(t_0)\big\rangle$ Eigenzustand vom *Generator* T_l zum Eigenwert τ_l ist, dann bleibt $\big|\Psi(t)\big\rangle$ Eigenzustand zu τ_l.

Im Allgemeinen gilt $[T_l, T_k] \neq 0$, was bedeutet, daß es einen maximalen Satz kommutierender Generatoren $T_k : T_1, \ldots, T_M,\ M \leq N$ gibt, was wiederum heißt, daß $\big|\Psi(t_0)\big\rangle$ simultaner Eigenvektor zu eben diesen $T_1, \ldots, T_M$ ist: $|\tau_1, \ldots, \tau_M\rangle$. Daraus folgt mittels obigem Sätzchen, daß das ebenfalls für $\big|\Psi(t)\big\rangle$ zutrifft, womit dann die $\tau_1, \ldots, \tau_M$ *erhaltene Quantenzahlen* sind.
Als Beispiele für diesen letzten Punkt kann man anführen

  - Translationsinvarianz

$$\begin{aligned} &[H, p_k] = 0 \quad k = 1,2,3 \\ &\quad \rightsquigarrow \vec{p} = (p_x, p_y, p_z) \text{ sind simultan erhaltene QZ, da} \\ &\qquad [p_k, p_l] = 0 \end{aligned}$$

  - Drehinvarianz

$$\begin{aligned} &[H, L_k] = 0, \quad k = 1,2,3 \quad \text{aber} \\ &[L_k, L_l] \neq 0 \rightsquigarrow \text{max. ein } L_k \text{ erhalten, üblich: } L_z. \end{aligned}$$

zusätzlich zu dem L_k (mit Quantenzahl m) erhält man aber wegen

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

daß die Eigenwert von $\vec{L}^2$, die üblicherweise mit l bzw. $l(l+1)$ bezeichnet werden, und die EW von L_z (m) simultan erhalten sind. Dementsprechend kann man den Eigenzustand „des“ Drehimpulses als $|lm\rangle$ darstellen.

2.4 Darstellungen und Eigenwertprobleme

2.4.1 Gruppendarstellungen

Gegeben sei eine Gruppe G. Die Elemente der Gruppe seien g. Man definiert folgendes

Definition: Eine *Darstellung* einer Gruppe G ist eine Abbildung

$$\begin{aligned}\Gamma: \quad & G \longrightarrow \{n \times n\text{-Matrix}\} \\ & g \in G \longrightarrow D(g) \quad (n \times n\text{-Matrix mit } \det D \neq 0),\end{aligned}$$

so daß gilt (mit $g_1 \circ g_2 \in G$)

$$g_1 \circ g_2 \longrightarrow D(g_1) \cdot D(g_2),$$

wobei auf der rechten Seite die normale Matrizenmultiplikation steht. $n = \dim \Gamma$ ist die Dimension der Darstellung. Zwei Konsequenzen dieser Gegebenheiten sind Abbildungen von Identität und Inversem ...

$$\begin{aligned}\text{Identität } I &\longrightarrow D(I) = \mathbf{1} \\ \text{Inverses } g^{-1} &\longrightarrow D(g)^{-1}.\end{aligned}$$

Der Raum der $(n \times n)$-Darstellungsmatrizen $D(g)$ heißt *Darstellungsraum*.
Es folgen einige Spezialfälle bzw. Folgerungen

- Γ ist eine *unitäre Darstellung*, woraus per definitionem folgt, daß die Darstellungsmatrizen $D(g)$ unitär sind für alle $g \in G$.
- $\bar{\Gamma}$ sei die zu Γ *konjugierte* Darstellung, dann gilt per def., daß die „konjugierte“ Darstellungsmatrix $\hat{D}(g) = D(g)^*$ dem komplexkonjugierten von $D(g)$ entspricht.
- zwei Darstellungen Γ, Γ' sind *äquivalent*, wenn gilt
  - $\dim \Gamma = \dim \Gamma'$
  - Es ex. eine Matrix S mit

    $$D'(g) = S D(g) S^{-1} \; \forall g \in G,$$

    was einem Basiswechsel im Darstellungsraum gleichkommt.

Als Beispiel, um die ganze „Begriffsverwirrung“ ein wenig zu klären, seien die räumlichen Drehungen $\mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ angeführt, welche folgende 3-dim. Darstellung besitzen

$$\begin{aligned}&\mathcal{R} \longrightarrow R \ (3 \times 3)\text{-Matrix} \\ &\vec{x}' = R\vec{x}, \ \text{mit } R^{-1} = R^{\mathrm{T}}, \det R = +1\end{aligned}$$

Die R-Matrizen bilden eine Gruppe, die $SO(3)$, die spezielle (d.h. $\det R = 1$) orthogonale Gruppe der (3×3)-Matrizen, welche isomorph zur 3-dim. Drehgruppe ist.

Zusammenhang mit der Quantenmechanik

A sei eine Observable und G eine Symmetriegruppe mit Elementen g. Die $g \in G$ werden wie gehabt auf $U(g)$ (auf $\mathcal{H}$) abgebildet und es gelte weiterhin

$$[A, U(g)] = 0 \; \forall g \in G. \tag{2.14}$$

Das Eigenwertproblem von A lautet

$$A\big|a_\lambda^r\big\rangle = a_\lambda \big|a_\lambda^r\big\rangle, \qquad r = 1, \dots, n_\lambda.$$

Dabei bedeutet $n_\lambda > 1$ eine Entartung der Eigenwert (und zwar n_λ-fach). Der Eigenraum zu diesem EW a_λ wird durch die Basisvektoren $\big|a_\lambda^r\big\rangle$ aufgespannt, die orthogonal gewählt werden können.

Aus (2.14) folgt

$$U(g)\big|a_\lambda^r\big\rangle \text{ ist ebenfalls EV zu } a_\lambda \text{ f. jedes } r = 1, \dots, n_\lambda \text{, denn} \tag{2.15}$$
$$A[U(g)\big|a_\lambda^r\big\rangle] = U(g)A\big|a_\lambda^r\big\rangle = a_\lambda[U(g)\big|a_\lambda^r\big\rangle]. \tag{2.16}$$

Demgemäß befindet sich $U(g)\big|a_\lambda^r\big\rangle$ im Eigenraum zu dem EW a_λ, kann also nach den Basis-Vektoren desselbigen entwickelt werden

$$\rightsquigarrow U(g)\big|a_\lambda^r\big\rangle = \sum_{r=1}^{n_\lambda} D(g)_{rr'}\big|a_\lambda^{r'}\big\rangle, \tag{2.17}$$

wobei das $D(g)$ eine $(n_\lambda \times n_\lambda)$-Matrix ist, deren Komponenten die „Entwicklungskoeffizienten in obiger Summe sind. Daher kann man sagen, daß die Eigenräume von A den Darstellungen von G entsprechen:

$$\boxed{\text{Eigenräume von } A \equiv \text{Darstellungen von } G}. \tag{2.18}$$

Reduzible Darstellungen

Gegeben sei eine Darstellung Γ_i

$$\Gamma_i : \quad g \longrightarrow D_i(g), \; i = 1, 2, \dots ,$$

aus der eine neue Darstellung wie folgt konstruiert werden kann

$$D(g) := \begin{pmatrix} \boxed{D_1} & & & 0 \\ & \boxed{D_2} & & \\ & & \boxed{D_3} & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Man kann das auch als *direkte Summe* (von Matrizen) schreiben

$$\Gamma = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \cdots$$
$$D(g) = D_1(g) \oplus D_2(g) + \cdots .$$

Führt man nun einens Basiswechsel

$$D(g) \longrightarrow SD(g)S^{-1} =: D'(g)$$

durch, ist $D(g)'$ i.allg. nicht mehr von der Form (2.19).

$D(g)$ sei nun für alle $g \in G$ gegeben. Dann stellt sich umgekehrt die Frage, ob es eine Matrix S gibt, so daß $SD(g)S^{-1}$ von der Form (2.19) $\forall g \in G$ ist.

- Wenn das der Fall ist nennt man die Dastellung *reduzibel*.

Eine *reduzible Darstellung* läßt sich via Basistransformation immer in die Form (2.19) überführen

  Die „Bausteine“ $D_i(g)$ der Matrix $D(g)$ aus (2.19) sind „invariante Teilräume“, die man auch als *irreduzible Darstellungen* bezeichnet, innerhalb derer die Gruppenverknüpfungen erhalten bleiben.

- Wenn nicht, ist die Darstellung *irreduzibel*.

Aus der Kenntnis der irreduziblen Darstellungen, welche „fundamental“ sind, lassen sich alle anderen Darstellungen, durch Anwendung von direkten Summen und Äquivalenztransformationen, erzeugen.

Produktdarstellung

Gegeben seien zwei Darstellungen

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : &\quad g \longrightarrow D_1(g), \quad \dim \Gamma_1 = n_1 \\ \Gamma_2 : &\quad g \longrightarrow D_2(g), \quad \dim \Gamma_2 = n_2 \end{aligned}$$

Definition der Produktarstellung:

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_2 : \quad g \longrightarrow D(g) = D_1(g) \otimes D_2(g). \tag{2.20}$$

(dabei bedeutet $\otimes$ das *Kroneckerprodukt*; was das ist, steht so [unter diesem Namen] nicht einmal im Bronstein ...). Daß heißt, die Komponenten der *Produktmatrix* ergeben sich aus den Komponenten der „alten“ Darstellungsmatrizen

$$D(g)_{rr'ss'} = D_1(g)_{rr'} D_2(g)_{ss'},$$

die zugehörige Matrix, eine $(n_1 \cdot n_2) \times (n_1 \cdot n_2)$-Matrix kann wie folgt konstriuert werden:

$$D_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad D_2 = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & b_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow D = D_1 \otimes D_2 := \left(\begin{array}{c|c|c} a_{11} \cdot \left(D_2\right) & a_{12} \cdot \left(D_2\right) & \cdots \\ \hline a_{21} \cdot \left(D_2\right) & a_{22} \cdot \left(D_2\right) & \cdots \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots \end{array}\right) \tag{2.21}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{12} & a_{11}b_{12} & \cdots \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{12} & a_{11}b_{12} & \cdots \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{12} & a_{22}b_{12} & \cdots \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{22} & a_{22}b_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \tag{2.22}$$

Man achte dabei auf die Reihenfolge! Es sei noch angemerkt, daß Produktdarstellungen wohl i.allg. reduzibel sind.

Produktbasis

Seien $\left|e_r\right\rangle,\ r = 1, \ldots, n_1$ die Basisvektoren der Darstellung (bzw. des Darstellungsraumes von) Γ_1 und $\left|\bar{e}_s\right\rangle,\ s = 1, \ldots, n_2$ die von Γ_2, dann ist die Basis der Produktdarstellung

$$\text{Basis von } \Gamma_1 \otimes \Gamma_2 : \quad \left|e_r\right\rangle\left|\bar{e}_s\right\rangle \equiv \left|E_{rs}\right\rangle \tag{2.23}$$

Es ex. also, wie es sein sollte, $n_1 \cdot n_2$ Basisvektoren, welche man wieder (so ähnlich wie bei der Produktmatrix) wie folgt konstruieren kann (als Spaltenvektoren durch „Einsetzten" der zweiten Vektoren in die ersten) …

$$\left.\begin{array}{l} \left|e_1\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \left|e_2\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots, \left|e_{n_1}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \end{array}\right\} n_1\text{-Vektoren}$$

$$\left.\begin{array}{l} \left|\bar{e}_2\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \left|\bar{e}_2\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots, \left|\bar{e}_{n_1}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \end{array}\right\} n_2\text{-Vektoren}$$

Setzt man nun die $\left|\bar{e}_2\right\rangle$ in die $\left|e_1\right\rangle$ ein, erhält man die Vektoren der Produktbasis zu …

$$\left|E_{11}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \\ 0\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \\ 0\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \\ \vdots \\ 0\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\0\end{pmatrix}, \left|E_{12}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\0\end{pmatrix}, \ldots, \left|E_{n_1 n_2}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\1\end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

2.4.2 EWP bei Symmetrie

Gegeben sei eine Observable A, die symmetrisch unter der Symmetriegruppe G ist; (2.14) ist also erfüllt. Die bekannten Eigenräume von A entsprechen (s. (2.18)) der Darstellung Γ von G. Da die Dimension der Darstellung (bzw. einer ihrer irred. Teildarstellung) der Entartung der zugehörigen Eigenwerte a_λ von A entspricht, folgt

Die Entartung eines Eigenwertes a_λ von A ist mindestens die Dimension einer irreduziblen Darstellung!

.

Zusammengesetzte Systeme

Ein zusammengesetztes System kann z.B. ein Mehrteilchensystem oder ein System mit Spin-Bahn-Kopplung usw. sein. Betrachtet werden die beiden Teilsysteme

Zustandsräume	$\mathcal{H}_1$	$\mathcal{H}_2$
Basisvektoren	$\left\|\Psi_n^{(1)}\right\rangle$	$\left\|\Phi_m^{(2)}\right\rangle$
Observable	$A_1, B_1 \ldots$	$A_2, B_2, \ldots$

Diese beiden Teilsysteme werden nun zum Gesamtsystem „zusammengesetzt“

Zustandsraum	$\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$
Basisvektoren	$\left\|\Psi_n^{(1)}\right\rangle\left\|\Phi_m^{(2)}\right\rangle$
Observable	$A_1 \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes A_2, A_1 \otimes A_2, \ldots$

Dabei bedeute das $\otimes$ bei $A_1 \otimes B_2$, daß das A_1 nur auf das erste System wirkt, während das B_2 nur auf das zweite wirkt:

$$A_1 \otimes B_2 \left|\Psi_n^{(1)}\right\rangle\left|\Phi_m^{(2)}\right\rangle = A_1\left|\Psi_n^{(1)}\right\rangle B_2\left|\Phi_m^{(2)}\right\rangle \tag{2.25}$$

Der „Gesamtraum“ $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ wird üblicherweise als *Produktraum* bezeichnet.

Ein Beispiel zur Verdeutlichung der obigen Begriffe ist die Spin-Bahn-Kopplung: $\mathcal{H}_1$ sei der Raum der Bahnbewegung, $\mathcal{H}_2$ der (2-dim) Spinraum. Auf $\mathcal{H}_1$ wirke der Bahndrehimpulsoperator $\vec{L}$, auf $\mathcal{H}_2$ der Spinoperator $\vec{S}$, im Produktraum ist dann

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1, \quad \vec{L} = \vec{L} \otimes \mathbf{1} \quad \vec{S} = \mathbf{1} \otimes \vec{S}.$$

Und der Gesamtdrehimpuls der in der „üblichen“ Schreibweise als einfache Addition von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ geschrieben wird, ist nun

$$\vec{J} = „\vec{L} + \vec{S}“ = \vec{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{S}.$$

Hamilton-Operator des Gesamtsystems

1. Keine Wechselwirkung zwischen den beiden Systemen

$$H = H_1 + H_2 \equiv H_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_2,$$

H_1 wirkt also auf das erste System während H_2 auf das zweite wirkt. H_1 *und* H_2 seien (jeweils) symmetrisch unter der Symmetriegruppe G (mit den Elementen $g \in G$, welche wie gehabt auf den Operator $U_1(g)$ bzw. $U_2(g)$ abgebildet werden, Demnach gilt gemäß (2.14)

$$H_i \text{ symmetrisch unter } G \Longleftrightarrow [H_1, U_1(g)] = [H_2, U_2(g)] = 0 \; \forall g \in G.$$

Man kann mit Hilfe der Beziehung

$$A_1 B_1 \otimes A_2 B_2 = (A_1 \otimes A_2)(B_1 \otimes B_2)$$

nachrechnen, daß sich die Symmetrieeigenschaft der Teilsysteme auf das Gesamtsystem überträgt.

$$\rightsquigarrow [H, U(g)] = 0 \; \forall g \in G, \quad U(g) = U_1(g) \otimes U_2(g).$$

Die Eigenräume von H entsprechen somit gemäß (2.18) den Darstellungsräumen von G.

Eigenwertproblem auf $\mathcal{H}_i$

- $H_1 \big| E_\lambda^r \big\rangle = E_\lambda \big| E_\lambda^r \big\rangle$, $r = 1, \ldots, n_1$. Die Darstellung Γ_1 wird aufgespannt durch die Eigenräume der $\big| E_\lambda^r \big\rangle$ (zum jeweiligen Eigenwert E_λ), die Bezeichnung dieses Teilraums sei $\mathcal{E}_\lambda^1$.
- $H_2 \big| \epsilon_\kappa^s \big\rangle = \epsilon_\kappa \big| \epsilon_\kappa^s \big\rangle$, $s = 1, \ldots, n_2$. Die Darstellung Γ_2 wird aufgespannt von den $\big| \epsilon_\kappa^s \big\rangle$, dieser Teilraum heiße $\mathcal{E}_\kappa^2$.

Eigenwertproblem auf $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Da die Hamiltonoperatoren der Einzelsysteme entkoppelt sind, kann man separieren

$$(H_1 + H_2)\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle = (E_\lambda + \epsilon_\kappa)\ \underbrace{\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle}_{\text{Produktbasis}}\ .$$

Die Eigenräume sind somit gegeben durch $\mathcal{E}\lambda^1 \times \mathcal{E}_\kappa^2$ mit der Dimension $n_1 \cdot n_2$.
Da der Kommutator zwischen dem Gesamthamilton-Op. und dem Gesamt-$U_(g)$ verschwindet, folgt gemäß (2.15)

$$[H, U(g)] = 0 \rightsquigarrow U(G)\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle \text{ auch EV zu } (E_\lambda + \epsilon_\kappa).$$

Die rechte Seite der obigen Gleichung kann man gemäß (2.17) ausdrücken durch die usrprünglichen Basisvektoren und Darstellungsmatrizen

$$U(G)\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle = \sum_{r',s'} \underbrace{D_1(g)_{rr'}}_{\in\Gamma_1} \underbrace{D_2(g)_{ss'}}_{\in\Gamma_2} \big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle.$$

Die $\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle$ bilden eine Basis der Produktdarstellung $\Gamma_1 \times \Gamma_2$, der „Produkteigenraum“ ist der Darstellungsraum dieser Produktdarstellung, welche (wie alle Produktdarstellungen) i.allg. reduzibel ist. Durch *Ausreduktion* kann man folgendes erhalten

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 = \Gamma_1^{\text{irr}} \oplus \Gamma_2^{\text{irr}} \oplus \cdots \equiv \sum_\Lambda \Gamma_\Lambda^{\text{irr}}.$$

Diese Darstellung $\Gamma_\Lambda^{\text{irr}}$ hat nun die Basisvektoren

$$\text{Basisvektoren von } \Gamma_\Lambda^{\text{irr}}: \ \big|\Lambda\sigma\big\rangle, \text{ mit } \sigma = 1, \ldots, \dim\Gamma_\Lambda.$$

D.h., eine (???) Basistransformation sieht nun wie folgt aus

$$\big|E_\lambda^r\big\rangle\big|\epsilon_\kappa^s\big\rangle = \sum_{\Lambda,\sigma} c_{rs}^{\Lambda\sigma}\big|\Lambda\sigma\big\rangle,$$

wobei die $c_{rs}^{\Lambda\sigma} \in \mathbb{C}$ sind. Die Entartung des Energieeigenwertes, der sich ergibt beträgt $n_1 \cdot n_2$. Die auftretenden Zustände kann man entweder durch deiQuantenzahlen $\lambda, r; \kappa, s$ oder durch $\lambda, \kappa, \Lambda, \sigma$ beschreiben (???).

2. Die Hamiltons der Einzelsysteme sind miteinander gekoppelt

$$H = H_1 + H_2 + H_{12},$$

wobei H_{12} auf *beide* Systeme wirkt und z.B. die Spin-Bahn-Kopplung sein kann. Der Gesamthamilton-Op. sei wieder invariant unter der Gruppe G (die Teilsysteme müssen nicht mehre invariant sein). Die Eigenräume von H sind aber noch immer die Darstellungen von G, die mit Γ bezeichnet werden soll.

Die Eigenvektoren $|E\Lambda^\sigma\rangle$ können wegen der Kopplung *nicht* mehr als Produktbasis $|E_\lambda^r\rangle|\epsilon_\kappa^s\rangle$ geschrieben werden!

$$H|E_\Lambda^\sigma\rangle = E_\lambda|E_\Lambda^\sigma\rangle, \quad \sigma = 1, \ldots, N = \dim\Gamma.$$

Es gibt jedoch noch immer mindestens eine (???) irreduzible Darstellung, so daß die Eigenräume von H der irreduziblen Darstellung von G entsprechen, also

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 = \sum_\Lambda \Gamma_\Lambda^{\text{irr}},$$

wobei die Dimension i.allg. $\dim\Gamma_\Lambda^{\text{irr}} \leq n_1 \cdot n_2$ ist, die Entartung der Energieeigenwerte ist also geringer, woraus eine *Termaufspaltung* folgt.

Betrachtet man eine <u>beliebig kleine Kopplung</u>

$$H_{12} = \varepsilon \cdot h \text{ mit } \varepsilon > 0, \varepsilon \xrightarrow{\text{stetig}} 0,$$

so geht der zusammengesetzte Hamilton in den Hamilton des ungekoppelten Falls über. Ebenso gehen die Eigenräume über in die Summe der „ungekoppelte" Eigenräume f. $\varepsilon \to 0$. Aus der irreduziblen Dasrtellung wird im Grenzfall wieder eine irreduzible Darstellung, die allerdings *nicht* der Produktdarstellung entspricht. Die Eigenzustände von H

$$|E, \Lambda\sigma\rangle \equiv |E_\lambda^\sigma\rangle$$

gehen für $\varepsilon \to 0$ über in

$$\begin{aligned}|E, \Lambda\sigma\rangle &\xrightarrow{\varepsilon\to 0} |E_\lambda + E_\kappa, \Lambda\sigma\rangle \\ &\not\longrightarrow |E_\lambda^r\rangle|\epsilon_\kappa^s\rangle.\end{aligned}$$

Wichtig für die Störungsrechnung
Der Ausgangspunkt für Störungsrechnung 1. Ordnung ist die ungekoppelte Basis

$$\big|E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda, \sigma\big\rangle, \tag{2.26}$$

die Aufspaltung dieses Energieniveaus ist gegeben durch (woher?)

$$\Delta E_{\kappa\lambda}\big\langle E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda\sigma\big|H_{12}\big|E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda\sigma\big\rangle \tag{2.27}$$

Die Matrix dieser Matrixelemente ist diagonal und unabhängig von σ aber abhängig von Λ, da $E_{\kappa\lambda} = E_\lambda + \epsilon_\kappa = E_\Lambda$???.

Symmetrieverminderung

Gegeben sei ein Hamitlon-Operator, der unter der Gruppe G symmetrisch ist und ein Hamilton $H = h_0 + \varepsilon h$, der unter der Untergruppe $G' \subset G$ symmetrisch sei. Logischerweise ist

$$\dim \Gamma^{\mathrm{irr}}(G') \leq \dim \Gamma^{\mathrm{irr}}(G)$$

und demenstsprechend ist die Entartung von H kleiner als die von H_0. Die Anwendung hiervon liegt z.B. beim Atom im homogenen $\vec{B}$-Feld (Zeemann-Effekt). Für $\vec{B} = 0$ erhält man die volle Drehsymmetrie, die Energie-EW sind $2J+1$-fach entartet.
Für ein $\vec{B}$-Feld z.B. in z-Richtung erhält man folgende Darstellung der Symmetriegruppe (hier die Drehung $R_z(\alpha)$)

$$D(\alpha) = e^{-i\alpha J_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha(J-1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{+i\alpha J} \end{pmatrix}.$$

Dabei ist J nun eine „Richtungsquantenzahl“ und J_z die Erzeugende dieser Symmetrie. Diese Darstellung ist reduzibel, die Γ^{irr} sind 1-dimensional, der Entartungsgrad ist also gleich 1, was bedeutet, daß keine Entartung vorliegt, die Terme sind aufgespalten. Das läßt sich allgemein auf folgenden Satzt zurückführen:

<u>Satz</u>: Ist die Symmetriegruppe G abelsch, folgt daraus, daß ihre irreduziblen Darstellung 1-dimensional sind.

Im vorliegenden Fall:

$$R_z(\alpha)R_z(\alpha') = R_z(\alpha')R_z(\alpha),$$

woraus die komplette Termaufspaltung folgt.

2.5 Drehungen

2.5.1 Irreduzible Darstellungen

Die (kontinuierliche) Gruppe der (räumlichen) Drehungen mit den Erzeugenden J_k erfüllt bis auf einen Faktor $\hbar$ die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses (die „Drehimpulsalgebra").

$$[J_k, J_l] = i\varepsilon_{klm} J_m.$$

Mathematisch kann man dies fassen durch Einführung des Begriffes der *Lie-Algebra*, welche allgemein wie folgt definiert ist:

Die selbstadjungierten Erzeugenden $T_1, \ldots, T_n$ sind Erzeugende einer *Lie-Gruppe* , wenn sie folgende Relation erfüllen

$$[T_k, T_l] = \sum_{m=1}^{n} i f_{klm} T_m. \tag{2.28}$$

Die $f_{klm} \in \mathbb{C}$ bezeichnet man als Strukturkonstanten.

Der zugehörige Symmetrioperator hat folgende Gestalt

$$U(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) = e^{i\alpha_1 T_1 + \cdots + \alpha_n T_n},$$

was für infinitesimale Transformationen in

$$\xrightarrow{\text{inf. Transf.}} U(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) = 1 + i \sum_{k=1}^{n} \delta_k T_k.$$

Man sieht nun leicht, daß sowohl die Drehgruppe, wie auch der Dehimpuls eine Lie-Gruppe bilden und daher auch „ähnlich" Vertauschungsrelationen besitzen müssen. Es folgen weitere Beispiele

- $SU(2)$: Gruppe der unitären 2×2-Matrizen mit det $= +1$. Die Erzeugenden dieser Gruppe sind I_1, I_2, I_3, wobei $I_n = \frac{1}{2}\sigma_n$, mit σ_n, den Pauli-Matrizen. Man kann die Algebra leicht nachrechnen

  $$[I_k, I_l] = i\varepsilon_{klm} Im$$

  Diese Gruppe ist die Isospin-Gruppe.

- $SU(3)$: Gruppe der untärem 3×3-Matrizen mit det $= +1$. Die Erzeugenden sind $T_1, \ldots, T_8$, wobei $T_n = \frac{1}{2}\lambda_n$, mit λ_n, den *Gell-Mann-Matrizen.* Diese Gruppe „beschreibt" die starke WW, die Quarks.

Darstellung der J_k

Die Eigenwertgleichungen des Drehinmpulses sind bekannt

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 \big| jm \big\rangle &= j(j+1) \big| jm \big\rangle, & j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ J_z \big| jm \big\rangle &= m \big| jm \big\rangle & m &= -j, -j+1, \dots, j-1, j. \end{aligned}$$

In der Basis der $\big| jm \big\rangle$ hat J_z folgende Gestalt

$$J_z = \begin{pmatrix} 0 & & & \mathbf{0} \\ & \boxed{\begin{matrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{matrix}} & & \\ & & \boxed{\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix}} & \\ \mathbf{0} & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Das obige J_z ist per def. reduzibel.
Die „Schiebe-Operatoren“ sind wie folgt definiert

$$\begin{aligned} J_\pm &= J_x \pm i J_y \\ J_+ \big| jm \big\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \big| j, m+1 \big\rangle, & J_+ \big| jj \big\rangle &= 0 \\ J_- \big| jm \big\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \big| j, m-1 \big\rangle, & J_- \big| j, -j \big\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Die $J_\pm$ und auch die J_x und J_y haben in der Basis $\big| jm \big\rangle$ ein Gestalt folgender Art

$$J_\pm, J_{x,y} \sim \begin{pmatrix} 0 & & & \mathbf{0} \\ & \boxed{2 \times 2} & & \\ & & \boxed{3 \times 3} & \\ \mathbf{0} & & & \ddots \end{pmatrix},$$

die der Gestalt von J_z gleicht. Diese Matrizen sind in dieser Gestalt also ebenfalls reduzibel. Anhand der obigen Darstellung kann man gut erkennen (???), daß zwischen den Teilräumen — die alle zu festem j gehören — mit unterschiedlichen keine Übergänge $j \to j'$ mit $j' \neq j$ stattfinden können.

Die Unterräume (für festes j) sind irreduzible Darstellungen der Dimension $2j+1$ mit der Basis $\big| jm \big\rangle$, $m = -j, \dots, j$. Sie heißen *Spinor-Darstellungen.* In diesen Spinor-Darstellungen wirkt $\vec{J}^2$ wie

$$\vec{J}^2 \longrightarrow j(j+1) \cdot \mathbf{1}, \tag{2.29}$$

dort gilt auch $[\vec{J}^2, J_k] = 0$. Das kann man auch verallgeinern auf die Lie-Gruppen, das besagt das *Schursche Lemma* :

Sei $C(T_1, \dots, T_n)$ ein Polynom in T_k mit $[C, T_k] = 0$, dann folgt, daß $C = \lambda \cdot \mathbf{1}$, $(\lambda \in C)$ in irreduzibler Darstellung.

Daher kann man anhand (2.29) ersehen, daß die irreduzible Darstellung der Drehgruppe durch die Eigenwerte von $\vec{J}^2$ klassifiziert wird.

Bei den Drehungen braucht man daher nur $\vec{J}^2$ zu betrachten, um alle irreduziblen Darstellungen zu erhalten (es gibt eben nur eine). Im Gegensatz dazu hat die Poincaré-Gruppe wohl zwei irred. Darstellungen ...

Abschließend sei noch angemerkt, daß die zu j =ganzzahlig gehörigen irred. Darstellungen den Bahndrehimpuls beschreiben, während die halbzahligen den Spin beschreiben, für den z.B. für Spin-$\frac{1}{2}$ gilt

$$s = \frac{1}{2}: \ D(\alpha) = e^{-i\alpha\sigma_z/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}.$$

Anhand dieses Asudrucks kann man erkennen, das für diese Spinoren eine volle „Drehung" erst bei $\alpha = 4\pi$ abgeschlossen ist.

2.5.2 Produkt-Darstellungen, Addition von Drehimpulsen

Gegeben sei ein System $\mathcal{H}_1$ mit Drehimpuls $\vec{J}_1$ und ein System $\mathcal{H}_2$ mit Drehimpuls $\vec{J}_2$. Das Gesamtsystem ist dann wie gehabt gegeben durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2, \qquad \vec{J} = \vec{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \vec{J}_2 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2. \tag{2.30}$$

Die J_k erfüllen die Lie-Algebra

$$[J_k, J_l] = i\varepsilon_{klm} J_m,$$

d.h. sie sind die Erzeugenden von Drehungen auf $\mathcal{H}$. Die irreduziblen Darstellungen (auf den Teilräumen) sind gegeben durch

$$\Gamma_j^1: \text{ auf Teilraum } \mathcal{H}_1, \ \vec{J}_1^2 \big| j_1 m_1 \big\rangle = j_1(j_1+1) \big| j_1 m_1 \big\rangle,$$

wobei $\big| j_1 m_1 \big\rangle$ die Basis bzgl. des Darstellungsraumes ist. Analog beim zweiten Teilraum

$$\Gamma_j^2: \text{ auf Teilraum } \mathcal{H}_2, \ \vec{J}_2^2 \big| j_2 m_2 \big\rangle = j_2(j_2+1) \big| j_2 m_2 \big\rangle.$$

Die Produktdarstellung auf $\mathcal{H}$ ist

$$\Gamma_j^1 \times \Gamma_j^2, \quad \text{Produktbasis: } \big| j_1 m_1 \big\rangle \big| j_2 m_2 \big\rangle \equiv \big| j_1 m_1 j_2 m_1 \big\rangle$$

Die Produktbasis ist $(2j_1+1)\cdot(2j_2+1)$-dimensional. Betrachtet man das „Produkt"-J_z:

$$J_z = J_z^1 + J_z^2 :\ J_z\big|j_1m_1\big\rangle\big|j_2m_2\big\rangle = \underbrace{(m_1+m_2)}_{=:M=\text{EW v. } J_z}\big|j_1m_1\big\rangle\big|j_2m_2\big\rangle.$$

Die Produktbasis-Vektoren sind jedoch *keine* Eigenvektoren von $\vec{J}^2$. Die Eigenzustände von $\vec{J}^2$ sind

$$\vec{J}^2 :\quad \vec{J}^2\big|JM\big\rangle = J(J+1)\big|JM\big\rangle, \quad J = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots,\ M = -J, \dots, J$$

Diese Eigenzustände entsprechen den irreduziblen Darstellungen. Demgemäß muß man $\Gamma_j^1 \times \Gamma_j^2$ nach den Γ_J ausreduzieren

$$\Gamma_j^1 \times \Gamma_j^2 = \sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} \Gamma_J = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \Gamma_J, \tag{2.31}$$

was insgesamt die Dimension

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_1} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

hat. Die Matrizen $J_z, J_\pm$ (und auch J_x und J_y) haben in der Basis der $\big|JM\big\rangle$ die Gestalt

$$J_z, J_\pm \sim \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} J_{\text{min}} & \\ \cdot J_{\text{min}} & \end{matrix}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \boxed{\begin{matrix} J_{\text{max}} & & \\ & \cdot & \\ & & J_{\text{max}} \end{matrix}} \end{pmatrix}$$

Beispiel: $j_1 = 2, j_2 = 1$. Die möglichen Werte von J kann man sich entwerde „konstruieren", indem man in einem Graphen auf die y-Achse die Werte von m_2 und auf die x-Achse die von m_1 aufträgt und dann die diagonalen konstanter Summe der beiden entlangläuft oder so. Man erhält

mögliche Werte von $J : j_1+j_2, j_1+j_2-1, \dots, |j_1-j_2|$.

Die zugehörigen Ms laufen von $-J, \dots, J$. Die physikalische Bedeutung der Ms und Js liegt darin, daß sie die Eigenwerte des Gesamtdrehinpulses sind. (???)

Basis-Transformation

Führt man eine Basistransformation („unitärer Übergang“ von einer orthogonalen Basis zu einer anderen) durch, erhält man

$$\big|JM\big\rangle \sum_{m_1,m_2} \underbrace{\big\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \big| JM \big\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}} \big|j_1 m_2\big\rangle \big|j_2 m_2\big\rangle. \tag{2.32}$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind ungleich Null falls $m_1 + m_2 = M$ und bilden die Elemente einer unitären Matrix. Die CG-Koeff. sind bis auf eine Phasenwahl eindeutig, die konventionsgemäß so gewählt wird, daß

$$\big\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \big| JJ \big\rangle \overset{\text{reell}}{\geq} 0 \text{ f. } m_1 = j_1.$$

Die Vorgehensweise zur Berechnung der CG-Koeff. sieht so aus, daß man zuerst den Koeffizienten für den Ket mit $M = J$ bestimmt:

$$\big|JJ\big\rangle = \big|j_1 j_1\big\rangle \big|j_2 j_2\big\rangle$$

und dann die weiteren $\big|JM\big\rangle$ durch Anwenden von J_- erhält. Für kleinere J muß man etwas mehr Aufwand betreiben, da mehrere Möglichkeiten zur Auswahl stehen, den „maximalen“ Ket zu erzeugen. Man setzt dann mit einer Linearkombination an und erhält die fehlenden Koeffizienten aus der Normierung/Phasenkonvention und der Orthogonalität der Zustände.

3-j-Symbol

Das 3-j-Symbol ist wie folgt definiert

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} := \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m}}{\sqrt{2j+1}} \cdot \big\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \big| j, -m \big\rangle. \tag{2.33}$$

Es ist symmetrisch unter zyklischen Permutationen und erhält bei Transposition ein Minuszeichen.

Anwendung:

Betrachtet wird ein Elektron im Zentralfeld. Der Hamilton-Op. ergibt sich aus dem freien

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$$

und einem Kopplungsterm zu

$$H = H_0 + \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S}.$$

Der Gesamtdrehimpuls ist $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ und es gelten die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}[\vec{L}^2, J_k] = [\vec{S}^2, J_k] &= [\vec{L}^2, \vec{J}^2] = [\vec{S}^2, \vec{J}^2] \\ &= [\vec{L}\cdot\vec{S}, J_k] = \frac{1}{2}[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2, J_k] = 0 \\ \rightsquigarrow [H, J_k] = 0, &\end{aligned}$$

was bedeutet daß der Gesamtdrehimpuls erhalten ist, da H drehsymmetrisch unter J ist. J, M sind erhaltene Quantenzahlen und $H, \vec{J}^2, J_k, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ haben gemeinsame Eigenzustände.
Andererseits gilt

$$[H, L_k] \neq 0, \quad [H, S_k] \neq 0,$$

woraus folgt, daß $\vec{L}$ und $\vec{S}$ *nicht* separat erhalten und demnach auch m_l und m_s keine erhaltenen Quantenzahlen sind und daß demnach $|lm_l\rangle|sm_s\rangle$ keine Eigenzustände von H sind. Klassisch stellt man sich das so vor, daß $\vec{L}$ und $\vec{S}$ um $\vec{J}$, welches fest steht, präzedieren.
Die Korrektur zu den Energieniveaus ergibt sich gemäß (2.27) zu

$$\Delta E_{JM}\langle E_{JM}, JM|H_{12}|E_{JM}, JM\rangle \sim J(J+1) - l(l+1) - s(s+1).$$

2.5.3 Tensor-Operatoren

Definition: Ein Satz von $2k+1$ Operatoren

$$T_m^{(k)}, \ m = -k, -k+1, \dots, k \tag{2.34}$$

heißt *irreduzibler Tensor-Operator k-ter Stufe*, wenn unter Drehungen gilt

$$U(\mathcal{R})T_{,}^{(k)}U^{-1}(\mathcal{R}) = \sum_{m'=-k}^{k} D_{mm'}^{(k)}(\mathcal{R})\Gamma_{m'}^{(k)}, \tag{2.35}$$

was bedeutet, daß sich ein Tensor-Op. wie $|km\rangle$ transformiert. Äquivalent zu (2.35) kann wohl auch gelten (beim Übergang zu infinitesimalen Drehungen)

$$\begin{aligned}[J_z, T_m^{(k)}] &= mT_m^{(k)} \\ [J_\pm, T_m^{(k)}] &= \sqrt{k(k+1) - m(m\pm 1)}T_m^{(k)}.\end{aligned}$$

Beispiele für Tensor-Operatoren

- $k = 0$: Skalar,

$$T_0^{(0)} : \ [J_\pm, T_0^{(0)}] = [J_z, T_0^{(0)}] = 0.$$

- Vektor

$$V_0 = T_0^{(1)} = z,\ V_{\pm 1} = T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \tfrac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y)$$
$$\vec{L} \to \big(\underbrace{J_\pm}_{T_\pm^{(1)}}, \underbrace{J_z}_{T_0^{(1)}}\big).$$

- Tensor 2. Stufe, hat prinzipiell 9 Komponenten, fordert man aber Symmetrie und Spurfreiheit, bleieen noch 5 Komponenten. Aus der Elektrodynmamik z.B. ist eine solcher Tensor bekannt, der Quadrupoltensor.

- allgemein: $Y_{lm}(\theta, \phi),\ l = 0, 1, 2 \ldots$ ist ein Tensor-Operator l-ter Stufe bzgl. Multiplikation.

2.5.4 Wigner-Eckart-Theorem

Im folgenden wird eine wichtige Aussage über Matrix-Elemente getätigt, die viel Rechenarbeit ersparen vermag.

Gegeben seien die Basisvektoren $\left|\alpha, JM\right\rangle$ einer $(2J+1)$-dimensionalen irreduziblen Darstellung, wobei α weiter simultane Quantenzahlen (z.B. Energie) sein können. Entsprechend seien die Basisvektoren $\left|\alpha', J'M'\right\rangle$ zu einer irreduziblen Darstellung zu J' gegeben. $T_m^{(k)}$ seien die Komponenten eines irreduziblen Tensoroperators. Dann gilt

$$\boxed{\left\langle \alpha, JM\middle|T^{(k)}\middle|\alpha', J'M'\right\rangle = \frac{1}{2J+1}\cdot\left\langle J'M', km\middle|JM\right\rangle\left\langle \alpha J'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha J\right\rangle}, \tag{2.36}$$

wobei

$$\left\langle J'M', km\middle|JM\right\rangle$$

der Clebsch-Gordan-Koeffizient für eine Kopplung $(J'M')(km) \to (JM)$ ist und

$$\left\langle \alpha J'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha J\right\rangle$$

das *reduzierte Matrixelement*, welches nicht mehr von M, M' und auch nicht mehr von m abhängt. Der Faktor $1/(2J+1)$ ist Konvention.

Der Vorteil des Wigner-Eckart-Theorems liegt nun darin, daß man das reduzierte Matrixelement *einmal* ausrechen muß und zur Berechnung der „richtigen“ Matrixelemente, die nun nur noch von den Clebsch-Gordan-Koeffizienten abhängen, braucht man diese lediglich nachzuschlagen oder auszurechnen.

Zur Verdeutlichung.
Wollte man alle Übergangsamplituden zwischen $l = 2, l' = 3, m = 0$ berechnen wären das 175 Matrix-Elemente. Aufgrund des Wigner-Eckart-Theorems braucht man lediglich eines „echt“ auszurechnen, der Rest ergibt sich aus den CG-Koeff.

Eine wichtige Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems liegt in der Spektroskopie, da aus dem WE-Theorem die Auswahlregeln (d.h. welche Übergänge erlaubt sind und welche nicht) folgen. Diese lassen sich teils relativ einfach über die Clebsch-Gordan-Koeff. berechnen, da diese bei bestimmten „Konstellationen“ von ms und ls verschwinden. Allerdings muß man zusätzlich zu dieser ersten Betrachtung noch andere Einschränkungen wie z.B. Parität beachten.

Man muß für die „entsprechende“ Strahlungsart Matrixelemente der folgenden Bauart beerechnen

- Dipolstrahlung $\langle \vec{x} \rangle$, bzw. $\langle T^{(1)} \rangle$.
- Quadrupolstrahlung $\langle Q_{jk} \rangle \sim \langle T_m^{(2)} \rangle$.

- allg. f. k-Pol-Strahlung erhält man folgende Auswahlregeln

$$|J - J'| \leq k \leq J + J', \qquad M - M' = 0, \pm 1.$$

Allerdings kommen wie beschrieben weitere Einschränkungen hinzu, z.B. ist der Übergang $J - J' = 0$ wegen der Paritätserhaltung wohl nicht erlaubt.

Index