

3. Spektren und Bahnen

3.1. Geladenes Teilchen im Magnetfeld

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

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

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

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

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

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):

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

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

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

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

In diesem Kapitel:

- Elektron am Wasserstoffatom, schwaches homogenes Feld
- Freie Elektronen, beliebiges homogenes Feld
- Zwischenbereiche $\rightarrow$ 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

$$\underline{\bar{E}_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} = -\frac{1}{2n^2}}$$

$$\frac{e^4 m}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_0} = \frac{e^2}{a_0} = \frac{e^2}{a_0}$$

1 Hartree = 27.2 eV

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

Eigenfkt

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

mit

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

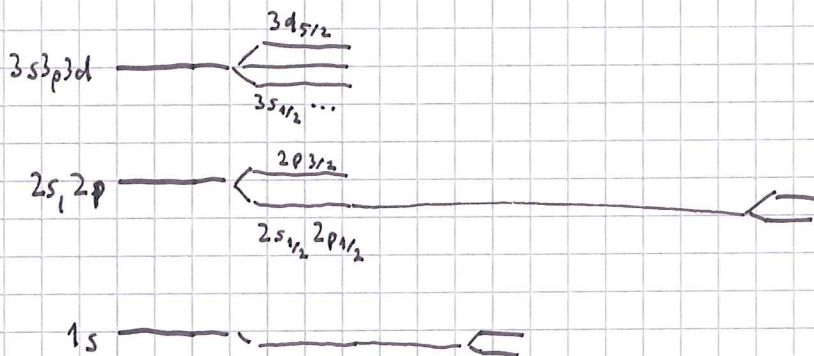
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

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

$$\Rightarrow \partial_i \vec{A}_j = \vec{A}_j \partial_i$$

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

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

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

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

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

$\uparrow g_{el} = 2$

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

"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

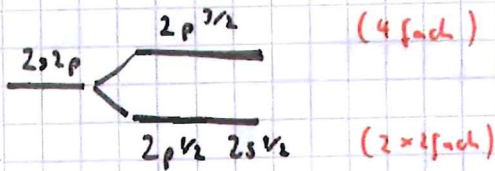
$$\langle \hat{H}_2 \rangle \ll \langle \hat{H}_1 \rangle$$

(MF $\ll$ Spin-Bahn)

Ungestörte Niveaus sind die Feinstruktur - aufgespaltenen

$$|j m_j s\rangle$$

$$j = l \pm \frac{1}{2}, -j \leq m_j \leq j$$



$$\langle j m_j s | j_z + s_z | j m_j' s \rangle = \delta_{m_j m_j'} \delta_{ss'} \left(\langle j m_j s | s_z | j m_j' s \rangle \right)$$

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

Konkret:

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

Damit $\langle j m_j s | s_z | j m_j' s \rangle \approx \delta_{m_j m_j'}$ und

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

↑
G-G einsetzen

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

Anomaler 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)

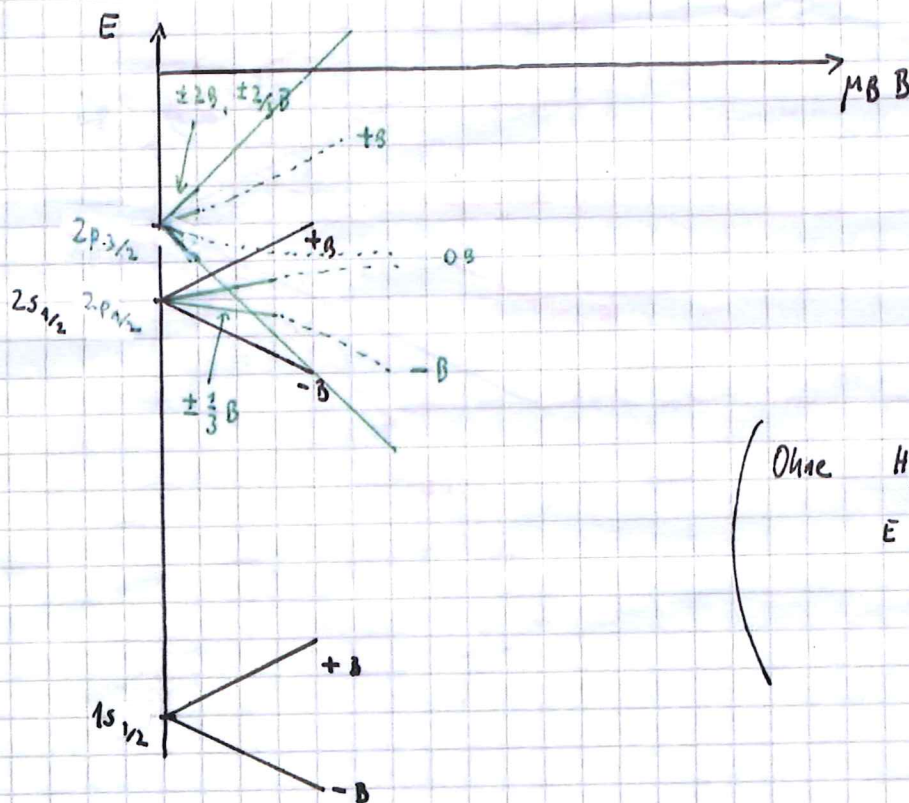
$$\langle l m_l s m_s | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | l m_l' s m_s' \rangle = \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'} \hbar (m_l + 2m_s)$$

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

Normales Zeeman-Effekt

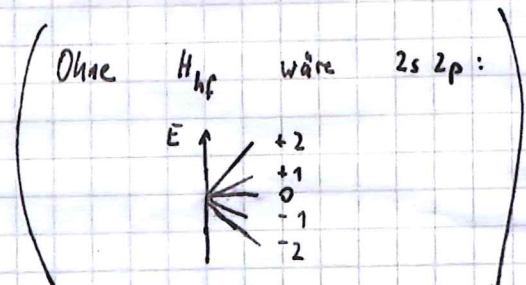
(Paschen-Back-Effekt)

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 $\pm \frac{\hbar}{2} \gamma |\vec{B}|$.

Im folgenden nur Bahnanteil d. Landau-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 Oszillator (!) mit Frequenz ω_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 .

Schwarzschild ($k_z = 0$ fest): $B = 0$

kontinuierliches Spektrum

 $\downarrow \frac{|e|\hbar}{mc} B$ $B > 0$

Landau-Niveaus

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

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

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

Hermite-Polynome

 $\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$ $\hat{=}$ 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:

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

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

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

$$(\Phi_0 \text{ Flussquant}, \quad \Phi_0 = \frac{\hbar c}{|e|})$$

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

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

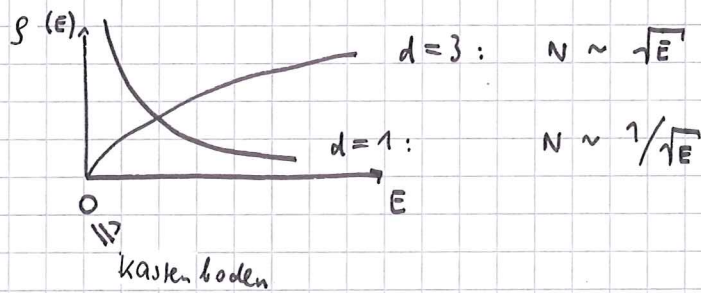
Ein Zusammenhang mit der Greenschen Fkt ergibt sich aus

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

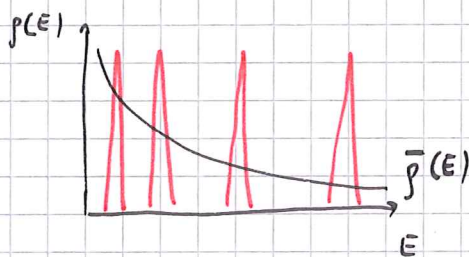
Damit (mit $\eta \rightarrow 0^+$)

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

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 $g(E)$ aus δ -Peaks; es bietet sich an, auf
großen Energiebereichen eine gemittelte Zustandsdichte $\bar{g}(E)$
einzuführen.



Semiklassischer Ausdruck für gemittelte Zustandsdichte! (1 Teilchen)

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

$\leadsto g(E) = \frac{dN(E)}{dE}$

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

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

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

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

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

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. Greensche Funktion und Übergangsamplitude

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

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

Die Greensche Fkt in Operatorstellung ^(1 Teilchen) ist damit die „halbszeitige“ 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 $\hat{U}$ ^{die Begriffe} „Übergangsamplitude“, „Propagator“ und „Greensche Fkt“ synonym benutzt.

Zusammenhang zu Greenscher 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 liegt Fourierkafu 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):

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

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

$$G_h(\vec{q}, \vec{q}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i k |\vec{q} - \vec{q}'|}}{|\vec{q} - \vec{q}'|}$$

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

(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:

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

$\uparrow$
Lsg von
 $(E + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta) \psi_0 = 0$

Lippmann-
Schwinger-
gleichung

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

Dazu aus Kap. 2 (zunächst 1 Teilchen):

$$U(qt, q'0) \stackrel{\text{klass. Limes}}{\approx} \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}} e^{i/\hbar S[q_{kl}]}$$

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: $S = \int_0^t dt' L = \int_{\text{weg}} p dq - \int_0^t dt' H \leadsto \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_{kl} = -H \Big|_{kl}$

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

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

Dort: $\varphi(t_0) = Et + \int dt L = Et + \int (pdq - Hdt) \stackrel{t_0}{\downarrow} \int pdq = W$

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

$$\leadsto G_E(q, q') \approx \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}}{\frac{\partial^2 S}{\partial t^2}} \right)^{1/2} e^{i/\hbar W(q, q', E)}$$

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

$$S = W - Et$$

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

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

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

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:

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

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

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

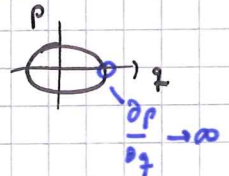
Bemerkung Maslov - Indizes (manchmal Morse - Indizes)

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 μ = Anzahl der „folgenden“ Punkte entlang der Bahn ($\frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'}$ Null durchgang)

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



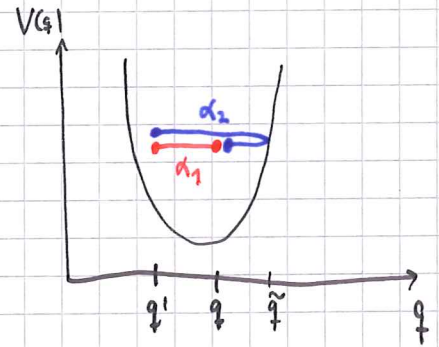
Für G_E kann man schreiben

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

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

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

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



Vollständige Wirkung folgt aus Summe aller Wege.

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

3.7. Gutzwillersche Spurformel

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

Dazu

$$\operatorname{Sp} \hat{G}_E = \int d\vec{q} G_E(\vec{q}, \vec{q}) \sim \int d\vec{q} \sum_{\alpha} \sqrt{|A_{\alpha}|} e^{i/\hbar W_{\alpha}(\vec{q}, \vec{q}; E) - i\pi \frac{\mu}{2}} \Big|_{\vec{q}'=\vec{q}} \quad \begin{matrix} \text{(periodische} \\ \text{Bahnen)} \end{matrix}$$

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 $p_i = p_f \hat{=} \text{Summation über periodische Bahnen fester Energie}$

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

(Gutzwillersche Spurformel)

periodische Bahnen mit Energie E

Bahnen mit $W \lesssim \hbar$ sollten separat betrachtet werden, da dort die Näherung der stationären Phase versagt ($\hat{=}$ kurze Bahnen, q 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:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} G_E \Big|_{\text{kurz}} &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int d\vec{q} G_E(\vec{q}, \vec{q}) \Big|_{\vec{q}' \rightarrow \vec{q}} \\ &\stackrel{d=3}{=} \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int d\vec{q} \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-V(\vec{q}))} \\ &= \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{V(\vec{q}) \leq E} d\vec{q} \sqrt{E - V(\vec{q})} = \bar{\rho}(E) \quad (!) \end{aligned}$$

$\operatorname{Im} \frac{e^{ix}}{x} \rightarrow x$

Folglich hat Zustandsdichte zwei (semiklassische) Beiträge:

$$\underline{\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \rho_{\text{osc}}(E)}$$

↑
Bahnen mit Länge 0

↑
periodische geschlossene Bahnen

mit

$$\underline{\rho_{\text{osc}}(E) = -\frac{1}{\pi \hbar} \operatorname{Re} \sum_{\alpha'} \sqrt{|A_{\alpha'}|} e^{i/\hbar W_{\alpha'}(E) - i\mu_{\alpha'} \frac{\pi}{2}}$$

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:

Bemerte Skalenvverhalten 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:

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

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

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 ;
(hängt nur von E_0, B_0 ab)

Die gemessene Zustandsdichte (aus Absorptionsspektren) wird damit eine Fkt von γ .

$$\rho^{(x)} = \bar{\rho} + \sum_{\alpha'} B_{\alpha'} e^{i/t} \gamma^{-1/3} W_{\alpha'}^0$$

$\uparrow$
Skalenvverhalten der Wirkung

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