Feynman Quantenmechanik

Regeln zur Addition von Amplituden und Wahrscheinlichkeiten woie Regeln zur Berechnung der Amplitude von aufeinanderfolgenden Ereignissen:

Generelle Prinzipien (3-2):

1, Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses kann durch das Betragsquadrat einer Wahrscheinlichkeitsamplitude ausgedrückt werden:

$$\langle \text{ Teilchen kommt bei x an} \,|\, \text{Teilchen verläßt die Quelle s} \rangle$$

$$\langle\, x \,|\, s \,\rangle\,; \quad \langle\, x \,|\, s \,\rangle = \langle\, s \,|\, x \,\rangle^*$$

2, Wenn ein Teilchen einen gegebenen Endzustand auf zwei verschiedene Arten erreichen kann, und beim Erreichen des Endzustandes nicht gesagt werden kann auf welchem Weg das Ergebnis zustande kam, so müssen die Wahrscheinlichkeitsamplituden beider Möglichkeiten addiert und davon das Betragsquadrat berechnet werden um die Wahrscheinlichkeit zu berechnen.

$$\langle\, x \,|\, s \,\rangle = \langle\, x \,|\, s \,\rangle_1 + \langle\, x \,|\, s \,\rangle_2$$

3, Die Wahrscheinlichkeitsamplitude eines zusammengesetzten Ereignisses kann als Produkt der Amplituden der einzelereignisse geschrieben werden.

$$\langle\, x \,|\, s \,\rangle = \langle\, x \,|\, 1 \,\rangle \langle\, 1 \,|\, s \,\rangle$$

4, Wenn sich ein Teilchen mit gegebener Energie im Kräftefreien Raum vom Ort $\vec{r}_1$ nach $\vec{r}_2$ bewegt kann die WA wie folgt berechnet werden:

$$\langle\, \vec{r}_2 \,|\, \vec{r}_1 \,\rangle = \frac{\exp(i\vec{p}\vec{r}_{12}/\hbar)}{r_{12}}$$

5, Addiere niemals Amplituden für unterschiedliche Endzustände, sondern immer Wahrscheinlichkeiten!

Der Untergrund bei Streuexperimenten kommt so zustande, daß bei den Streuungen ohne Spinübertrag die Amplituden addiert werden, also interferieren und die Peaks liefern. Und bei den Streuungen mit Spinübertrag die Wahrscheinlichkeiten addiert werden und somit den breiten Untergrund ergeben (prinzipiell wäre es möglich den Streuort zu identifizieren!).(Fig. 3-6)

Identische Teilchen; ununterscheidbare Teilchen

Beim Austausch von jeweils zwei identischen Teilchen verhält sich die WA wie folgt:

$$\left.\begin{array}{lcl} a(x_1, x_2) & = & a(x_2, x_1) \\ a(x_1, x_2) & = & -\; a(x_2, x_1) \end{array}\right\} \text{Parität} \quad \begin{array}{r} 1 \\ -1 \end{array}$$

Bei Teilchen mit positiver Parität spricht man von *Bosonen* und bei Teilchen negativer Parität von *Fermionen*. Die physikalische Situation beim Austausch von zwei identischen Teilchen muß dieselbe sein, d.h. das Betragsquadrat der WA muß dasselbe sein:

$$a(x_2, x_1) = e^{i\delta} a(x_1, x_2)$$

Außerdem muß bei doppeltem Austausch die WA dieselbe wie beim Ausgangszustand sein, d.h.:

$$e^{2i\delta} = 1 \quad \Rightarrow \quad \delta = \{0, \pi\}$$

Zustände mit zwei Boseteilchen

Die Wahrscheinlichkeit, daß zwei Boseteilchen in dieselbe Richtung gestreut werden ist doppelt so groß wie die Wahrscheinlichkeit für zwei unterscheidbare Teilchen.

$$P_{n+1}(\text{Bose}) = (n+1) P_0(\text{Bose}) P_n(\text{Bose})$$

P_0 ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen in einem bestimmten Zustand ist. P_n ist die Wahrscheinlichkeit, daß dort bereits n Teilchen sitzen. Man könnte diesen Sachverhalt auch so ausdrücken:

$$P_n(\text{Bose}) = n! P_n(\text{different})$$

Zwei Teilchen a, b haben bestimmte Wahrscheinlichkeiten a_1, b_2 bei einer Streuung jeweils in Richtung 1 bzw. 2 zu fliegen. Die Wahrscheinlichkeit für das zusammengesetzte Ereignis ist:

$$p = |a_1|^2 |b_2|^2$$

Interessiert man sich nur für die Wahrscheinlichkeit, daß irgendein Teilchen im Detektor bei 1 und im Detektor bei 2 landet, so gilt:

$$p = |a_1|^2 |b_2|^2 + |a_2|^2 |b_1|^2$$

Sind die beiden Teilchen unterscheidbar und nähern sich 1 und 2 soweit an, daß sie identisch sind, so erhält man:

$$p_2 = 2|a|^2 |b|^2$$

Handelt es sich nun um ununterscheidbare Teilchen, so gilt:

$$p = |a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 \quad \Rightarrow \quad p_2 = 4|a|^2 |b|^2$$

Photonen emission – absorption

Da Photonen Bosonen sind sind obige überlegungen anwendbar:

$$\langle\, n+1 \,|\, n \,\rangle = \sqrt{n+1}a = \langle\, n \,|\, n+1 \,\rangle^*$$

Wobei a die WA für die Einzelemission bzw absoprtion ist. Obige gleichung bedeutet folgendes. Wenn in einem Zustand bereits n Photonen vorhanden sind dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß bei einer Photonenemission dieses Photon ebenfalls diesen Zustand besetzen wird $n+1$ mal so groß als wenn dort noch kein Photon wäre.

Sind in einem Zustand n Photonen, so ist die Wahrscheinlichkeit für eine Emission $p_e = (n+1)|a|^2$ und die Wahrscheinlichkeit für eine Absorption $p_a = n|a|^2$. Die Wahrscheinlichkeit für eine Emission kann man sich zusammengesetzt aus induzierter Emission $n|a|^2$ und spontaner Emission $|a|^2$ denken. Beide Wahrscheinlichkeiten, sowohl für die Emission als auch für die Absorption sind proportional zur Intensität des auf das Atom auftreffenden Lichts: $I \propto n$. Absorptions- Emissionskoeffizienten sind gleich und stehen in Relation zur Wahrscheinlichkeit einer spontanen Emission.

Schwarzkörperstrahlung im thermodynamischen Gleichgewicht.

Betrachtet man eine Menge von N gleichen Atomen, die alle entweder im Angeregten Zustand e oder im Grundzustand g sind, so gitl für ihr Zahlenverhältnis:

$$\frac{N_e}{N_g} = e^{-\Delta E/kT} = e^{-\hbar\omega/kT}$$

Sei nun $\bar{n}$ die mittlere Anzahl an Photonen in einem Bestimmten Zustand. Es gilt dann:
Absorptionsrate von Licht: $N_g \bar{n} |a|^2$ Emissionsrate: $N_e(\bar{n}+1)|a|^2$.
Im thermischen Gleichgewicht müssen Absorptions- und Emissionsrate gleich sein:

$$\frac{\bar{n}}{\bar{n}+1} = e^{-\hbar\omega/kT} \quad \Rightarrow \quad \bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}$$

Dies ist die mittlere Energie eines quantenmechanischen Oszillators. Durch die mathematische Äquivalenz des QM Oszillators und eines QM Zustands der Boseteilchen die nicht wechselwirken sind beide Modelle gültige Beschreibungen der Natur. Es kann nicht entschieden werden, welches Modell das zutreffendere ist.

Mit Oszillator ist ein Gewicht an einer Feder gemeint oder eine stehende Welle in einem Resonator. Deshalb kann man das EM-Feld als Boseteilchen beschreiben oder als quantisierte EM-Wellen.

Beide Fragen, wieviele Schwingungsmoden (ω_1, ω_2, ..., ω_n) gibt es im Hohlraum oder wieviele Zustände der Boseteilchen gibt es im k-Raum haben dieselbe Antwort:

$$\sum_{\vec{p}} \to (2s+1)\frac{V}{\hbar} \quad \text{(Kontinuumslimes)}$$

Pauliverbot: Fermionen

H^2 kann bestehen aber He^2 gibt es nicht. Die Kernkräfte sind spinabhängig und größer bei parallelem Spin. Bei antiparallelem Spin gibt es keine Bindung. Zusammen mit dem Pauliverbot folgt diese Beobachtung.

Stern - Gerlach: Drei Zustand System

Mit einem Stern - Gerlach Apparat kann man den z-Spin entlang einer ausgezeichneten Achse messen. In diesem Versuch werden schon einige der grundlegenden Eigenschaften der QM sichtbar:

1, Basiszustände:

$$\begin{array}{cl} \langle\, i \,|\, j \,\rangle = \delta_{ij} & \text{Orthogonalität, Normiertheit} \\ \sum_i |\, i \,\rangle \langle\, i \,| = 1 & \text{Vollständigkeit} \\ \langle\, \Phi \,|\, \chi \,\rangle = \langle\, \chi \,|\, \Phi \,\rangle^* & \text{Wahrscheinlichkeitserhaltung} \end{array}$$

Die letzte Zeile folgt so:

$$|\,\langle\, +T \,|\, +S \,\rangle\,|^2 + |\,\langle\, 0T \,|\, +S \,\rangle\,|^2 + |\,\langle\, -T \,|\, +S \,\rangle\,|^2 = 1$$

Da ein Teilchen das ursprünglich im Zustand $|\, +S \,\rangle$ war auch in irgendeinem Zustand bezüglich des SG-Apparates T sein muß. Dieselbe Gleichung nochmals:

$$\langle\, +T \,|\, +S \,\rangle \langle\, +T \,|\, +S \,\rangle^* + \langle\, 0T \,|\, +S \,\rangle \langle\, 0T \,|\, +S \,\rangle^* + \langle\, -T \,|\, +S \,\rangle \langle\, -T \,|\, +S \,\rangle^* = 1$$

Außderm gilt nach der Vollständigkeit:

$$\langle\, +S \,|\, +T \,\rangle \langle\, +T \,|\, +S \,\rangle + \langle\, +S \,|\, 0T \,\rangle \langle\, 0T \,|\, +S \,\rangle + \langle\, +S \,|\, -T \,\rangle \langle\, -T \,|\, +S \,\rangle = 1$$

Diese beiden Gleichungen können nur erfüllt sein, wenn

$$\langle\, \Phi \,|\, \chi \,\rangle = \langle\, \chi \,|\, \Phi \,\rangle^*$$

für alle $|\, \Phi \,\rangle, |\, \chi \,\rangle$.

Messungen können als Matrizen dargestellt werden

$$\langle\, \chi \,|\, A \,|\, \Phi \,\rangle = \sum \langle\, \chi \,|\, j \,\rangle \langle\, j \,|\, A \,|\, i \,\rangle \langle\, i \,|\, \Phi \,\rangle$$

Das Heißt, wenn man in einer Basisdarstellung weiß, was mit den Basiszuständen in einem Apparat A passiert, weiß man das für alle Zustände.

Aufeinanderfolgende Messungen können als Produkt von Matrizen verstanden werden:

$$\{C\} = \{A\} \cdot \{B\} \quad \Rightarrow \quad C_{ij} = B_{ik}Akj$$

Basiswechsel

Ändert man die Räumliche Orientierung unserers SG-Apparates, so erhalten wir andere Basiszustände, da sich die ausgezeichnete Achse verändert hat.

$$\{x, y, z|S\} \to \{x', y', z'|T\}$$

mit

$$z' = z\cos\alpha + x\sin\alpha \quad x' = x\cos\alpha - z\sin\alpha \quad y' = y$$

Tist um y-Achse um den Winkel α im mathematisch positiven Drehsinn gegenüber S verdreht (d.h. Linksdrehung des KS).

$$\langle\, iT \,|\, jS \,\rangle = R_y(\alpha)_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\alpha) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \frac{1}{2}(1-\cos\alpha) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \cos\alpha & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha \\ \frac{1}{2}(1-\cos\alpha) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \frac{1}{2}(1+\cos\alpha) \end{pmatrix}$$

Wie später noch genauer gezeigt wird gilt für ein (2l+1) Zustandsystem:

$$Y_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\langle\, 0T \,|\, mS \,\rangle\, e^{im\Phi}$$

und

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\alpha) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\langle\, 0T \,|\, 0S \,\rangle$$

Betrachtet man eine Rotation um die ausgezeichnete z-Achse, so erhält man:

$$\langle\, kT \,|\, lS \,\rangle = R_z(\Phi)_{kl} = \delta_{kl} e^{ik\Phi}$$

Da aus diesen beiden Rotationsmatrizen alle anderen Rotationen zusammengesetzt werden können ist das Problem des Basiswechsels gelöst. Eine Ableitung aus geometrischen Überlegungen obiger Matrizen folgt weiter unten.

Für Spin 1 Teilchen gibt es eine Menge von Basiszuständen, die genauso transformiert werden wie 3-dim räumliche Vektoren:

$$C_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ - C_-) \quad C_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-) \quad C_z = C_0$$

Transformation eines 2-Zustand Systems

$$R_z(\Phi) = \begin{pmatrix} e^{i\Phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\Phi/2} \end{pmatrix} R_x(\Phi) = \begin{pmatrix} \cos\Phi/2 & i\sin\Phi/2 \\ i\sin\Phi/2 & \cos\Phi/2 \end{pmatrix} R_y(\Phi) = \begin{pmatrix} \cos\Phi/2 & \sin\Phi/2 \\ -\sin\Phi/2 & \cos\Phi/2 \end{pmatrix}$$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} e^{i(\beta+\gamma)/2} & i\sin\frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta-\gamma)/2} \\ i\sin\frac{\alpha}{2} e^{i(\beta-\gamma)/2} & \cos\frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

Warum gibt ein Atom Energie in Form von Licht ab?

Der Grund dafür ist, daß die Entropie des Systems damit erhöht wird wenn Photonen ins Strahlungsfeld abgegeben werden. Die Frage Strahlung oder Absorption geht in die Richtung der Entropieerhöhung.

Zustände die zerfallen sind keine stationären Zustände

Jeder zustand der zerfallen kann, kann kein stationärer Zustand des Systems sein und hat deshalb auch keine eindeutige Energie.

Ergänzung zu generelle Prinzipien

Für ein Teilchen mit fester Energie das sich in Ruhe befindet ist seine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsamplitude:

$$P(x,y,z) = ae^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} = ae^{-i\omega t}$$

Diese Aussage hängt eng mit der Unschärferelation zusammen: $\Delta p \Delta x \approx \hbar$. Wenn ein Zustand feste Energie hat und man nach Wahrscheinlichkeiten fragt, so sind diese generell zeitunabhängig. Deshabl heißen diese Zustände **stationäre Zustände**.

Gleichförmige Bewegung

Wendet man auf obiges Statement eine relativistische Transformation (Minkowskidiagramm (7-3)) an:

$$t = \frac{t' - \frac{x'v}{c^2}}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

so ergibt sich

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 t'/\sqrt{1-\beta^2} - E_0 v x'/c^2\sqrt{1-\beta^2}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E'_p t' - p' x')}$$

$$E'_p = \frac{E_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad p' = \frac{E'_p v'}{c^2}$$

$$x_\mu = (t, x, y, z) \quad p_\mu = (E, p_x, p_y, p_z) \quad p_\mu x_\mu = Et - \vec{p}\vec{x}$$

Dies ist in der Minkowskimetrik eine skalare Invariante. Die Wellenfunktion eines freien Teilchens

$$\phi(t, x, y, z) = a e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{x})}$$

ist relativistisch richtig. Es gilt $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ und $\lambda = 2\pi/k$ Die Gruppengeschwindigkeit von Wellenpaketen ist gegeben durch

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}E_p}{\mathrm{d}p} = c^2 \frac{p}{E_p} = \frac{p}{M} \quad E_p = \sqrt{(pc)^2 + E_0^2}$$

Bewegung eines Teilchens in einem Potentialfeld

Handelt es sich nun um ein Teilchen in einem Potentialfeld, so ersetzt man E_p durch dessen Gesamtenergie $E = \hbar\omega = E_p + V$.

Kräfte, der klassische Grenzfall

Nehmen wir nun an, daß sich ein Teilchen in Richtung positive x-Achse bewegt und durch einen Bereich mit entlang der y-Achse variirendem Potential fliegt. Klassisch würde man sagen daß auf das Teilchen die Kraft durch

$$F = -\frac{\partial V}{\partial y}$$

gegeben ist. Wenn die Kraft nur in einem kleinen Bereich der Breite w vorhanden ist wird die Kraft nur während der Zeit $\tau = w/v$ wirken. Das Teilchen wird einen y-Impuls von

$$p_y = F\frac{w}{v}$$

erhalten und der Ablenkwinkel $\delta\theta$ ist:

$$\delta\theta = \frac{p_y}{p} = \frac{Fw}{pv} = -\frac{w}{pv}\frac{\partial V}{\partial y}.$$

Wenn man nun andererseits überprüft wie die Welle der Wahrscheinlichkeitsamplitude auf dasselbe Potential reagiert erhält man folgendes. Wir können sagen, daß in jedem kleinen Bereich die Amplitude wie

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}[(W + \frac{p^2}{2M} + V)t - \vec{p}\vec{x}])$$

läuft (W ist die interne Energie des Teilchens). In jedem kleinen Bereich ist die Wellenlänge $\lambda = h/p$. Wobei p über

$$W + \frac{p^2}{2M} + V = const$$

mit V in Verbindung steht (Energieerhaltung). Folgende Bezeichnungen beziehen sich auf Fig. 7-8 Seite 7-9. Um die Winkelablenkung zu finden betrachtet man die Knotenlinien im Abstand D voneinander. Zwischen den beiden Pfaden a und b in Fig. 7-8 ist eine Potentialdifferenz von

$$\Delta V = \frac{\partial V}{\partial y} D$$

so daß zwischen den beiden Spuren ein Impulsunterschied besteht:

$$\Delta\left(\frac{p^2}{2M}\right) = \frac{p}{M}\Delta p = -\Delta V.$$

Die Wellenzahl $k = p/\hbar$ ist deshalb unterschiedlich auf beiden Spuren was bedeutet, daß sich die Phase mit unterschiedlicher Geschwindigkeit verändert. Der Unterschied in der Phasengeschwindigkeit ist $\Delta k = \Delta p/\hbar$, so daß der Tatsächliche Phasenunterschied in der Entfernung w gegeben ist durch:

$$\Delta\phi = \Delta k \cdot w = \frac{\Delta p}{\hbar} \cdot w = -\frac{M}{p\hbar}\Delta V \cdot w.$$

Das ist die Phasendifferenz die die Welle auf Pfad b der Welle auf Pfad a voraus ist wenn die Welle den schmalen Streifen der Breite w verläßt. Aber außerhalb des Streifens bedeutet ein Phasenunterschied, daß die Knotenlinie um

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi}\Delta\phi = \frac{\hbar}{p}\Delta\phi$$

oder

$$\Delta x = -\frac{M}{p^2}\Delta V \cdot w.$$

Dieser Wegunterschied entspricht einem Winkelunterschied $\delta\theta = \Delta x/D$. Also haben wir

$$D\delta\theta = -\frac{M}{p^2}\Delta V \cdot w \quad \Rightarrow \quad \delta\theta = -\frac{\partial V}{\partial y}\frac{w}{pv}$$

Also das selbe Ergebnis wie auf klassischem Weg.

Myonendisintegration

$$\mu \to e + \nu + \bar{\nu}$$

Das Elektron wird bevorzugt in die entgegengesetzte Richtung des Spins des Myons emittiert (7-11). Der Spin in der x-y-Ebene läuft mit einer Frequenz von

$$\omega_p = \frac{2\mu B}{\hbar}$$

Dieses Ergebnis erhält man folgendermaßen. Geht man von einem präparierten Myon aus, daß im Zustand $|+x\rangle$ ist und läßt man es durch ein konstantes Magnetfeld, das in $+z$ Richtung ausgerichtet ist, fliegen, so sind die Anfangswahrscheinlichkeiten

$$\begin{aligned} \langle +z \,|\, +x \rangle &= C_+ &= 1/\sqrt{2} \\ \langle +z \,|\, -x \rangle &= C_- &= 1/\sqrt{2} \end{aligned}$$

durch die Transformationsmatrix $R_y(-90°)$ gegeben. Da der Bereich des Magnetfeldes einem konstanten Potential von $V = \pm\mu B$ $(U = -\vec{\mu}\vec{B})$ entspricht ergeben sich WA-Wellen der Form

$$\begin{aligned} C_+(t) &= C_+(0)e^{-(i/\hbar)\mu B t} \\ C_-(t) &= C_-(0)e^{+(i/\hbar)\mu B t} \end{aligned}$$

Wenn wir nun $C_+(t), C_-(t)$ kennen haben wir alles was es über den Zustand zu wissen gibt. Wenn wir nun wissen wollen mit welcher Wahrscheinlichkeit der Spin zum Zeitpunkt t in $+x$ Richtung weist errechnet sich das so

$$A_+(t) = \langle +x \,|\, \psi(t) \rangle = \langle +x \,|\, +z \rangle \langle +z \,|\, \psi(t) \rangle + \langle +x \,|\, -z \rangle \langle -z \,|\, \psi(t) \rangle$$

oder

$$A_+(t) = \langle +x \,|\, +z \rangle C_+(t) + \langle +x \,|\, -z \rangle C_-(t)$$

Benutzen wir wiederum die Rotationsmatirx $R_y(90°)$ so erhalten wir

$$A_+(t) = \frac{1}{2}e^{(i/\hbar)\mu Bt} + \frac{1}{2}e^{-(i/\hbar)\mu Bt} = \cos\frac{\mu B}{\hbar}t$$

Die Wahrscheinlichkeit P_+, daß das Myon im Zustand $|+x\rangle$ zur Zeit t gefunden wird ist $(A_+)^2$ oder

$$P_+ = \cos^2\frac{\mu B}{\hbar}t$$

Die "klassische" Umlauffrequenz in der x-y-Ebene hat also die Frequenz

$$\omega_p = \frac{2\mu B}{\hbar}$$

Was sind die Basiszustände der Welt?

Zur Beschreibung der Welt reichen die Zustände die angeregt werden können aus. Ob aber das Elektron z.B. angeregte Zustände hat (also eine innere Mechanik) weiß niemand. Diese Inneren Zustände wären von Bedeutung um ein genaues Bild der inneren Mechanik der Materie zu erhalten.

Zeitentwicklung

Sei nun $t_1 < t_2$. Der Operator $\hat{U}$ drückt die Zeitentwicklung aus. Stellt man sich z.B. die Frage welcher Anteil der WA des Zustandes Φ nach der Zeit Δt in den Zustand χ übergegangen ist, so schreibt man

$$\langle\chi\,|\,U(t+\Delta t, t)\,|\,\Phi\rangle$$

Für $t_1 \to -\infty$ und $t_2 \to +\infty$ Spricht man von der S-Matrix

$$S := U(+\infty, -\infty)$$

Es gilt

$$U_{ij} = \delta_{ij} + K_{ij}\Delta t \quad \text{für } \Delta t \to 0 \quad U_{ij} \to \delta_{ij}$$

Außerdem stellt man an U_{ij} die Forderung, daß die Matrix stetig differenzierbar sein soll, da auch für kleine Zeitintervalle Lösungen existieren (Zeitnullpunkt kann verschoben werden).

$$U_{ij} = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar}H_ij(t)\Delta t$$

$$\Rightarrow C_i(t+\Delta t) = \sum_j \left[\delta_{ij} - \frac{i}{\hbar}H_ij(t)\Delta t\right]C_j(t)$$

$$\Rightarrow i\hbar C_i(t) = \sum_j H_{ij}C_j(t)$$

In Operatorschreibweise lautet diese Gleichung

$$i\hbar\,|\,\psi\,\rangle = H\,|\,\psi\,\rangle$$

Ich nehme hier grundsätzlich eine Menge von Basiszuständen die zeitunabhängig sind. Es gibt auch noch die Möglichkeit die Zeitabhängigkeit auf die Basiszustände abzuwälzen, was man Heisenbergbild nennt und eine Mischform beider Möglichkeiten nennt man Diracbild.

Die Hamilton-Matrix

Sie muß nur hermitesch sein, falls keine Teilchen erzeugt oder vernichtet werden. Dies folgt aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung, daß das Teilchen immer in irgendeinem Zustand sein muß. Wir haben schon bei freien Teilchen gesehen, daß sich ihre WA wie

$$\propto e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

verhält. Dies ist die Lösung der Gleichung

$$i\hbar C = EC.$$

Hieran kann man schon erkennen, daß die Werte die in der Hamiltonmatrix stehen die Einheiten von Energien haben. Hat man ein Mehrzustandsystem, so stehen auf der Diagonalen die Energien, die ein Teilchen hätte, wenn es sich nur in einem dieser Zustände befinden könnte also keine Wahrscheinlichkeit vorhanden wäre, daß das Teilchen den Zustand wechselt. Die anderen Plätze sind mit Energiewerten gefüllt die mit $-i/\hbar$ multipliziert der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit entsprechen, daß das Teilchen vom Zustand $|\, i\, \rangle$ in den Zustand $|\, j\, \rangle$ wechselt.

Betrachtet wir z.B. ein symmetrisches Zweizustandsystem. Es könnte sich z.B. um ein H_2^+ Ion handeln, wobei der erste Zustand bedeutet, daß sich das Elektron in der nähe des ersten H-Atoms aufhält und der zweite Zustand, daß sich das Elektorn in der Nähe des zweiten H-Atoms aufhält. Die Differentialgleichung für die zeitliche Entwicklung dieses Systems lautet dann

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C_1} \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$

Da die Hamiltonmatrix zeitunabhängig ist lautet die Lösung

$$\begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = a \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) \begin{pmatrix} C_1(0) \\ C_2(0) \end{pmatrix}$$

Das Restproblem ist es die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix H zu bestimmen.

$$\lambda_{1/2} = E_0 \pm A$$

Die Eigenwerte mit zugehörigen Eigenvektoren sind

$$\lambda_1 = E_0 + A: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \lambda_2 = E_0 - A: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die allgemeine Lösung für $C_1(t)$ lautet also

$$C_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left[C_1(0) \cos\left(\frac{At}{\hbar}\right) + C_2(0) \sin\left(\frac{At}{\hbar}\right) \right]$$

Die Eigenvektoren sind nur in ihrer Richtung festgelegt. Die Länge bestimmt man aus der Normierungsbedingung! Das legt die Koeffizienten $C_1(0), C_2(0)$ bis aug eine gemeinsame Phase $e^{i\delta}$ fest, welche aber keine physikalische Bedeutung hat.

Die Eigenfrequenz der Übergänge zwischen den beiden Zuständen ist

$$\omega = \frac{2A}{\hbar}.$$

Allgemeine Lösung:

$$i\hbar\, |\, \psi\, \rangle = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} |\, \psi\, \rangle$$

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12} H_{21}}$$

$$E_{II} \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12} H_{21}}$$

Dies sind die Energien der stationären Zustände, die sich aus den Basiszusätnden mit den Koeffizienten der normierten Eigenvektoren ergeben.

$$|\, I\, \rangle = a_1\, |\, 1\, \rangle + a_2\, |\, 2\, \rangle \qquad |\, Ii\, \rangle = a_1'\, |\, 1\, \rangle + a_2'\, |\, 2\, \rangle$$

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1 \quad |a_1'|^2 + |a_2'|^2 = 1$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}} = \frac{E_I - H_{22}}{H_{21}} \quad \frac{a_1'}{a_2'} = \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{11}}$$

$$\Rightarrow a_1 = \frac{H_{12}}{\sqrt{(E_I - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}}} \quad a_2 = \frac{E_I - H_{11}}{\sqrt{(E_I - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}}}$$

Wie oben schon erwähnt sind a_1, a_2 die normierten Koeffizienten des Eigenvektors zum Eigenwert E_X in der ursprünglichen Basis.

NH_3 – Maser (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation (9-8)

Übergänge in einem zeitabhängigen Feld.

$$\begin{array}{rcrcr} i\hbar\dot{C}_1 & = & (E_0 + \mu\mathcal{E})C_1 & - & AC_2 \\ i\hbar\dot{C}_2 & = & -AC_1 & + & (E_0 - \mu\mathcal{E})C_2 \end{array}$$

mit

$$\mathcal{E} = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) = \mathcal{E}_0(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

Die Lösung erhält man durch Variation der Konstanten (Gl. 9.44)! Für kleine Felder $\mathcal{E}_0$ wird die zeitliche Änderung langsam erfolgen, so daß man schnell variirende Terme vernachlässigen kann (sie heben sich im zeitlichen Mittel heraus).

Die Übergänge der Wahrscheinlichkeiten I↔II bei der Resonanzfrequenz $\omega = \omega_0 = 2A/\hbar$ sind harmonische Funktionen die mit der Frequenz $2\mu\mathcal{E}_0/\hbar$ variiren. Die Übergangsfrequenz hängt also linear von der Stärke des Feldes ab. Fals die Erregerfrequenz im Hohlraum nur leicht von der Resonanzfrequenz des Ammoniakmoleküls abweicht findet kein Übergang von Zustand I in den Zustand II statt! Dieser Effekt ist die Basis genauer Zeitmessung (9-14 Fig 9-7)!

$$P(I \to II) = \left[\frac{\mu\mathcal{E}_0 T}{\hbar}\right] \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]}$$

Absorption von Licht

Die obigen Gleichungen gelten nicht nur für Resonatoren sondern auch für die Absorption und emission von Licht. Schreibt man also obige Gleichungen um, so daß sie sich auf die Intensität des einfallenden Lichtes beziehen, so ergibt sich:

$$I = \varepsilon_0 c^2 \overline{\left|\vec{\mathcal{E}} \times \vec{B}\right|} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 c^2 \left(\vec{\mathcal{E}} \times \vec{B}\right)_{max} = 2\varepsilon_0 c^2 \mathcal{E}_0^2$$

$$P(I \to II) = 2\pi \left(\frac{\mu^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 c}\right) JT^2 \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]}$$

Weil das einfallende Licht meist nicht monochromatisch ist muß man über eine Intervall, das ω_0 enthält integrieren um die Übergangswahrscheinlichkeit zu erhalten:

$$P(I \to II) \approx 4\pi^2 \left(\frac{\mu^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 c}\right) J(\omega_0)T$$

Generell wird $\mu\mathcal{E}$(der Störtherm) der $\langle\, II \,|\, H \,|\, I \,\rangle$ entspricht oben durch dieses Matrixelement ersetzt

$$\mu_{mn} = \langle\, m \,|\, H \,|\, n \,\rangle = H_{mn}$$

μ_{mn} ist das elektrische Dipol-Matrixelement. $P(I \to II)$ entspricht dem Absorptionskoeffizienten $B_{n,m}$ der Einsteinschen Strahlungstheorie.

Zusammenfassung der Zweizustandsysteme

Die Ausgangsbasiszustände für ein Zweizustandsystem nennen wir $|\,1\,\rangle\,,|\,2\,\rangle$. Dann läßt sich jeder Zustand $|\,\psi\,\rangle$ schreiben als:

$$|\,\psi\,\rangle = |\,1\,\rangle\,C_1 + |\,2\,\rangle\,C_2$$

Die Amplituden C_i erfüllen die beiden Differentialgleichungen:

$$i\hbar\dot{C}_i = \sum_j H_{ij}C_j.$$

Wenn die Hamiltonmatrix zeitunabhängig ist sind die beiden stationären Zustände gegeben durch:

$$|\,\psi_I\,\rangle = |\,I\,\rangle\,e^{-(i/\hbar)E_I t} \quad \text{und} \quad |\,\psi_I I\,\rangle = |\,II\,\rangle\,e^{-(i/\hbar)E_{II} t}$$

und deren Energien gegeben sind durch:

$$E_I = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11}-H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}$$

$$E_{II}\frac{H_{11}+H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11}-H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}$$

Die neuen Zustandsvektoren $|\,I\,\rangle$ und $|\,II\,\rangle$ sind mit den Ausgangszuständen $|\,1\,\rangle$ und $|\,2\,\rangle$ verknüpft durch:

$$\begin{aligned} |\,I\,\rangle &= |\,1\,\rangle\,a_1 + |\,2\,\rangle\,a_2 \\ |\,II\,\rangle &= |\,1\,\rangle\,a_1' + |\,2\,\rangle\,a_2' \end{aligned}$$

Wobei die as komplexe Konstanten sind die die Gleichungen

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}},$$

$$|a_1'|^2 + |a_2'|^2 = 1$$

$$\frac{a_1'}{a_2'} = \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{11}},$$

erfüllen müssen. Wenn $H_{11} = H_{22}$ und $H_{12} = H_{21} = -A$ gilt, dann sind $E_I = E_0 + A$, $E_{II} = E_0 - A$, und die Zustände $|\,I\,\rangle$ und $|\,II\,\rangle$ sind:

$$|\,I\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\,1\,\rangle - |\,2\,\rangle\right], \quad |\,II\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\,1\,\rangle + |\,2\,\rangle\right]$$

Kräfte durch Teilchenaustausch

Kräfte können durch den Austausch von virtuellen Teilchen erklärt werden. Mit virtuellen Teilchen sind Teilchen gemeint, die bei der Überwindung einer Strecke “negative” Energie haben; es handelt sich also um tunnelnde Teilchen.

Als Beispiel nehmen wir das H_2^+-Molekül als Zweizustandsystem. Für große Entfernungen zwischen den beiden Protonen ist die elektrostatische Energie des Elektrons nahezu Null für den Großteil der Stecke zwischen beiden Protonen. Wenn das Elektron nun seinen “Sprung” macht bewegt sich das Elektron in diesem Bereich nahezu wie ein freies Teilchen, aber mit einer negativen Energie (nämlich der Bindungsenergie $-W_H$ mit der das Elektron im Grundzustand des H-Atoms sitzt). Die Amplitude für ein Teilchen mit fester Energie um von einem Ort zum anderen im Abstand r zu gelangen ist:

$$\frac{e^{(i/\hbar)pr}}{r}$$

wobei p der Impuls ist, der der Energie des Teilchens entspricht. D.H.

$$p = i\sqrt{2mW_H}.$$

Wir erwarten nun, daß sich die Amplitude A für das H_2^+-Ion wie

$$A \propto \frac{e^{-(\sqrt{2mW_H}/\hbar)r}}{r}$$

für Große Abstände r zwischen den beiden Protonen verhält. Die Energieverschiebung aufgrund der Elektronenbindung ist proportional zu A, so daß eine Kraft vorhanden ist, die die beiden Protonen zusammenzieht. Für große r ist diese Kraft proportional zur Ableitung von A bezüglich R.

Auf dieselbe Art und Weise können auch andere Kräfte erklärt werden wie z.B. die elektrostatische Anziehung bzw. Abstoßung von geladenen Körpern durch den Austausch von virtuellen Photonen.

Das Potential

$$\frac{e^{-\alpha R}}{R}$$

nennt man Yukawa Potential.

Hamiltonian eines Spin1/2 Teilchens im Magnetfeld

Falls das Magnetfeld nur eine z-Komponente hat wissen wir bereits, daß die beiden Basiszustände bereits stationäre Zustände sind.

$$H = \begin{pmatrix} -\mu B_z & 0 \\ 0 & \mu B_z \end{pmatrix}$$

Wenn nun aber das Feld nicht in die z-Richtung weist was ist dann die Hamiltonmatrix? Wir machen einige Annahmen über H_{ij}. Wir nehmen an, daß H_{ij} linear in $\vec{B}$ ist. Wenn wir H_{ij} für ein Magnetfeld B_x und ein H_{ij} für ein Magnetfeld B_z haben, dann addieren sich beide Hamiltonian einfach, wenn wir B_x und B_z überlagern.

Wenn wir nun ein konstantes Feld $\vec{B}$ haben, so könnte es in die z-Richtung weisen und die Energien der stationären Zustände wären gegeben durch $\pm\mu B_z$. Wenn wir nun unser Koordinatensystem beliebig gedreht annehmen, so ändert sich die Physik des Problems nicht! Unsere Beschreibung der stationären Zustände wird sich ändern aber ihre Energie bleibt $\pm\mu|\vec{B}|$, d.h.

$$E_I = -\mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$

und

$$E_{II} = +\mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$

Nun haben wir die Gleichungen für die Energien. Wir wollen eine Hamiltonmatrix, die linear in B_x, B_y, B_z ist und die uns diese Energien für die stationären Zustände liefert. Als erstes stellen wir fest, daß die Energieaufspaltung symmetrisch ist. Das bedeutet aber

$$H_{22} = -H_{11}.$$

Die allgemeine Lösung eines Zweizustandsystems sagt uns nun für die beiden Energien E_I und E_{II}:

$$\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2).$$

Wider für den Spezialfall, daß das Magnetfeld nur in z-Richtung weist erhalten wir

$$\mu^2 B_z^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2 B_z^2$$

was uns sagt (da H linear sein soll), daß das Matrixelement H_{12} unabhängig von B_z ist. Wenn wir folgende Gleichungen annehmen, die die Energiebedingung genügen:

$$H_{11} = -H_{22} = -\mu B_z \quad |H_{12}|^2 = \mu^2((B_x^2 + B_y^2)$$

so stellt sich heraus, daß dies die einzige Möglichkeit ist diese Energien zu erhalten! Da die Forderung der Linearität noch erfüllt werden muß folgt:

$$H_{12} = \mu(B_x \pm iB_y)e^{i\delta}$$

wobei die Wahl des Vorzeichens und der Phase Konvention ist:

$$H_{12} = -\mu(B_x - iB_y), \quad H_{21} = -\mu(B_x + iB_y).$$

Die vollständige H-Matrix lautet nun:

$$H = \begin{pmatrix} -\mu B_z & -\mu(B_x - iB_y) \\ -\mu(B_x + iB_y) & \mu B_z \end{pmatrix}$$

Da man diese Gleichung formal als Skalarprodukt eines Vektors aus Matrizen (den Pauli-Spinmatrizen) und dem Vektor $\vec{B}$ schreiben kann definiert man die Pauli-Spinmatrizen wie folgt:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Zusammen mit der 2×2 Einheitsmatrix bilden sie eine Basis für alle 2×2 Matrizen.

Es folgt nun ein Einschub über die Cayley-Klein-Parameter und deren Zusammenhang mit Rotationen im dreidimensionalen Raum.

2. Cayley-Klein Parameter

Obwohl die Cayley-Klein Parameter als generalisierte Koordinaten zur Darstellung von Drehungen nicht geeignet sind, sind sie doch sehr nützlich in nummerischen Verfahren. Die Idee hinter den Cayley-Klein Parametern ist es einen Homomorphismus zwischen den 3×3 reellen orthogonalen und den 2×2 unitären complexen Matrizen zu konstruieren.

$$Q = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \text{ mit } \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathcal{C}$$

und

$$Q^{\dagger} Q = 1$$

Aus der Unitaritätsbeziehungen kann man sofort ableiten, daß

$$\beta = -\gamma^* \quad \wedge \quad \delta = \alpha^*$$

$$Q = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}$$

gilt. Mit der weiteren Bedingung $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$ könnten die vier Parameter auf drei reduziert werden, was wir aber nicht tun wollon.

Wir definieren nun eine Matrix P wie folgt:

$$P = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} \text{ mit } x, y, z \in \mathcal{R}$$

, die wir physikalisch als Punkt (x, y, z) interpretieren wollen, und betrachten wir das Transformationsverhalten von P unter Q:

$$P' = QPQ^{-1} = QPQ^{\dagger}$$

Da P eine hermite'sche Matrix mit Spur Null ist, und diese Eigenschaften unter Ähnlichkeitstransformationen invariant sind muß P' wieder von der Form

$$P = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix} \text{ mit } x, y, z \in \mathcal{R}$$

sein. Der Wert der Determinante ist ebenfalls invariant unter Ähnlichkeitstransformationen, so daß man schreiben kann:

$$\det P = -(x^2 + y^2 + z^2) = -({x'}^2 + {y'}^2 + {z'}^2) = detP'$$

was die Orthogonalitätsbedingung darstellt. Aus diesen Überlegungen folt, daß es zu jeder unitären Matrix Q in einem zweidimensionalen complexen Vektorraum eine zugeordnete reelle orthogonale Matrix D im $\mathcal{R}^3$ gibt.

Bezeichnen wir diese zuordnung mit h, so gilt:

$$D = h(Q)$$

Es kann gezeigt werden, daß gilt:

$$h(Q_1 \circ Q_2) = h(Q_1) \circ h(Q_2) = D_1 \circ D_2$$

Also ist h ein homomorphismus, der die 2×2 unitären complexen Matrizen auf die 3×3 orthogonalen reellen Matrizen abbildet.

Vergleicht man nun die Transformation eines Vektors p im R^3 und die Transformation der Matrix P, so ergibt sich durch vergleich der Koeffizienten:

$$D = \begin{pmatrix} 1/2(\alpha^2 - \gamma^2 + \delta^2 - \beta^2) & i/2(\gamma^2 - \alpha^2 + \delta^2 - \beta^2) & \gamma\delta - \alpha\beta \\ i/2(\alpha^2 + \gamma^2 - \beta^2 - \delta^2) & 1/2(\alpha^2 + \gamma^2 + \beta^2 + \delta^2) & -i(\alpha\beta + \gamma\delta) \\ \beta\delta - \alpha\gamma & i(\alpha\gamma + \beta\delta) & \alpha\delta + \beta\gamma \end{pmatrix}$$

ersetzt man weiterhin:

$$\alpha = e_0 + ie_3$$
$$\beta = e_2 + ie_1$$

so schreibt sich die Zusatzbedingung, die es ermöglicht die vier reelle Werten auf drei, also auf veralgemeinerte Koordinaten, zu reduzieren, so:

$$e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1$$

Mit ein wenig Algebra ergibt sich:

$$D = \begin{pmatrix} e_0^2 + e_1^2 - e_2^2 - e_3^2 & 2(e_1 e_2 + e_0 e_3) & 2(e_1 e_3 - e_0 e_2) \\ 2(e_1 e_2 - e_0 e_3) & e_0^2 - e_1^2 + e_2^2 - e_3^2 & 2(e_2 e_3 + e_0 e_1) \\ 2(e_1 e_3 + e_0 e_2) & 2(e_2 e_3 - e_0 e_1) & e_0^2 - e_1^2 - e_2^2 + e_3^2 \end{pmatrix}$$

Warum diese Schreibweise sinnvoll ist wird sich später zeigen.

Um nun von den Eulerwinkeln auf die Cayley-Klein Parameter zu schließen wendet man die Transformationsformel im $\mathcal{R}^3$ um die z-Achse auf einen Vektor $p = (x, y, z)$ an und durch koeffizientenvergleich schließt man auf die Cayley-Klein Parameter. Es ergibt sich:

$$Q = \begin{pmatrix} e^{i(\psi+\phi)/2}\cos\theta/2 & ie^{i(\psi-\phi)/2}\sin\theta/2 \\ ie^{-i(\psi-\phi)/2}\sin\theta/2 & e^{-i(\psi+\phi)/2}\cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

$$e_0 = \cos\frac{\phi+\psi}{2}\cos\frac{\theta}{2} \quad e_2 = \sin\frac{\phi-\psi}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$
$$e_1 = \cos\frac{\phi-\psi}{2}\sin\frac{\theta}{2} \quad e_3 = \sin\frac{\phi+\psi}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

Eine weitere Darstellungsmöglichkeit ergibt sich wenn man die Pauli-Spin-Matrizen und die 1-Matrix als Basis für die Drehmatrizen Q und Punktmatrizen P verwendet.

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$P = \vec{r}\cdot\vec{\sigma}$$
$$Q = e_0 1 + i(e_1\sigma_1 + e_2\sigma_2 + e_3\sigma_3)$$
$$Q_{\alpha_i} = 1\cos\frac{\alpha_i}{2} + i\sigma_i\sin\frac{\alpha_i}{2} = e^{i\sigma_i\cdot(\alpha_i/2)}$$

wobei α_1 der Winkel bei der Linksdrehung des Koordinatensystems um die x-Achse, α_2 um die y-Achse und α_3 um die z-Achse ist.

3. Drehungen als Operation angewandt auf Vektoren.

Der Anschauung am gelegensten kommt eine Darstellung der Drehung, bei der man die Drehachse durch einen Einheitsrichtungsvektor $\vec{n}$ und den Drehwinkel um diese Achse Φ angibt. Hier ist $\vec{n}$ so gewählt, daß er in die entgegengesetzte Richtung von $\vec{\omega}$ zeigt. Dies ist notwedig, damit die Koordinatensystemrotation eine linksdrehung sit, auch wenn die Drehung als Operator angewandt auf eine Vektor eine Rechtsdrehung ist.

$$\vec{n} = -\vec{\omega}/|\vec{\omega}|$$

$$r' = \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{r}) + [\vec{r} - \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{r})]\cos\Phi + (\vec{r}\times\vec{n})\sin\Phi$$

mit den Definitionen:

$$e_0 = \cos\Phi/2$$
$$\vec{e} = \vec{n}\cdot\sin\Phi/2$$

schreibt sich die Transformation:

$$\vec{r'} = \vec{r}(e_0^2 - e_1^2 - e_2^2 - e_3^2) + 2\vec{e}(\vec{e}\cdot\vec{r}) + 2(\vec{r}\times\vec{e})e_0$$

In Matrixschreibweise erhält man dieselbe Matrix wie im Abschnitt zu den Cayley-Klein Parametern, was den Cayley-Klein Parametern eine anschauliche Bedeutung zukommen läßt.

$$D = \begin{pmatrix} e_0^2+e_1^2-e_2^2-e_3^2 & 2(e_1e_2+e_0e_3) & 2(e_1e_3-e_0e_2) \\ 2(e_1e_2-e_0e_3) & e_0^2-e_1^2+e_2^2-e_3^2 & 2(e_2e_3+e_0e_1) \\ 2(e_1e_3+e_0e_2) & 2(e_2e_3-e_0e_1) & e_0^2-e_1^2-e_2^2+e_3^2 \end{pmatrix}$$

oder in Koordinaten:

$$d_{ij} = \delta_{ij}(e_0^2 - e_ke_k) + 2e_ie_j + 2\epsilon_{ijk}e_0e_k$$

Im Vergleich mit den Ergebnissen der vorherigen Abschnitte ergibt sich:

$$Q = 1 \cos\frac{\Phi}{2} + i\vec{n}\vec{\sigma}\sin\frac{\Phi}{2}$$

$$Q = e^{i\vec{n}\vec{\sigma}\cdot(\Phi/2)}$$

$$\cos\frac{\Phi}{2} = \cos\frac{\phi+\psi}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

Einschub – Anmerkung

In der Quantenmechanik gibt es neue Erhaltungsgrößen wie die Parität eines Zustandes oder auch die *Strangeness*. Diese Größe bleibt nicht bei Vorgängen erhalten, die mit der schwachen Wechselwirkung zu tun haben! Weiter ist wichtig, daß der Hamiltonoperator nur hermite'sch ist falls keine Teilchen vernichtet oder erzeugt werden.

Hyperfine Splitting von H_2

Berücksichtigt man im H_2-Molekül den Spin der Elektronen, so erhält man eine Aufspaltung des Spektrums in Zustände, die bei $E_0 + A$ und bei $E_0 - 3A$ liegen! Bei Anwesenheit eines Magnetfeldes zerfällt das höhere Niveau in drei Energien. Diese Aufspaltung nennt man die hyperfein Aufspaltung des H_2 Moleküls. Dieser Vorgang wird durch die Kopplung der Elektronenspins erklärt, die bei Anwesenheit eines starken Magnetfeldes wieder aufgehoben wird, wodurch man die ursprünglichen 4 Zustände wieder bekommt.

Transformationsmatrix für Spin1 Teilchen

Da man die Transformationsmatrix für Spin1/2 Teilchen nun kennt kann man die Transformationsmatrix für Spin1 Teilchen daraus berechnen. Der Tripletzustand des Wasserstoffs verhält sich wie ein Spin1 Teilchen und ist aus Spin1/2 Zuständen zusammengesetzt. So erhält man die Rotationsmatrix um die y-Achse:

$$\langle\, jT \,|\, iS \,\rangle = \begin{pmatrix} a^2 & \sqrt{2}ac & c^2 \\ \sqrt{2}ab & ad+bc & \sqrt{2}cd \\ b^2 & \sqrt{2}bd & d^2 \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} a &= \cos\alpha/2, & b &= -\sin\alpha/2, \\ c &= \sin\alpha/2, & d &= \cos\alpha/2, \end{aligned}$$

Ausbreitung von Amplitudenwellen in einem Kristallgitter

Der effektive Durchmesser eines Atoms für Elektronenstreuung liegt in der Größenordnung von einigen Atomabständen, so daß man erwarten würde, daß Elektronen nicht sehr tief in einen Kristall eindringen können. Doch man stellt fest, daß sich Elektronen durch einen sehr reinen Kristall fast wie freie Teilchen bewegen. Nimmt man zur Erklärung das Modell einer Atomkette, wobei ein Elektron im Grundzustand jedes Atoms, wäre es isoliert von den anderebn, eine Energie von E_0 hätte, so erhält man ein System von unendlich vielen Gleichungen

$$H\,|\,\psi\,\rangle = E\,|\,\psi\,\rangle \quad\Rightarrow\quad E = E_0 - 2A\cos kb \quad k \in [-\frac{\pi}{b}; \frac{\pi}{b}[$$

wobei b der Abstand der Atome voneinander ist. Für kleines kb gilt

$$E \approx Ak^2b^2.$$

Für Wellenpakete gilt die Gruppengeschwindigkeit

$$v = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k} = \frac{2Ab^2}{\hbar}k$$

Stellt man sich unter dem Wellenpaket in einem Kristall genauso wie bei einem Wellenpaket im freien Raum ein Teilchen vor, so erhält man mit $m_{eff} = \hbar^2/(2Ab^2)$:

$$E = \frac{m_{eff}}{2}v^2 \quad p = m_{eff}v = \hbar k$$

die richtigen Gleichungen für ein klassisches Teilchen. Handelt es sich nicht um ein kubisches Gitter, so rechnet man mit einem Massentensor.

Streuung an Störstellen

Hat man in einem Kristall Störstellen z.B. Atome mit Bindungsenergien $= E_0 + F$ so erhält man die gleiche Dispersionsrelation

$$E = E_0 - 2A\cos kb$$

Aber auch einen reflektierten Teil der Welle. Gibt man der einlaufenden Wellenmaximalamplitude den Wert 1, der gestreuten Amplitude den Wert β und der transmittierten Amplitude den Wert γ so ergibt sich

$$\beta = \frac{-F}{F - 2iA\sin kb} \quad |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1 \quad \gamma = 1 + \beta$$

Gebundene Zustände durch Störstellen

Sei $E_0 + F < E_0 - 2A$, d.h. befindet sich das Energieniveau der Störstelle unterhalb des Leitungsbandes, so erhält man einen gebundenen Zustand mit den Eigenschaften

$$E = E_0 - \sqrt{4A^2 + F^2}, \quad k = i\kappa, \quad 2A\sinh\kappa b = -F$$

Streuamplitude und gebundene Zustände

Die Streuamplitude β ist das Verhältnis der gestreuten Amplitude und der einlaufenden Wellenamplitude. Bei gebundenen Zuständen existiert keine einlaufende Welle, die die auslaufende initieren würde, so daß hier das Verhältnis unendlich groß würde. Oder andersherum, interpoliert man die Streuamplitude β in den an sich physikalisch unsinnigen Breich und findet dort eine Singularität, so hat man dort einen gebundenen Zustand gefunden. Also suche die Pole von β und man findet gebundene Zustände z.B.:

$$E = E_0 \pm \sqrt{4A^2 + F^2}$$

Dies ist ein wichtiges Hilfsmittel bei der Suche nach gebundenen Zuständen.

Halbleiter

Man nimmt die Dispersionsrelation für Kristalle um das Verhalten der Halbleiter zu erklären:

$$\begin{array}{rcll} E & = & E_0 - & 2A_x\cos k_x a - 2A_y\cos k_y b - 2A_z\cos k_z c \\ & \approx & E_{min} + & A_x a^2 k_x^2 + A_y b^2 k_y^2 + A_z c^2 k_z^2 \end{array}$$

Diese Relation gilt sowohl für Elektronen als auch für Löcher mit unterschiedlichen Koeffizienten A_x, a_y, A_z. Die Wahrscheinlichkeit Elektronen-Loch-Paare zu erzeugen ist proportional zu

$$e^{-\frac{E_{gap}}{kT}}.$$

Außerdem gibt es eine bestimmte Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, daß ein Elektron auf ein Loch trifft und die beiden sich gegenseitig vernichten. Sie geben dann ihre überschüssige Energie an das Gitter ab. Ist die Elektronendichte gegeben durch N_n und die Lochdichte durch N_p, so ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Loch und ein Elektron treffen proportional zum Produkt ihrer Konzentrationen

$$N_n \cdot N_p.$$

Im Gleichgewicht müssen sich Erzeugung und Vernichtung die Waage halten:

$$N_n \cdot N_p = \text{const.} e^{-\frac{E_{gap}}{kT}}.$$

Gedopte Halbleiter

Die überragende Mehrheit an Ladungsträgern bei Raumtemperatur kommt von den Störstellen, die näherungsweise alle "aktiv" sind und deshalb deren Ladungsträgerkonzentration z.B. N_n temperaturunabhängig it.

$$N_n \cdot N_p = \text{const.} e^{-\frac{E_{gap}}{kT}}.$$

muß immer noch gültig sein, so daß durch hinzugeben von mehr Donatoren die Konzentration N_p der Löcher abnehmen muß. Der Widerstand eines Halbleiters ist hauptsächlich durch seine Verunreinigungen bestimmt, nicht so sehr von Kristallirregularitäten.

Irregularitäten entstehen auch durch thermische Vibrationen, so daß $E_0 = E_0 \pm \delta_{therm}$

Abschätzung der Leitfähigkeit

Da die Driftgeschwindigkeit eines Ladungsträgers im Vergleich zu dessen ungeordneter thermischer Geschwindigkeit sehr klein ist kann man die mittlere Zeit *tau* zwischen zwei Stößen als konstant (unabhängig vom Feld) annehmen.

$$v_{drift} = a_{drift} \cdot \tau = \frac{q\mathcal{E}}{m_{eff}}\tau$$

$$j = N_n v_{drift} q_n = \frac{N_n q^2 \tau}{m_{eff}}\mathcal{E}$$

Leitfähigkeit:

$$\sigma_n = \frac{N_n q^2 \tau}{m_{eff}} \quad \sigma_{ges} = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n} + \frac{N_p q_p^2 \tau_p}{m_p}$$

Berylium

In Berylium findet Ladungstransport durch Löcher statt!

Halbleiterkontakte

$$N_p(\text{n-side})/N_p(\text{p-side}) = e^{-q_p V/kT} \quad N_n(\text{n-side})/N_n(\text{p-side}) = e^{-q_n V/kT}$$

$$N_p(\text{n-side})N_n(\text{n-side})/N_p(\text{p-side})N_n(\text{p-side}) = e^{-(q_p+q_n)V/kT} = e^{-(q_p-q_p)V/kT} = 1$$

Das Potential ist so aufgebaut, daß die positiven Löcher, die in den n-Teil Driften und die Elektronen die in den p-Teil aus ihren jeweiligen Überschußgebieten driften wieder in ihre Überschußgebiete zurückkehren! Damit Strom über einen n-p-Kontakt fließen kann muß die Potentialbarriere verringert werden, d.h. an die n-Seite kommt eine negative Spannung und an die p-Seite eine positive Spannung, da im Gleichgewicht die n-Seite auf höherem Potential liegt als die p-Seite. Wenn eines der Wenigen Löcher auf der n-Seite den Kontakt erreicht findet es dort einen Potentialabfall, den es sofort hinunterläuft. Dieser Strom, den wir I_0 nennen ist Proportional zur Anzahl der Löcher auf der n-Seite und im Gleichgewicht gilt:

$$I_0 \propto N_p(\text{n-side}) = N_p(\text{p-side})e^{-q_p V/kT}$$

Legt man nun ein Potential über den Kontakt an, so erhält man den Strom I_1:

$$I_1 \propto N_p(\text{p-side})e^{-q_p(V-\Delta V)/kT} = I_0 e^{q_p \Delta V/kT}$$

Der Gesamtstrom ergibt sich also zu:

$$I_{ges} = I_1 - I_0 = I_0(e^{q_p \Delta V/kT} - 1)$$

Natürlich setzt sich dieser Strom auch noch von der Anderen Seite durch die Elektronen zusammen. Aber dafür erhält man dieselben Ausdrücke.

Lösung der DGL für eindimensionale Kette mit Nachbar- Nachbar WW

$$H \mid \psi \rangle = E \mid \psi \rangle$$

$$E = -\sum_{i,j} K \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j$$

Für den eindimensionalen Fall einer Spinkette schreiben wir:

$$\hat{H} = \sum_n -\frac{A}{2}\hat{\sigma}_n \cdot \hat{\sigma}_{n+1}$$

Wir haben früher schon festgestellt, daß sich das Produkt aus den Spinmatrizen umschreiben läßt in:

$$\sigma_n \cdot \hat{\sigma}_{n+1} = (2P_{ij}^{ex} - 1)$$

$$\hat{H} = -A\sum_n (2P^{ex}_{n,n+1} - 1/2)$$

Für den Grundzustand sind alle Spins nach oben ausgerichtet und man erhält für jedes paar von Spins den Faktor $-A/2$, d.h. die Energie des Grundzustandes ist $-A/2$ pro Atom. Skalieren wir unser ursprüngliches Problem um, so daß der Grundzustand die Energie Null hat, so erhalten wir die Gleichung:

$$\hat{H} = -A\sum_n (2P^{ex}_{n,n+1} - 1)$$

Nehmen wir an, wir haben nun eine Kette von Spins die alle nach oben zeigen bis auf einen Spin der nach unten zeigt. Sei dieser Zustand mit $|\, x_5 \,\rangle$ gekennzeichnet. Dann gilt:

$$\hat{H}\,|\, x_5 \,\rangle = -A\sum_n (\hat{P}_{n,n+1} - 1)\,|\, x_5 \,\rangle = -A(|\, x_6 \,\rangle + |\, x_4 \,\rangle - 2\,|\, x_5 \,\rangle)$$

oder Allgemein:

$$\hat{H}\,|\, x_n \,\rangle = -A(\left|\, x_{n+1} \,\right\rangle + \left|\, x_{n-1} \,\right\rangle - 2\,|\, x_n \,\rangle)$$

In Matrixschreibweise erhält man:

$$\begin{array}{rcl} H_{n,n} & = & A \\ H_{n,n+1} & = & H_{n,n-1} = -A \\ H_{n,m} & = & 0 \quad \text{sonst} \end{array}$$

Mit dem Ansatz für stationäre Zustände:

$$C_n = a_n e^{-iEt/\hbar}$$

erhält man das System von Gleichungen:

$$Ea_n = 2Aa_n - Aa_{n-1} - Aa_{n+1}$$

Macht man aus a_n eine kontinuierliche Funktion des Ortes, so erhält man

$$Ea(x) = 2Aa(x) - Aa(x-b) - Aa(x+b)$$

Wobei man wieder den Ansatz einer ebenen Welle probiert

$$a(x) = e1ikx$$

Man erhält so die Dispersionsrelation:

$$E = 2A[1 - \cos kb]$$

Unabhängige Teilchennäherung

Betrachtet man eine Spinkette mit zwei Spins nach unten und Betrachtet man die zeitunabhängige Schrödingergleichung, so fallen drei Gelichungen von unendlich vielen aus der Reihe. Ignoriert man diese Tatsache, so erhält man eine Lösung, die die wechselwirkungsfreie Überlagerung von Einspinwellen ist. Diese Näherung nennt man unabhängige Teilchen Näherung. Es ist auch möglich die exakte Lösung in einem Modell zu deuten, in dem zwei Teilchen (Wellenzüge) wechselwirken! Man erhält so ein Bild von Teilchen, die aneinander streuen und die gegenseitig Kräfte aufeinander ausüben. Spinwellenzüge können also auch als Teilchen gedeutet werden analog zu den Elektronen-Wellenzügen im Vakuum, die sich gegenseitig durch das Coulombpotential beeinflussen.

Unabhängige Teilchen

Es handelt sich heirbei eigentlich nicht um zwei Teilchen mit Wellenvektor $\vec{k}_1$ bzw. $\vec{k}_2$ sondern um einen Zustand bestehend aus zwei Teilchen (Bosonen), der durch zwei Zahlen $\vec{k}_1, \vec{k}_2$ charakterisiert ist. Diese Lösung sieht aus wie ein gebundener Zustand wobei ein Teilchen den Impuls $\vec{p}_1 = \hbar\vec{k}_1$ und das andere den Impuls $\vec{p}_2 = \hbar\vec{k}_2$ hat. Man kann allerdings nicht sagen welches Teilchen welches ist, so daß die Wellenfunktion symmetrisiert werden muß um der Bose-Statistik zu genügen.

Die Wellenfunktion

Für ein Teilchen in Ruhe wurde angenommen, daß dessen Wahrscheinlichkeitsamplitude durch

$$\psi(x,t) = ae^{-i\omega t} = ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

ist. Hat das Teilchen eine festen Impuls $\vec{p}$, so erhält man dessen Wahrscheinlichkeitsamplitude durch eine relativistische Transformation

$$t = \frac{t' - x'v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad E_0 t = E_p' t' - p'x' \quad E_p = \sqrt{(pc)^2 + E_0^2}$$

$E_p t - \vec{p}\vec{x}$ ist skalare Invariante unter Minkowski-Metrik!

$$\Rightarrow \quad \psi(x,t) = ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{x})}$$

$$\langle\, x \,|\, \text{impuls } p \,\rangle \propto e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$$

$$\Rightarrow \quad \langle\, \text{impuls } p \,|\, \psi \,\rangle = \int \langle\, \text{impuls } p \,|\, x \,\rangle \langle\, x \,|\, \psi \,\rangle \,\mathrm{d}x = \int e^{-i\vec{p}\vec{x}/\hbar}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{p})$$

ist die Fourier-Transformierte.

Einige grundlegende Gleichungen

$$\langle\, x' \,|\, x \,\rangle = \delta(x - x')$$

$$\langle\, \phi \,|\, \psi \,\rangle = \int \phi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}$$

$$\langle\, x \,|\, H \,|\, x' \,\rangle = H(x,x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\delta''(x - x') + V(x)\delta(x - x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\delta(x - x')$$

Symmetrien und Erhaltungsgrößen

$$\hat{Q}\hat{U} = \hat{U}\hat{Q} \quad \hat{U} = 1 - i\hat{H}\epsilon/\hbar \quad [\hat{Q}, \hat{H}] = 0$$

Sind die Bedingungen für die Erhaltung der Eigenwerte des Operators $\hat{Q}$.

Aufbau der Quantenmechanik

Grundlage ist die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t \,|\, \psi \,\rangle = H \,|\, \psi \,\rangle$$

wobei $|\, \psi \,\rangle$ eine Wahrscheinlichkeitsamplitude ist. Genauer, es ist ein Zustandsvektor im Hilbertraum der Zustände des Systems. Die Wahrscheinlichkeit des Zustandes wird als $\langle\, \psi \,|\, \psi \,\rangle$ berechnet. Was diese Wahrscheinlichkeit bedeutet hängt von der Interpretation von $|\, \psi \,\rangle$ ab. Um nun einen Anschluß dieser Theorie an die klassische Mechanik zu finden führt man die Begriffe der klassischen Mechanik wie Ort und Impuls als Erwartungswerte von Operatoren ein. Zu jedem Operator gibt es eine Menge von Zuständen, dessen Eigenvektoren, die ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Wendet man den jeweiligen Operator auf seinen Eigenzustand an, so erhält man den Eigenzustand multipliziert mit dessen Eigenwert.

Disintegration von Λ^0

$$\Lambda^0 \top + \pi^- \quad f(\theta) = (a\cos^2\frac{\theta}{2} + b\sin^2\frac{\theta}{2}) = \langle\, +z \,|\, \text{proton fliegt in x-Richtug} \,\rangle$$

Allein durch Drehimpulserhaltungsargumente erhält man diese Winkelverteilung. Wäre die Paritätserhaltung erfüllt, so müßte für a und b gelten $|a| = |b|$ und $f(\theta) = const$. Da dies nicht dr Fall ist gilt hier keine Paritätserhaltung. $\Rightarrow$ keine Inversionssymmetrie!

Wenn ein System inversionssymmetrisch ist, so haben Masse null Teilchen Spin $(+j, -j)$ ansonsten nur eine der beiden Möglichkeiten.

Rotationsmatrizen (17-16)

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 & \sin\theta/2 \\ -\sin\theta/2 & \cos\theta/2 \end{pmatrix}$$

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta) & +\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1}{2}(1-\cos\theta) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & +\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\theta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1}{2}(1+\cos\theta) \end{pmatrix}$$

Photonentrafo ist in Tabelle 17-3 zu finden.

Drehmoment, Elektrische Dipolstrahlung

Rechsthändige (RHC) Photonen nach oben:

$$\langle\, j=1, m=1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = i\hbar a$$

Linkshändige (LHC) Photonen nach oben:

$$\langle\, j=1, m=-1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = i\hbar b$$

Nach Inversion geht das RHC Photon in ein LHC Photon nach unten über:

$$\langle\, j=1, m=1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = \pm i\hbar a$$

und das LHC Photon in ein RHC Photon nach unten:

$$\langle\, j=1, m=-1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = \pm i\hbar b$$

wobei das Vorzeichen der Parität des Ausgangszustandes Entspricht. Nach Rotation um 180° um die y-Achse ($m = -1 \cdot m$ in drei Zustandssystem) des Ausgangszustandes:

$$\langle\, j=1, m=-1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = \pm i\hbar a = i\hbar b \quad \Rightarrow \quad |a| = |b|$$

In Atomaren Prozessen bleibt die Parität erhalten, so daß die Parität des Gesamtsystems die gleiche vor und nach der Emission sein muß! Der Prozeß ist abhängig davon, ob der Ausgangszustand und der Endzustand des Atoms gerade oder ungerade ist. Die Winkelverteilung der Strahlung wird davon abhängen. Elektrische Dipolstrahlung bedeutet ungerade Parität des Ausgangszustandes und gerade Parität des Endzustandes des Atoms. Wenn Anfangszustand und Endzustand gleiche Parität haben spricht man von magnetischer Dipolstrahlung.

Es folgt $b = -a$ für elektrische Dipolstrahlung

$$\langle\, P(j=1, m=1) \,|\, H \,|\, P(j=0, m=0) \,\rangle = \langle\, (-1)(j=1, m=1) \,|\, H \,|\, (+1)(j=0, m=0) \,\rangle$$

wobei die linke Seite RHC nach oben und die rechte Seite LHC nach unten entspricht.

$$= -\langle\, j=1, m=-1 \,|\, H \,|\, j=0, m=0 \,\rangle = -i\hbar a = i\hbar b$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude, daß ein RHC Photon in die Richtung θ emittiert wird ist

$$a\,\langle\, +' \,|\, R_y(\theta) \,|\, + \,\rangle = \frac{a}{2}(1+\cos\theta)$$

Die Amplitude, daß ein LHC Photon in dieselbe Richtung emittiert wird ist:

$$(-a)\,\langle\, -' \,|\, R_y(\theta) \,|\, + \,\rangle = -\frac{a}{2}(1-\cos\theta)$$

Lichtstreuung Absoprtion-Reemission

Die Amplitude pro Zeiteinheit für Absorption sei c

$$\langle R' \,|\, S \,|\, R \rangle = \frac{ac}{2}(1+\cos\theta) \quad \langle L' \,|\, S \,|\, R \rangle = -\frac{ac}{2}(1-\cos\theta)$$

$$\langle R' \,|\, S \,|\, L \rangle = -\frac{ac}{2}(1-\cos\theta) \quad \langle L' \,|\, S \,|\, L \rangle = \frac{ac}{2}(1+\cos\theta)$$

$$|\, x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\, R \rangle + |\, L \rangle) \quad |\, y \rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|\, R \rangle - |\, L \rangle)$$

$$\langle x' \,|\, S \,|\, x \rangle = ac\cos\theta \quad \langle y' \,|\, S \,|\, y \rangle = 0$$

Das Bedeutet, daß das gestreute Licht vollständig x-Polarisiert ist. Rotationen sind jeweils Hintereinanderschaltungen von:

$$R_z(\gamma)R_y(\alpha)R_z(\beta)$$

Allgemeine Rotationsmatrix

$$R_z(phi)\,|\, j,m \rangle = e^{im\phi}\,|\, j,m \rangle$$

Es bleibt das Problem $R_y(\alpha)$ zu bestimmen! Dies geschieht indem man sich den Spin j aus $2j$ Spin-1/2 Teilchen zusammengesetzt denkt. Da für jedes Spin-1/2 Teilchen gilt

$$R_z(\phi)\,|\, \pm \rangle = e^{\pm i\phi/2}\,|\, \pm \rangle$$

folgt $M = (u-d)/2$, wobei u für die Anzahl an Spin-up Teilchen steht und d für die Anzahl an Spin-down Teilchen. Die Zustände $|\, j,m \rangle$ mit $j = u+d$ und $m = u-d$ sind die normierte Summe aller Zustände mit $m = u-d$ wobei die Zustände addiert (keiner subtrahiert) werden. Die Superposition mit Subtraktionen von Zuständen gehören zu Zuständen mit geringerem j! Dies sieht man folgendermaßen: man weiß für ein 2 Spin-1/2 System, daß

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\, + \rangle - |\, - \rangle) = |\, 0,0 \rangle$$

Hat man jetzt ein Mehrfaches Spin-1/2 System mit Differenzen von Zuständen mit gleichem m, so faßt man jeweils zwei Zustände zusammen. Da es unterschiedliche Kombinationen aus gleichvielen u und gleichevielen d sind sind mindestens zwei vertauscht. Außerdem gibt es mindestens ein Paar, wo genau zwei vertauscht sind und die Vorzeichenkombination in der Linearkombination $+, -$ gegeben ist (sonst sind alle Vorzeichen $-$ das Vorzeichen kann ausgeklammert werden). Bei diesem Paar klammert man die beiden unterschiedlichen aus

$$\sqrt{2}\,|\, +...-,,,+ \rangle\, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\, +- \rangle - |\, -+ \rangle)$$

und erkennt, daß der Teil in Klammern ein Spin-0 Teilchen ist, das nicht mehr zum Gesamtspin beitragen kann. Daher gehören zu Spin $j = u+d$ nur die positiven überlagerungen von Zuständen. Damit hat man die Zustände j,m und kann auf diese die Spin-1/2 Trafo anwenden, die allein aus geometrischen Überlegungen hergeleitet werden kann!

$$\langle j,m' \,|\, R_y(\theta) \,|\, j,m \rangle = [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{\frac{1}{2}} \cdot \sum_k \frac{(-1)^k(\cos\theta/2)^{2j+m'-m-2k}(\sin\theta/2)^{m-m'+2k}}{(m-m'+k)!(j+m'-k)!(j-m-k)!k!}$$

$$\langle j,0' \,|\, R_y(\theta) \,|\, j,0 \rangle = P_l(\cos\theta)$$

$$Y_{lm}(\theta,\Phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4}}\,\langle l,0 \,|\, R_y(\theta)R_z(\Phi) \,|\, l,m \rangle$$

Messung des Kernspins von Ne^{20*}

$$\left.\begin{array}{l} C^{12}+C^{12}\rightarrow Ne^{20*}+\alpha_1 \\ Ne^{20*}\rightarrow O^{16}\alpha_2 \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad Ne^{20} \text{ im Zustand } |\,j,0\,\rangle$$

Da die Anfänglichen C^{12}, der O^{16} und die Alphateilchen Spin-0 haben muß auch das angeregte Neon 0-Drehimuls um die z-Achse haben. Beim Zerfall des angeregten Neon muß es eine gewisse Amplitude haben im Zustand $|\,j,0\,\rangle$ entlang der z'-Achse (Flugbahn des α_2-Kerns) haben. Durch Messung der Winkelabhängigkeit der Intensität des zweiten α-Teilchens und vergleich mit

$$|\,\langle\,j,0\,|\,R_y(\theta)\,|\,(j,0)\,\rangle\,|^2$$

ergibt sich j.

Clebsch Gordan Koeffizienten

Meist reicht es bei einer Problemstellung die Einzelspins in $2j_1$ und $2j_2$ Spin-1/2 Teilchen zu unterteilen und mit obiger Argumentation alle $m=u+d$ Zustände positiv zu überlagern um $j=u+d$ Zustände zu erhalten. Dann sucht man orthogonale Zustände mit $m=u-d$, die dann zu $j=u+d-1$ gehören. Reicht dieses Vorgehen nicht aus, so geht man vom Zustand $j=j_1+j_2$ aus und verwendet den Absteigeoperator $\hat{l}_-$ um alle Zustände $|\,j,m\,\rangle$ zu gewinnen. Dann sucht man zu $|\,j,j-1\,\rangle$ einen orthogonalen Zustand (es gibt nur einen) und verwendet wieder $\hat{l}_-$. Damit erhält man $|\,j-1,m\,\rangle$. Nun sucht man einen orthogonalen Zustand zu $|\,j,j-2\,\rangle,|\,j-1,j-2\,\rangle$ und erhält $|\,j-2,j-2\,\rangle$ usw. Der Gesamtdrehimpuls I nimmt damit Werte von j_a+j_b bis $|j_a-j_b|$ an.

Winkelabhängigkeit des H-Atoms

Falls das Atom in einem Zustand $|\,j,m\,\rangle$ mit $m\neq 0$ ist ist die Wahrscheinlichkeit das Elektron auf der z-Achse zu finden gleich 0. Ein Elektron auf der z-Achse kann keinen Drehimpuls um diese Achse haben! Falls $m=0$ kann das Elektron eine von 0 verschiedene Amplitude haben irgendwo im Abstand r vom Kern zu sein. Diese Amplitude nennen wir $F_l(r)$. Wenn man $F_l(r)$ kennt ist der Rest bekannt!

$$\psi_{lm}(r)=\langle\,l,0\,|\,R_y(\theta)R_z(\Phi)\,|\,l,m\,\rangle\,F_l(r)=aY_{lm}(\theta,\Phi)F_l(r) \text{ mit } a=\sqrt{\frac{4}{2l+1}}$$

Zustandsvergleich

Die folgenden p,m Zustände des H-Atoms sind bezogen auf die Achse, die vor ihnen steht gleich:

z $\rightarrow |\,1,0\,\rangle$

x $\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\,1,+1\,\rangle+|\,1,-1\,\rangle)$

y $\rightarrow -\frac{i}{\sqrt{2}}(|\,1,+1\,\rangle-|\,1,-1\,\rangle)$

Diese Zustände sind zwar nicht identisch mit den Basiszuständen für Spin-1 Teilchen, die genauso transformiert werden wie 3-dim räumliche Vektoren:

$$C_x=-\frac{1}{\sqrt{2}}(C_+-C_-) \quad C_y=-\frac{i}{\sqrt{2}}(C_++C_-) \quad C_z=C_0$$

aber ähnlich dazu. Wobei ich eingentlich erwartet hätte, daß sie gleich sind.