

## 3. Spektren und Bahnen

### 3.1. Geladenes Teilchen im Magnetfeld

$$\vec{F}_{\text{Lorentz}} = q \vec{E} + q \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}$$

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - q \phi(\vec{r}) + \frac{q}{c} \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(\vec{r})$$

$$\vec{J} = \text{rot } \vec{A}$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi - \frac{1}{c} \dot{\vec{A}}$$

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + \underbrace{q \phi(\vec{r})}_{U(\vec{r})}$$

Kanonische Quantisierung;

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + \frac{i q \hbar}{2mc} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{q^2 \vec{A}^2}{2mc^2} + U(\vec{r})$$

Ergänzen: Spin und Spin-Bahn-Kopplung (Pauli-Gleichung):

$$\hat{H}_{\text{SB}} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} - \gamma_{\vec{S}} \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}$$

$$\vec{S} = \gamma \vec{L}$$

$$\gamma = \frac{q}{2mc} \cdot g$$

(Elektron:  
 $q < 0$   
 $\gamma < 0$   
 $g = 2$ )

In diesem Kapitel:

- Elektron am Wasserstoffatom, schwaches homogenes Feld
- Freie Elektronen, beliebiges homogenes Feld
- Zwischenbereich  $\rightarrow$  Semiklassik!

### 3.2. Erinnerung: Wasserstoffatom

Nichtrelativistisch, ohne Felder:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Spektrum

$$\underline{\underline{E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} = -\frac{1}{2n^2}}}$$

$$\frac{c^4}{2 \cdot 9 \cdot 10^8 \cdot \hbar^2} = \frac{c^2}{a_0} = \frac{1}{2n^2}$$

1 Hartree = 27.2 eV

Hauptquantenzahl  $n = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{radial}}}{l+1}$

Eigenfkt

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

mit

$$R_{nl}(r) \propto e^{-r/na_0} \left(\frac{r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

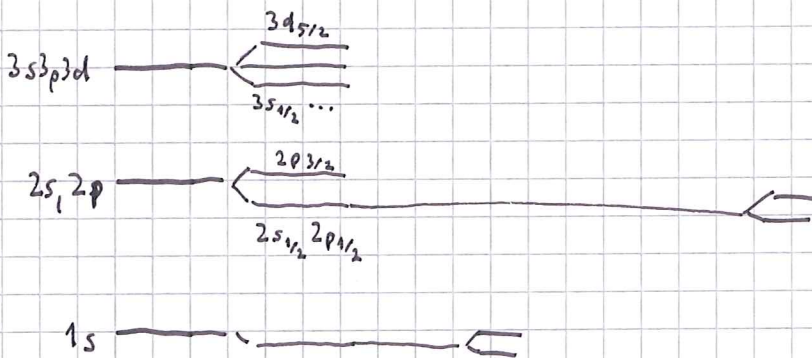
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

↑ zugeordnete Laguerre-Polynome (Grad  $n-l-1$ )

$m$ -Entartung wegen Kugelsymmetrie ( $m = -l, \dots, l$ )

$l$ -Entartung wegen Runge-Lenz-Vektor (speziell für  $1/r$ -Potential)

Feinstruktur aus Spin-Bahn-Kopplung  $\rightarrow$  Quantenzahl  $j = l \pm \frac{1}{2}$



$$-\frac{1}{n^2}$$

Feinstruktur

Hyperfeinstruktur  
(Kernspin)

Lambshift  
(QED)



### 3.3. Wasserstoff im schwachen Magnetfeld: Zeeman-Effekt $q \rightarrow e, s_0$

Homogenes MF:  $\vec{B} = B \hat{e}_z$ ,  $\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} (\hat{e}_y Bx - \hat{e}_x By)$ ,  $\text{div} \vec{A} = 0$

$$\Rightarrow \partial_{\vec{r}} \vec{A} = \vec{A} \partial_{\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = B \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = B \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$$

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m^2 c^2} \vec{p} \cdot \frac{dU}{dr} \vec{r} \cdot \vec{p}$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{e\hbar\beta}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) = -\frac{e\hbar\beta}{2mc} (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$$

$\uparrow g_{el} = 2$

$$\hat{H}_3 = \frac{e^2 \hbar^2 \beta^2}{8m c^2} (x^2 + y^2)$$

"Schwache" Felder  $\langle \hat{H}_2 \rangle, \langle \hat{H}_3 \rangle \ll \langle \hat{H}_0 \rangle$ .

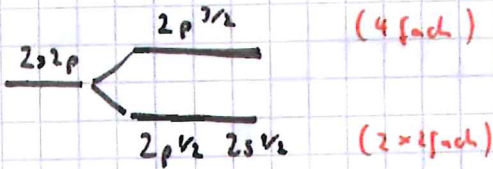
Zeeman-Effekt  $\hat{=}$  Verschiebung der (Atom-)Niveaus im homogenen B-Feld

(a) "Schwach" Magnetfeld

$$\langle \hat{H}_2 \rangle \ll \langle \hat{H}_1 \rangle$$

(MF  $\ll$  Spin-Bahn)

Ungestörte Niveaus sind die Feinstruktur- aufgespaltenen  $|j, m_j, l, s\rangle$   
 $j = l \pm \frac{1}{2}, -j \leq m_j \leq j$



$$\langle j, m_j, l, s | j_z + s_z | j, m_j, l, s \rangle = \delta_{m_j, m} \text{dec. } \pm m + \delta_{l, l} \langle j, m_j, l, s | s_z | j, m_j, l, s \rangle$$

Clebsch-Gordan:  $|j, m_j, l, s\rangle = \sum_{m_l, m_s} |l, m_l, s, m_s\rangle C_{l, m_l, s, m_s}^{j, m_j}$

Konkret:  $|l \pm \frac{1}{2}, m_j, l, s\rangle = \pm |l, m_j - \frac{1}{2}, s, \frac{1}{2}\rangle \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}$   
 $+ |l, m_j + \frac{1}{2}, s, -\frac{1}{2}\rangle \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}$

Damit  $\langle j, m_j, l, s | s_z | j, m_j, l, s \rangle \approx \delta_{m_j, m} \text{ und}$

$$\langle j, m_j, l, s | j_z + s_z | j, m_j, l, s \rangle = \delta_{m_j, m} \text{dec. } \pm m_j \left(1 \pm \frac{1}{2l+1}\right) \text{ für } j = l \pm \frac{1}{2}$$

↑  
G-G einsehen

$$E_{n, l, j, m_j}^{(1)} = m_j \underbrace{\frac{\hbar |e|}{2mc}}_{\mu_B} B, \quad \bar{g} = 1 \pm \frac{1}{2l+1} \quad \text{für } j = l \pm \frac{1}{2}$$

Anomales Zeeman-Effekt

$g = \text{Landé-Faktor}$

Bohr-Magneton  $\mu_B = \frac{\hbar |e|}{2mc}$



⑥ „Starkes“ Magnetfeld

$$\langle \hat{H}_2 \rangle \gg \langle \hat{H}_0 \rangle$$

(MF  $\gg$  Spin-Bahn)

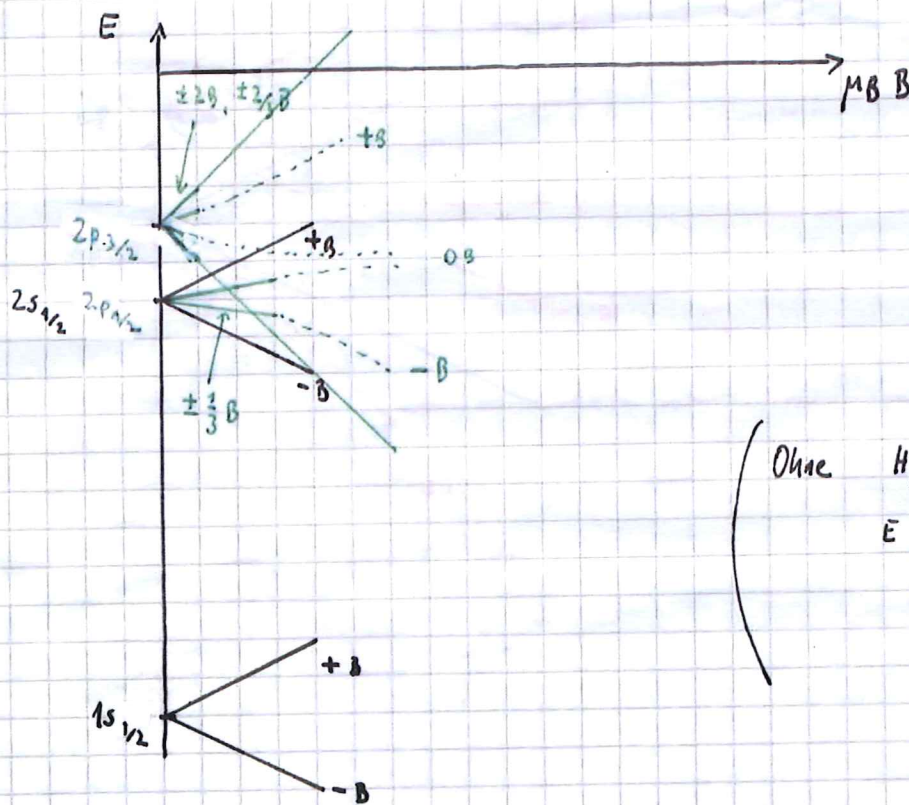
Ungestörte Normen sind  $|l m_l s m_s\rangle$  (Spin-Bahn vernachlässigbar)

$$\langle l m_l s m_s | \hat{L}_z^2 + 2\hat{S}_z^2 | l m_l s m_s \rangle = \hbar^2 m_l m_l + \hbar^2 m_s m_s = \hbar^2 (m_l + 2m_s)$$

$$\underline{E_{n m_l m_s}^{(1)}} = + \frac{(m_l + 2m_s) \mu_B B}{-l, \dots, l \quad \pm \frac{1}{2}}$$

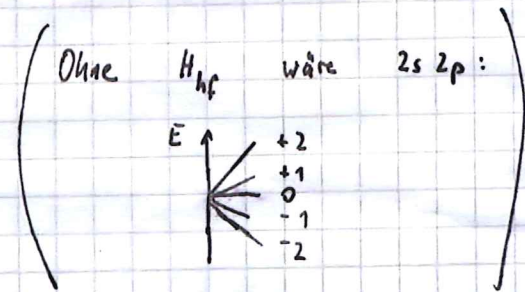
Normales Zeeman-Effekt (Paschen-Back-Effekt)

Schematische: (siehe Cohen-Tannoudji)



$$\bar{g}(2p_{3/2}) = \frac{4}{3}$$

$$\bar{g}(2p_{1/2}) = \frac{2}{3}$$





### 3.4. Freie Elektronen im Magnetfeld: Landau-Niveaus

Externes Potential  $U=0$ .

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \gamma \vec{B} \cdot \vec{s}$$

$\vec{B}$  homogen  $\rightarrow$  Effekt des Spins trivial: Aufspaltung aller Niveaus gemäß  $\pm \frac{1}{2} \gamma |\vec{B}|$ .

Im folgenden nur Bahnanteil d. Landau  $\sqrt{\text{-Eichung}}$   $\vec{A} = (-By, 0, 0)$  für  $\vec{B} = B\hat{e}_z$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x + \frac{eB}{c} \hat{y} \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Ansatz:  $\psi(\vec{r}) = e^{i(k_x x + k_z z)} \chi(y)$

Einsetzen in SGL:

$$\frac{1}{2m} \left[ \hbar^2 k_x^2 + 2k_x \frac{eB}{c} y + \left( \frac{eB}{c} \right)^2 y^2 \right] \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \chi = E \chi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 \chi + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \chi = E \chi$$

$$\omega_c = \frac{|e|B}{mc}; \quad y_0 = -\frac{c\hbar k_x}{eB}$$

1. und 2. Term beschreiben harmonischen Oszillatoren (!) mit Frequenz  $\omega_c$  und Ruhelage  $y_0$ . Lösung bekannt. 3. Term verschiebt nur Energie.

Eigenwertspektrum

$$E(n, k_z) = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Bewegung  $\perp$   $\vec{B}$ -feld

Bewegung  $\parallel$   $\vec{B}$ -feld

Für festes  $k_z$  gibt es diskrete Energieniveaus („Landau-Niveaus“), nummeriert mit  $n$ .



Niveaus  
Entartung  
WF

Schwartzsch ( $k_z = 0$  fest):



Eigenzustände von  $\hat{H}$  (ohne Beweis):

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} e^{-\frac{1}{2}(y-y_0)^2/a_B^2} H_n\left(\frac{y-y_0}{a_B}\right) e^{ik_z z} \frac{1}{\sqrt{\pi}^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{a_B}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

$(y_0 = \frac{\hbar}{eB} k_x, \quad a_B^2 = \frac{\hbar c}{|e|B})$        $\uparrow$  Hermite-Polynome

$\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$   
 $\frac{1}{\sqrt{L_x L_y}}$   
 $\times \times$

$\hat{=}$  ebene Welle in x-Richtung  $\times$  Oszillator-WF in y-Richtung am Ort  $y_0$

Landau-Niveaus sind hochgradig entartet! ( $\sim$  Systemgröße)

Entartung für endliches System:

Oszillatorzentrum im System  $\leadsto 0 < y_0 < L_y \quad \leadsto 0 < |k_x| < \frac{eB}{\hbar c} L_y$

Period. Randbed. in x  $\leadsto \Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$

Zahl d. Zustände ( $n, k_z$  fest) ist  $\frac{k_{x, \max}}{\Delta k_x} = \frac{|e|B}{\hbar c} \frac{L_x L_y}{2\pi} = \frac{\Phi}{\Phi_0}$

( $\Phi_0$  Flussquant,  $\Phi_0 = \frac{h c}{|e|}$ )

### 3.5. Spektren und Zustandsdichte

Greensche Fkt  $\hat{G}_E$ :

$$\text{Schrödingergl } (E_n - \hat{H}) |\psi_n\rangle = 0$$

Operator  $(E - \hat{H})$  hat Inverse für  $E \neq E_n$ :

$$\underline{\hat{G}_E := \frac{1}{E - \hat{H}} = (E - \hat{H})^{-1}}$$

$\hat{G}_E$  hat Pole bei  $E_n$ ; für  $E \neq E_n$  heißt  $\hat{G}_E$  Resolvente von  $\hat{H}$  an der Stelle  $E$ .

Es ist günstig (siehe später),  $E \rightarrow E + i\eta$  mit Infinitesimal  $\eta > 0$  zu ersetzen. (retardierte GF)

Dann

$$\hat{G}_E = \frac{1}{E + i\eta - \hat{H}} = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E + i\eta - E_n}$$

Ortdarstellung

$$\langle q | \hat{G}_E | q' \rangle = \sum_n \frac{\psi_n(q) \psi_n^*(q')}{E + i\eta - E_n}$$

Zustandsdichte: (zur Umwandlung  $\sum_n \rightarrow \int dE \dots$ )

Für System mit Eigenenergien  $E_n$  ist Zustandsdichte *für Systemzustände!* definiert als

$$\underline{\rho(E) = \sum_n \delta(E_n - E)}$$

Ein Zusammenhang mit der Greenschen Fkt ergibt sich aus

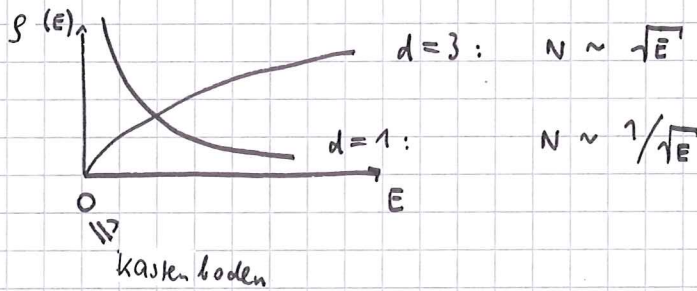
$$\delta(E - E_n) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(E - E_n)^2 + \eta^2} = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \frac{1}{E + i\eta - E_n}$$

Damit (mit  $\eta \rightarrow 0^+$ )

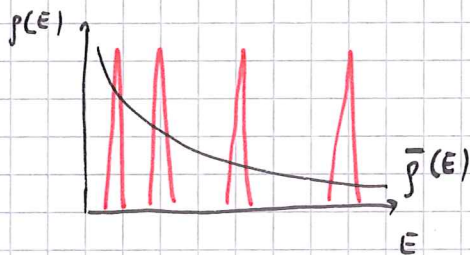
$$\underline{\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_n \text{Im} \frac{1}{E + i\eta - E_n} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Sp} \hat{G}_E}$$



Beispiel: Unendlich tiefes Kastenpotential in  $d$  Dimensionen  
im Grenzfall Kastengröße  $L \rightarrow \infty$



Für endliche Kastengröße sind die Niveaus diskret, mit  $E_n \propto n^2$ .  
Hier besteht  $\rho(E)$  aus  $\delta$ -Peaks; es bietet sich an, auf  
großen Energiebereichen eine gemittelte Zustandsdichte  $\bar{\rho}(E)$   
einzuführen.



Semiklassischer Ausdruck für gemittelte Zustandsdichte! (1 Teilchen)

Dazu  $N(\bar{E}) = \text{Anzahl Zustände mit } E_n \leq \bar{E} = \sum_{E_n \leq \bar{E}} 1 = \int_0^{\bar{E}} dE' \rho(E')$

$\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE}$

Semiklassik: Zustände im Phasenraum zählen, mit Volumen  $(2\pi\hbar)^d$  pro Zustand

$N(\bar{E}) \propto \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int_{H(q,p) \leq \bar{E}} d^d q d^d p$

$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$   
 $d=3$

$$= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\frac{p^2}{2m} + V(q) \leq \bar{E}} d^3 q p^2 dp = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_{V(q) \leq \bar{E}} d^3 q \int_0^{\sqrt{2m(\bar{E}-V(q))}} p^2 dp$$

$$= \frac{4\pi}{3(2\pi\hbar)^3} \int_{V(q) \leq \bar{E}} d^3 q [2m(\bar{E}-V(q))]^{3/2}$$

Damit

$$\bar{\rho}(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{V(\vec{q}) \leq \epsilon} d^3q \sqrt{\epsilon - V(\vec{q})}$$


---

Für Kastenpotential in  $d=3$  mit  $V(\vec{q})=0$  für  $\vec{q} \in L^3$

ergibt dies

$$\bar{\rho}(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2} L^3}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\epsilon}$$



### 3.6. Green'sche Funktion und Übergangsamplitude

Mittels  $\frac{1}{\alpha} = \int_0^{\infty} dx e^{-\alpha x}$  folgt

$$\frac{1}{E+i\eta - E_n} = \int_0^{\infty} dt \frac{1}{i\hbar} e^{i/\hbar (E+i\eta - E_n)t}$$

und  $\hat{G}_E = \frac{1}{E - \hat{H}} = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \frac{1}{E+i\eta - E_n} = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \int_0^{\infty} dt \frac{1}{i\hbar} e^{i/\hbar (E+i\eta - E_n)t}$

$$\hat{G}_E = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{i/\hbar (E+i\eta)t} e^{-i/\hbar \hat{H}t}$$

Die Green'sche Fkt in Operatorform <sup>(1 Teilchen)</sup> ist damit die „halbseitige“  
Fouriertransformation der Übergangsamplitude:

$$G_E(q, q') = \langle q | \hat{G}_E | q' \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{i/\hbar (E+i\eta)t} \underbrace{\langle q | e^{-i/\hbar \hat{H}t} | q' \rangle}_{U(qt, q'0)}$$

Häufig werden  $\hat{G}$  „Übergangsamplitude“, „Propagator“ und „Green'sche Fkt“  
synonym benutzt.

Zusammenhang zu Green'scher Fkt einer DGL:

- $\hat{U}(t) = e^{-i/\hbar \hat{H}t}$  löst die Schrödingergleichung  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \hat{U}(t) = 0$ .
- $\hat{G}_E$  löst die Gleichung  $(E - \hat{H}) \hat{G}_E = \hat{1}$

Dies legt Fourierkafo nahe, und wir haben abgeleitet:

$$\hat{G}_E = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{i/\hbar (E+i\eta)t} \hat{U}(t)$$

Beispiel: Freies Teilchen in 3d, mit  $\hat{H} = \frac{p^2}{2m}$ .

Wir wissen (Kap 2):

$$U(\vec{q}t, \vec{q}'0) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp\left( \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\vec{q} - \vec{q}')^2}{t} \right)$$

$(E - \hat{H}) \hat{G}_E = \hat{1}$  in Ortsdarstellung ist:

$$\left( E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{q}} \right) G_E(\vec{q}, \vec{q}') = \delta(\vec{q} - \vec{q}')$$

Diese Gleichung ist (bis auf Faktoren) identisch zur Helmholtz-Gleichung: (inhomogene Wellengl.)

$$(\Delta_{\vec{q}} + k^2) G_H(\vec{q}, \vec{q}') = \delta(\vec{q} - \vec{q}')$$

$$\leadsto G_E(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{2m}{\hbar^2} G_H(\vec{q}, \vec{q}')$$

Bekannt (Streuung):

$$G_H(\vec{q}, \vec{q}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{q} - \vec{q}'|}}{|\vec{q} - \vec{q}'|}$$

$$\leadsto G_E(\vec{q}, \vec{q}') = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{i/\hbar \sqrt{2mE} |\vec{q} - \vec{q}'|}}{|\vec{q} - \vec{q}'|}$$

(übliche Interpretation: Kugelwelle propagiert von  $\vec{q}'$  nach  $\vec{q}$  mit Energie  $E$ )

Lösung der Schröd. Gleichung mit externem Potential:

$$\left( E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{q}} \right) \psi(\vec{q}) = V(\vec{q}) \psi(\vec{q})$$

Lösung für inhom. DGL aus ungestörte homogene Lsg + spezielle „inhom.“ Lsg:

$$\psi(\vec{q}) = \psi_0(\vec{q}) + \int d^3q' G_E(\vec{q}, \vec{q}') V(\vec{q}') \psi(\vec{q}')$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Lsg von} \\ \left( E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi_0 = 0 \end{array}$$

Lippmann-Schwinger-Gleichung



## Semiklassischer Ausdruck für $G_E(q, q')$

Dazu aus Kap 2 (zunächst 1 Teilchen):

$$U(q, t, q', 0) \stackrel{\text{klass. Limes}}{\approx} \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}} e^{i/\hbar S[q_{kl}]}$$

Also:

$$G_E(q, q') \approx \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}} e^{i/\hbar (Et + S[q_{kl}])}$$

Integral in Näherung der stationären Phase (da  $S, Et$  „groß“ in Einheiten von  $\hbar$ )

Dazu  $\int dt f(t) e^{i/\hbar \varphi(t)} \stackrel{\text{Semiklassik}}{\approx} f(t_0) e^{i/\hbar \varphi(t_0)} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{\varphi''(t_0)}}$   
 $\varphi'(t_0) = 0$

Hier:  $\varphi(t) = Et + S[q_{kl}]$ .  $S[q_{kl}]$  hängt von  $t$  ab: Dauer des Weges  $q \rightarrow q'$ .

Wir benötigen:  $S = \int_0^t dt' L = \int_{\text{weg}} pdq - \int_0^t dt' H \rightsquigarrow \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_{kl} = -H \Big|_{kl}$

Damit:  $\frac{d\varphi}{dt} = E + \frac{\partial S[q_{kl}]}{\partial t} = E - E[q_{kl}] \stackrel{!}{=} 0$

$\rightsquigarrow$  Beitrag zu Integral von Zeit  $t_0$ , bei der klassische Bahn  $q \rightarrow q'$  in Zeit  $t_0$  gerade Energie  $E$  hat.

Dort:  $\varphi(t_0) = Et_0 + \int dt L = Et_0 + \int (pdq - Hdt) \Big|_0^{t_0} = \int pdq = W$

Man bezeichnet  $W = \int pdq = W(q, q', E)$  als Maupertuische (oder verkürzte) Wirkung.

$$\rightsquigarrow G_E(q, q') \approx \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} \right)^{1/2} e^{i/\hbar W(q, q', E)}$$

S und W hängen über Legendre - Trafo zusammen ( $t \leftrightarrow E$ ):

$$S = W - Et$$

$$E = - \frac{\partial S}{\partial t}$$

$$E(q, q', t) \leftrightarrow t(q, q', E)$$

$$\left( t = \frac{\partial W}{\partial E}, \text{ und } \frac{\partial t}{\partial q_j} = 0, \dots \right)$$

Man kann zeigen:

$$- \frac{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}} = \frac{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 W}{\partial E^2}} - \frac{\frac{\partial^2 W}{\partial q \partial E}}{\frac{\partial^2 W}{\partial q' \partial E}}$$

In d Dimensionen erhält man:

$$G_E(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{1}{i\hbar} \left( \frac{i}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{d-1}{2}} \sum_d \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial q_j} & \frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial E} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial q_j} & \frac{\partial^2 W}{\partial E^2} \end{pmatrix} e^{i/\hbar W_d(\vec{q}, \vec{q}', E)}$$

↑ alle klass. Wege  $\vec{q} \rightarrow \vec{q}'$  mit Energie E

↑ Matrix  $(d+1) \times (d+1)$ , mit Ableitungen nach  $q_1, \dots, q_d, E$ .

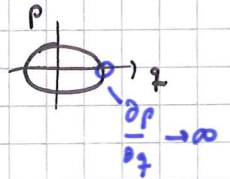
Bemerkung Maslov - Indizes (manchmal Morse - Indizes)

Der Ausdruck  $\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}$  im Vorfaktor des Propagators kann

negativ sein. Man schreibt deshalb auch  $\sqrt{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}} = \sqrt{\left| \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} \right|} e^{-\frac{\mu}{2} \pi i}$

mit  $\mu =$  Anzahl der „Inflexions“ Punkte entlang der Bahn ( $\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}$  Nullwertgang)

Dies sind die Umkehrpunkte, denn  $\frac{\partial S}{\partial q} = p$ .



Für  $G_E$  kann man schreiben

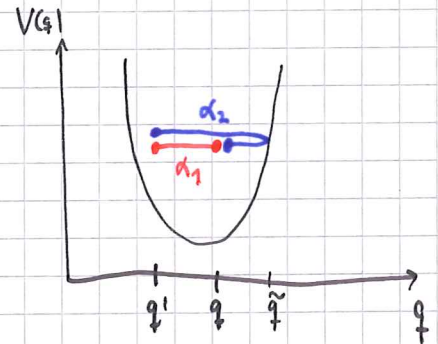
$$G_E(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{1}{i\hbar} \left( \frac{i}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{d-1}{2}} \sum_d \sqrt{\left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial q_j} & \frac{\partial^2 W}{\partial q_i \partial E} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial q_j} & \frac{\partial^2 W}{\partial E^2} \end{pmatrix} \right|} e^{i/\hbar W_d - i/\hbar \frac{\mu}{2} \pi}$$



Beispiel: Teilchen in 1d, Potential  $V(q)$

$$\begin{aligned} \text{Weg } \alpha_1: \quad W_{\alpha_1}(q, q', E) &= \int_{q'}^q dq p \\ (\mu_{\alpha_1} = 0) &= \int_{q'}^q dq \sqrt{2m(E - V(q))} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Weg } \alpha_2: \quad W_{\alpha_2}(q, q', E) &= \left( \int_{q'}^{\tilde{q}} + \int_{\tilde{q}}^q \right) dq p \\ (\mu_{\alpha_2} = 1) & \end{aligned}$$



Vollständige Wirkung folgt aus Summe aller Wege.

Ergibt Bohr-Sommerfeld-Quantisierung  $\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$  (SÜB)

### 3.7. Gutzwillersche Spurformel

Zustandsdichte aus  $\hat{G}_E$  in semiklassischer Näherung:  $\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Sp } \hat{G}_E$ .

Dazu

$$\text{Sp } \hat{G}_E = \int d^d q \ G_E(\vec{q}, \vec{q}') \sim \int d^d q \ \sum_{\alpha'} \sqrt{|A_{\alpha'}|} e^{i/\hbar W_{\alpha'}(\vec{q}, \vec{q}', E) - i\pi \chi_{\alpha'}} \Big|_{\vec{q}' = \vec{q}} \quad \begin{array}{l} \text{(unklassische} \\ \text{Bahnen)} \end{array}$$

Auswertung des Integrals mittels Näherung der stationären Phase.

" $q' = 0$ " ist (1d):

$$0 = \left( \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{\partial W}{\partial q'} \right) \Big|_{q=q'} = -p_i + p_f$$

da  $W(q, q', E) = \int_{q'}^q dq p$ . Bedingung  $p_i = p_f \hat{=} \text{Summation über periodische Bahnen fester Energie}$

$$\rightarrow \text{Sp } \hat{G}_E \approx \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha'} \sqrt{|A_{\alpha'}|} e^{i/\hbar W_{\alpha'}(E)} \quad \text{mit} \quad A_{\alpha'} = \frac{2\pi i \hbar}{W_{\alpha'}''} \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W_{\alpha'}}{\partial q \partial q'} & \frac{\partial^2 W_{\alpha'}}{\partial q \partial E} \\ \frac{\partial^2 W_{\alpha'}}{\partial E \partial q'} & \frac{\partial^2 W_{\alpha'}}{\partial E^2} \end{pmatrix}$$

(Gutzwillersche Spurformel)

periodische Bahnen mit Energie  $E$

Bahnen mit  $W \lesssim \hbar$  sollten separat beobachtet werden, da dort die Näherung der stationären Phase versagt ( $\hat{=} \text{kurze Bahnen, } q \text{ nahe } q'$ )

Approximiere Bewegung als freie Bewegung mit Energie  $E - V(\vec{q})$ :

$$\lim_{\vec{q}' \rightarrow \vec{q}} G_E(\vec{q}, \vec{q}') = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \lim_{\vec{q}' \rightarrow \vec{q}} \frac{e^{i/\hbar \sqrt{2m(E-V(\vec{q}))} |\vec{q} - \vec{q}'|}}{|\vec{q} - \vec{q}'|}$$

Beitrag zur Zustandsdichte:

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im Sp } G_E \Big|_{\text{kurz}} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d^d q \ G_E(\vec{q}, \vec{q}') \Big|_{\vec{q}' \rightarrow \vec{q}}$$

$$\stackrel{d=3}{=} \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int d^3 q \ \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-V(\vec{q}))}$$

$$= \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{V(\vec{q}) \leq E} d^3 q \ \sqrt{E - V(\vec{q})} = \bar{\rho}(E) \quad (!)$$





### 3.8. Spektren des H-Atoms im B-Feld

Fouriertraf des expt Spektrums  $E \rightarrow t$

$\leadsto \exists$  große Beiträge bei bestimmten Zeiten  $T$ , die den Umlaufzeiten periodischer Bahnen entsprechen

Effiziente Analyse:

Betrachte Skaleneverhalten als Fkt von  $E$  und  $B$  wie folgt:

Die klassische Lagrange-Fkt

$$L(\vec{r}, \frac{d\vec{r}}{dt}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + \frac{e^2}{r} + \frac{Be}{2c} (\dot{x}y - \dot{y}x)$$

kann durch folgende Skalierung in selbstähnlicher Weise transformiert werden:

$$t' = t/\gamma, \quad \vec{r}' = \vec{r}/\gamma^{2/3}, \quad B' = \gamma B$$

$$\begin{aligned} \leadsto L' = L(\vec{r}', \frac{d\vec{r}'}{dt'}, t') &= \gamma^{2/3} L & \leadsto S' = \gamma^{-1/3} S \\ E' &= \gamma^{2/3} E \end{aligned}$$

Strategie: Betrachte Spektroskopie mit

$$E = \gamma^{2/3} E_0, \quad B = \gamma B_0 \quad \leadsto \quad S = \gamma^{-1/3} S_0$$

$\searrow$  unabh. von  $E, B$ ;  
 $\nearrow$  hängt nur von  $E_0, B_0$  ab

Die gemessene Zustandsdichte (aus Absorptionsspektren) wird damit eine Fkt von  $\gamma$ .

$$P^{(x)} = \bar{P} + \sum_{\alpha'} B_{\alpha'} e^{i/\tau_{\alpha'}} \gamma^{-1/3} W_{\alpha'}^0$$

$\uparrow$   
Skaleneverhalten der Wirkung

Eine Fouriertraf bzgl  $\gamma^{-1/3}$  liefert also direkt das Spektrum der Wirkung  $W_{\alpha'}$ , wo Peaks periodischen Bahnen zugeordnet werden können.