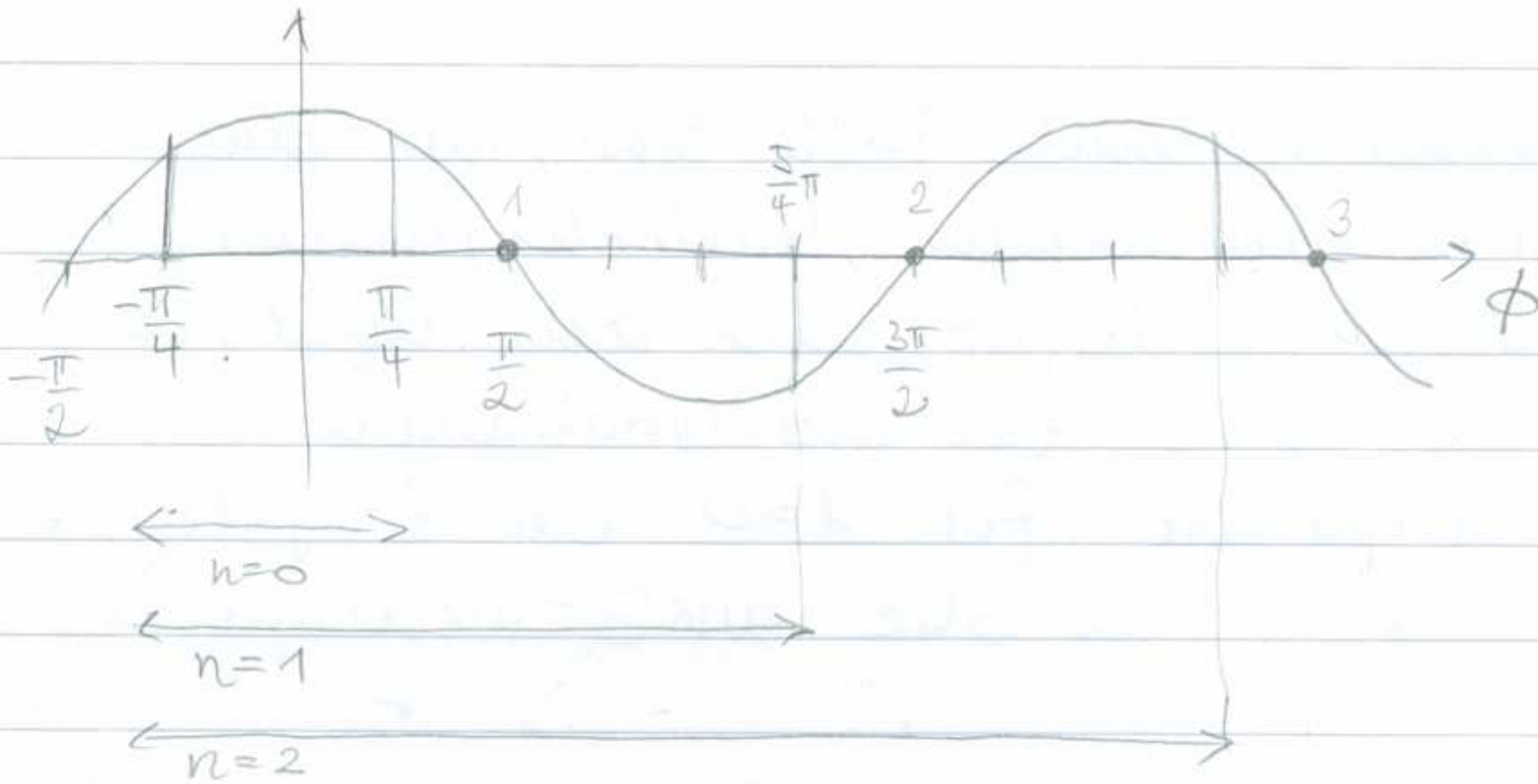


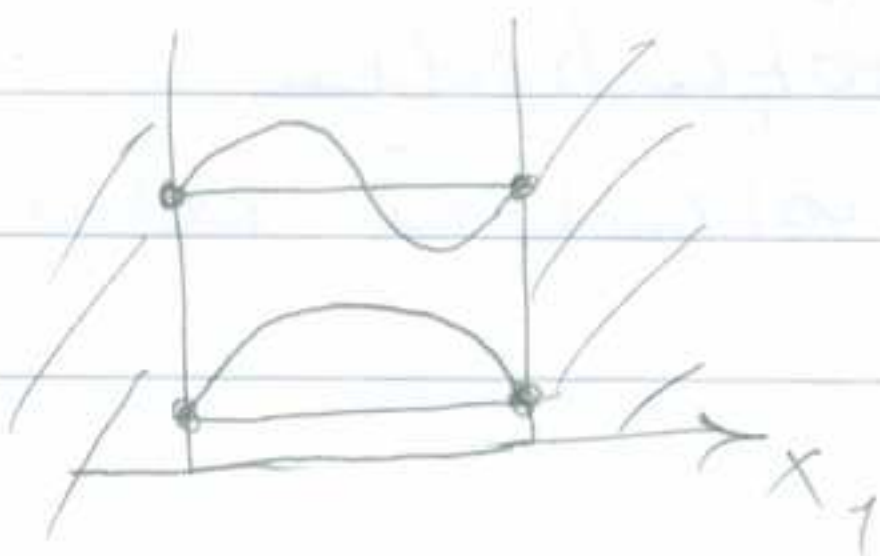
also z.B. für $n=0$ von $-\frac{\pi}{4}$ bis $+\frac{\pi}{4}$.
 Dabei wird der Kosinus nie null $\rightarrow$
 kein Knoten. Für $n=1$ geht
 die Phase von $-\frac{\pi}{4}$ bis $\frac{3}{2}\pi - \frac{\pi}{4} = \frac{5}{4}\pi$,
 und der Kosinus hat eine Nullstelle:



- Wenn die Wellenfunktion an den klass. Umkehrpunkten verschwindet, wie z.B. beim unendlich hohen Kasten, so gilt die Sommerfeldsche Quantisierungsbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n+1) \pi \hbar, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

denn „vollständige“ halbe Wellenlängen müssen in den Topf passen:



Das ist kein Widerspruch zu obiger Herleitung, da eine lin. Entw. des Pot. hier nicht möglich!

Durch das exponentielle Hineintunneln in den klassisch verbotenen Bereich passen weniger „vollständige“ Halbwellenlängen in das Potential. Daher nur $n + \frac{1}{2}$ und nicht $n + 1$.

Es kommen auch Fälle vor, wo das Potential an einem Umkehrpunkt unendlich hoch ist und am anderen endlich, z.B. bei der radialen Schrödinger-Gl. für $l=0$ bei kugelsymmetrischen Problemen, wo die WKB-Wellenfunktion

$$u(r) \sim \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r') dr' \right]$$

lautet. Hier gilt $u(0) = 0$, und da die Einschränkung $r \geq 0$ einer unendlich hohen Barriere bei $r=0$ gleichkommt, erhält man in diesem Fall als Quantisierungsbedingung

$$\int_0^{r_{\max}} p(r) dr = \left(n + \frac{3}{4} \right) \hbar \pi, \quad n=0,1,2$$

also ein Mittelthing zwischen $\frac{1}{2}$ und 1. Diese Formel gilt allerdings nur für bei $r \rightarrow 0$ regulären Potentialen (nicht beim Coulomb-Potential oder für $l \neq 0$).

I.2 Variationsmethode

- Wir betrachten für einen Hamiltonian $\hat{H}$ und ^{belieben} beliebigen Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle.$$

- Mit Hilfe der vollst. Basis $\{|n\rangle\}$ von $\hat{H}$ können wir schreiben

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\hat{H}|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \langle\psi|n\rangle E_n \langle n|\psi\rangle$$

da $E_n \geq E_0$

$$\geq E_0 \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle$$

$$= E_0 \sum_n |\langle\psi|n\rangle|^2 = E_0 \langle\psi|\psi\rangle$$

$$\text{oder } E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} =: E[\psi]. \quad (\text{I.12})$$

- $E[\psi]$ ist ein Funktional: man gibt eine Wellenfunktion ψ zu und erhält eine reelle Zahl

- Im Prinzip könnte man alle $|\psi\rangle$ aus dem Hilbert-Raum nehmen und in $E[\psi]$ einsetzen, um den Grundzustand $|\psi_0\rangle$, der zum niedrigsten

Energiewert E_0 führt) zu finden. In der Praxis kann man nicht alle Zustände durchprobieren und beschränkt sich auf einen Unterraum, der mit Parametern $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ parametrisiert wird,

$$\Rightarrow E(\alpha, \beta, \dots) = \frac{\langle \psi(\alpha, \beta, \dots) | \hat{H} | \psi(\alpha, \beta, \dots) \rangle}{\langle \psi(\alpha, \beta, \dots) | \psi(\alpha, \beta, \dots) \rangle}.$$

Das Minimum $E(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ ist dann eine obere Grenze für E_0 (Ritzsches Variationsprinzip).

- Die „Kunst“ ist es, mit wenig Aufwand (kleiner Unterraum, wenige Parameter $\alpha, \beta, \dots$) einen guten Wert für die Energie zu bekommen. Hierbei hilft es, alles auszunutzen, was man von der exakten Grundzustandswellenfunktion weiß (oder ahnt).

- Beispiel: Grundzustand für

$$V(x) = \lambda x^4$$

Wir wissen: Grundzustand hat gerade Parität, Max. bei $x=0$, keine Knoten, verschwindet für $|x| \rightarrow \infty$.

→ Versuche Testfunktion

$$\psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2/2}$$

α bestimmt Breite.

$$E(\alpha) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2/2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \right) e^{-\alpha x^2/2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx}$$

$$= \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2}$$

kin. Energie wird klein für $\alpha \rightarrow 0$, breite Wellenfkt, große Wellenlänge

pot. Energie, wird klein für punktförmiges Teilchen bei $x=0$, also große α

Optimum dazwischen

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \alpha_0 = \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2} \right)^{1/3}$$

$$\Rightarrow E(\alpha_0) = \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{1/3}$$

Da $\hat{H}$ positiv definit $\Rightarrow$

$$0 \leq E_0 \leq E(\alpha_0).$$

Unsere Näherung für die Wellenfkt. ist

$$\psi_0(x) \approx A e^{-\frac{1}{2}\alpha_0 x^2}$$

- Woher wissen wir, wie weit wir noch weg sind vom exakten Wert E_0 ?
Und woher wissen wir, ob wir ihn nicht vielleicht schon gefunden haben?

In der Praxis bleibt nur, den Parameter-
raum zu vergrößern und zu testen, ob
sich noch Wesentliches ändert.

- In den Übungen werden wir $\psi(r) = e^{-\alpha r^2}$
als Testfunktion für den H-Grundzu-
stand versuchen.

- Die Energieeigenwerte sind üblicherweise
„besser“ als ihre Wellenfunktionen:

$$|\psi\rangle = |E_0\rangle + |\delta\psi\rangle$$

$\nwarrow$ exakter Grundzustand $\swarrow$ „Fehler“

$$|\delta\psi\rangle = |\delta\psi_{\parallel}\rangle + |\delta\psi_{\perp}\rangle = \alpha |E_0\rangle + |\delta\psi_{\perp}\rangle$$

$\nwarrow$ parallel zu $|E_0\rangle$

$$\Rightarrow E[\psi] = \frac{(\langle E_0 | (1 + \alpha^*) + \langle \delta\psi_{\perp} |) \hat{H} ((1 + \alpha) | E_0 \rangle + |\delta\psi_{\perp} \rangle)}{(\langle E_0 | (1 + \alpha^*) + \langle \delta\psi_{\perp} |) ((1 + \alpha) | E_0 \rangle + |\delta\psi_{\perp} \rangle)}$$

$$= \frac{|1 + \alpha|^2 E_0 + \langle \delta\psi_{\perp} | \hat{H} | \delta\psi_{\perp} \rangle}{|1 + \alpha|^2 + \langle \delta\psi_{\perp} | \delta\psi_{\perp} \rangle}$$

$$= E_0 + \mathcal{O}((\delta\psi_{\perp})^2)$$

$\nwarrow$ Fehler nur von quadr. Ord.

- Die eben durchgeführte Rechnung gilt für alle Eigenzustände von $\hat{H}$, sodafs für

$$|\psi_n\rangle = |E_n\rangle + |\delta\psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow E[\psi_n] = E_n + \mathcal{O}((\delta\psi_n)^2),$$

d.h. die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ sind stationäre „Punkte“ von $E[\psi]$: in erster Ordnung ändert sich $E[\psi]$ nicht, wenn sich $|\psi_n\rangle$ in erster Ordnung ändert.

$$\left. \frac{\delta E}{\delta \psi} \right|_{\psi_n} = 0$$

- Wenn man z.B. eine ungerade Testfunktion für den Fall eines geraden Potentials wählt, z.B. $V = \lambda x^4$ von oben, so werden wir einen Wert

$$E[\psi] \geq E_1 \quad (I13)$$

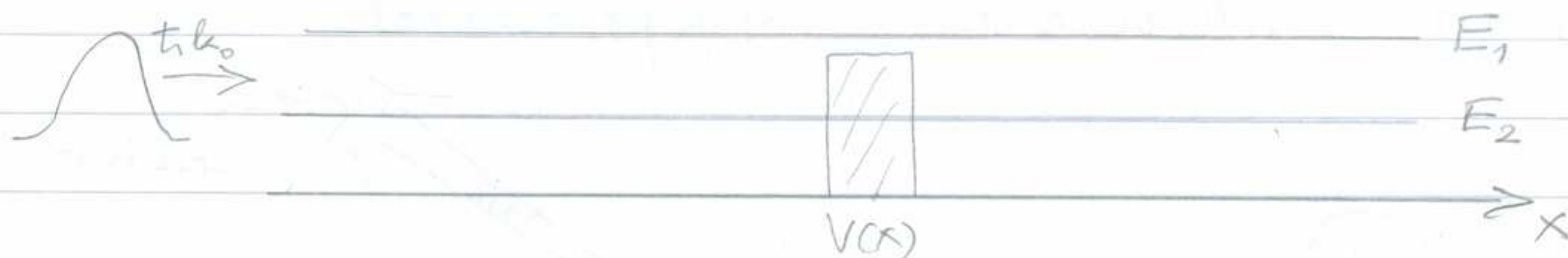
finden.

- Andere Eigenenergien kann man durch sukzessives Herausprojizieren eines gefundenen Zustands annähern, wobei allerdings keine strikten Ungleichungen der Art (I13) mehr gelten.

II. Streuung

- Struktur der Materie wird erforscht, indem man Teilchen aneinander streut
- Sehen: Licht streut an Objekt und trifft auf unser Auge (Detektor)
- Historisch: Rutherford schoß mit α -Teilchen auf Metallfolien
- Historisch: SLAC-Experiment: Photonen auf Neutronen $\Rightarrow$ Neutronen bestehen aus geladenen Teilchen, die sich zur Gesamtladung null addieren (Quarks).
- Streutheorie ist ein weites Feld.
Am einfachsten: Potentialstreuung (elastisch), inelastische Streuung (z.B. $e + H \rightarrow e + H^*$ (angeregtes H-Atom)), reaktive Streuung (Chemie), Streuung an Festkörpern (Bestimmung der Kristallstruktur), Tomographie (aus Streumuster auf das Objekt schließen; inverses Problem) u. v. m. ($\rightarrow$ Spezialliteratur).

- In 1D:



Strahl (monoenergetisch, $\langle p \rangle = \hbar k_0$) trifft von $x \rightarrow -\infty$ auf Potential $V(x)$ (welches für $|x| \rightarrow \infty$ verschwindet).
Bruchteil T wird transmittiert,
Bruchteil R wird reflektiert.

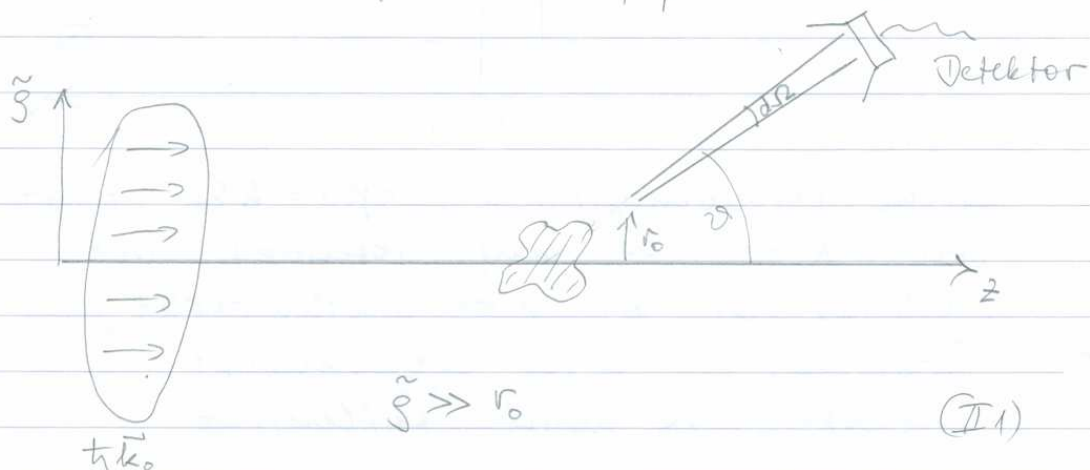
Strategie: 1. Entwickle einfallende Welle in Eigenlösungen $|\psi_k\rangle$,

$$E_k |\psi_k\rangle = (\hat{T} + \hat{V}) |\psi_k\rangle, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

2. Versuche Entwicklungskoeffizienten $a(k)$ mit entsprechendem, die Zeitentwicklung beschreibendem Phasenfaktor $e^{-iE_k t/\hbar}$.

3. Betrachte $t \rightarrow \infty$ und berechne $T(k_0)$, $R(k_0)$, die für entsprechend gewähltes Wellenpaket nur von k_0 und nicht der speziellen Form des Anfangszustandes abhängen werden.

- In 2D oder 3D haben wir auch noch (eine) laterale Richtung(en) (Stoßparameter)



- Def. Differenzierter Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \begin{array}{l} \text{Anzahl Teilchen, die pro Zeiteinheit} \\ \text{in Raumwinkel } d\Omega \text{ festdetektiert werden} \end{array}$$

Anzahl einfallender Teilchen
pro Zeiteinheit und Fläche
in der g -Ebene

- Wegen (II1) und der Annahme eines monochromatischen einfallenden Teilchenstrahls können wir mit einer ebenen einfallenden Welle rechnen und lassen den Index 0 weg, $\vec{k} = \vec{k}_0$, $\vec{k} = k\vec{e}_z$

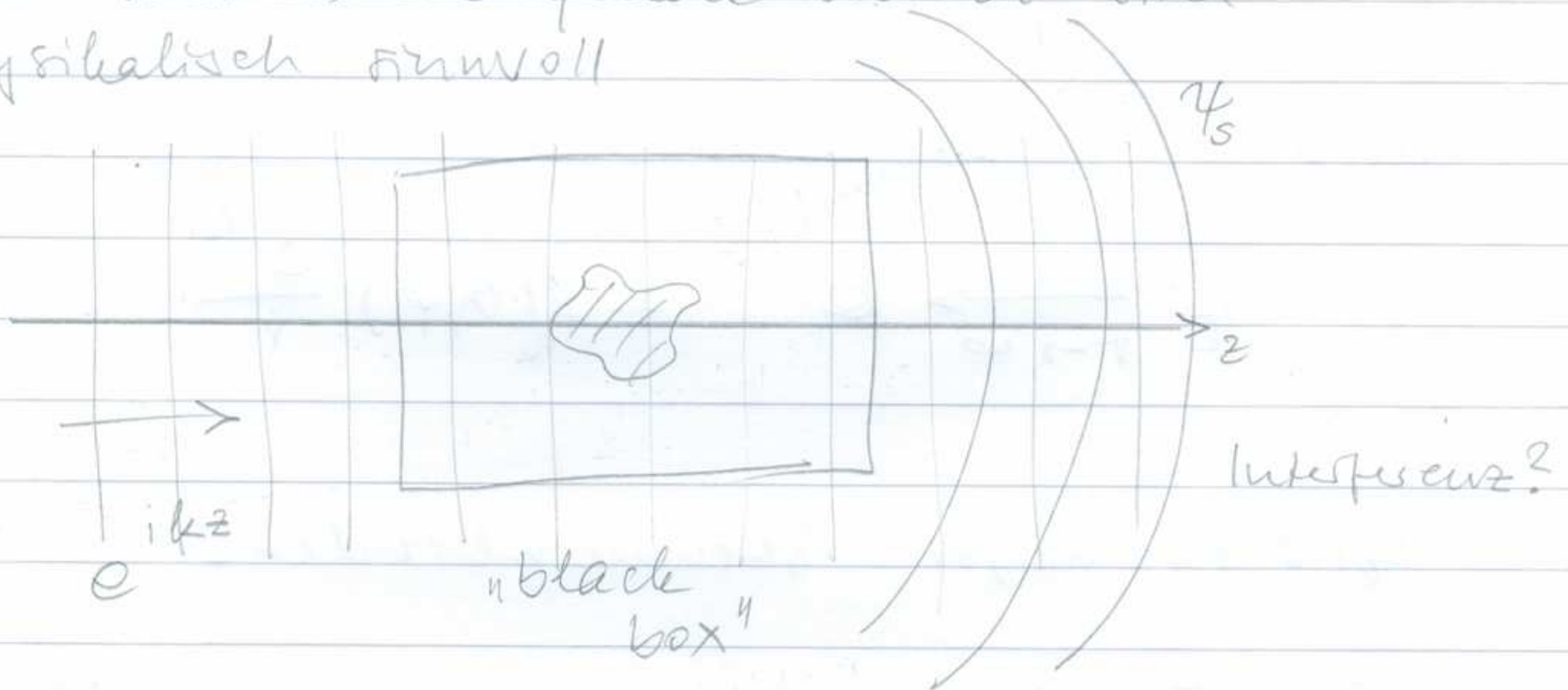
$$\psi_{\vec{k}} = \underbrace{e^{ikz}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{\psi_0(r, \vartheta, \varphi)}_{\text{Streuwellen}} \quad (\text{II2})$$

(Normierung nicht nötig)

- Für den Fall $r V(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$
(nicht für Coulomb!) gilt weit
weg vom Ursprung (wo $V \neq 0$)

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2) \psi_s = 0, \quad r \rightarrow \infty \quad (\text{II3})$$

und nur auslaufende Wellen sind
physikalisch sinnvoll



Die Lösungen von (II3) lauten

$$\psi_s \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_l \sum_m (A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$\uparrow$ sph. Besselfkt.
 $\nwarrow$ Neumannfkt

Da $j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) \cdot \frac{1}{kr}$

$n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \cdot \frac{1}{kr}$

muß $\frac{A_l}{B_l} = -i$ gelten, so daß $\psi_s \sim \frac{e^{ikr}}{kr}$

$$\begin{aligned}
\psi_s &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{\ell m} \left(-B_{\ell} i 8\pi^2 \right) \frac{1}{kr} - B_{\ell} \cos(\ell) \frac{1}{kr} \bigg) Y_{\ell m} \\
&= \frac{1}{kr} \sum_{\ell m} (-B_{\ell}) e^{i(kr - \ell\pi/2)} Y_{\ell m} \\
&= \frac{e^{ikr}}{kr} \sum_{\ell m} (-B_{\ell}) (-i)^{\ell} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \\
&=: \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\vartheta, \varphi)
\end{aligned}$$

also

$$\psi_k \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f_k(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{II.4})$$

$f_k(\vartheta, \varphi)$ heißt Streuamplitude.

- Zur Berechnung von $d\sigma/d\Omega$ benötigen wir die einfallende Wahrsch.-stromdichte $\vec{j}_i$ und die gestreute Stromdichte $\vec{j}_s$

$$|\vec{j}_i| \sim \left| \frac{\hbar}{2mi} \left(e^{-ikz} \vec{\nabla} e^{ikz} - e^{ikz} \vec{\nabla} e^{-ikz} \right) \right|$$

$\uparrow$
 evtl. reduzierte Masse

$$= \frac{\hbar k}{m}$$

- Zu $\vec{j}_s$ könnten Interferenzen zwischen einfallender und gestreuter Welle beitragen; allerdings können wir uns