zu 4.) Pauligleichung $\underline{H}\,\vec{\Psi} = i\hbar\,\dot{\vec{\Psi}}$ als 2×2 Gleichung

mit $\vec{\Psi} = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}$

stationäre Pauligleichung $\underline{H}\,\vec{\Psi} = E\,\vec{\Psi}$

ergibt:

$$\left[\underline{H}_{Atom} + \mu_B \left(\underline{l}_z \pm \frac{\hbar}{2} g \right) \right] \Psi_\pm = E_\pm\, \Psi_\pm$$

also 2 entkoppelte Gleichungen für $\Psi_\pm$.

wissen: $\underline{H}_{Atom}\, \varphi_{nlm}(\vec{r}) = \varepsilon_n\, \varphi_{nlm}(\vec{r})$

$\underline{l}_z\, \varphi_{nlm}(\vec{r}) = \hbar m_l\, \varphi_{nlm}(\vec{r})$

Ansatz: $\vec{\Psi} = \varphi_{nlm}\, \vec{\chi}_\pm$, ergibt:

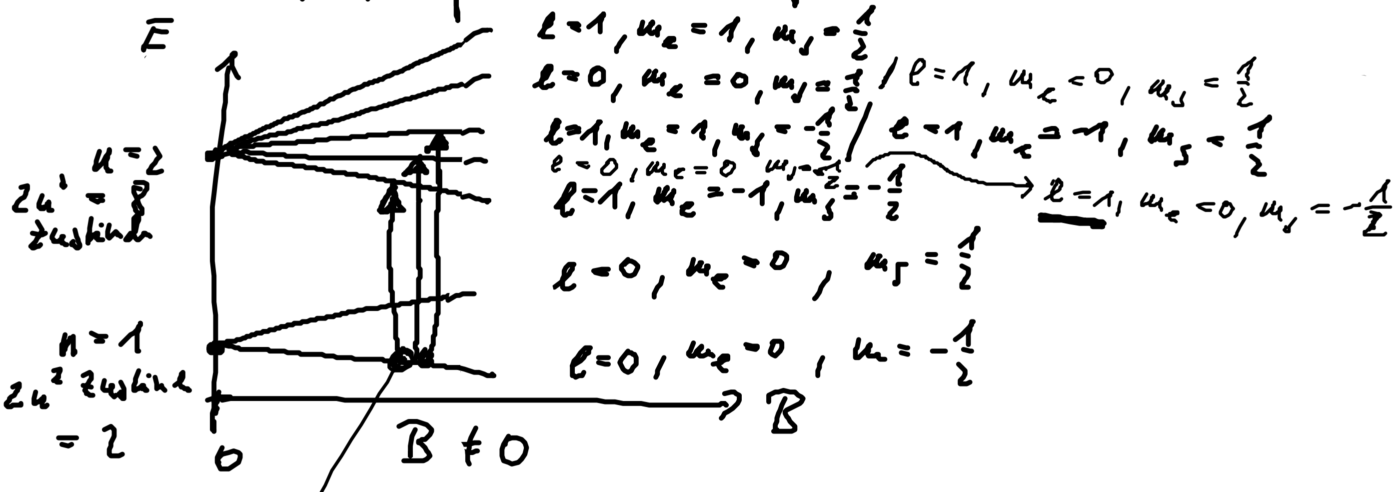
$$\underline{H}\,\varphi_{nlm} = \left[\underline{H}_{Atom} + \mu_B \left(\underline{l}_z \pm \frac{\hbar}{2} g \right) \right] \varphi_{nlm} = \left[\varepsilon_n + \mu_B \hbar \left(m_l \pm \frac{g}{2} \right) \right] \varphi_{nlm}$$

Spineinstellungen

$$\boxed{\Rightarrow\ E_\pm = \varepsilon_n + \mu_B \hbar \left(m_l \pm 1 \right)} \qquad (g = 2)$$

$m_s \cdot g$

Energie von H-Atom Elektron im Magnetfeld mit Spin, führt zu Aufhebung der Entartung bzgl. $\underline{m_l}$ / $\underline{\underline{m_s}}$



Elektron: Auswahlregel

$$\left.\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m_l &= 0, \pm 1 \\ \rightarrow \Delta m_s &= 0 \end{aligned}\right\} \text{Optische Übergänge!}$$

3 Linien im Spektrum mit Magnetfeld

(vorher eine Linie)

Klassifizierung v. Magnetfeld

- Schwaches Magnetfeld: → normaler Zeeman effekt (nur Bahn)
  → anomaler -"- (Bahn + Spin)

<u>vergessen bisher</u>: Spin-Bahn Kopplung >> Magnetfeldeffekt von außen

(nächste Woche)

- <u>bisher</u> starkes Magnetfeld >> Spin Bahn Kopplung.

Paschen - Back Effekt

VII Diracformulierung der QM

Paul Dirac (1926) abstrakte Formulierung
betont den Vektorcharakter im Vgl.
Darstellg. d. Vektoren der QM

→ Zustandsdynamik $|\psi(t)\rangle$ im Hilbertraum
(spezieller Vektorraum der QM)

Kompaktheit der Schreibweise v. Dirac hat viele Vorteile

[1928: Diracgleichung : relativistische Wellengleichung
f. 4dimensionale Wellenfunktion
(Spinor)]

a) Wellenfunktionen

$\psi(\vec{r}, t)$, $\psi(\vec{p}, t)$, $\sum_n c_n(t)\,\varphi_n(\vec{r})$ → verschiedene Darstellg. desselben Sachverhalts

Dirac: Beschreibg. unabhängig v. Darstellung

$|\psi(t)\rangle \hat{=}$ Zustandsvektor unabhängig v. Darstellg.

Analogie Vektorraum

$$\underset{\text{Vektorsymbol}}{\vec{v}(t)} \Longrightarrow \underset{\text{Darstellg.}}{(v_1, v_2, v_3)}$$

$$\underbrace{\text{Vektor } |\psi(t)\rangle}_{\text{Raum in der diese Objekte leben } \hat{=} \text{ Hilbertraum}} \Longrightarrow \psi(\vec{r}, t),\ \psi(\vec{p}, t),\ \{c_n\}$$

Analogie Dualraum

$$\underset{\text{Skalarprodukt}}{(\vec{v}_1, \vec{v}_2)} \quad \text{in Darstellg.: } (v_1, v_2, v_3) \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle}_{\text{Def. d. Skalarprodukts}} \quad \text{in Darstellg.: } \int d^3r\, \psi_1^*(\vec{r}, t)\, \psi_2(\vec{r}, t)$$

duales Vektor

"$*$" $\hat{=}$ duale Vektor

Basis

Entwicklg. $\underbrace{\vec{v} = \sum_n v_n \vec{e}_n}_{\text{abstrakte Schreibweise}}$ in Darstellg.: $\{\vec{e}_n\} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$ in Darstellg.: $\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$

$|n\rangle$: Element einer Basis im Hilbertraum

Beispiele Basissysteme im Hilbertraum:

Ort: $\underline{\vec{r}}\, |\vec{r}\rangle = \vec{r}\, |\vec{r}\rangle$

Impuls: $\underline{\vec{p}}\, |\vec{p}\rangle = \vec{p}\, |\vec{p}\rangle$

$|\vec{r}\rangle$, $|\vec{p}\rangle$ sind vollständige Systeme

$\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}$: abstrakte Operatoren

$\vec{r}, \vec{p}$: Zahlen $\vec{r}, \vec{p} \in R^3$

$|\vec{p}\rangle$: nummeriert mit Quantenzahlen $\vec{r}, \vec{p}$

b) Vollständigkeitsrelation

Vektorraum: $\vec{v} = \sum_n (\vec{e}_n, \vec{v})\, \vec{e}_n = \sum_n \vec{e}^{\,T} \cdot \vec{v}\, \vec{e}_n = \sum_n \underbrace{\left(\vec{e}_n \vec{e}_n^{\,T}\right)}_{\underline{1}\text{ Operator}} \cdot \vec{v}$

Hilbertraum: $|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle n|\psi(t)\rangle\, |n\rangle$

$$= \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\underline{1}\ \text{Operator}} \Psi(t)\rangle$$

$\underline{1}$ im Hilbertraum: $\underline{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ diskret

$\not{f}$ $\underline{1} = \int dn\, |n\rangle\langle n|$ kontinuierlich

$$\underbrace{\hphantom{\underline{1} = \int dn\, |n\rangle\langle n|}}_{\text{Vollständigkeitsrelation in Diracschreibweise}}$$

c) Darstellung d. Zustandsvektors

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \langle n|\Psi(t)\rangle\, |n\rangle$$

so ist $\langle n|\Psi(t)\rangle$ der Koeffizient f. $|n\rangle$

nach Dirac: $\langle \vec{r}|\Psi(t)\rangle \equiv \Psi(\vec{r},t)$

$\langle \vec{p}|\Psi(t)\rangle \equiv \Psi(\vec{p},t)$

d) Skalarprodukt

$$\langle \psi(t) | \varphi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \underbrace{\int d^3r\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|}_{1}\, |\varphi(t)\rangle =$$

Vollständigkeit

$$= \int d^3r\, \psi^*(\vec{r},t)\, \varphi(\vec{r},t)$$

konsistent mit Rechng. in Schrödinger wellenfunktion

e) Ableitg. einer dynamischen Gleichung f. $|\psi(t)\rangle$

$$H\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r\right) \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = i\hbar\, \partial_t \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$$

Ortsdarstellg. d. Operators f. Schrödingergl.

$\psi(\vec{r},t)$

Suche darstellungsfreie Gleichg. f. $|\psi(t)\rangle$

linke Seite d. Schrödingergl.: Identität: $\int d^3p\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|$

$$\int d^3\vec{p}\;\; H\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r\right) \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

bekannt: $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ Eigenfunktion von $\vec{p}$

in Ortsdarstellung.

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \, e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}$$

ist bekannt aus VL

Wellenpaket dynamik

$$\left(\text{denn } \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \right)$$

$$= \int d^3p \; H(\vec{r}, \vec{p}) \; \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

Zahl Zahl

$$= \int d^3p \; \langle \vec{r} | \; H(\vec{r}, \vec{p}) \; | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$$

$$= \underline{\int d^3p} \; \langle \vec{r} | \; H(\vec{r}, \hat{\vec{p}}) \; \underline{| \vec{p} \rangle \langle \vec{p} |} \; \psi(t) \rangle$$

wegen $\quad \vec{p} \, | \vec{p} \rangle = \hat{\vec{p}} \, | p \rangle$

$$= \langle \vec{r} \, | \, H(\vec{r}, \hat{\vec{p}} \, | \, \psi(t) \rangle$$

$$\boxed{H\left(\vec{r}, \vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\partial}_r\right) \langle r | \Psi(t) \rangle =}$$

in Ortsdarstellung

$$\langle \vec{r} \,|\, H(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) \,|\, \Psi(t) \rangle$$

abstrakte Operatoren

damit gilt für $|\Psi(t)\rangle$

$$\boxed{i\hbar\, \partial_t\, |\Psi(t)\rangle = \underline{H}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}})\, |\Psi(t)\rangle}$$

Dynamik d. Zustandsvektors im Hilbertraum unabhängig von einer Darstellung

zur Schrödingergleichung durch: $\langle \vec{r} |$ Multiplikation und vorletzte Formel anwenden

f) Observable

beobachtbare Größe wird Observable im Hilbertraum zugeordnet:

(i) Observable sind lineare Operatoren mit:

- $\underline{L} = \underline{L}^{+}$ selbstadjungiert

z.B. $\langle \psi_1 | L | \psi_2 \rangle =$

$\langle L^{+} \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle L \psi_1 | \psi_2 \rangle$

- $\underline{L} | \ell \rangle = \ell | \ell \rangle$

mit $\langle \ell | \ell' \rangle = \delta_{\ell\ell'}$ orthogonal

$$\underline{1} = \sum_{\ell} | \ell \rangle \langle \ell | \quad \text{vollständig}$$

(ii) Spektraldarstellung v. Observablen

$$\underline{L} = \sum_{\substack{\ell \\ \ell'}} | \ell \rangle \langle \ell | \underbrace{\underline{L} \, | \ell' \rangle}_{\ell'} \langle \ell' |$$

$$= \sum_{\ell\ell'} | \ell \rangle \underbrace{\langle \ell | \ell' \rangle}_{\delta_{\ell\ell'}} \langle \ell' | \, \ell'$$

$$\underline{L} = \sum_{\ell} \ell \underbrace{| \ell \rangle \langle \ell |}_{\text{Operator}}$$

Spektraldarstellg. eines Operators

(iii) Einführg. v. Observablen

- klassische Größe Impuls $\vec{p} \longrightarrow \underline{\vec{p}}$
- experimentelle Befunde: Spin
- philosophische Gründe z.B. Symmetrien

(iv) Operator in Ortsdarstellung

$$|\Psi\rangle = \underline{A}\,|\Psi\rangle \qquad \Big|\ \langle\vec{r}|$$

↑ denn in Ortsdarstellung ?

$$\langle\vec{r}|\Psi\rangle = \langle\vec{r}|\underline{A}|\Psi\rangle$$

$$= \sum_{r'} \underbrace{\langle\vec{r}|\underline{A}|\vec{r}\,'\rangle}_{\text{Matrix wird als Operator in Ortsdarstellg. bezeichnet}} \langle\vec{r}\,'|\Psi\rangle$$

sinnvoll?

$\underline{A} = \underline{\vec{r}}$, sollte f. Schrödinger-Fkt. $\langle\vec{r}|\Psi\rangle$ nur $\vec{r}\,\langle\vec{r}|\Psi\rangle$ liefern:

$$\langle\vec{r}|\Psi\rangle = \sum_{r'} \underbrace{\langle\vec{r}|\underline{\vec{r}}|\vec{r}\,'\rangle}\langle\vec{r}\,'|\Psi\rangle$$

$\vec{r}' \, |\vec{r}'\rangle$

$$= \vec{r} \, \underbrace{\langle \vec{r} \,|\, \psi \rangle}_{\psi(\vec{r},t)} \quad \checkmark$$

ohne Beweis:

$$\underline{A} = \vec{\underline{p}} \qquad \langle r \,|\, \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \langle \vec{r} \,|\, \psi \rangle$$

g) Vertauschungsrelation

- Lösung v. Eigenwertproblem ist angegl. durch eine Def v. Vertauschungsrelationen (axiomatisch)

- aus $H_{klassisch}$ bzw $\mathcal{L}_{klass.}$ werden kanonisch konjugierte Paare gefunden $\xrightarrow[QT]{}$ werden zu Operatoren + vertauschen nicht

- Festlegg. axiomatisch:

<u>Bsp</u>: punktförmige Teilchen

$$[\underline{x}_i, \underline{p}_j] = i\hbar \, 1 \, \delta_{ij}$$

<u>abgeleitete Größe</u>. (ohne Beweis)

$$[x_i, f(\vec{r}, \vec{p})] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_i}$$

$$[p_i, f(\vec{r}, \vec{p})] = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

Spin als 2. Bsp:

$$[S_i, S_{i+1}] = i\hbar S_{i+2}$$

Aus den axiomatisch definierten Kommutatorrelation kann man Eigenwertproblem lösen.

Ein Bsp. war harmonischer Oszillator

nur aus $[a, a^\dagger] = 1 \longrightarrow$ Zustände + Eigenwerte

wirklich nachlesen!

h) Zeitliches Verhalten d. Zustandsvektors

$$i\hbar |\dot{\Psi}\rangle = \underline{H} |\Psi\rangle \qquad |\Psi(t)\rangle = |\Psi\rangle$$

Ansatz: $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$

Zeitentwicklungsoperator

Anfangszustand

Einsetzen:

$$i\hbar\, \underline{\dot{U}}\, |\Psi(t_0)\rangle = \underline{H}\, \underline{U}\, |\Psi(t_0)\rangle$$

Gleichung f. Zeitentwicklungsoperator $U(t,t_0)$

$$i\hbar\, \underline{\dot{U}}(t,t_0) = \underline{H}\, \underline{U}(t,t_0) \xrightarrow{\text{naiv}} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{H}(t-t_0)}$$

→ Lösung durch Iteration! (über beide Seiten integrieren)

$$\underline{U}(t,t_0) = \underbrace{\underline{U}(t_0,t_0)}_{\underline{1}} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \underline{H}(t')\, \underline{U}(t',t_0)$$

und dann durch Iteration lösen

0. Ordnung in $\underline{H}$: $U(t,t_0) = 1$

1. Ordnung in $\underline{H}$: $U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')$

2. Ordnung in $\underline{H}$: $U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')$

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt'\, H(t') \int_{t_0}^{t'} dt''\, H(t'')$$

usw.

aber wenn $\left[H(t'), H(t'') \right] \neq 0$

ein Fall wo man eine einfache Lsg. findet, wenn H keine <u>explizite Zeitabhängigkeit</u> hat

$$H(\underline{r}, \vec{p}, \cancel{t})$$

findet man durch aufsummieren der Reihe

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{H}(t-t_0)}$$