

Experimentalphysik III (Oberthaler)

Robin Heinemann

6. Mai 2018

Inhaltsverzeichnis

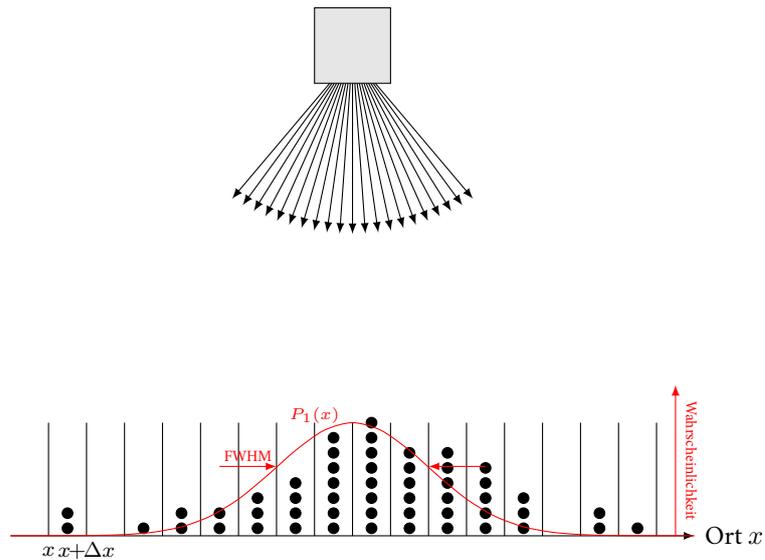
1	Vorspann	2
1.1	Ein Experiment mit klassischen Teilchen	2
1.2	Ein Experiment mit klassischen Wellen	3
1.3	Ein Experiment mit Elektronen/Atomen	5
1.4	Zusammenfassung	7
2	Materiewellen	8
2.1	Historische Herleitung von de Broglie	8
2.2	Wie sieht die Materiewelle aus?	10
2.3	Das Wellenpaket - physikalische Wellenfunktion durch Überlagerung (Superposition von ebenen Wellen)	11
2.4	Allgemeine Ausbreitung eines Wellenpakets	18
2.5	Beugung von Materiewellen	20
2.5.1	Elektronen	21
2.5.2	Moleküle an einem Transmissionsgitter	22
2.5.3	Nachweis von sehr „fragilen“ Molekülen	22
2.5.4	Beugung von Makro-Molekülen	23
2.6	Atom Interferometer	23
2.7	Zusammenfassung	27
3	Allgemeine Quantenmechanik	27
3.1	Quantenmechanischer Zustand und dessen Darstellung	27
3.2	Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren	29
3.3	Die Schrödinger Gleichung (nicht relativistische Quantenmechanik)	33
4	Beispiele für Einteilchen Quantenmechanik	34
4.1	Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe	34
4.2	Tunneleffekt durch eine Potentialbarriere	38
4.3	Kasten-Potential	39
4.4	„Revival“ in der Quantenmechanik	43
4.5	Harmonischer Oszillator	43
4.6	Klassische Korrespondenz beim harmonischen Oszillator	47
5	Wasserstoff	49
5.1	Ausgestrahltes Licht einer H ₂ Gasentladung	49

5.2	Wasserstoff ist mehr als zusammengesetztes ein negatives Teilchen gebunden an ein positives Teilchen	49
5.3	Wasserstoff - ein einfaches Modell	50
5.4	Wasserstoff - radiale Wellenfunktion	52
5.5	Wasserstoff - Winkelanteil der elektronischen Wellenfunktion	53
5.6	Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff	57
5.7	Optische Übergänge	57
5.8	Externe Felder - Zeeman-Effekt (1896)	58
6	Spin	59
7	2 Elektronen System am Beispiel Helium	59
7.1	Helium - $2p, 2n, 2e^-$: Modell: $Z = 2$	59
7.2	Spin Feiheitsgrad	60

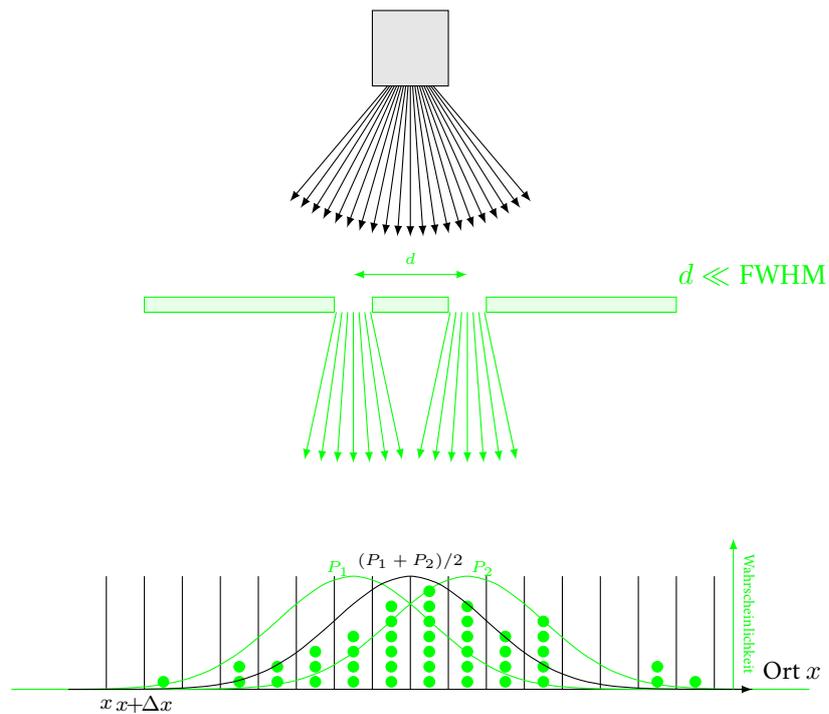
1 Vorspann

1.1 Ein Experiment mit klassischen Teilchen

1. Fall: Quelle von nicht weiter zerteilbaren Teilchen mit zufälliger Richtung. Es werden die Anzahl der Teilchen auf einem Raster x mit Gitterkonstante Δx gemessen. Dann werden in der Mitte die meisten Teilchen ankommen. Die diskrete Verteilung kann mit einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung beschrieben werden. Die wichtigen Größen sind hier die Position der maximalen Wahrscheinlichkeit und die Breite (FWHM - full width half maximum)



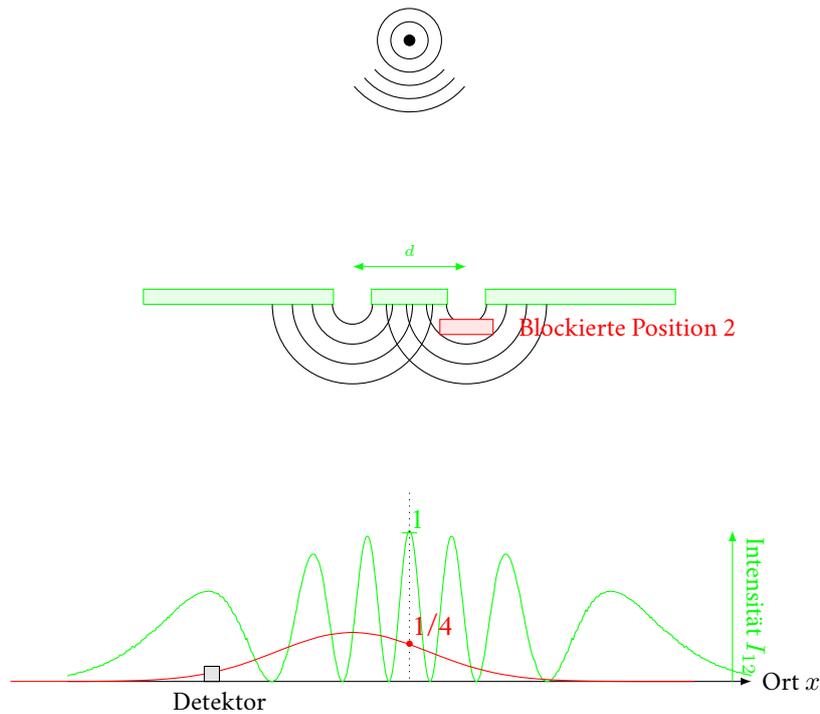
2. Fall: 2 Quellen (mittels Doppelspalt der Breite $d, d \ll \text{FWHM}$)



Wichtig: Diskrete Zahlen. Die theoretische Wahrscheinlichkeitsverteilung kann nur annähernd gemessen werden!
 Anzahl der Teilchen $\rightarrow \infty \implies P_1(x)$.

1.2 Ein Experiment mit klassischen Wellen

Quelle sendet Kugelwellen aus (fixe Frequenz, fixe Amplitude), Doppelspalt. Ein Detektor misst Strom \propto Intensität. Man erhält das Intensitätsmuster I_{12} eines Doppelspalts. Bei blockieren eines der Öffnungen des Doppelspalt erhält man einen Einzelspalt und somit nur noch das Intensitätsmuster eines Einzelspalts, mit Maximum bei dem nicht blockierten Spalt. Wichtig: Intensität ist kontinuierlich I_{12} kann genau gemessen werden.



Warum hat I_{12} die angegebene Form?

$$I(x) = c\varepsilon_0 \frac{1}{2T} \int_{-T}^T E(x, t) dt$$

$$E(x, t) = E_1 \cos(\omega t + \vec{k} \vec{R}_1) + E_2 \cos(\omega t + \vec{k} \vec{R}_2)$$

mit Hilfe von komplexer Schreibweise

$$\begin{aligned} E(x, t) &= \Re\{E_1 e^{i(\omega t - \vec{k} \vec{R}_1)} + E_2 e^{i(\omega t - \vec{k} \vec{R}_2)}\} \\ &\quad \downarrow \qquad \qquad \downarrow \\ &\quad \text{reell} \qquad \qquad \text{reell} \\ &= \Re\left\{ \underbrace{E_1 e^{-i(\vec{k} \vec{R}_1)}}_{a_1} + \underbrace{E_2 e^{-i\vec{k} \vec{R}_2}}_{a_2} \right\} e^{i\omega t} \\ \implies I_{12}(x) &\propto |a_1 + a_2|^2 \end{aligned}$$

Wir interessieren uns nur für x -Abhängigkeit, nicht für absolute Werte

$$\begin{aligned} I_{12}(x) \propto |a_1 + a_2|^2 &= (a_1^* + a_2^*)(a_1 + a_2) \\ &= |a_1|^2 + |a_2|^2 + a_1^* a_2 + a_2^* a_1 \\ |a_1|^2 &= E_1 e^{ikR_1} E_1 e^{-kR_1} = E_1^2 \sim I_1 \\ |a_2|^2 &= E_2 e^{ikR_2} E_2 e^{-kR_2} = E_2^2 \sim I_2 \\ a_1^* a_2 + a_2^* a_1 &= a_1^* a_2 + \text{c. c.} \\ &= 2\Re\{a_1^* a_2\} = 2\Re\{E_1 E_2 e^{ik(\vec{R}_2 - \vec{R}_1)}\} \\ &= 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\underbrace{\vec{k}(\vec{R}_2 - \vec{R}_1)}_{\phi}\right) \\ \implies I_{12} &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \phi \end{aligned}$$

Maximale Intensität $\phi = 0$ $|\vec{R}_1| = |\vec{R}_2|$. Für $I_1 = I_2 = I_0$:

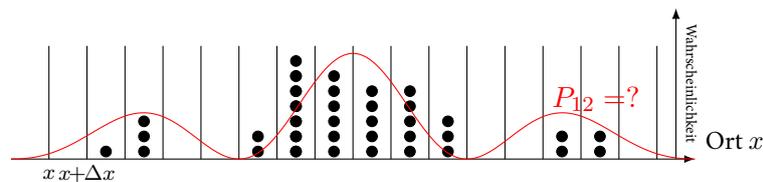
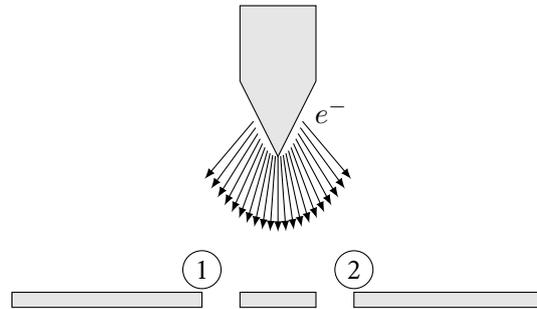
$$I_{\text{MAX}} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} = 4I_0$$

$$I_{\text{MIN}} = I_1 + I_2 - 2\sqrt{I_1 I_2} = 0$$

Intensität wird räumlich umverteilt, gesamt Intensität bleibt erhalten

$$I_1 + I_2 = \text{Energieerhaltung}$$

1.3 Ein Experiment mit Elektronen/Atomen

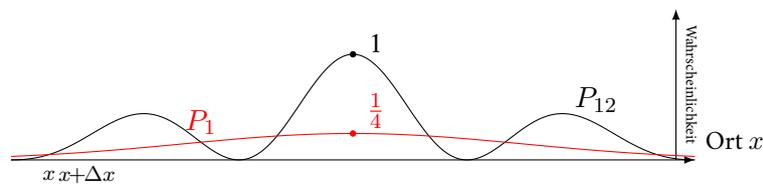
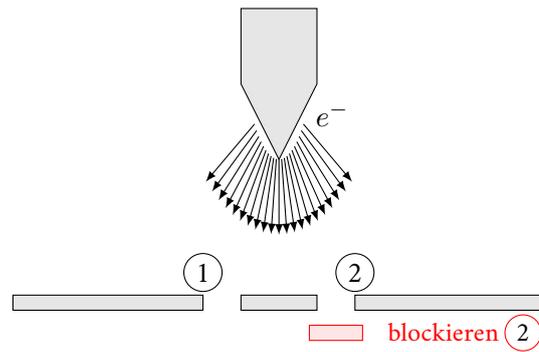


Quelle: Metallspitze aus hohem negativen Potential. Wieder diskrete Detektoren, Messung über Elektronenvervielfacher: durch anliegende Spannung löst ein Elektron aus einer Metallplatte weitere Elektronen aus, die wieder weiter auslösen. Es entsteht ein kurzer Strom-Peak, der gemessen werden kann.

Annahmen:

1. Das Elektron geht entweder durch Blende ①, oder Blende ②
2. Mit „komplizierter“ Dynamik

Einfacher Test für Annahme 2.: Blockieren einer Blende (hier ②). Man würde eine Verteilung ähnlich der mit zwei Blendern erwarten.



Teilchen verschwinden in den Minima bei der P_{12} , obwohl sie nach der Verteilung für eine Blende auch dort ankommen müssten.

$$\Rightarrow P_{12} \neq \frac{1}{2}\{P_1 + P_2\}$$

Mathematische „einfach“: Einführen der komplexen Wahrscheinlichkeitsamplitude ϕ . Wahrscheinlichkeiten sind gegeben durch

$$P_1 = |\phi_1|^2$$

$$P_2 = |\phi_2|^2$$

$$P_{12} = |\phi_1 + \phi_2|^2$$

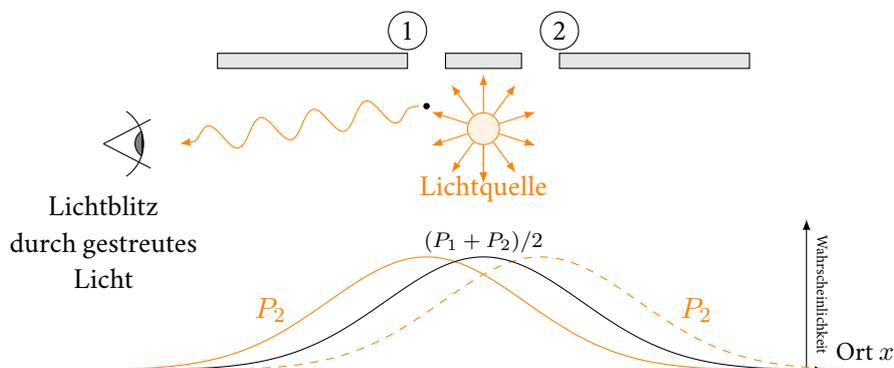
Wichtig

Elektronen werden einzeln gezählt. Es gibt keine "halben" Elektronen. Wahrscheinlichkeitsverteilung kann nur annähernd gemessen werden. $P_{12} \hat{=}$ unendlich viele Experimente.

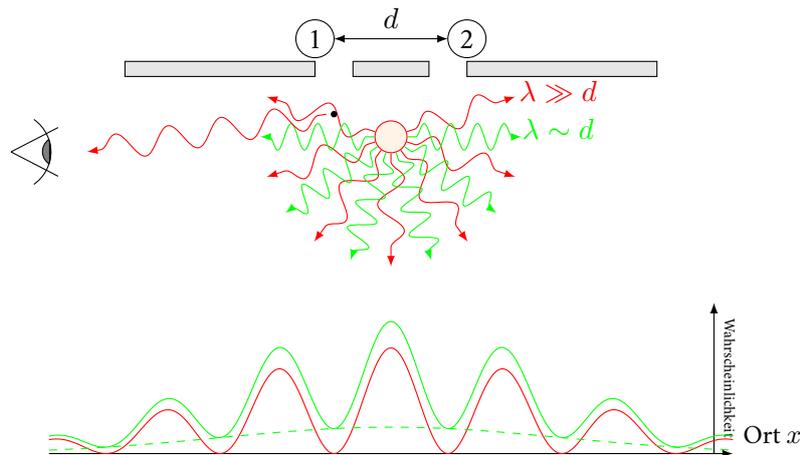
Welle-Teilchen Dualismus

Elektronen werden nur als Einheiten detektiert, die räumliche Verteilung kann als Interferenz von Wahrscheinlichkeits-Amplituden (komplexes ϕ) beschrieben werden.

Beobachtung der Elektronen an jedem Spalt.



Es entstehen Lichtblitze durch gestreutes Licht. P_1 : Blitz bei ①, P_2 : Blitz bei ②. Blitz bei ① und ② wird nie beobachtet. Dies bestätigt Annahme ①.



Bei $\lambda > d$ ist nicht mehr feststellbar, ob das Elektron durch ① oder ② kommt. Bei $\lambda \sim d$ erhält man eine Überlagerung von $|\phi_1 + \phi_2|$ und $\frac{1}{2}(P_1 + P_2)$

Quantenmechanik kann das beschreiben, weil das prinzipiell mögliche Wissen einer physikalischen

1.4 Zusammenfassung

Für fundierte Diskussion eines Quantenmechanischen Experiments muss definiert werden

1. Präparation de Anfangszustand
2. Wechselwirkung / Zeitlich Entwicklung
3. Detektion - Was wird beobachtet

Ein **Ereignis** ist definiert als ein spezielles Set von 1. bis 3..

Beispiel 1.1 Ein e^- verlässt die Quelle kann nicht alle Orte in Raum erreichen (Blenden), e^- wird in einem Ortsintervall $[x, x + \Delta x]$ detektiert.

Vorhersagen nach folgenden Regeln

1. Die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses in einem idealen Experiment ist gegeben als das Quadrat des Absolutbetrages einer im allgemeinen komplexen Wahrscheinlichkeitsamplitude
 $P \dots$ Wahrscheinlichkeit
 $\phi \dots$ Wahrscheinlichkeits-Amplitude
 $P = |\phi|^2 = \phi^* \phi$
2. Wenn ein Ereignis in verschiedener Art und Weise stattfinden kann, dann ist die Wahrscheinlichkeits-Amplitude gegeben als Summe der einzelnen Wahrscheinlichkeits-Amplituden der Möglichkeiten.

Beispiel 1.2 $e^- \rightarrow$ Detektor über

- Blende ①
- Blende ②

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \quad (\text{Superposition})$$

$$P = |\phi|^2 = |\phi_1 + \phi_2|^2$$

3. Kann man die einzelnen Möglichkeiten prinzipiell unterscheiden, addieren sich die Wahrscheinlichkeiten

$$P = (P_1 + P_2)/2$$

2 Materiewellen

2.1 Historische Herleitung von de Broglie

Ziel:

- Dispersionsrelation für massive Teilchen
- Superpositionen von unphysikalischen Wellen können Natur beschreiben
- Zerlegung in de Broglie-Wellen erlaubt vorhersagen

Louis de Broglie. "XXXV. A tentative theory of light quanta". In: *Philosophical Magazine Series 6* 47.278 (1924), S. 446–458

3 Grundlegende Hypothesen ($3 \times$ Einstein)

1. $E = m_0 c^2$ Masse = Energie, m_0 : Ruhemasse, c : Lichtgeschwindigkeit
2. $E = h\nu_0$ Photoeffekt, $h = 6.626\,069\,934(89) \times 10^{-34}$ J s Planck Konstante, ν_0 : Frequenz
3. Gleichmäßig bewegte Bezugssysteme sind mit Lorentz Transformation verknüpft

Aus 1. und 2. folgt, dass man jedem Teilchen im Ruhesystem eine Frequenz zuordnen kann

$$\nu_0 = \frac{m_0 c^2}{h}$$

Sei S ein ruhendes Bezugssystem, betrachte ein ruhendes Teilchen ($v = 0$). Man erhält

$$\psi = e^{i\nu_0 2\pi t}$$

Nun betrachte ein bewegtes Bezugssystem S' mit $v_x = v, v_{y,z} = 0$. Man erhält

$$\psi = e^{i\nu_0 2\pi t'}$$

$$t' = \frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

Die Zeit wird ortsabhängig!

$$S' : e^{i2\pi\nu_0 t'}$$

$$S : e^{i2\pi\nu_0 \left(\frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \right)} = e^{i(\omega_{dB}t - k_{dB}x)}$$

(die de Broglie Welle)

mit

$$\omega_{dB} = \frac{2\pi\nu_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = \frac{2\pi}{h} \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = \frac{E_{\text{gesRuhe}}}{\hbar}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\vec{k}_{dB} = \frac{2\pi\nu_0 \vec{v}}{c^2 \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = \frac{2\pi}{h} \frac{m_0 c^2 \vec{v}}{c^2 \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = \frac{\vec{P}_{\text{mel}}}{\hbar}$$

nicht relativistischer Limes $v \ll c$

$$\omega_{dB} = \frac{1}{\hbar} \left(m_0 c^2 + \frac{m_0 \vec{v}^2}{2} + \dots \right)$$

$$\vec{k}_{dB} = \frac{1}{\hbar} m_0 \vec{v}$$

$$\psi(x, t) = e^{-i(\omega_{dB}t - \vec{k}_{dB}\vec{x})} = e^{i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} e^{i \left(\underbrace{\frac{m_0 \vec{v}^2}{2\hbar}}_{\omega} t - \underbrace{\frac{m_0 \vec{v}}{\hbar}}_{\vec{k}} \vec{x} \right)}$$

const. hängt nur von der Masse ab

Materiewelle

$$\psi(x, t) = e^{-i(\omega t - kx)}$$

mit

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\hbar k = mv$$

Beschreibt ein massives Teilchen mit Masse m , das sich mit wohldefinierter / scharf definierter Geschwindigkeit $v \ll c$ bewegt (Impuls Eigenzustand).

Den Zusammenhang $\omega(k) = f(k)$ nennt man Dispersionsrelation.

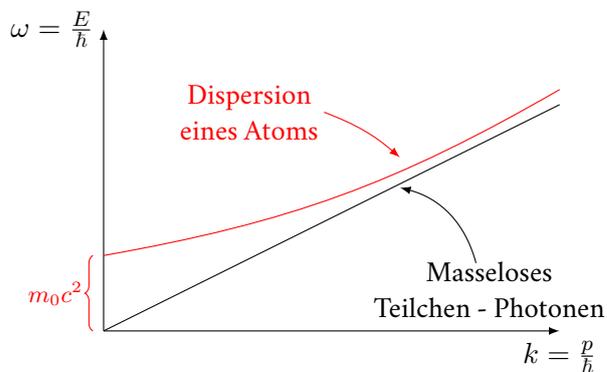
Wichtig

Unterschied zu elektromagnetischen Wellen im Vakuum:

$$\lambda \nu = c \implies \omega = ck$$

Materiewellen

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \textcircled{2}$$



2.2 Wie sieht die Materiewelle aus?

$$\begin{aligned}
 t = 0 \quad \psi(x, t = 0) &= e^{ik_{dB}x} \\
 &= \cos(k_{dB}x) + i \sin(k_{dB}x) \\
 k_{dB} &= \frac{2\pi}{\lambda_{dB}} \\
 E &= \frac{\hbar^2 k_{dB}^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} \\
 \Rightarrow \lambda_{dB} &= \frac{h}{mv}
 \end{aligned}$$

de Broglie Beziehung

Größenordnung

Thermisches Gas:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$$

mittlere Geschwindigkeit

$$\hat{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$$

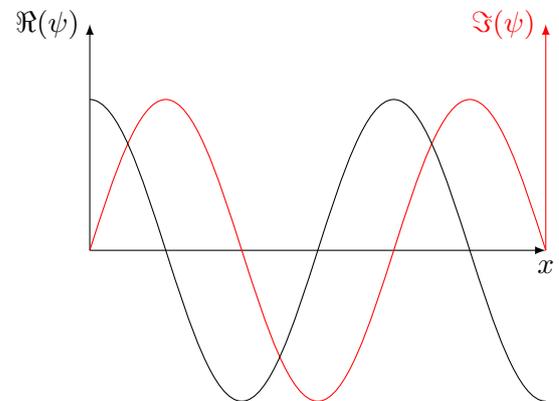
wahrscheinlichste Geschwindigkeit

T	\hat{v}	$\hat{\lambda}_{dB}$
300 K	$\sim 240 \text{ m s}^{-1}$	19 pm
10 μK	$\sim 4 \text{ cm s}^{-1}$	0.1 μm
10 nK	$\sim 1.4 \text{ mm s}^{-1}$	3.3 μm

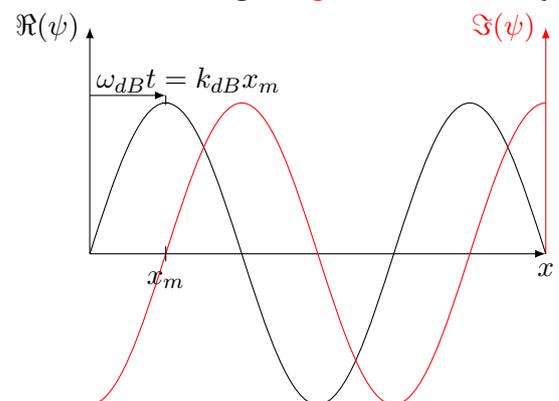
$$\lambda_{dB} \propto \frac{1}{\sqrt{T}}$$

 $\psi(x, t)$ ist ein komplexes Feld:Zeit $t = 0$

$$\psi(x, t = 0) = e^{ik_{dB}x}$$

Zeit t

$$\psi(x, t) = e^{-i(\omega_{dB}t - k_{dB}x)}$$



- globale Phase spielt keine Rolle
- Energienullpunkt $E = m_0c^2$

$\psi(x, t)$ ist ein komplexes Feld:

$$\omega_{dB}t = k_{dB}x_m$$

$$x_m = \underbrace{\frac{\omega_{dB}}{k_{dB}}}_{v_{ph}^{dB}} t$$

$$v_{ph}^{dB} = \frac{m v^2}{2\hbar} \frac{\hbar}{m v} = \frac{v}{2}$$

Phasengeschwindigkeit

Phasengeschwindigkeit ist nicht physikalisch! Gegeben eine de Broglie Welle mit $k_{dB} = k$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo zu finden?

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{p(x)}_{\text{W.-Dichte}} dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

Eine de Broglie Welle ist nicht normierbar! Analoges Problem: Energieinhalt in einer ebenen Elektromagnetischen Welle.

⇒ Lösung: Superposition (Überlagerung) von ebenen (unphysikalischen) Wellen erlaubt, um physikalischen Situation zu beschreiben.

Zusammenfassung: Neue Beschreibung der Bewegung von Teilchen ⇒ Wellenoptik. Für $\psi(x, t) \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit t im Intervall $[x, x+dx]$ zu beobachten. Klassische Teilchenmechanik entspricht dem geometrischen „Optik-Limit“ der Wellenmechanik.

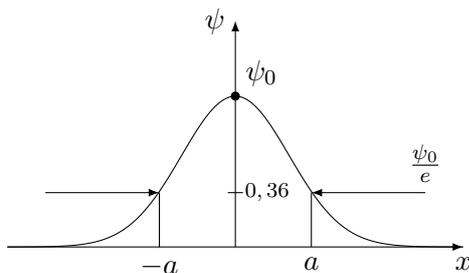
Fermat'sches Prinzip in der Wellenoptik

Licht breitet sich entlang des kürzesten optischen Weges aus

$$\underbrace{\delta \int \frac{ds}{\lambda}}_{\text{Variation}} = 0 = \delta \int \frac{ds}{\frac{h}{mv}} = \frac{1}{h} \delta \underbrace{\int m v ds}_{\text{Maupertuis Prinzip der kleinsten Wirkung}} = 0$$

2.3 Das Wellenpaket - physikalische Wellenfunktion durch Überlagerung (Superposition von ebenen Wellen)

Das Wellenpaket (ruhend)
 $t = 0$



$$\psi(x, t = 0) = \underbrace{\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}}_{\text{Normierung}} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad \text{Quadrat-Integral}$$

$t = T$? Wir wissen „nur“ wie sich die Broglie Wellen ausbreiten \implies zerlege $\psi(x, t = 0)$ in ebene Wellen mit Wellenvektor k_{dB} . Jede Welle wird sich entsprechend

$$\omega_{dB} = \frac{\hbar k_{dB}^2}{2m}$$

ausbreiten.

$$\psi(x, t = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\tilde{\psi}(k)}_{\text{Amplitude der Welle}} e^{ikx} dk$$

de Broglie Welle $t = 0$

\implies triviale Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \psi(x, t = T) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} e^{-i\omega T} dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\tilde{\psi}(k) e^{-i\frac{\hbar}{2m}k^2 T}}_{\text{Phase}} e^{ikx} dk \end{aligned}$$

Nur die Phase der komplexen Wahrscheinlichkeits-Amplitude ändert sich. Die zeitliche Änderung ist **linear** in der Zeit, aber quadratisch in k .

Da

$$\Psi = \tilde{\psi}(k) e^{i(kx - \omega t)}$$

einer de Broglie Welle und damit einem Teilchen mit scharf definiertem Impuls $p = mv = \hbar k$ entspricht, bezeichnet man $\tilde{\psi}(k)$ als Impulsdarstellung / Impulsamplitude. Entsprechend $\Psi(x)$ ist die Ortsdarstellung / Ortsamplitude des Quantenmechanischen-Zustandes. Die Ausbreitung im Impulsraum ist trivial

$$\underbrace{\tilde{\psi}(k)}_{t=0} \rightarrow \underbrace{\tilde{\psi}(k)}_t e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

Rotation in komplexer Zahlenebene

Aber wie sieht die räumlich Wahrscheinlichkeitsverteilung aus?

Wiederholung: Fourier-Transformation.

Periodische Funktionen (Fourier 1822)

$$f(x + d) = f(x) \quad d: \text{Periode}$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx} \quad G = \frac{2\pi}{d}$$

$$g_n = \frac{1}{d} \int_x^{x+d} f(x) e^{-inGx} dx$$

$$\int_0^d f(x)e^{-imGx} = \int_0^d \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i(n-m)Gx} = g_m d$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n^* e^{-inGx} \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m e^{imGx} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n \sum_m g_n^* g_m e^{i(m-n)Gx} dx$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} |g_n|^2 = 1$$

Normierung

$f(x)$ reell $\rightarrow g_n = g_n^*$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx} = g_0 + \sum_{n=-\infty}^{-1} g_n e^{inGx} + \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{inGx}$$

$$= g_0 + \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} g_n^* e^{-inGx} + \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{inGx} \right\}$$

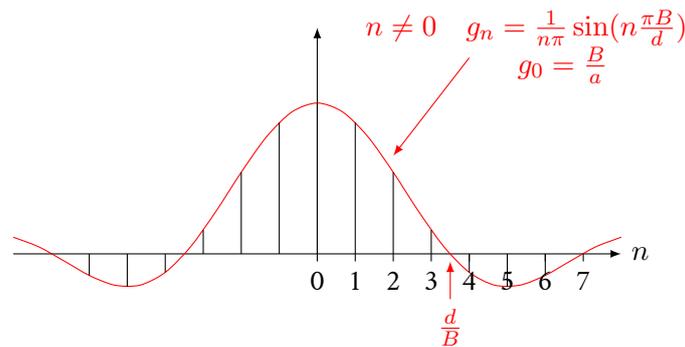
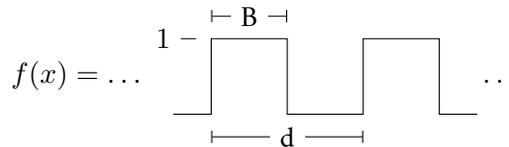
$$z^* + z = (a + ib)^* + (a + ib) = 2\Re\{z\}$$

Einfache Beispiele

$$f(x) = \cos(Gx) = \frac{1}{2}e^{-iGx} + \frac{1}{2}e^{iGx}$$

Fouriertransformierte

$$g_{-1} = \frac{1}{2} \quad g_0 = 0 \quad g_1 = \frac{1}{2} \quad g_{|n|>1} = 0$$



Je kleiner die Struktur im Ortsraum, umso breiter wird die Verteilung im Impulsraum.

Aperiodische Funktionen

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

Normierung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) f^*(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) g^*(k) dk = 1$$

In der Quantenmechanik hat man

$$\psi(x) \iff f(x)$$

$$\tilde{\psi}(k) \iff g(k)$$

Dirac-Delta Funktion

$$f(x) = \delta(x) = \begin{array}{c} \infty \\ | \\ \hline 0 \end{array} \quad x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x) \delta(x - x_0) dx = h(x_0)$$

Darstellung der Dirac δ -Funktion über Fourier-Transformation

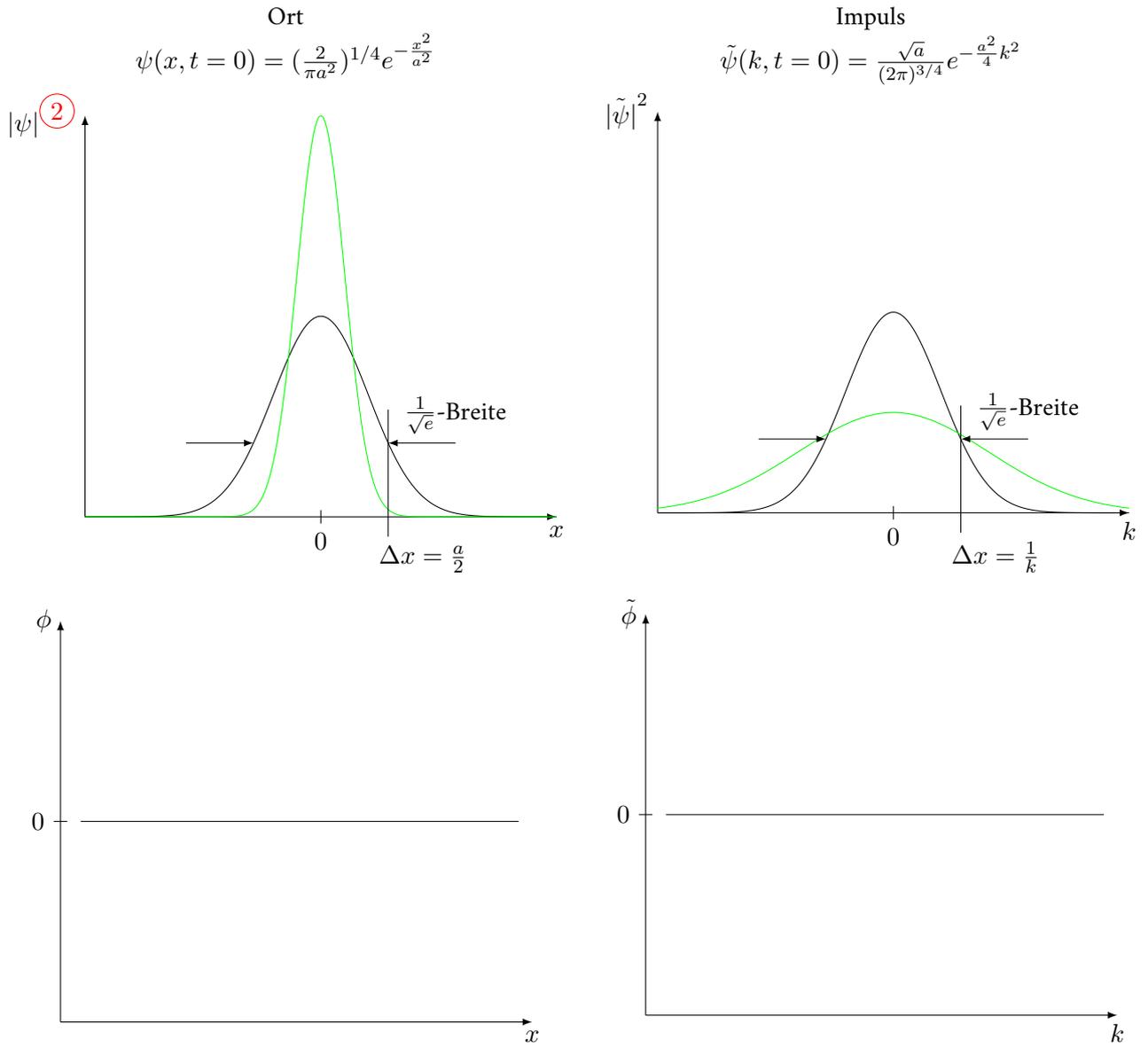
$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

Darstellung von komplexen Zahlen:

$$\psi = |\psi| e^{i\phi}$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk$$



Heisenberg Unschärfe

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar \Delta x \Delta k = \hbar \frac{a}{2} \frac{1}{a} = \frac{\hbar}{2}$$

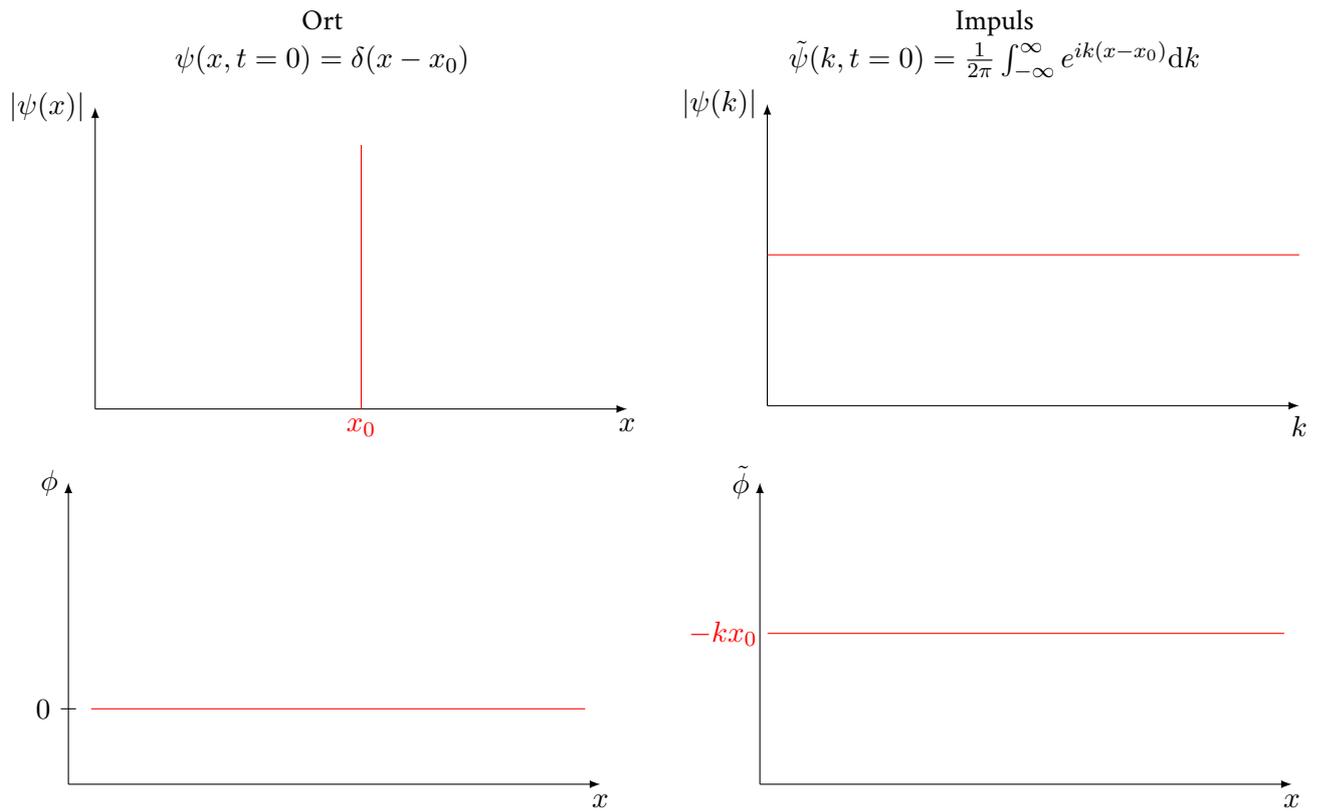
↓
 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ Wert der W.-Verteilung

$$\Delta x = \text{RMS} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

↓
 Root Mean Square

folgt aus der Beschreibung eines Teilchens mit Geschwindigkeit \vec{v} / Impuls $m\vec{v}$ durch $e^{i\vec{k}\vec{x}}$ \iff de Broglie Welle und dem Superpositionsprinzip.

Extremfall: Teilchen am Ort x_0 :

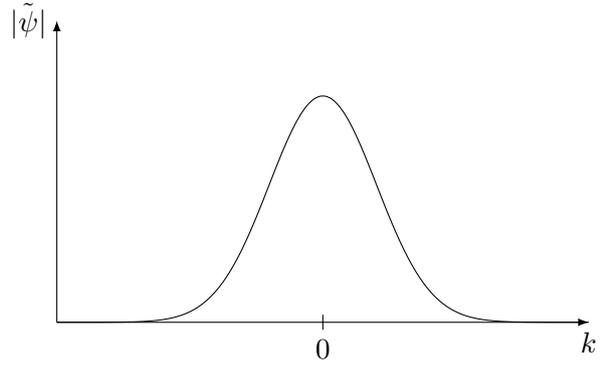
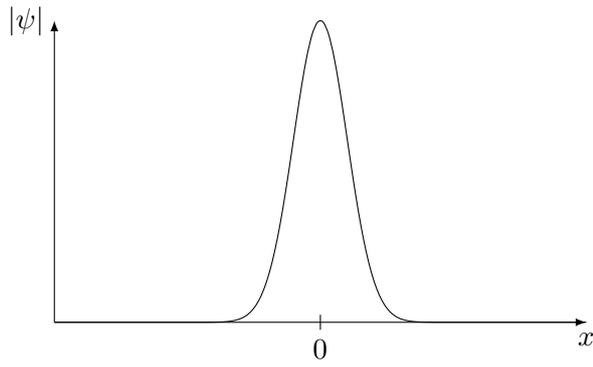


\implies Impuls maximal $[-\infty, \infty]$ unscharf.

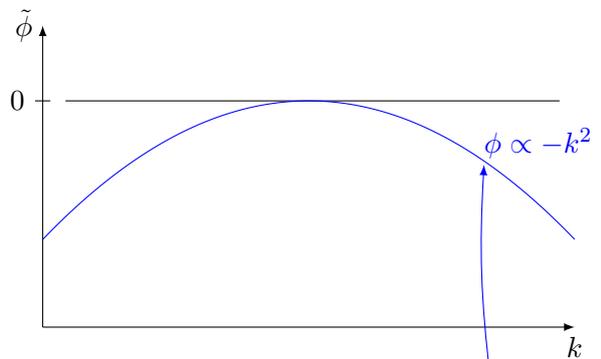
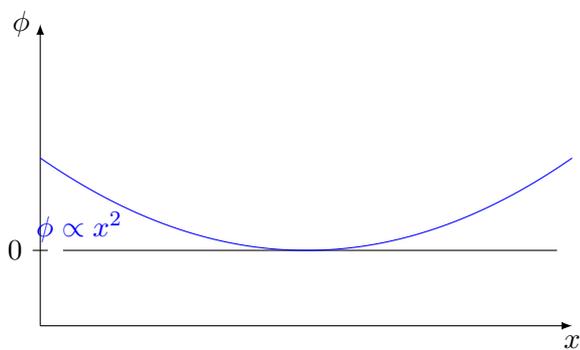
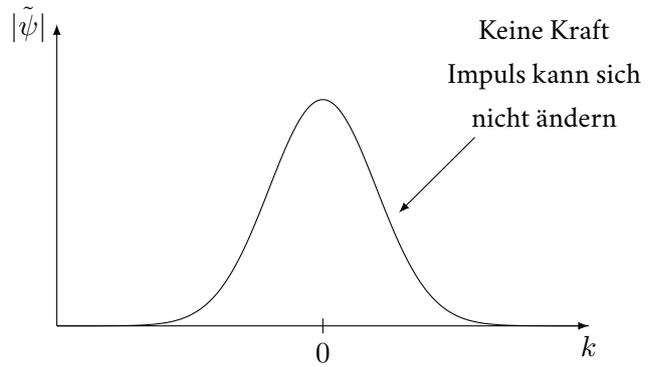
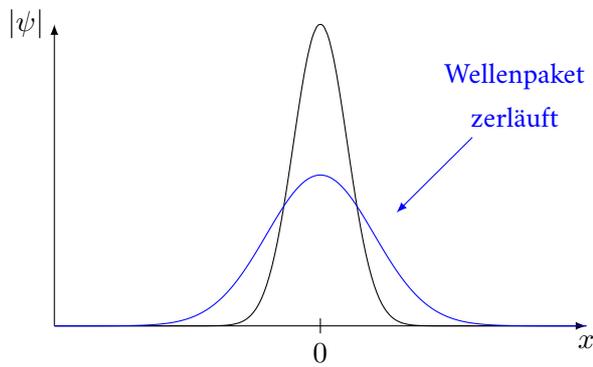
Analog: Ein Teilchen mit wohldefiniertem Impuls ist vollständig delokalisiert.

Ausbreitung eines Wellenpakets:

$t = 0$



$t = T$



$$\tilde{\psi}(k, t) = \tilde{\psi}(k) e^{-i\omega_{dB}t} = \tilde{\psi}(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

mit $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}}$$

mit $\varphi = -\theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t$

$$\tan 2\theta = \frac{2\hbar t}{ma^2}$$

Für die Breite $\Delta x(t)$ ergibt sich

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

Für kurze Zeiten:

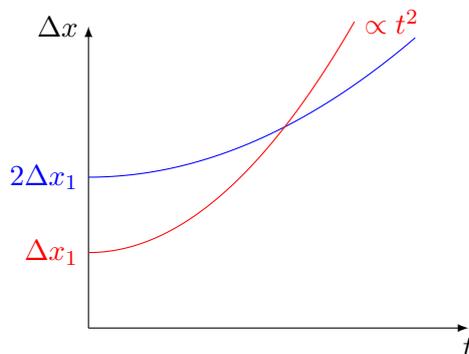
$$\Delta x(t) \sim \frac{a}{2} + \frac{\hbar^2}{2m^2 a^3} t^2 + \dots \quad \text{Quadratisch}$$

Für lange Zeiten:

$$\Delta x(t) \sim \frac{\hbar}{ma} t \quad \text{Linear}$$

Bemerkung:

$$\lambda_{dB} = 2a \iff v = \frac{\hbar}{m} \frac{2\pi}{\lambda_{dB}} = 2\pi \frac{\hbar}{ma}$$



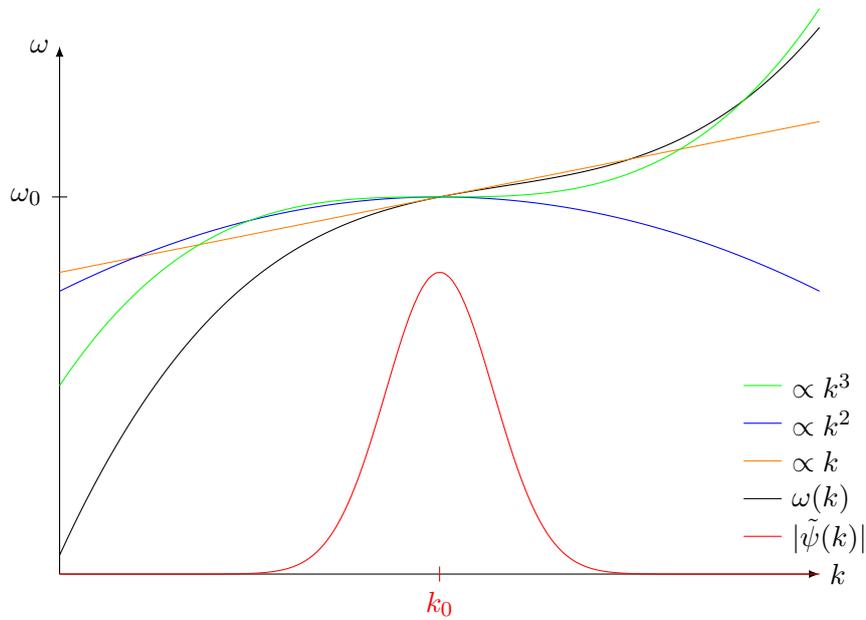
Stärkere Lokalisierung führt zum schnellerem Zerfließen!

2.4 Allgemeine Ausbreitung eines Wellenpakets

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

$\omega(k)$: Dispersionsrelation

Wenn $\tilde{\psi}(k)$ im k -Raum (Impuls Raum) um k_0 konzentriert ist, kann die Dispersionsrelation $\omega(k)$ durch eine Taylor Reihe genähert werden.



Taylor Reihe für $\omega(k)$:

$$\omega(k) = \omega(k)|_{k_0} + \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k_0} (k - k_0) + \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}|_{k_0} \frac{(k - k_0)^2}{2} + \dots$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{-i(\omega_0 + \omega'_0(k - k_0) + \omega''_0 \frac{(k - k_0)^2}{2})t - kx} dk$$

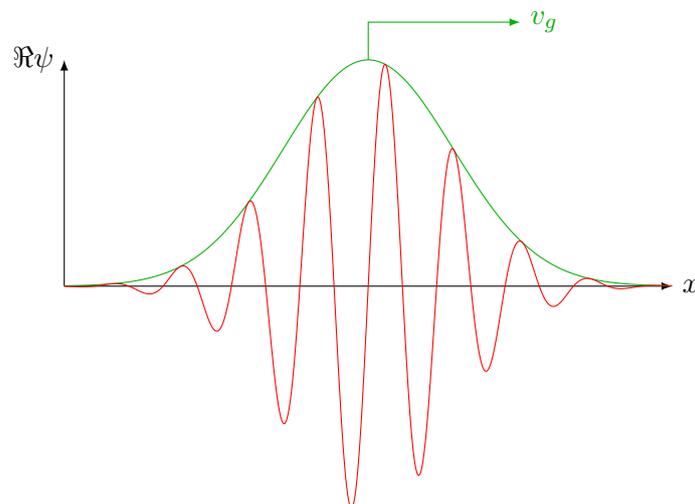
Definiere $\kappa = k - k_0 \Rightarrow k = \kappa + k_0$, damit

$$\psi(x, t) = \underbrace{e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}}_{\text{de Broglie Welle}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(\kappa + k_0) e^{-i(\omega'_0 t - x)\kappa + \frac{\omega''_0}{2} \kappa^2 t}}_{\text{Einhüllende}} d\kappa$$

Einhüllende bewegt sich mit

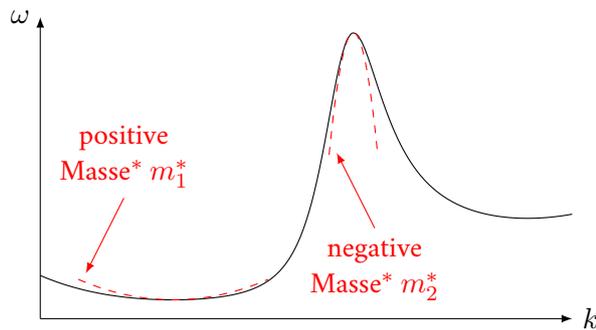
$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k_0}$$

$\omega''_0 = 0$:



$\omega_0'' \neq 0 \implies \text{Phase} \propto \kappa^2 t \implies \text{zerfließen. Interpretation:}$

$$\omega \sim \omega_0 + \frac{\omega''}{2} k^2 = \omega_0 + \frac{\hbar}{2m^*} k^2$$



Effektive Masse m^* ist invers proportional zur Krümmung der Dispersionsrelation $\omega(k)$.
 $|m_1^*| > |m_2^*|$

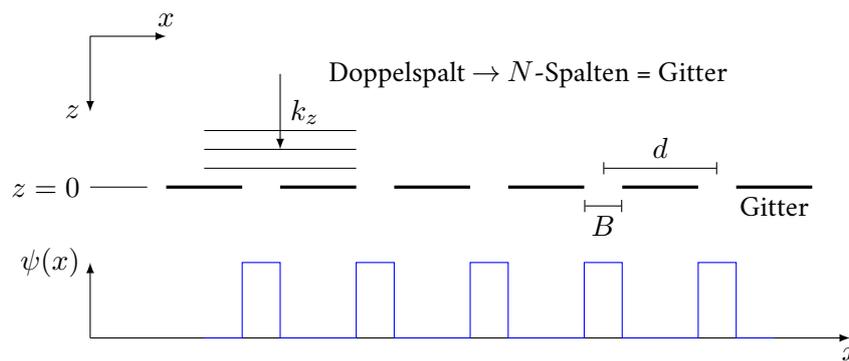
Gauss'sches Wellenpaket:

$$\tilde{\psi}(k) \sim e^{-\frac{\sigma^2}{4} k^2}$$

$\implies \omega''$ Term führt zum zerfließen des Pakets \implies Gauss bleibt Gauss. Höhere Ableitungen von $\omega(k)$ führen zur Verzerrung des Gauss'schen Wellenpakets.

2.5 Beugung von Materiewellen

Doppelspalt $\rightarrow N$ -Spalten = Gitter. (vergleiche Abschnitt 2.3 Fourier)



$\psi(x)$ dirket nach dem Gitter

$$\psi(x, z=0) = N \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx} \quad G = \frac{2\pi}{d}$$

mit $g_n = \frac{1}{n\pi} \sin\left(n \frac{\pi B}{d}\right)$

Wie breitet sich $\psi(x, k, t)$ aus?

1. Energieerhaltung: ω_{dB} ändert sich nicht

2. Impuls ändert die Richtung weil nach dem Gitter gilt:

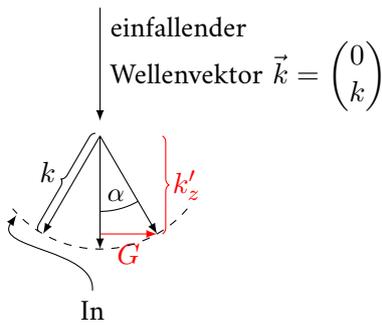
$$\begin{aligned} \psi(x, z, t) &= N \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n \underbrace{e^{inGx} e^{i(k'_z z - \omega t)}}_{\vec{k}_n = \begin{pmatrix} nG \\ k'_z \end{pmatrix}} \\ &= N \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i(\vec{k}_n \vec{x} - \omega t)} \end{aligned}$$

k'_z folgt aus der Energieerhaltung

$$\begin{array}{c} \text{vor dem Gitter} \\ \uparrow \\ n^2 G^2 + k'_z{}^2 = k^2 \\ \downarrow \\ \text{nach dem Gitter} \end{array}$$

Wahrscheinlichkeit sich in Richtung $\vec{k}_1 = \begin{pmatrix} G \\ k'_z \end{pmatrix}$ auszubreiten / gebeugt zu werden:

$$P(k_x = G) = |N|^2 g_1^* g_1$$



$|\vec{k}|$ ist erhalten aber die Richtung ändert sich durch Gittervektor \vec{G} . Für
Nur diskrete Impulse weil periodische Struktur im Raum.

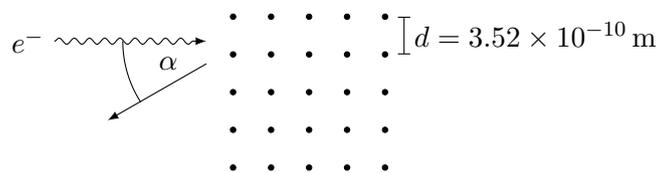
Festkörperphysik:
Ewald Kugel

$\frac{G}{k} \ll 1$: Ergebnis wie in Beugung von elektromagnetischen Wellen an periodischen Strukturen.

$$\alpha = \frac{G}{k} = \frac{2\pi \lambda_{dB}}{d \cdot 2\pi} = \frac{\lambda_{dB}}{d}$$

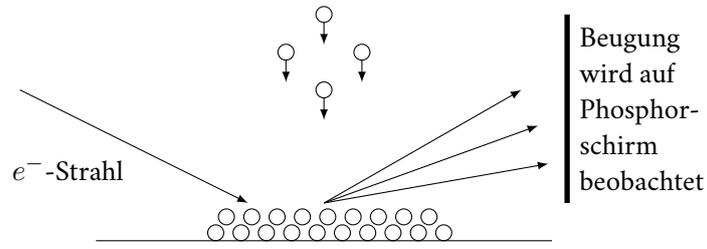
2.5.1 Elektronen

Beobachtung: Davisson & Germer (1927) e^- Strahl mit 75 eV, $\lambda_{dB} = 1.4 \times 10^{-10}$ m fällt auf NI-Kristall.



$$\Rightarrow \alpha = \frac{\lambda_{dB}}{d} = 0.4 \hat{=} \sim \frac{40 \text{ cm}}{1 \text{ meter}} \sim 23^\circ$$

Die Beugungswinkel sind vergleichbar zu Röntgenstrahlen, aber die Eindringtiefe für e^- ist geringer (Coulomb WW) \Rightarrow werden heute standardmäßig eingesetzt um bei Molekularstrahl Epitaxie kristallines Wachsen nachzuweisen.



Kristallines Wachstum

Klare Beugungsstruktur:



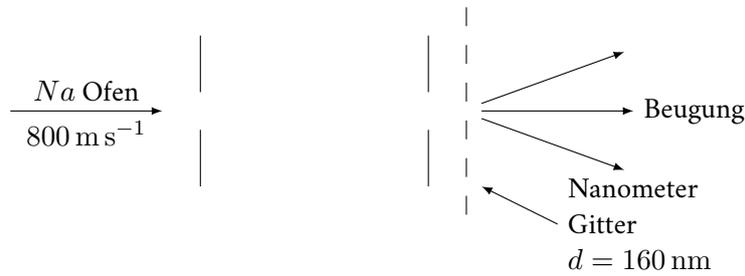
Amorphe Strukturen

Diffuse Beugungsstruktur:



2.5.2 Moleküle an einem Transmissionsgitter

Beispiel: Na_2 Pritchard Group am MIT.



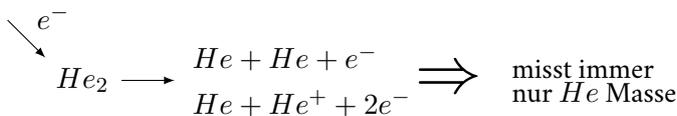
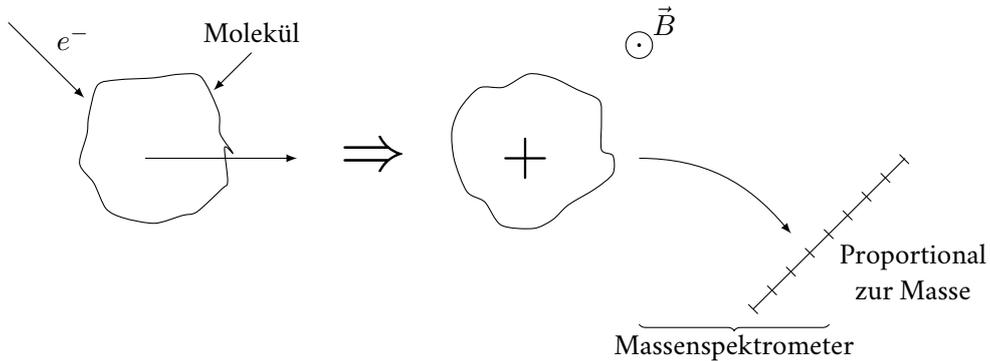
$$Na : \quad \lambda_{dB} = 20 \text{ pm} \implies \theta = \frac{\lambda_{dB}}{d} \sim 1.25 \times 10^{-4} \hat{=} 125 \mu\text{m m}^{-1}$$

$$Na_2 : \quad \lambda_{dB} = 10 \text{ pm} \implies \theta = \frac{1}{2} 125 \mu\text{m m}^{-1}$$

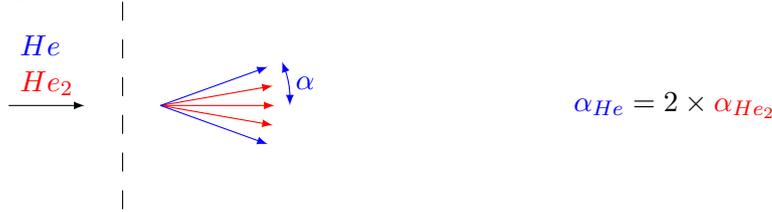
2.5.3 Nachweis von sehr „fragilen“ Molekülen

Beispiel: He_2

Übliche Methode:

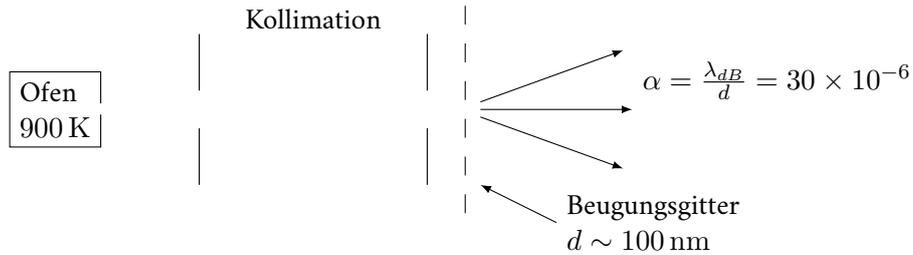


Verwendung von nanometer Transmissionsgitter → Analyse der Beugungswinkel



2.5.4 Beugung von Makro-Molekülen

Beispiele: $C_{60}, C_{60}F_{40}$



$$m = 60 \cdot 10^{12} \text{ C}$$

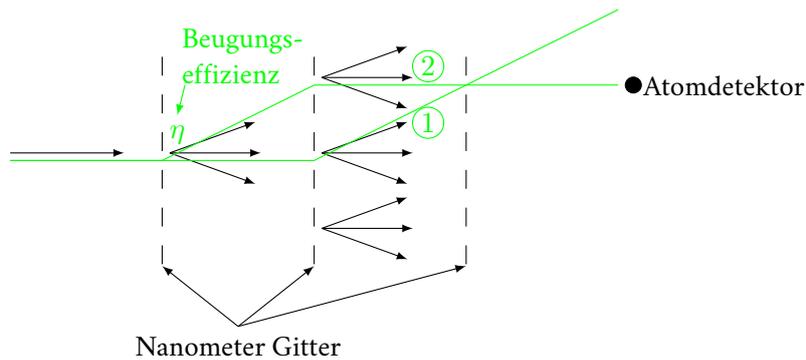
$$\lambda_{dB} \sim 3 \text{ pm}$$

$$30 \times 10^{-6} \hat{=} \frac{30 \mu\text{m}}{\text{m}} \sim \frac{3 \text{ cm}}{\text{km}}$$

Fundamentale Frage: Gibt es eine kritische Größe, ab der Quantenmechanik klassisch wird?

2.6 Atom Interferometer

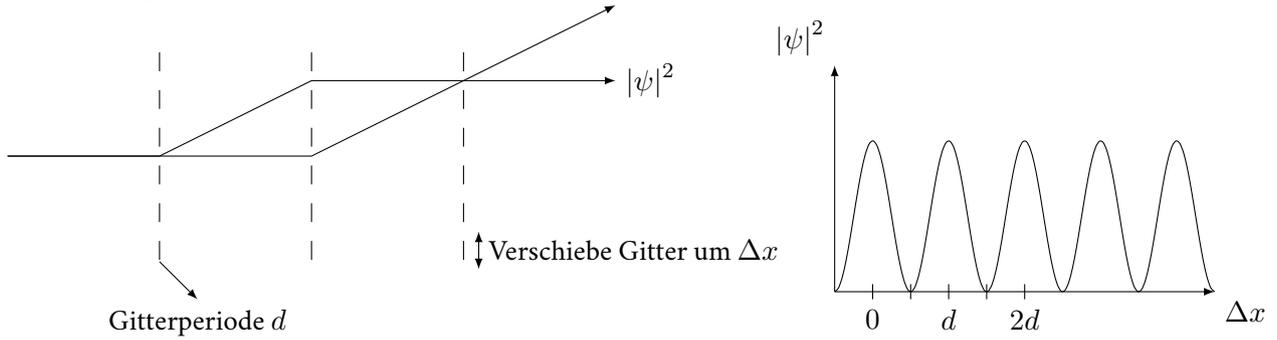
1. Atom Interferometer - Doppelspalt aus dünnen Goldfolien
Gruppe-Mlynek: 1991 Konstanz
2. Atom Interferometer - 3 Gitter Aufbau
Gruppe Pritchard: 1991 MIT/Boston



Die Wahrscheinlichkeit das Atom zu detektieren ist $|\psi|^2$ mit

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1 + \psi_2 = \eta^2 e^{ikl_1} + \eta^2 e^{ikl_2} \\ &= \eta^2 e^{ikl_2} \left(1 + e^{ik(l_2-l_1)} \right) \\ &\quad \downarrow \\ &\quad \text{globale Phase} \\ \Delta l = l_2 - l_1 = 0 &\implies |\psi|^2 = 4\eta^4 \end{aligned}$$

Beobachtung des Interferenzmusters $|\psi|^2 = 0$?



Warum:

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx}$$

$$x \mapsto x + \Delta x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underbrace{g_n e^{inG\Delta x}}_{g_n e^{i2\pi n \frac{\Delta x}{d}}} e^{inGx}$$

$$\Delta x = d \implies e^{i2\pi n} = 1 \implies \text{keine \u00c4nderung}$$

Letztes Gitter:

$$\implies \psi = \eta^2 e^{ikl_1} e^{i \frac{2\pi \Delta x}{d}} + \eta^2 e^{ikl_2}$$

mit $l_1 = l_2 = l$

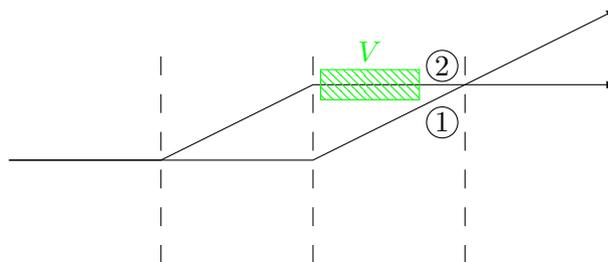
$$\psi = \eta^2 e^{ikl} (e^{i \frac{2\pi \Delta x}{d}} + 1)$$

$$|\psi|^2 = \eta^4 ((e^{-i \frac{2\pi \Delta x}{d}} + 1)(e^{i \frac{2\pi \Delta x}{d}} + 1))$$

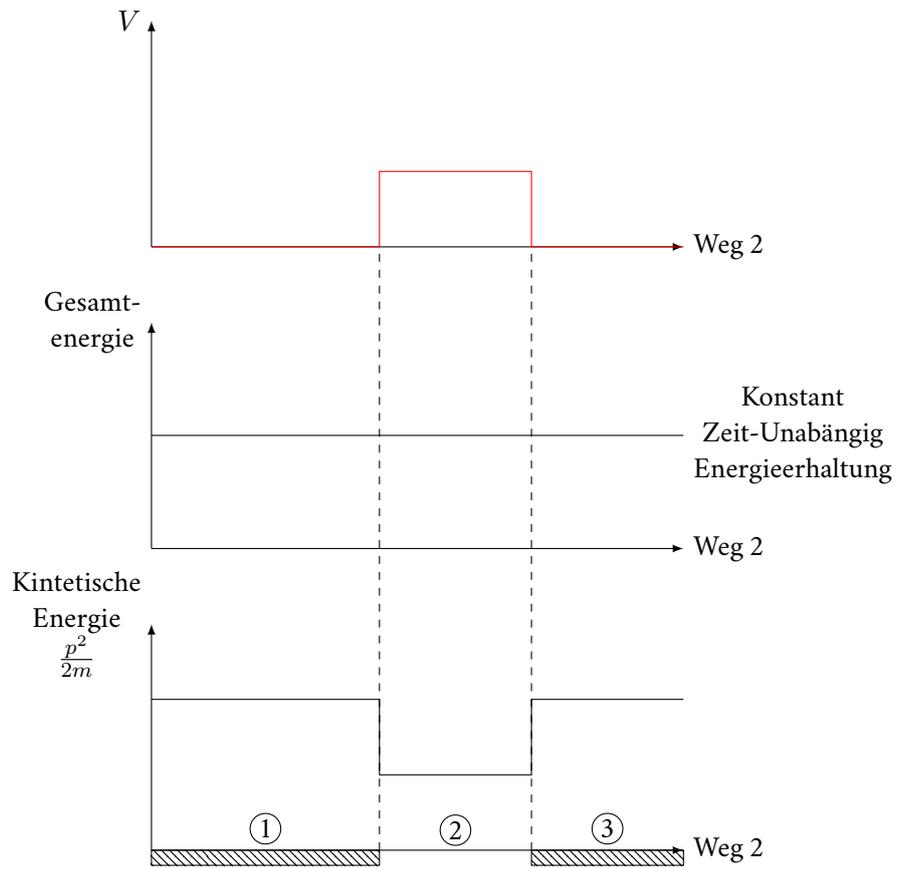
$$= \eta^4 \{2 + \underbrace{e^{-i \frac{2\pi \Delta x}{d}} + e^{i \frac{2\pi \Delta x}{d}}}_{=2 \cos \frac{2\pi \Delta x}{d}}\}$$

$$\implies |\psi|^2 \propto 1 + \cos\left(\frac{2\pi}{d} \Delta x\right)$$

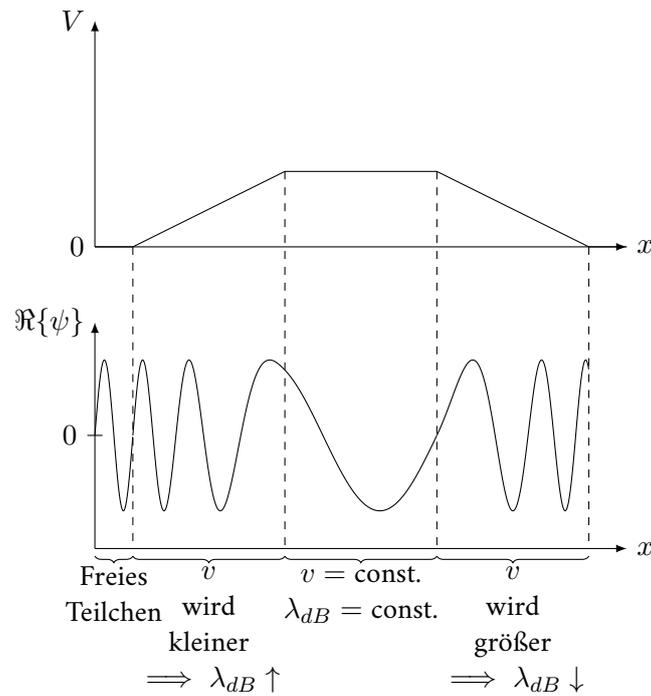
Messen von Potentialen



Potential am Weg 2:



$$\begin{aligned}
 1 + 3 : & \quad \frac{\hbar^2 k_{dB}^2}{2m} \\
 2 : & \quad \frac{p'^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} \\
 & \quad \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}
 \end{aligned}$$



Die Kraft verändert die Geschwindigkeit \Rightarrow die de Broglie Wellenlänge ändert sich entsprechend $\Rightarrow \phi = k_{dB}^a \cdot x$ die Phasenakkumulation ändert sich im Potential \Rightarrow Phasenshift kann gemessen werden. Die de Broglie-Wellenlänge ändert sich \Rightarrow sie wird im Bereich 2 länger, weil Atom langsamer wird. Einfach Beschreibung durch Einführung eines „Brechungs Index“

$$n = \frac{k_{\text{Medium}}}{k_{\text{Vakuum}}} = \frac{k'_{\text{Potential}}}{k_{\text{frei}}} = \frac{\lambda_{dB}^{\text{frei}}}{\lambda_{dB}^{\text{Potential}}}$$

Mit 2:

$$k'^2 = k^2 - \frac{2mV}{\hbar^2}$$

$$k' = k \sqrt{1 - \frac{2m}{\hbar^2 k^2} V} = k \underbrace{\sqrt{1 - \frac{V}{E_{\text{ges}}}}}_{n_{dB}}$$

Für $V \ll E_{\text{ges}}$

$$n_{dB} \approx 1 - \frac{V}{2E_{\text{ges}}}$$

Im Atom Interferometer: Empfindlichkeit abschätzen \rightarrow welche Potentialhöhe führt zu einer Phasenverschiebung von $\pi \hat{=}$ Maxima des Interferenzmusters verschieben sich um eine halbe Periode.

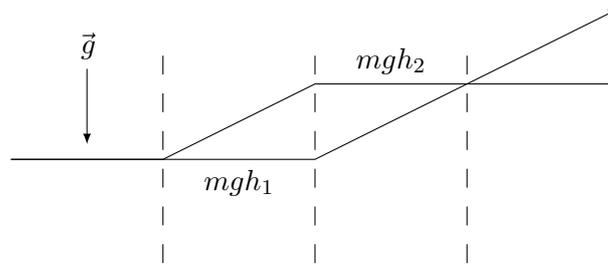
$$\Delta\phi = -\pi = (n - 1)k_{dB} \cdot L = -\frac{V}{2E} k_{dB} L$$

$$V = \frac{\hbar^2 k_{dB} \pi}{m L}$$

$m = Na, \lambda_{dB} \sim 20 \text{ pm}, L = 1 \text{ cm}$

$$V = 3 \times 10^{-29} \text{ J} \hat{=} 0.18 \text{ neV}$$

Anwendungen: Messung der Erdbeschleunigung.



⇒ Potentialdifferenz, für $m : Cs, \Delta h = 1 \text{ m}$

$$mg\Delta h \sim 13 \mu\text{eV}$$

Gravitationsmessung mit Atomen Fountain ⇒ $g \pm 10^{-9}g$. Erste Messung mit Neutronen.

2.7 Zusammenfassung

Historische Herleitung von de Brogliewellen = $3 \times$ Einstein

De Brogliewelle: Quantenmechanischer Zustand mit scharfen Impuls

Dispersionsrelation für massive Teilchen

Superposition von ebenen Wellen können physikalische (normierbare) Zustände beschreiben - $|\psi(x)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ zu detektieren.

Zerlegung einer allgemeinen Einteilchenwellenfunktion in de Broglie Wellen erlaubt Vorhersage der Dynamik

Viele Experimente in Quantenmechanik mit einzelnen Teilchen, können mit diesen minimalen Voraussetzungen verstanden werden

3 Allgemeine Quantenmechanik

3.1 Quantenmechanischer Zustand und dessen Darstellung

Bisher nur den Fall der Ausbreitung eines massiven Teilchens → Wellenmechanik. Quantenmechanik ist allgemeiner!

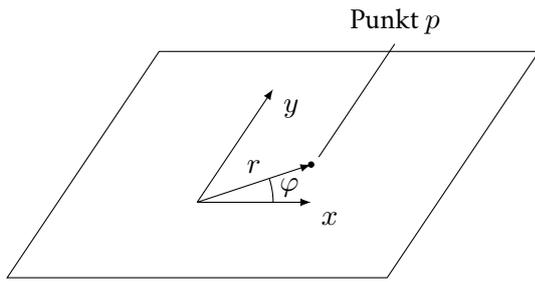
Das System (zum Beispiel Teilchen, drehendes Molekül, . . .) wird beschrieben durch einen Quantenmechanischen Zustand $|\psi\rangle$. Er beinhaltet alles, was wir vom System wissen können.

$|\psi\rangle$ nennt man „ket“, eingeführt von Dirac.

$|\psi\rangle^* = \langle\psi|$ nennt man „bra“.

Skalarprodukt: $\langle\psi|\psi\rangle$

2D Raum:



Darstellung des Punktes in einem Koordinatensystem durch einen Vektor:

kartesisch: (x, y)

polar: (r, φ)

$$\vec{P} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$$

x, y : Koordinaten, \vec{e}_x, \vec{e}_y : Basisvektoren, alternativ

$$\vec{P} = r\vec{e}_r + \varphi + \vec{e}_\varphi$$

Skalarprodukt

$$\langle \vec{e}_x, \vec{e}_x \rangle = \vec{e}_x \cdot \vec{e}_x = 1 \quad \text{Normiert}$$

$$\langle \vec{e}_x, \vec{e}_y \rangle = 0 \quad \text{Orthogonal}$$

$$\langle \vec{v}, a\vec{w} + b\vec{x} \rangle = a\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle + b\langle \vec{v}, \vec{x} \rangle$$

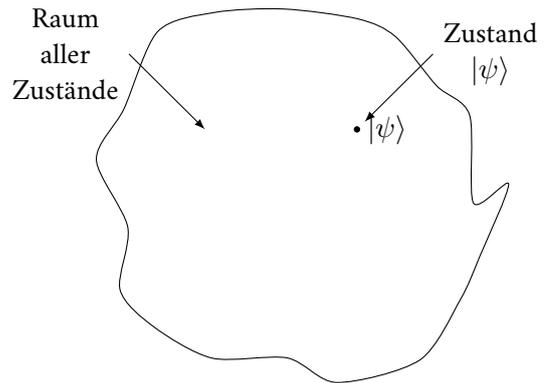
„nützlich“ um Koordinaten zu extrahieren:

$$\langle \vec{e}_x, \vec{P} \rangle = \vec{e}_x \cdot (x\vec{e}_x + y\vec{e}_y) = x$$

Beispiel 3.1 (1D-Wellenpaket) Basis: Zustände mit wohldefiniertem Impuls $\hbar k$

$$|k\rangle \hat{=} \text{de Broglie Wellen}$$

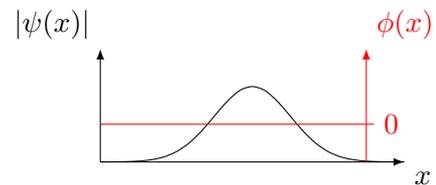
Quantenmechanik



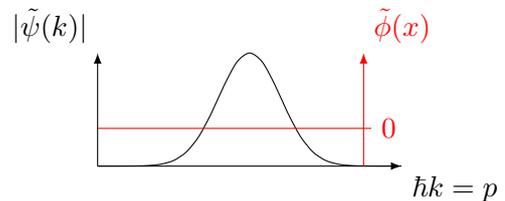
Darstellung des Zustandes $|\psi\rangle$ in einer Basis.

Bisher: |Wellenpaket).

Ortsdarstellung: $\psi(x) = |\psi|e^{i\phi}$



Impulsdarstellung: $\tilde{\psi}(k) = |\tilde{\psi}|e^{i\phi}$



$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})d^3x$$

Ortsdarstellung

$$= \int \tilde{\varphi}^*(\vec{k})\tilde{\psi}(\vec{k})d^3k$$

Impulsdarstellung

„nützlich“ um Wahrscheinlichkeitsamplituden zu extrahieren

Wellenpaket ist eine Summe (Superposition) von de Broglie Wellen

$$|\text{Wellenpaket}\rangle = |\psi_{WP}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk$$

↑ Basisvektor / Impuls Basis
↓ Koordinate

$\hat{=}$ Darstellung von $|\psi_{WP}\rangle$ in Impulsbasis.

Koordinate / Wahrscheinlichkeits-Amplitude von $|k'\rangle \rightarrow$ Impuls $\hbar k'$ zu messen:

$$\begin{aligned} \langle k' | \psi_{WP} \rangle &= \langle k' | \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle k' | \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) \langle k' | k \rangle dk \\ \langle k' | k \rangle &= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik'x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')x} dx = \delta(k - k') \\ \langle k' | \psi_{WP} \rangle &= \int \tilde{\psi}(k) \delta(k - k') dk = \tilde{\psi}(k') \end{aligned}$$

Ortsdarstellung von $|\psi_{WP}\rangle$

„Ortskoordinate“: $\langle x | \psi_{WP} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle x | \psi_{WP} \rangle &= \psi_{WP}(x) = \langle x | \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) \underbrace{\langle x | k \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk \end{aligned}$$

Ortswellenfunktion $\psi(x)$ ist eine Darstellung von $|\psi_{WP}\rangle \hat{=}$ Ortsdarstellung. $\tilde{\psi}(k)$ ist eine andere Darstellung vom Zustand $|\psi_{WP}\rangle \hat{=}$ Impulsdarstellung. Das Ergebnis von Rechnungen hängt nicht ab von der Darstellung / Basis ab \rightarrow die Berechnung kann in einer bestimmten Basis sehr einfach sein. Zum Beispiel: Wellenpaket Dynamik ist in der Impulsdarstellung einfach.

3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

Observablen können mit Hilfe von Operatoren extrahiert werden.

Beispiel 3.2 (Impuls-Operator) \hat{p} . Das \hat{p} symbolisiert Operator $|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle$.

Eigenschaften:

$$\begin{array}{c} \text{Zahl} \\ \text{entspricht Impuls [kg m s}^{-1}\text{]} \\ \uparrow \\ \hat{p}|k\rangle = \hbar k |k\rangle \\ \downarrow \\ \text{Ortsdarstellung} \\ \text{de Broglie Welle} \end{array}$$

$|k\rangle$ ist ein *spezieller* Zustand, weil der Impulsoperator den Zustand nicht „ändert“, sondern nur mit einer Zahl multipliziert. Daraus folgt, dass der Zustand $|k\rangle$ einem wohldefinierten/scharfen Impuls entspricht. $|k\rangle$ nennt man Impuls-Eigenzustand. Erwartungswert: Was erwarten man für den Mittelwert des Impulses?

Mittelwert Für de Broglie Welle: $\tilde{\psi}(k) = \delta(k' - k)$

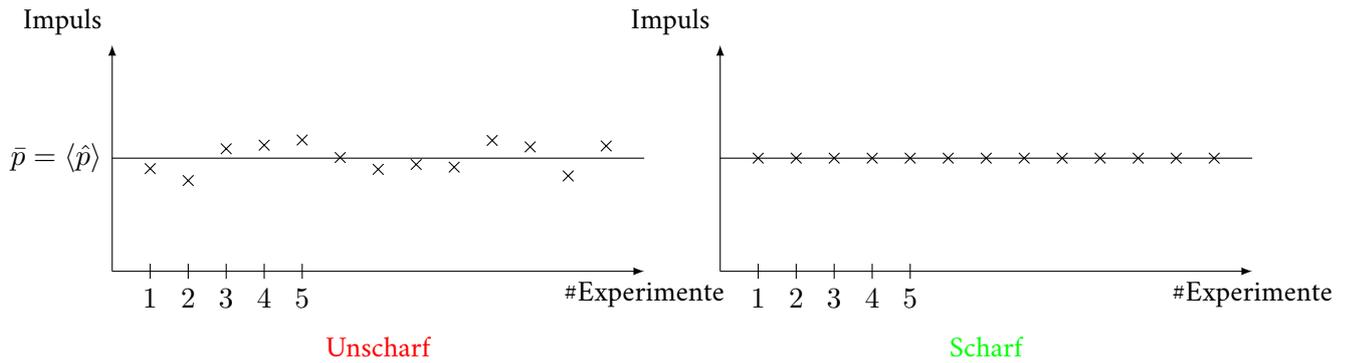
$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} p P(p) dp = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} k' \overbrace{|\tilde{\psi}(k')|^2} dk' = \hbar k$$

\uparrow
 Probability
 ↓
 Wahrscheinlichkeit

In Dirac Notation

$$\langle k | \hat{p} | k \rangle = \langle k | \hbar k | k \rangle = \hbar k \underbrace{\langle k | k \rangle}_1$$

Erwartungswert / Mittelwert ist $\bar{p} = \hbar k \implies$ zwei Möglichkeiten:



Obwohl beide den gleichen Mittelwert können diese Messreihen nicht das gleiche System beschreiben. \rightarrow Berechne Varianz:

$$\text{VAR}(p) = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2$$

Für Impulseigenzustand $|k\rangle$
 Notation $\langle \hat{p} \rangle := \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$
 Jetzt speziell $|\psi\rangle = |k\rangle$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle k | \hat{p} \hat{p} | k \rangle = \langle k | \hat{p} \hbar k \rangle = \hbar k \langle k | \hat{p} | k \rangle = \hbar^2 k^2 \underbrace{\langle k | k \rangle}_1$$

$$\langle \hat{p} \rangle^2 = (\langle k | \hat{p} | k \rangle)^2 = (\hbar k)^2 \underbrace{\langle k | k \rangle}_1$$

$\text{VAR}(p) = 0 \quad \text{für Zustand } |k\rangle$

Alle Messungen ergeben exakt den gleichen Wert; es gibt keine Streuung der Messwerte \implies Impuls scharf / wohldefiniert.

Bemerkung 3.3 Dieser Zustand existiert nur in beliebig guter Näherung!

Darstellung von Operatoren

$$\hat{p} |k\rangle = \hbar k |k\rangle$$

Darstellung des Impulsoperator in Impulsdarstellung $\hat{=}$ einfach nur Zahl. Wie sieht das in Ortsdarstellung aus?

$$|k\rangle \mapsto e^{ikx} |x\rangle$$

$$\hat{p} |k\rangle = \hbar k |k\rangle \mapsto \hbar k (e^{ikx} |x\rangle) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (e^{ikx} |x\rangle)$$

Impulsoperator in Ortsdarstellung:

$$\hat{p} := -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

↓
Ortsdarstellung

Bemerkung 3.4

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\hat{p}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \hbar k \psi(k) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \end{aligned}$$

Impuls Erwartungswert für allgemeine Wellenfunktion $\psi(x)$ für ein Teilchen:

Bezüglich einem $ket\psi$

$$\begin{aligned} \bar{p}_x &= \langle \psi|\hat{p}_x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \\ &\quad \text{Ortsdarstellung} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int \tilde{\psi}^*(k') e^{ik'x} dk'}_{\psi^*(x)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int \tilde{\psi}(k'') e^{ik''x} dk''}_{\psi(x)} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \int_{-\infty}^{+\infty} dk'' \tilde{\psi}^*(k') \tilde{\psi}(k'') \hbar k'' \frac{1}{2\pi} \underbrace{\int e^{i(k''-k')x} dx}_{\delta(k''-k')} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \underbrace{\tilde{\psi}^*(k') \tilde{\psi}(k')}_{P(k')} \hbar k' = \int_{-\infty}^{+\infty} dk' (\hbar k') P(k') = \langle \hbar k \rangle \end{aligned}$$

Gleichzeitige Messung von 2 Observablen \hat{A} und \hat{B} . Wenn es einen Eigenzustand zu \hat{A} und \hat{B} gibt, dann ist das möglich:

$$\begin{aligned} \hat{A}|a, b\rangle &= a|a, b\rangle \\ \hat{B}|a, b\rangle &= b|a, b\rangle \end{aligned}$$

aber auch:

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}|a, b\rangle &= \hat{A}b|a, b\rangle = ab|a, b\rangle \\ \hat{B}\hat{A}|a, b\rangle &= \hat{B}a|a, b\rangle = ba|a, b\rangle \\ (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a, b\rangle &= 0 \end{aligned}$$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ Kommutator, Kurzschreibweise:

$$[A, B] = 0$$

Für vertauschende Operatoren gibt es gemeinsame scharfe Observablen.
 Heisenberg Unschärfe für Ort und Impuls
 Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} \\ &= [x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x] \\ &= [-i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar + i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}] \\ &= i\hbar \end{aligned}$$

⇒ Operatoren vertauschen nicht! ⇒ es gibt keinen Eigenzustand zu \hat{x} und \hat{p} !
 Theoretische Quantenmechanik: $[A, B] = i\text{const.}$

$$\Rightarrow \text{VAR}(A)\text{VAR}(B) \geq \frac{\text{const.}}{2}$$

Energie-Operator für ein freies Teilchen, klassisch:
 Impulsdarstellung (in Impulsdarstellung: $\hat{p} \rightarrow p$):

$$\text{klassisch: } H = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \text{Quantenmechanik: } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Erwartungswert der Energie für Impuls Eigenzustand:

$$\begin{aligned} \hat{H}|k\rangle &= \frac{1}{2m}\hat{p}\hat{p}|k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}|k\rangle \\ \hbar H &= \langle k|\hat{H}|k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\langle k|k\rangle = \hbar\omega_{dB} \\ [\hat{p}^2, \hat{p}] &= \hat{p}^3 - \hat{p}^3 = 0 \end{aligned}$$

Auch hier: Zustand unverändert, die Zahl gibt die Energie [J] an. ⇒ $|k\rangle$ ist Energie Eigenzustand

$$\hat{E}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$$

\hat{H} in Ortsdarstellung:

$$\frac{\hat{p}\hat{p}}{2m} \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Beispiel 3.5 (de Broglie Welle)

$$\begin{aligned} e^{i(k_{dB}x - \omega_{dB}t)} &\mapsto \underbrace{\hbar\omega_{dB}}_{\text{Energie}} e^{ik_{dB}x - \omega_{dB}t} \\ \hat{E} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \end{aligned}$$

⇒ damit der Energie-Operator die Energie „liefert“ muss er als

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

definiert sein.

Allgemein auch gültig, das heißt Energie Eigenzustände haben die einfache Zeitentwicklung

$$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Deshalb sind diese Zustände eine gute Basis, um Zeitdynamik zu beschreiben. Generell: Jede klassische Größe

$$a = f(\vec{x}, \vec{p}) \implies \hat{a} = f(\hat{x}, \hat{p})$$

zum Beispiel Drehimpuls: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

$$H = \kappa \vec{L}^2 \rightarrow \hat{H} = \kappa (\hat{x} \times \hat{p})^2, \quad [L_x, L_y] = iL_z$$

Es gibt aber auch nicht-klassische Größen (zum Beispiel Spin).

3.3 Die Schrödinger Gleichung (nicht relativistische Quantenmechanik)

Klassische Gesamtenergie: E

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$$

Allgemeiner: H Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \mapsto \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Axiom der nicht-relativistischen Quantenmechanik

Operator Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Darstellung im Ortsraum: $\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$

$$\hat{x} \mapsto \vec{x}$$

$$\hat{p} \mapsto -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 = -\hbar^2 \Delta$$

Schrödinger Gleichung für nicht-relativistische Quantenmechanik

Randbedingung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t)$$

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

Damit wird die Dynamik in allgemeinen Potentialen beschrieben. Die Zeitdynamik kann als Interferenz verstanden werden, wenn man die Energie-Eigenzustände $\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$ als Basis verwendet \rightarrow Zeitabhängigkeit kommt nur durch die verschiedene Phasenentwicklung der Energie-Eigenzustände zustande.

Beispiel 3.6 (Drei Zustandsystem) $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$ Basiszustände, Eigenschaften:

$$\begin{aligned}\langle a|b\rangle &= \langle a|c\rangle = \langle b|c\rangle = 0 && \text{(Orthonormalität)} \\ \langle a|a\rangle &= \langle b|b\rangle = \langle c|c\rangle = 1 && \text{(Normierung)}\end{aligned}$$

Operatoren:

$$\begin{aligned}\hat{A}|a\rangle &= a|a\rangle \\ \hat{B}|b\rangle &= b|b\rangle \\ \hat{C}|c\rangle &= c|c\rangle\end{aligned}$$

Mögliche Definitionen:

$$\begin{aligned}\hat{A} &= a|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle c| + |c\rangle\langle b| \\ \hat{B} &= b|b\rangle\langle b| \\ \hat{C} &= c|c\rangle\langle c|\end{aligned}$$

Anwenden auf die Basiszustände:

$$\begin{aligned}\hat{A}|a\rangle &= (a|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle c| + |c\rangle\langle b|)|a\rangle = a|a\rangle \\ \hat{A}|b\rangle &= (a|a\rangle\langle a| + |b\rangle\langle c| + |c\rangle\langle b|)|b\rangle = |c\rangle \\ \hat{B}|b\rangle &= (b|b\rangle\langle b|)|b\rangle = b|b\rangle\end{aligned}$$

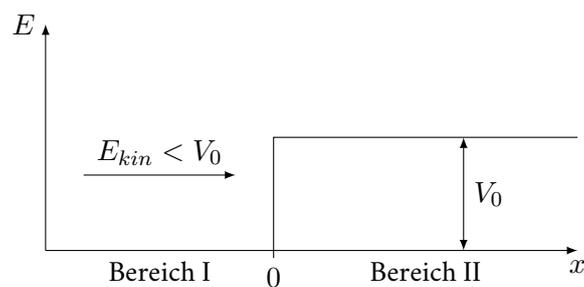
Erwartungswert für a :

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle_{|a\rangle} &= \langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|a|a\rangle = a \langle a|a\rangle = a \\ \text{VAR}(A)_{|a\rangle} &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \langle a|\hat{A}a|a\rangle - a^2 = 0 \\ \langle b|\hat{A}|b\rangle &= \langle b|c\rangle = 0 \\ \text{VAR}(A)_{|b\rangle} &= \langle b|\hat{A}^2|b\rangle - \langle b|\hat{A}|b\rangle^2 = 1\end{aligned}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = b\{|c\rangle\langle b| + |b\rangle\langle c|\} \neq 0$$

4 Beispiele für Einteilchen Quantenmechanik

4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe



Lösen Schrödinger Gleichung in **einer** Dimension in Ortsdarstellung: $\vec{x} \rightarrow x$

$$\vec{x} \mapsto x : \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

Suchen Lösungen mit Separationsansatz

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x)$$

Warum: Die Zeitentwicklung ist „nur“ Rotation in komplexen Zahlenebene, dieser Zustand $|\psi_E\rangle$ in Ortsdarstellung $\psi(x, t)$ ist Energie-Eigenzustand.

$$\hat{E} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = i\hbar \phi(x) \left(-i\frac{E}{\hbar} e^{i\frac{E}{\hbar}t} \right) = E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) = E \psi(x, t) \checkmark$$

$$E = E_{\text{ges}} = E_{\text{kin}}^I$$

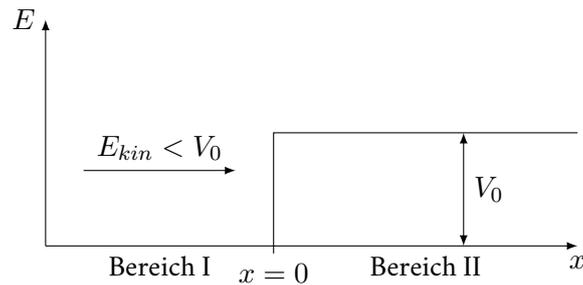
Gleichung für $\phi(x)$ folgt aus Einsetzen von $\psi(x, t)$ in Schrödinger Gleichung:

$$E e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) + V(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x)$$

Man erhält eine Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$E \phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + V(x) \phi(x)$$

Fall 1: $E_{\text{kin}} < V_0$, klassisch wird das Teilchen reflektiert



Bereich I:

$$V(x) = 0 \implies E \phi_I(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_I(x) \quad E = E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

kennen Lösung:

$$\phi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Check:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_I(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (A(-k^2)e^{ikx} + B(-k^2)e^{-ikx}) \\ &= \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{E_{\text{kin}}^I} \phi_I(x) = \hbar \omega_{dB} \phi_I(x) = E \phi_I(x) \checkmark \end{aligned}$$

Man erhält die Superposition von zwei Wellen, eine in positive x -Richtung und eine in negative x -Richtung

$$\begin{aligned} \psi_I(x, t) &= e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x) = A e^{i(kx - \omega_{dB}t)} + B e^{i(-kx - \omega_{dB}t)} \\ &\quad \downarrow \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \omega_{dB} \hbar \end{aligned}$$

Bereich II:

$$E\phi_{\text{II}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{\text{II}}(x) + V_0 \phi_{\text{II}}(x)$$

Allgemeine Lösung:

$$\phi_{\text{II}}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x} \quad \text{mit} \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

Für den Fall $V_0 > E$ ist α reell und, Kopffizient $D = 0$ macht ϕ_{II} quadratintegrabel

$$\int_0^{\infty} |\phi|^2 dx = 0$$

Bemerkung: Für $V_0 = 0 \rightarrow \alpha$ imaginär, wie in Bereich I besprochen. Die spezielle Lösung des Problems folgt aus Randbedingungen bei $x = 0$:

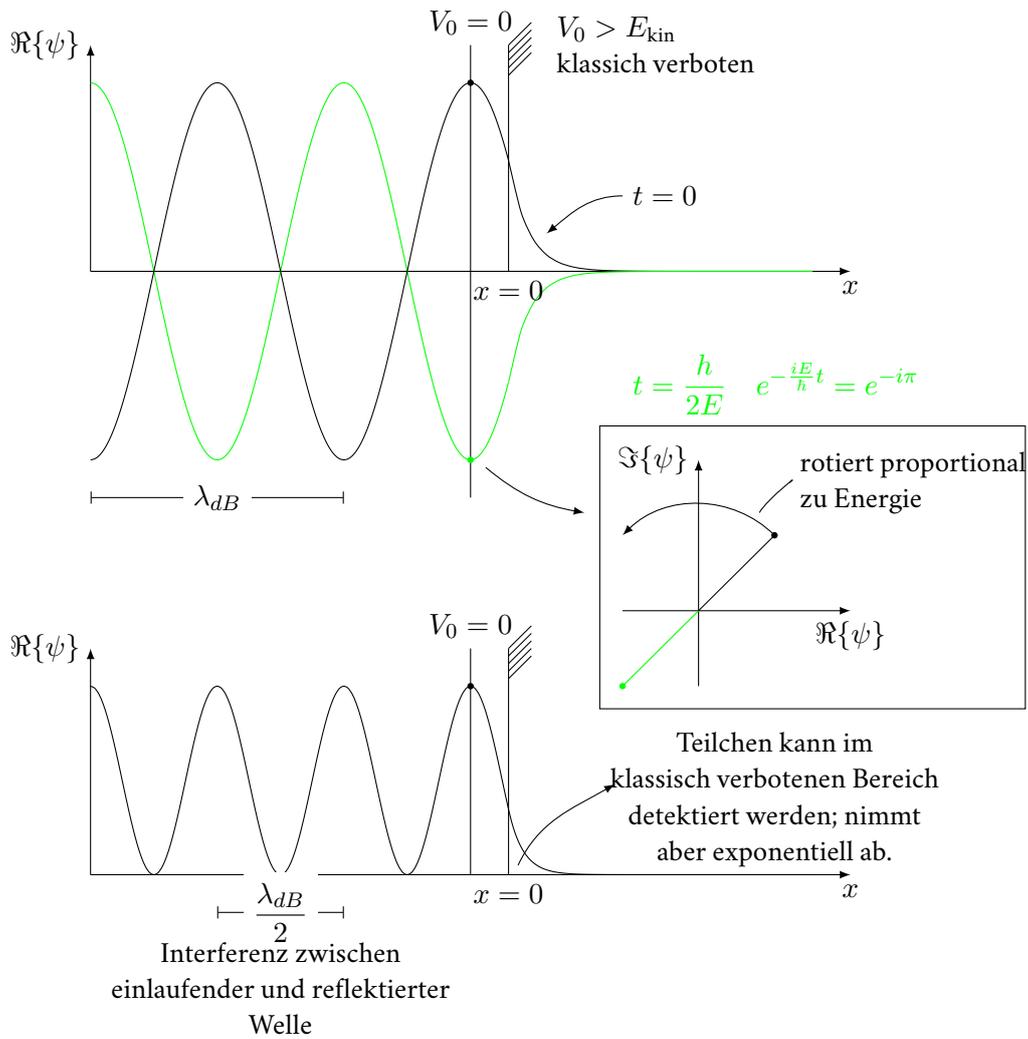
Wahrscheinlichkeit muss eindeutig sein

$$\phi_{\text{I}}(x=0, t) = \phi_{\text{II}}(x=0, t)$$

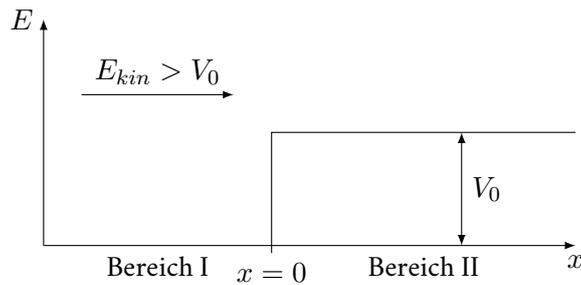
Impuls muss eindeutig sein

$$\left. \frac{d\phi_{\text{I}}}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\phi_{\text{II}}}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\begin{aligned} \implies A + B = C & \\ \implies Aik - Bik = -C\alpha & \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} \implies A + B = C \\ \implies Aik - Bik = -C\alpha \end{aligned}} \right\} \begin{aligned} B &= A \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \\ C &= A \frac{2ik}{ik - \alpha} \end{aligned}$$



Fall 2: $E_{kin} > V_0$, Fall $E_{kin} \gg V$ wurde im Abschnitt 2.7 - Interferometer diskutiert.

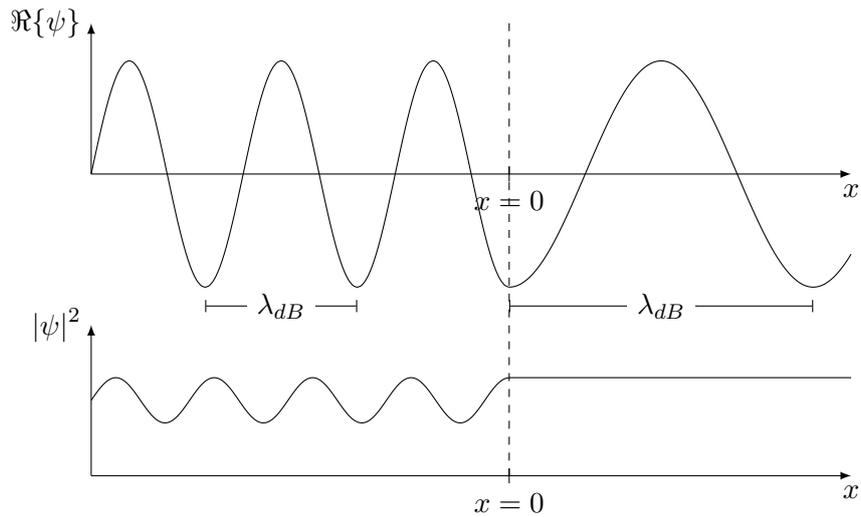


Analoge Vorgehensweise; Im Bereich II findet man propangierende Lösungen $\hat{=}$ de Broglie Wellen:

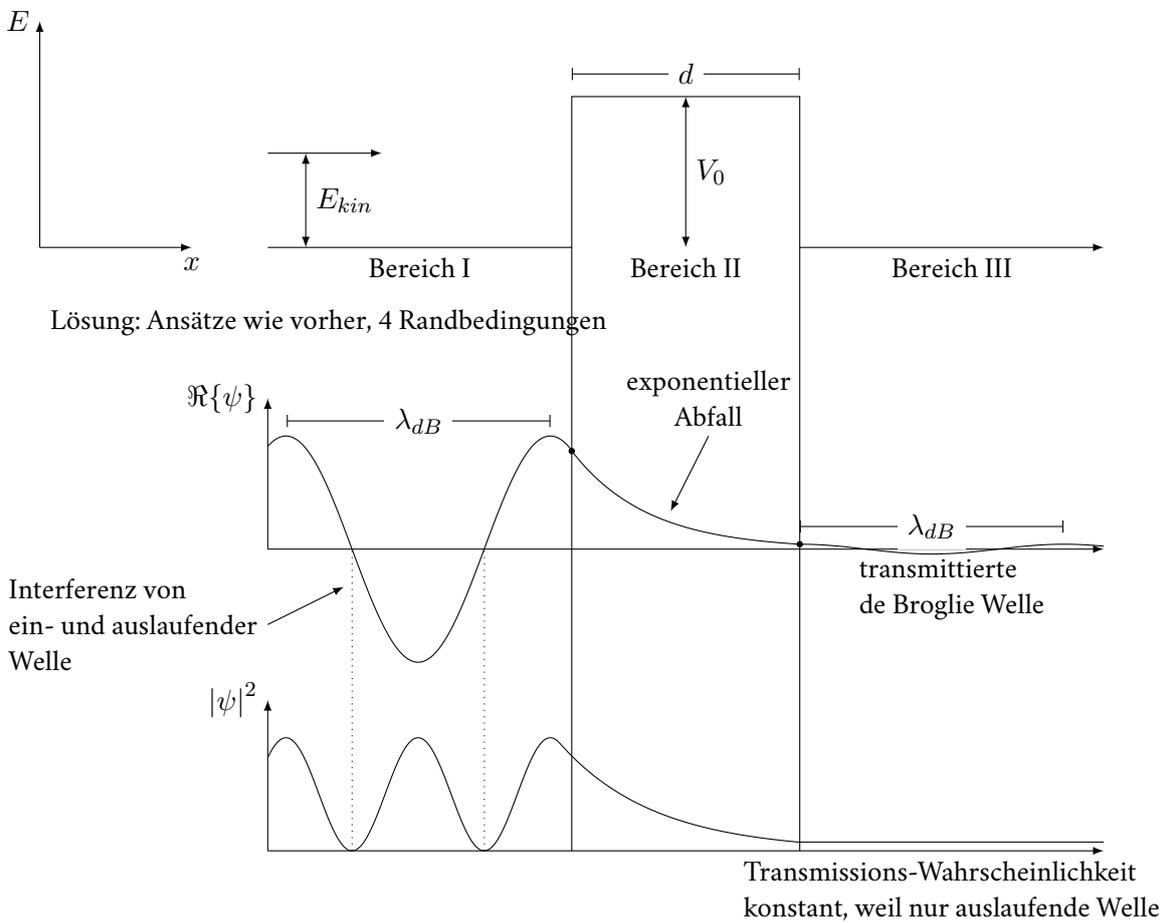
$$\phi_{II}(x) = C e^{ik_2 x} \quad \text{mit} \quad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V_0, k_2 \text{ reell}$$

Randbedingung bei $x = 0$:

$$B = \frac{k - k_2}{k + k_2} \quad C = \frac{2k}{k + k_2} A$$



4.2 Tunneffekt durch eine Potentialbarriere



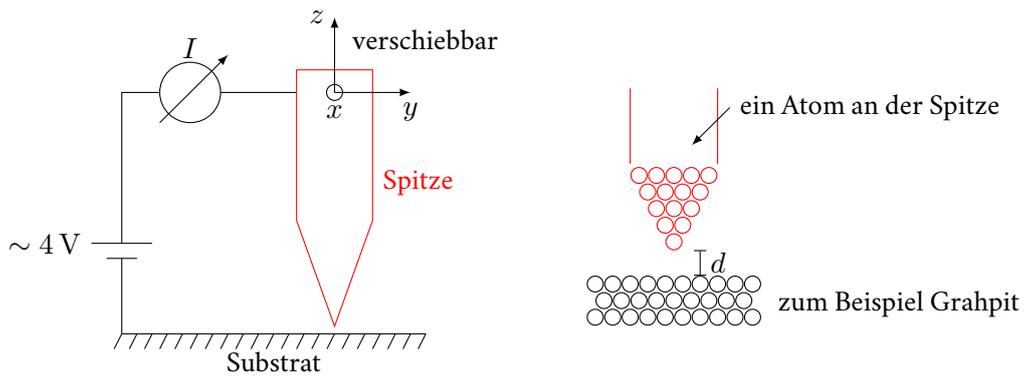
Bereich II:

$$|\psi_{II}|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \alpha^2} |\psi(0)|^2 e^{-2\alpha x} \quad \hbar\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E_{kin})}$$

Transmissions Wahrscheinlichkeit:

$$T = \frac{|\psi_{II}(d)|^2}{|\psi_{II}(0)|^2} \propto e^{-2\alpha d}$$

Exponentiell empfindlich auf Änderungen von Barrierenbreite d . Anwendung: Scanning tunneling microscope ((STM) - Rastertunnelmikroskop)



Elektronen können zur Spitze tunneln \implies Strom ~ 1 nA

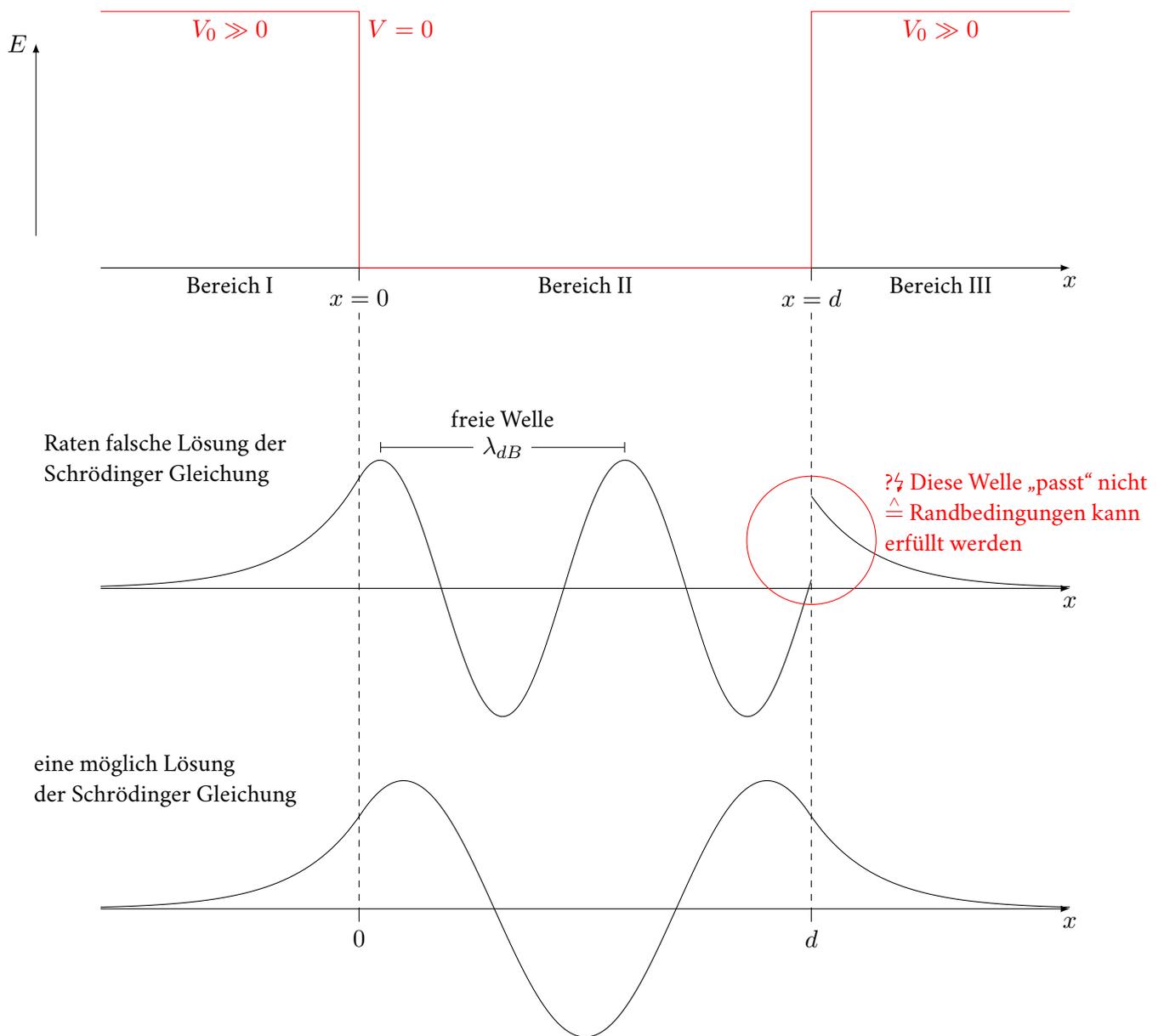
$$I \propto T \propto e^{-2\alpha d} \quad \alpha \sim 1 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$d = 0.1 \text{ nm} \quad T \sim 0.13$$

$$d = 1 \text{ nm} \quad T \sim 2 \times 10^{-9}$$

extrem empfindlich auf $d \implies$ atomare Auflösung.

4.3 Kasten-Potential



Limes $V_0 \rightarrow \infty \implies$ Lösung in Bereich I + Bereich III $e^{-\alpha x} \rightarrow 0 \implies$ Randbedingungen für Bereich II:

$$\psi_{\text{II}}(0) = \psi_{\text{II}}(d) = 0$$

Suchen Energie-Eigenzustände

$$\psi_{\varepsilon}(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi(0) &= \phi(d) = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) &= E\phi(x) \end{aligned}$$

Lösung:

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

mit

$$\begin{aligned} \phi(x) = A + B = 0 & \quad \rightarrow A = -B \\ \phi(d) = Ae^{ikd} + Be^{-ikd} = 0 & \quad \rightarrow A(e^{ikd} - e^{-ikd}) = 2Ai \sin kd = 0 \end{aligned}$$

⇒ k kann nur ganz bestimmte / diskrete Werte annehmen: $kd = n\pi, n \in \mathbb{N}, n$: Quantenzahlen.
 A : folgt aus Normierungsbedingung. Lösung für Energie-Eigenzustände in Ortsdarstellung:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \quad \text{mit Energie} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} n^2$$

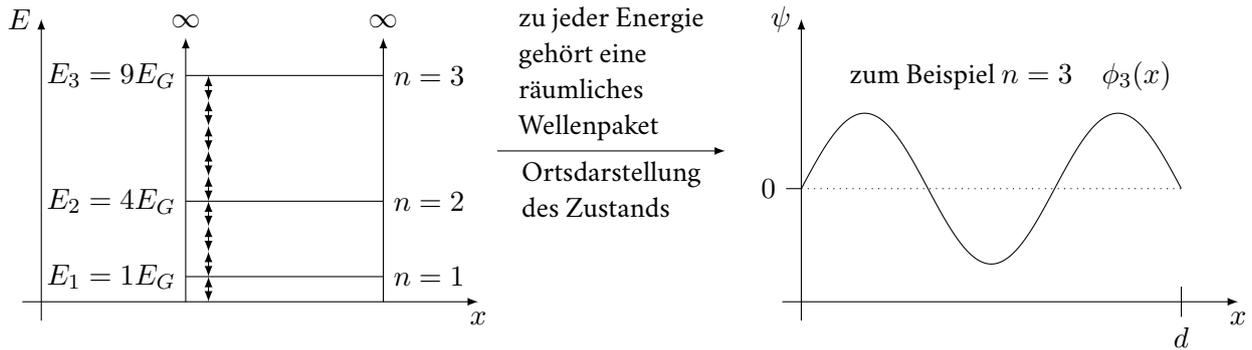
In Dirac Schreibweise:

$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle \rightarrow |\psi_E\rangle = |n\rangle$$

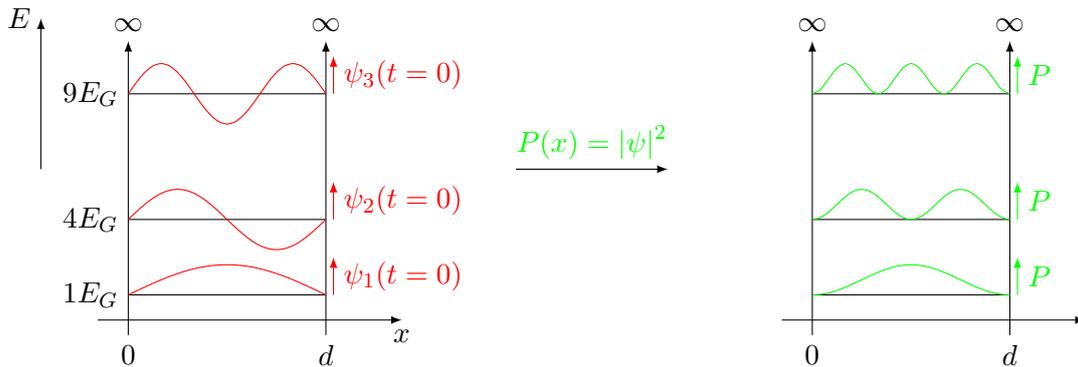
Definiere E_G für den Grundzustand:

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} n^2 = E_G n^2 \\ \rightarrow \hat{H} |n\rangle &= E_G n^2 |n\rangle \end{aligned}$$

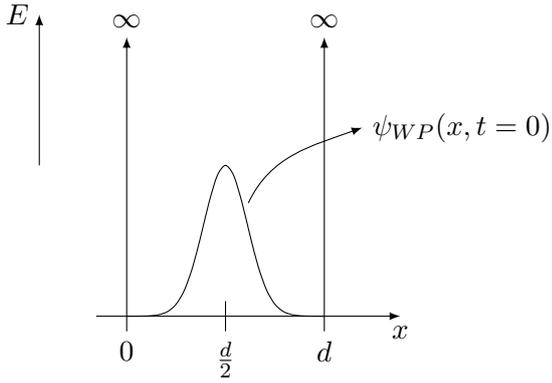
für den energetisch niedrigsten Zustand = Grundzustand erhält man $E = E_G$



Typische Darstellung:



Vorhersage für ein Teilchen anfänglich lokalisiert:

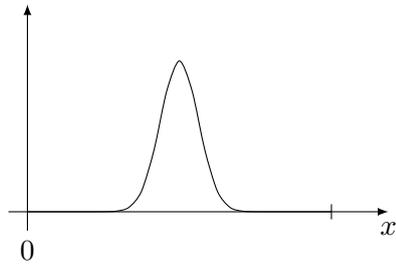


→ später?

$$|\psi_{WP}\rangle_t = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} |n\rangle$$

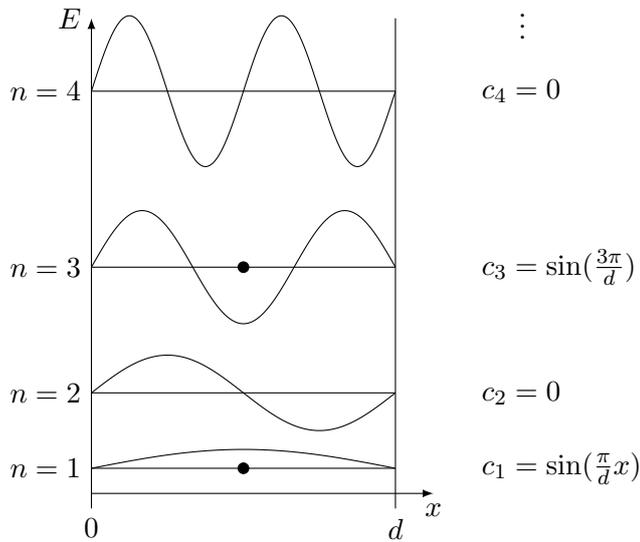
→ finde c_n : $\langle n | \psi_{WP} \rangle = c_n$

Ortsdarstellung: $|n\rangle = \sin\left(\frac{n\pi}{d}x\right)$



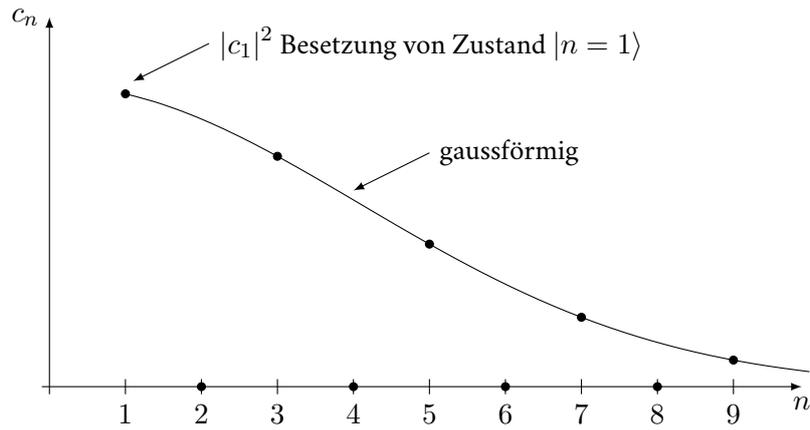
$$\psi(x, t=0) = \left(\frac{2}{\pi d^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{d^2}}$$

|| ← Summe von Energie Eigenzuständen



ϕ_2 ungerade und $\psi(x, t=0)$ gerade

$$\implies \int \phi_2 \psi dx = 0$$



⇒ Anfangsdynamik wie freies Wellenpaket ⇒ Reflexionen am Rand ⇒ lange Zeiten „Revival“ = der Anfangszustand wird wieder erreicht.

4.4 „Revival“ in der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik in Systemen mit diskreten Energien zeigt das Phänomen des „rephasieren“ das heißt die Phasenunterschiede zwischen allen Energieeigenzuständen sind $n \cdot 2\pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Im Fall des Wellenpakets im Kastenpotential:

$$e^{i \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} t} = 1$$

Revival wenn $\frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} t = m2\pi, m \in \mathbb{Z} \Rightarrow$ 1. Revival:

$$\frac{E_3 - E_1}{\hbar} \cdot T_{\text{Revival}} = 2\pi \rightarrow \frac{E_G}{\hbar} (3^2 - 1^2) T_{\text{Revival}} = 2\pi \Rightarrow T_{\text{Revival}} = \frac{\hbar}{E_G} \frac{1}{(9 - 1)} = \frac{\hbar}{E_G} \frac{1}{8}$$

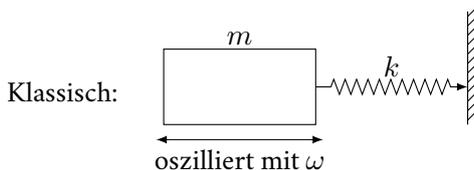
Allgemeine Energiedifferenz:

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_G (n^2 - n'^2) = E_G (n - n') (n + n') \\ \Rightarrow \Delta E_{\text{min}} &= E_G (3^2 - 1) \end{aligned}$$

wenn Phasendifferenz für Grund- und 2. angeregter Zustand 2π ist, sind alle anderen Phasendifferenzen ein gerades Vielfaches davon

mit $d \rightarrow \infty$ geht die Grundzustandsenergie $E_G = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \rightarrow 0$, damit wird die „revival“ Zeit $T_{\text{Revival}} \rightarrow \infty$ unendlich lang. Deshalb zerfließt ein Wellenpaket im freien Raum ($d \rightarrow \infty$) für immer.

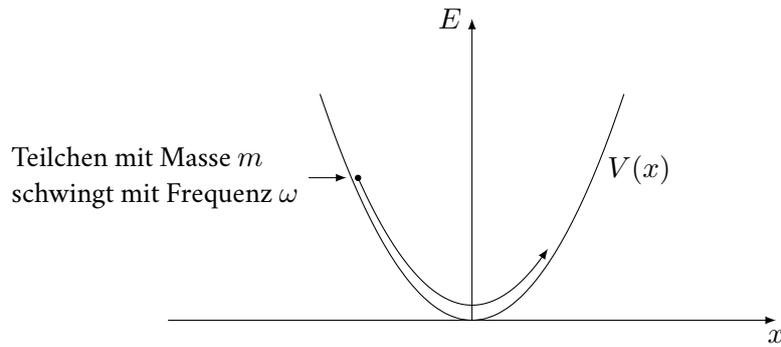
4.5 Harmonischer Oszillator



$$\left. \begin{aligned} F &= -kx \\ V &= \frac{k}{2} x^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} x &= x_0 \sin(\omega_0 t) \\ \omega_0^2 &= \frac{k}{m} \end{aligned}$$

⇒ schreiben harmonisches Potential so, dass man die Frequenz ablesen kann

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$$



Quantenmechanische Beschreibung: $\psi(x, t) \rightarrow$ suchen Energie-Eigenzustände:

$$\psi_E(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(x)$$

Schrödinger Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi(x) = E \phi(x)$$

Suche Lösung der Form:

$$\phi(x) = N e^{-\frac{b}{2}x^2} \underbrace{(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots)}_{\text{Potenzreihenansatz}}$$

Polynome haben die Form:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0(x) &= 1 \\ \tilde{H}_1(x) &= 2\sqrt{b}x \\ \tilde{H}_{n+1}(x) &= 2\sqrt{b}x\tilde{H}_n(x) - 2n\tilde{H}_{n-1}(x) \end{aligned}$$

Was sind die Eigenenergien \rightarrow einsetzen in Schrödinger Gleichung:

$$\begin{aligned} \phi_0 &= N e^{-\frac{b}{2}x^2} \\ \phi_0'' &= N(b^2 x^2 - b) e^{-\frac{b}{2}x^2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(b^2 x^2 - b) + \frac{m\omega^2}{2} &= E_0 \end{aligned}$$

die x -Abhängigkeit muss verschwinden, weil E eine Konstante ist (hängt nicht von x ab)

$$\begin{aligned} \implies \frac{\hbar^2}{2m} b^2 &= \frac{m\omega^2}{2} \\ b &= \frac{m\omega}{\hbar} \\ \phi_0 &= N e^{-\frac{b}{2}x^2} = N e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{a_{ho}}\right)^2} \end{aligned}$$

a_{ho} : charakteristische Länge; harmonic oscillator length

$$\begin{aligned} a_{ho} &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ E_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} b = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

weitere Beispiele:

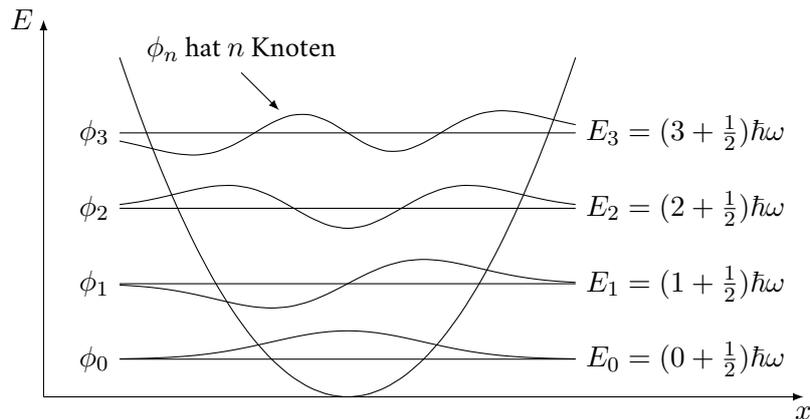
$$\begin{aligned}\phi_1 &= N2\sqrt{bx}e^{-\frac{b}{2}x^2} \\ \phi_1'' &= N2(-3bx + b^2x^3)\sqrt{bx}e^{-\frac{b}{2}x^2} \\ E_1 2N\sqrt{bx} &= -\frac{\hbar^2}{2m}2N\sqrt{b}(-2bx + b^2x^3) + 2N\sqrt{b}\frac{m\omega^2}{2}x^3 \\ x^3 : \text{Koeffizient ist null, weil } b &= \frac{m\omega}{\hbar} \\ x : +\frac{\hbar^2}{2m}2b &= E_1 = \hbar\omega\frac{3}{2} = \hbar\omega\left(1 + \frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

N : folgt aus Normierungsbedingung.

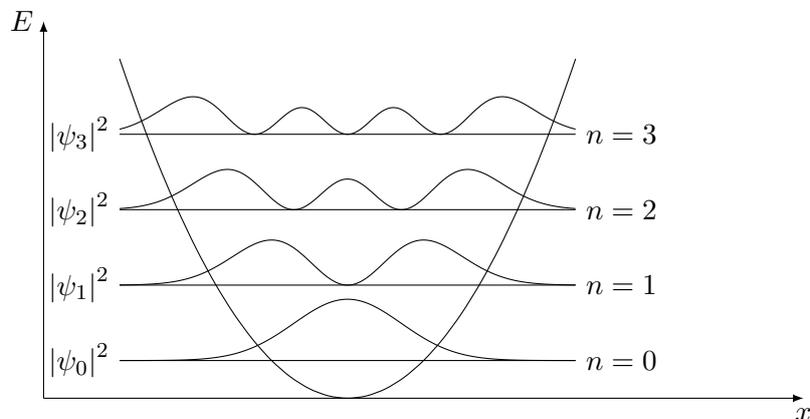
Allgemeine Lösung:

$$\begin{aligned}\phi_n &= \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}a_{ho}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}}H_n\left(\frac{x}{a_{ho}}\right)e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a_{ho}}\right)^2} \\ \text{mit } E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad a_{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \text{mit } H_0(x) &= 1 \quad H_1(x) = 2x \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)\end{aligned}$$

H_n : Hermitesche Polynome.



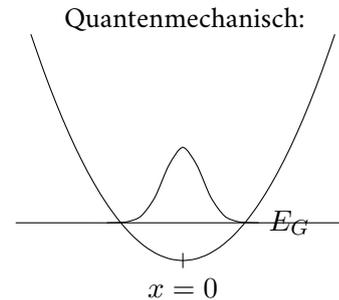
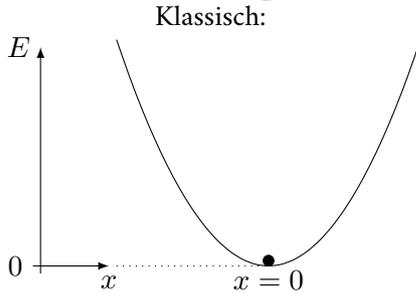
$$\psi_n(x, t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\phi_n(x) \rightarrow |\psi_n|^2 = |\phi_n(x)|^2$$



$n \hat{=} \text{Quantenzahl.}$

$$\hat{H}_{\text{Harmonischer Oszillator}} |n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle$$

Grundzustand: $E_G = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$



Grundzustand:

Quantenmechanischer Zustand kann nicht beliebig räumlich lokalisiert sein. Heisenberg Unschärfe gibt

$$\text{VAR}(x) \cdot \text{VAR}(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

kinetische Energie steigt mit Lokalisierung.

Allgemeiner Grundzustand ergibt sich aus dem „Gleichgewicht“ zwischen potentieller Energie und kinetischer Energie (nennt man auch Quantendruck)

Der Grundzustand des harmonischen Oszillators erfüllt minimale Heisenberg Unschärfe. Harmonischer Oszillator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle \hat{x}^2 \rangle$$

harmonischer Oszillator symmetrisch in $x, p \implies \langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$

$$\text{VAR}(x) = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle$$

$$\text{VAR}(p) = \langle \hat{p}^2 \rangle$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \text{VAR}(p) + \frac{m\omega^2}{2} \text{VAR}(x)$$

$$V_x := \text{VAR}(x)$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{V_x} + \frac{m\omega^2}{2} V_x$$

suchen Minimum

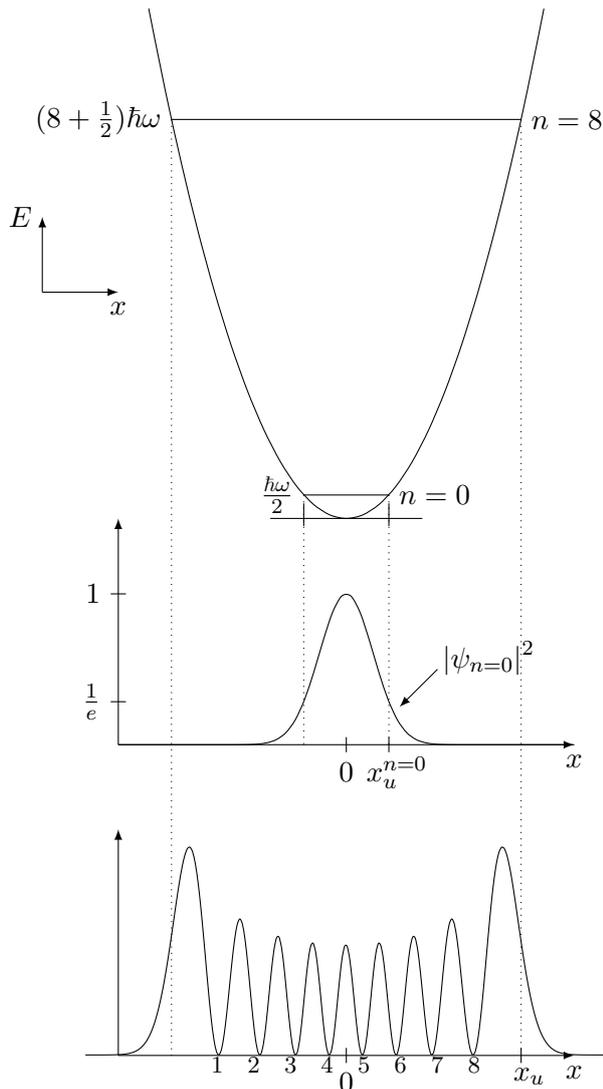
$$\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dV_x} = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{V_x^2} + \frac{m\omega^2}{2} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\implies V_x = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\implies \langle \hat{H} \rangle_{\min} = \hbar\omega \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = \frac{1}{2}\hbar\omega \checkmark$$

Grundzustand ist Zustand minimaler Heisenberg-Unschärfe.

4.6 Klassische Korrespondenz beim harmonischen Oszillator



x_u : klassischer Umkehrpunkt

$$E = \frac{m\omega^2}{2}x_u^2$$

$$x_u = \sqrt{\frac{2E}{m\omega}}$$

für $n=0$ $E = \frac{\hbar\omega}{2}$

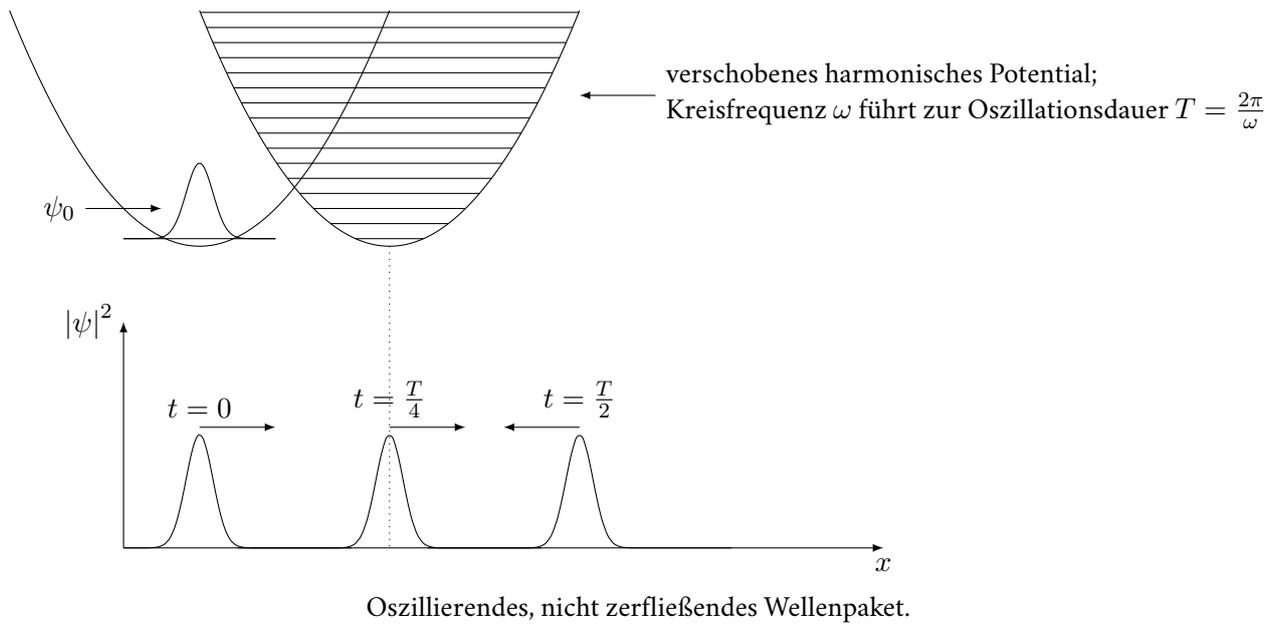
$$x_u = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = A_{ho}$$

mit $\psi_{n=0} = e^{-i\frac{\omega}{2}t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{a_{ho}})^2}$

$$|\psi_{n=0}(x_u)|^2 = \frac{1}{e} |\psi_{n=0}(x=0)|^2$$

Die Quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte nähert sich der klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte für $n \rightarrow \infty$ an.

Was entspricht einem klassisch oszillierenden Teilchen?



Quadratisches Potential in x kompensiert quadratische Phasenentwicklung in x des expandierenden Wellenpakets
 \implies Paket zerfließt nicht und oszilliert mit der Kreisfrequenz ω . Dieses Wellenpaket nennt man auch „verschobenes Vakuum ($n = 0$)“ beziehungsweise kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$. Wahrscheinlichkeit P :

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}$$

5 Wasserstoff

5.1 Ausgestrahltes Licht einer H2 Gasentladung

5.2 Wasserstoff ist mehr als zusammengesetztes ein negatives Teilchen gebunden an ein positives Teilchen

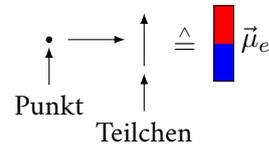
Man könnte meinen ein einfachen zwei-Körper Problem mit Coulomb-Anziehung, aber:

1. Atom bewegt sich konstant mit Geschwindigkeit v
2. Das Proton bewirkt ein Potential:

$$\hat{=} V(\vec{x}) = \frac{-e^2}{2\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$$

$$V = \frac{-q^2}{2\pi\epsilon_0|\vec{r}|} = \frac{-e^2}{2\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$$

3. Elektron hat Spin (folgt aus relativistischer Behandlung). Damit verbunden hat das Elektron ein magnetisches Moment

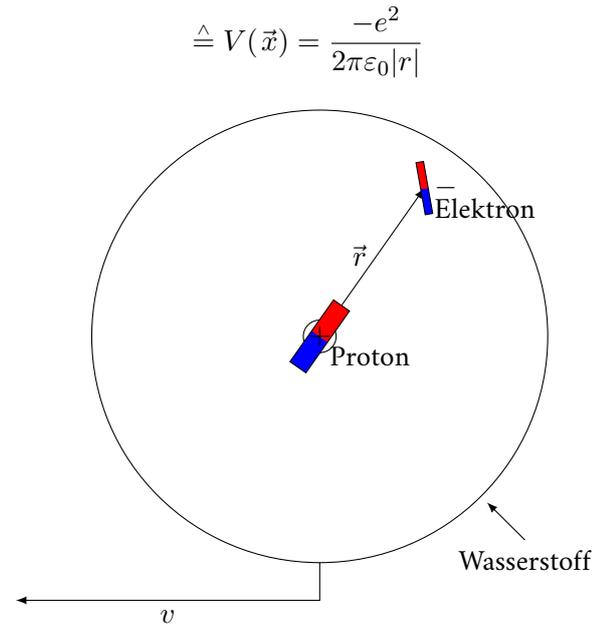


\Rightarrow Feinstruktur, weil zusätzliche Energie

$$E = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B}$$

$$\Delta E \sim 10^{-4} \text{ eV}$$

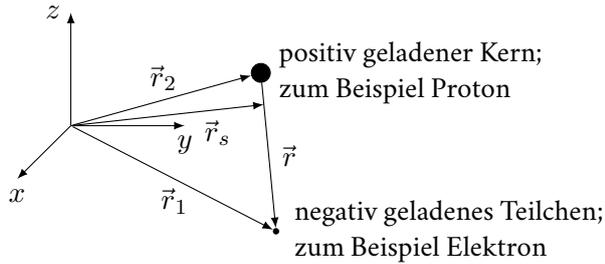
4. Proton ist zusammengesetztes Teilchen mit Spin \Rightarrow gesamt Spin \Rightarrow Magnetisches Moment $\vec{\mu}_p \Rightarrow$ Energie durch $\vec{\mu}_p \cdot \vec{\mu}_e$. Hyper-Feinstruktur $\Delta E \sim 10^{-6} \text{ eV}$
5. Vakuum ist nicht leer \Rightarrow Vielteilchen-Problem, $\Delta E \sim 10^{-6} \text{ eV}$



Aber:

1. Atom bewegt sich; Lösung: Einführen von Schwerpunktsbewegung (λ_{dB} wie bisher) und Relativbewegung (analog wie in Mechanik) \Rightarrow
2. Schrödinger Gleichung. 3D und $1/r$ Potential

5.3 Wasserstoff - ein einfaches Modell



Wasserstoff: Kern $\hat{=}$ Proton

$$\begin{aligned} m_p &= 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg} \\ &= 938 \text{ MeV} \\ &= 1 \text{ u (atomic mass unit)} \end{aligned}$$

negativ geladenes Teilchen $\hat{=}$ Elektron

$\vec{\mu}_2$: Ort des positiven Kerns

$\vec{\mu}_1$: Ort des negativen Teilchens

$\vec{\mu}_s$: Ort des Schwerpunkts

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$= 510 \text{ keV}$$

$$= 1/1835 \text{ u}$$

Suchen Energie-Eigenzustände

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

$$\hat{H} = \hat{E}_{\text{kin}} + \hat{E}_{\text{pot}} = \underbrace{\frac{\hat{p}_2^2}{2m_k}}_{\text{Kern}} + \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m_e}}_{\text{Elektron}} - \underbrace{\frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0|\vec{r}|}}_{\text{Wechselwirkung}}$$

in Ortsdarstellung

$$E_{\text{ges}}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_1 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Zu Frage 1: Vereinfachung durch Trennung von Schwerpunkts- (\vec{r}_s) und Relativbewegung (\vec{r})

$$\vec{r}_s = \frac{m_k \vec{r}_2 + m_e \vec{r}_1}{m_k + m_e} = \begin{pmatrix} x_s \\ y_s \\ z_s \end{pmatrix} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_s, \vec{r})$$

$$\text{mit } \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_s, x) = \frac{\partial \Psi}{\partial x_s} \frac{\partial x_s}{\partial x_1} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} = \left(\frac{m_e}{M} \frac{\partial}{\partial x_s} + \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x_s, x)$$

analog: y_1, z_1

$$\begin{aligned} \implies E_{\text{ges}} \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_s \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} \right) \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) = E_{\text{ges}} \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) \\ \mu &= \frac{m_k m_e}{m_k + m_e} \end{aligned}$$

Dabei erhält man für die kinetische Energie des Schwerpunkts:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_s \Psi(\vec{r}_s, \vec{r})$$

dies ist entkoppelt von $\vec{r} \implies$ Atom als ganzes verhält sich wie eine De-Broglie-Welle. Zum Beispiel: Doppelspalt, Atom-Molekülinterferometer. $\hat{=}$ externe Dynamik.

Für die kinetische und potentielle Energie der Relativbewegung erhält man:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} \right) \Psi(\vec{r}_s, \vec{r})$$

$\hat{=}$ interne Dynamik.

Löse mit Separationsansatz

$$\Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) = \Psi_s(\vec{r}_s)\Psi(\vec{r}) \quad \text{und} \quad E_{\text{ges}} = E_s + E$$

\implies Externe Dynamik:

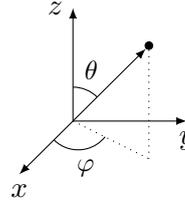
$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_s \psi_s(\vec{r}_s) = E_s \psi_s(\vec{r}_s)$$

Lösung: de-Broglie Welle für das Atom mit

$$\lambda_s = \frac{h}{\sqrt{2ME_s}}$$

\implies Interne Dynamik: Lösung etwas langwieriger.

Zentral Potential \implies sinnvoll in Kugelkoordinaten



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{hängt nur von } r \text{ ab}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)}_{\text{hängt nur von } \theta\text{-Polarwinkel und } \varphi\text{-Azimutwinkel ab}}$$

\implies Separationsansatz:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)P(\theta)Q(\varphi)$$

3 gewöhnliche Differentialgleichungen 2. Grades für $R(r)$, $P(\theta)$, $Q(\varphi)$. Zusätzliche Bedingung

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

grenzt die Lösungen der Differentialgleichungen stark ein.

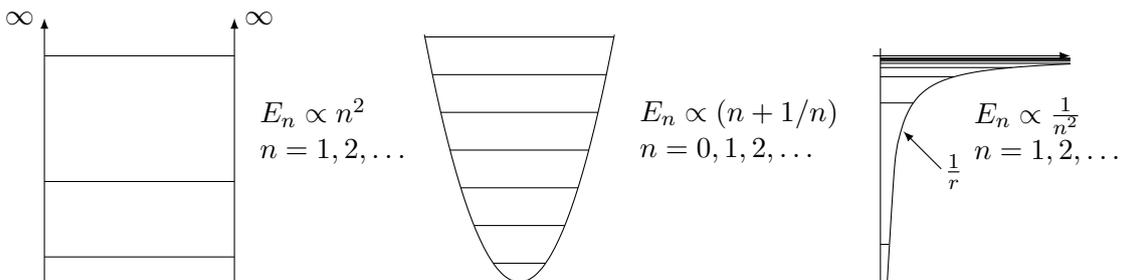
$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,e}(r)P_l^m(\cos \theta)e^{im\varphi}$$

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{z^2}{n^2} = -R_y^* \frac{z^2}{n^2}$$

R_y^* : reduzierte Rydberg Konstante $\approx 13.6 \text{ eV}$
 $n = 1, 2, 3, \dots$ Hauptquantenzahl
 Für gegebenes n ist $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$
 Für gegebenes l ist $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \rightarrow |n, l, m\rangle \quad \psi_{n,l,m} = \langle x | n, l, m \rangle$$

Wichtig: Energie = $-13.6 \text{ eV} \cdot 1/n^2$



5.4 Wasserstoff - radiale Wellenfunktion

Radiale Wellenfunktion:

R_{nl} : skaliertes Radius

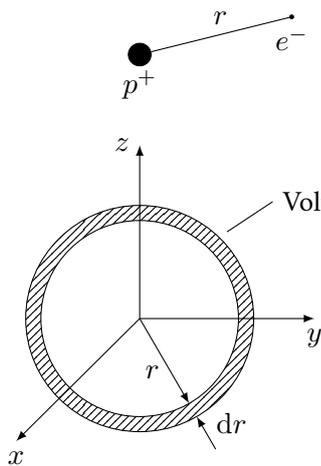
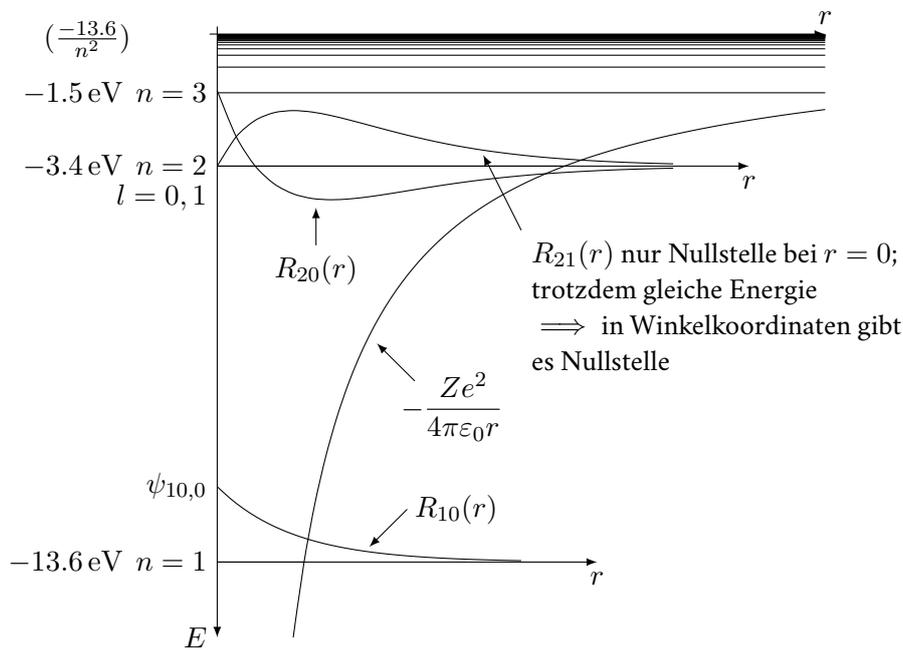
$$\rho = 2Z \frac{r}{na'_B}$$

Mit Bohrschem Radius a'_B :

$$a'_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$$

(normaler Bohrscher Radius ist mit Elektronmasse anstatt μ definiert). $L_m^n(\rho)$: zugeordnete Laguerre Polynome.

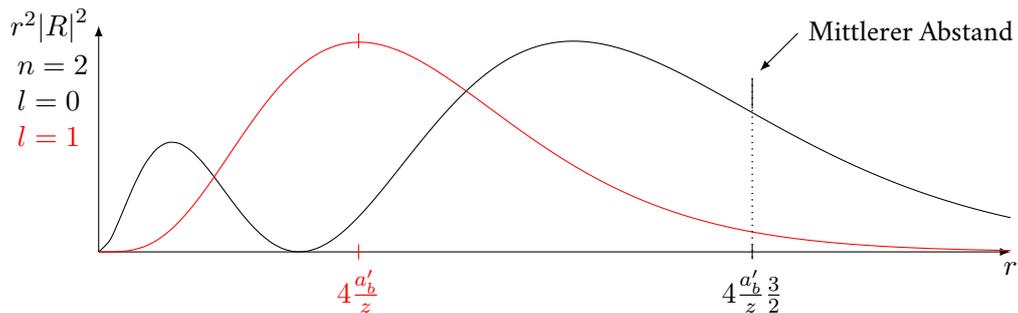
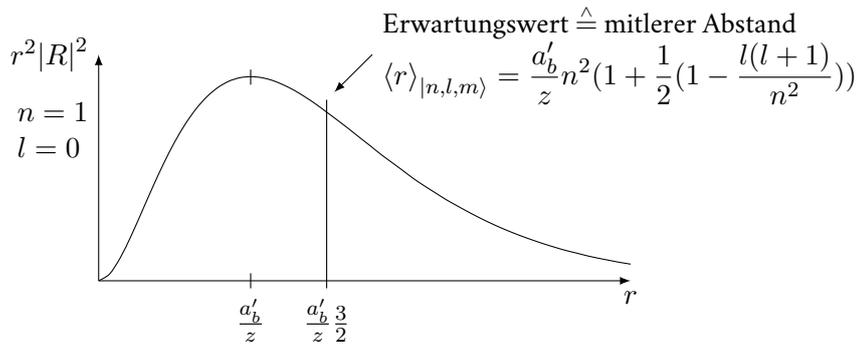
$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{Z}{na'_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l \underbrace{L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)}_{\text{Polynom } n-l-1 \text{ Grades } \hat{=} \text{Anzahl der Nullstellen}}$$



Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit das Elektron im Abstand $[r, r + dr]$ zu finden?

$$dP = |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr$$

$\Rightarrow |R_{n,l}(r)|^2 r^2$ ist eine sinnvolle Größe um Aufenthaltswahrscheinlichkeit darzustellen.



Allgemein: $l = n - 1$

$$r_{\max} = n^2 \frac{a'_b}{Z}$$

(ergibt auch Bohr Modell)

5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der elektronischen Wellenfunktion

Winkelanteil der Wellenfunktion:

$$P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$P_l^m(x)$: Legendre-Polynome. Klassischer Drehimpuls:

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

Quantenmechanische Beschreibung

$$\vec{x} \rightarrow \hat{x} \quad \vec{p} \rightarrow \hat{p}; \quad \hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$$

In Ortsdarstellung: $\hat{x} \mapsto x$ $\hat{p}_x \mapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\rightarrow \hat{L}_z \mapsto -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \text{ in Kugelkoordinaten}$$

$\hat{L}_Z |n, l, m\rangle$: Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (R_{n,l}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}) &= -i\hbar(im) R_{n,l}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \\ \implies \hat{L}_z |n, l, m\rangle &= m\hbar |n, l, m\rangle \end{aligned}$$

das heißt Eigenzustand zu \hat{L}_z Operator! Damit ist die z -Komponente des Drehimpulses des Elektrons scharf definiert. $\langle \hat{L}_z^2 \rangle - \langle \hat{L}_z \rangle^2 = 0$

Teilchen im Zustand $\langle 5, 3, 2 \rangle$ messen wir mit Wahrscheinlichkeit 1 für die Drehimpulskomponente in z -Richtung $2\hbar$. Das gilt nicht für x, y -Richtung:

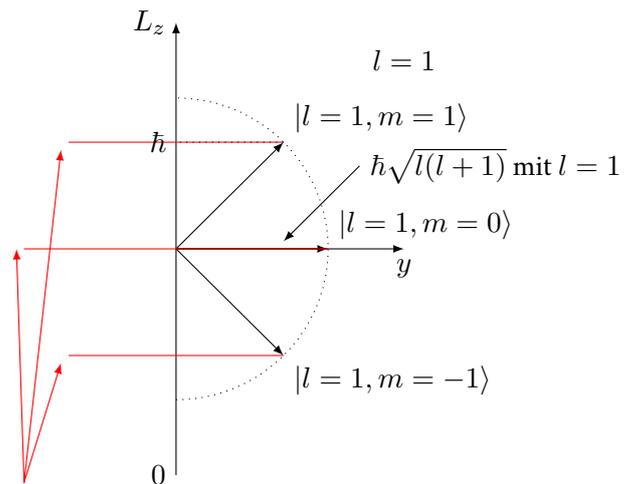
$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z$$

Quadrat des Beitrages des Drehimpulses: $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$. Es gilt $[\vec{L}^2, \hat{L}_z] = 0$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |n, l, m\rangle &= \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)}_{\text{Ortsdarstellung von } \vec{L}^2 \text{ in Kugelkoordinaten}} \psi_{n,l,m} \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) R_{n,l}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{n,l,m} \\ \hat{L}^2 |n, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle \end{aligned}$$

Allgemeine Drehimpuls-Eigenzustände: Drehimpuls ist gequantelt: $|\vec{L}|$ kann nur diskrete $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ Werte annehmen.

Für gegebenen Betrag des Drehimpulses gibt es $2l + 1$ Einstellmöglichkeiten in z -Richtung $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$; Der Wert in x - und in y -Richtung ist unbestimmt. Typische Darstellung:



Quantenmechanisch ist x - und y -Richtung nicht festgelegt, das heißt unscharf. $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z$ in 3D Darstellung $\hat{=}$ Kegel

Nomenklatur:

$l = 0$	s - Zustand
$l = 1$	p - Zustand
$l = 2$	d - Zustand
$l = 3$	f - Zustand

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar l(l+1) |l, m\rangle$$

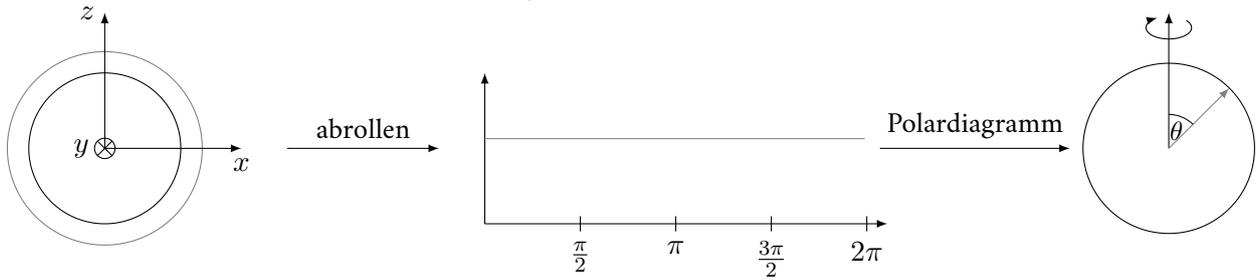
$|l, m\rangle$ sind Drehimpulseigenzustände. In Ortsdarstellung (Kugelkoordinaten):

$$|l, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} = N_{l,m} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

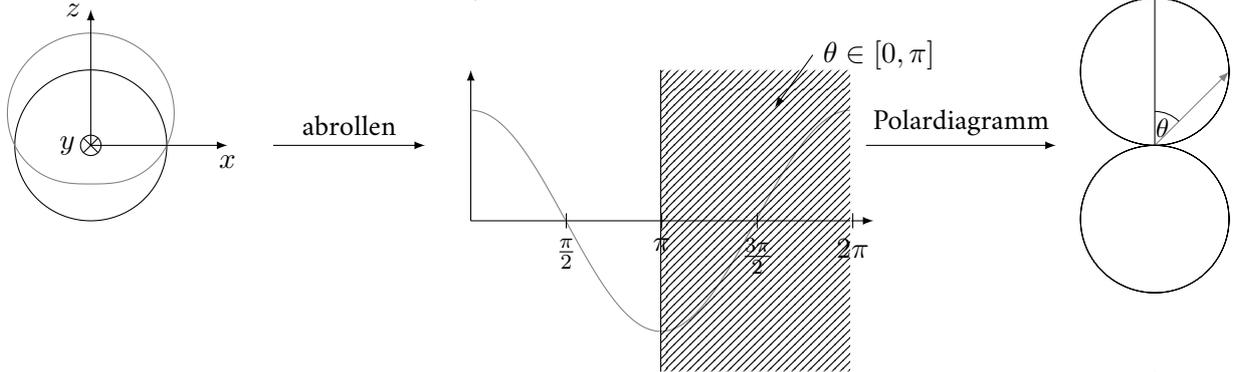
N : Normierung. Y_l^m : Kugelflächen-Funktion. \implies Funktion definiert auf einer Kugeloberfläche kann in Y_l^m zerlegt werden „Fourierzerlegung auf einer Kugel“. Y_l^m sind

$$\begin{aligned} \text{normiert} \quad & \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta |Y_l^m|^2 = 1 \\ \text{orthogonal} \quad & \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned}$$

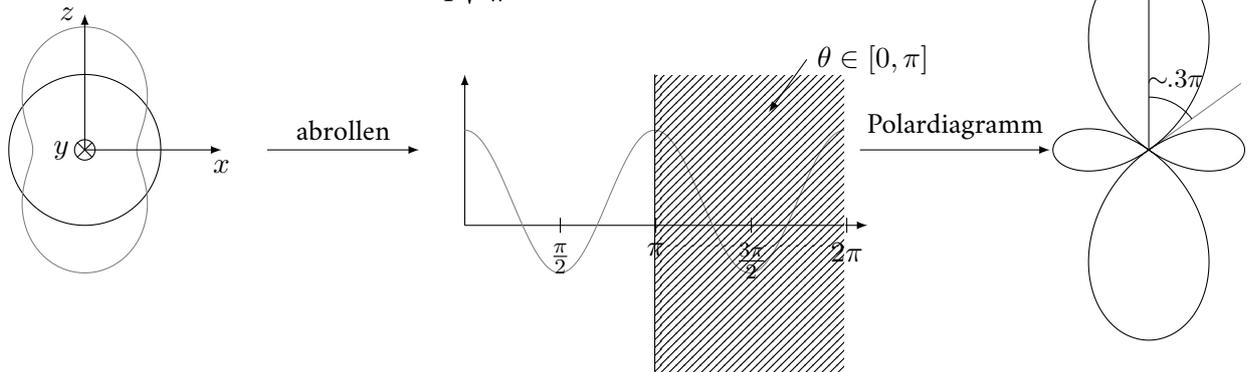
$$|l, m_l\rangle = |0, 0\rangle \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} Y_{l=0}^{m_l=0} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$



$$|l, m_l\rangle = |1, 0\rangle \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} Y_1^0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$$

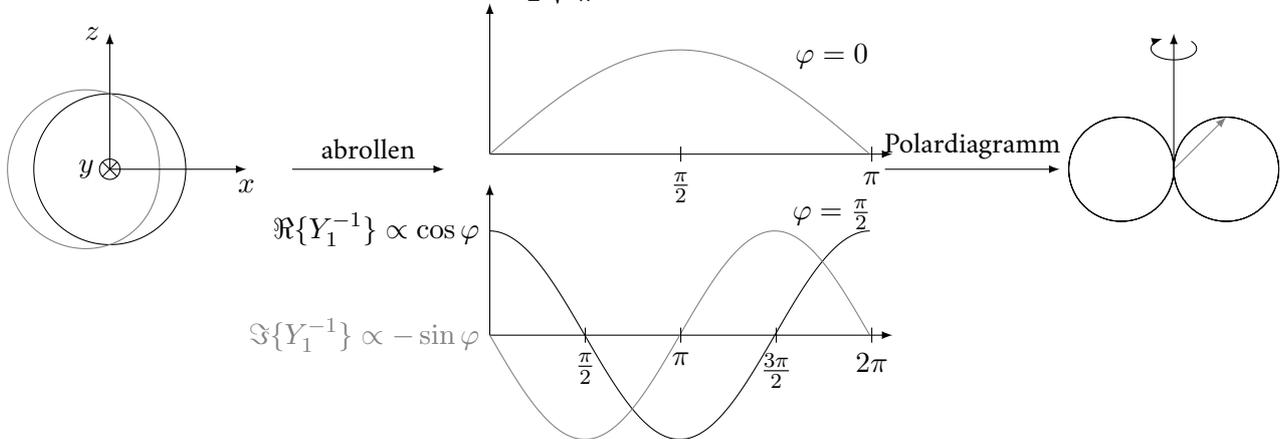


$$|l, m_l\rangle = |2, 0\rangle \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} Y_2^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta)$$



$\implies Y_l^0$ erlaubt Polarwinkel-Abhängigkeiten zu beschreiben; $Y_l^{m_l}$ mit $m_l \neq 0 \implies$ Azimut-Abhängigkeiten zum Beispiel

$$|l, m_l\rangle = |1, \pm 1\rangle \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} Y_1^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$



5.6 Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff

5.7 Optische Übergänge

Licht aus Gasentladung von H_2 Gas zeigt charakteristische Frequenzen, die bestimmten Energie-Differenzen im Energieeigenwert Spektrum entsprechen.

Behauptung: Die Emission von Licht folgt aus der Superposition von verschiedenen Energieeigenzuständen n und n' mit der zusätzlichen Bedingung $|l - l'| = \Delta l = 1$ (Dipol Auswahlregel) Plausibilisierung:

klassische Elektrodynamik: oszillierender Dipol strahlt ab

$$\vec{d} = q\vec{x} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z_0 \cos \omega t \end{pmatrix}$$

\Rightarrow Quantenmechanik: $\vec{d} \rightarrow \hat{d}$, Erwartungswert

$$\langle \hat{d} \rangle = \langle \psi | \hat{d} | \psi \rangle$$

1D-lineare Emmission $\vec{d} \rightarrow d_z = ez$

Grundzustand:

$$\langle 100 | e\hat{z} | 100 \rangle = \int \underbrace{\psi_{100}^*(r, \theta, \varphi)}_{\text{gerade}} \overbrace{ez \psi_{100}(r, \theta, \varphi)}^{\text{ungerade}} \underbrace{dV}_{\text{gerade}} = 0$$

\Rightarrow Zustand hat kein elektrisches Dipolmoment

$$\langle \psi_{nlm} | e\hat{x} | \psi_{nlm} \rangle = 0 \forall n, l, m$$

Das Elektron ist eine Superposition von zwei Zuständen

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{t=0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \underbrace{|n, l, m\rangle}_{|\phi\rangle} + \underbrace{|n', l', m'\rangle}_{|\phi'\rangle} \} \\ \langle \hat{d} \rangle &= \frac{e}{2} \left((\langle \phi | + \langle \phi' |) \hat{d} (|\phi\rangle + |\phi'\rangle) \right) \\ &= \frac{e}{2} \left(\underbrace{\langle \phi | \hat{d} | \phi \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle \phi' | \hat{d} | \phi' \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle \phi | \hat{d} | \phi' \rangle + \langle \phi' | \hat{d} | \phi \rangle}_{c+c^* \Rightarrow \text{reelle Zahl}} \right) \end{aligned}$$

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_s\rangle + e^{-i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t} |\phi_p\rangle \right)$$

$$\langle \hat{d} \rangle_\psi = \Re \left(\langle \phi_s | e\hat{x} e^{-i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t} | \phi_p \rangle \right)$$

$$= e \Re \left(e^{-i\omega_{12}t} \underbrace{\langle \phi_s | \hat{z} | \phi_p \rangle}_{\neq 0 \text{ für } \Delta l = \pm 1, \text{ Dipolmatrix Element } D_z} \right)$$

Oszilliert mit der Frequenz, die der Energie-Differenz entspricht

$$\uparrow \\ = e D_z \cos \omega_{12} t$$

\(\downarrow\)
Dipol in z -Richtung

Licht emission mit Polarisation in z -Richtung in x - y -Richtung; keine Emission in z -Richtung; $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ transversale elektromagnetische Welle.

Quantitative siehe Lehrbücher zu Quanten-Elektrodynamik (QED) $\hat{=}$ Photon Konzept; als Ergebnis findet man, dass die Superposition exponentiell zerfällt \rightarrow natürliche Lebensdauer.

Welche Energie hat das Photon?

Der Erwartungswert des Dipolos $\vec{D} \propto \langle a | \hat{d} | g \rangle$ zerfällt auch exponentiell

Welche Frequenzen hat das Licht?

Äquivalent: was misst man in einem Spektrometer?

Lösung: zerlegen elektromagnetisches Feld in $e^{i\omega t}$

$$\begin{aligned} \rightarrow E(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} E(\omega) e^{i\omega t} d\omega \\ \Rightarrow E(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt \end{aligned}$$

Spektrometer misst $I(\omega) = E^*(\omega)E(\omega) = |E(\omega)|^2$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} \psi \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle &= \hat{H} |\psi\rangle \\ |\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle_{t+dt} &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar} dt} |\psi\rangle_t \end{aligned}$$

Split-Step-Fourier

5.8 Externe Felder - Zeeman-Effekt (1896)

Klassisch:

$$H = \frac{1}{2m_e} (\vec{p} + e\vec{A}(\vec{x}))^2 + V(\vec{x})$$

mit \vec{A} : Vektorpotential, $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ Quantenmechanik:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{p}^2 + e\hat{p}\hat{A} + e\hat{A}\hat{p} + e^2\hat{A}^2) + V(\hat{x})$$

in Ortsdarstellung mit

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \hat{=} \vec{A} = \frac{B_z}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \\ \hat{p}\hat{A} + \hat{A}\hat{p} &= -i\hbar \frac{B_z}{2} \left(\begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \right) = -i\hbar \frac{B_z}{2} (-\partial_x y + \partial_y x) \end{aligned}$$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2m_e} \Delta + V(\vec{x})}_{\text{in Ortsdarstellung ohne Magnetfeld}} + \underbrace{\frac{e}{2m_e} \frac{\hbar}{i} (x\partial_y - y\partial_x)}_{\hat{L}_z \sim 1 \times 10^{-34} \text{ J und } \hbar \langle B_z \cdot \hat{L}_z \rangle \text{ Term in „standard“ Labor } B \sim 10 \text{ T}} + \underbrace{\frac{e^2}{2m_e} \frac{B_z^2}{4} (x^2 + y^2)}_{\text{„standard“ Labor } B \sim 10 \text{ T}}$$

Der \hat{L}_z Term ist nur in z -Richtung, das legt das Koordinatensystem fest.

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} B_z \hat{L}_z \\ \hat{H}_0 |n l m\rangle &= E_n |n l m\rangle \end{aligned}$$

mit $m \hat{=} z$ -Komponente des Drehimpulses, wird auch Magnet-Quantenzahl genannt

$$\implies \hat{H} |n l m\rangle = E_n + \frac{e\hbar}{2m_e} m B_z |n l m\rangle$$

wir definieren μ_B - Bohrsches Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

6 Spin

Darwin Term ist nur für Zustände mit $l = 0$ nicht null

$$\Delta E_D = \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \underbrace{\int \psi_{n00}^*(n)\delta(n)\mu_{n00}(n)dV}_{=|\Psi_{n00}(0)|} = -E_n \frac{(2\alpha)^2}{n}$$

Alle Terme bis $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^2$

$$E_{nj} = E_n \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right)$$

\vec{S} und \vec{L} liegen in unterschiedlichen Vektorräumen \implies

$$[\vec{L}, \vec{S}] = 0$$

7 2 Elektronen System am Beispiel Helium

7.1 Helium - $2p, 2n, 2e^-$: Modell: $Z = 2$

Wichtig: Zusätzlich zur anziehenden Wechselwirkung (e^- -Kern) gibt es abstoßende Wechselwirkungen (e^-e^-) Ortsdarstellung:

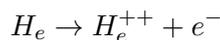
$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1 + \Delta_2)}_{\text{kinetische Energie}} - \overbrace{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_1|} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_2|}}^{\text{Elektron-Kern Wechselwirkung}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_{12}|}}_{\text{ElektronElektronWechselwirkung}}$$

$$\mu = \frac{m_e m_k}{m_e + m_k} \sim m_e$$

Grundzustandsenergie ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung: $2 \times$ Wasserstoff mit $Z = 2$

$$E_{n-1} = 2 \times Z^2(-13.6 \text{ eV}) = -108.8 \text{ eV}$$

Beobachtet wird, dass die vollständige Ionisierung



79 eV benötigt wird. kleinere Bindungsenergie folgt aus Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Schätzen Elektron-Elektron-Wechselwirkung mit Störungstheorie (1. Ordnung) ab:

$$\Delta E_{e^-e^-ww} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \psi | \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} | \psi \rangle$$

$|\psi\rangle$ ist ein zwei-Elektronen Zustand. Nehmen zwei unabhängig gebundene e^- an $\implies |\psi\rangle$ in Ortsdarstellung

$$\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{\psi_n(\vec{r}_1)}_{\text{Lösung von Wasserstoff mit } Z=2} \psi_n(\vec{r}_2)$$

Für Grundzustand: $\psi_{n=1}^1(\vec{r}) = \psi_{n=1}^2(\vec{r}) = \psi_{100}(\vec{r})$

$$\implies \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\pi a_B^3} e^{-\frac{Z}{a_B}}$$

7.2 Spin Freiheitsgrad

\implies Energie-Eigenzustände werden Gesamts spin haben *hat* $\vec{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$
Analog zu $\vec{j} \implies \hat{S}^2, \hat{S}_z$ Eigenzustände $|s, r_s\rangle$.

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &: s_1 - s_2 \leq S \leq s_1 + s_2 \\ \hat{S}_z &: -s \leq r_s \leq s \end{aligned}$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} s_1 &= \frac{1}{2} \\ s_2 &= \frac{1}{2} \\ s &= 0, r_s = 0 && \text{(Singulett)} \\ s &= 1, r_s = -1, 0, 1 && \text{(Triplet)} \end{aligned}$$

Wie sehen die Eigenzustände zu $S = 0$ und $S = 1$ aus?

Wähle Basis $|\uparrow\downarrow\rangle$ Teilchen 1 und $|\uparrow\rangle$, Teilchen 2 ind $|\downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle, |\uparrow, \uparrow\rangle$

$$\hat{S}^2 |\psi\rangle = \left(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 \right)^2 |\psi\rangle = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \hat{S}_2 |\psi\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\psi\rangle$$

$$\begin{aligned} S_x |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad \&\& S_y |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad \&\& S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \\ S_x |\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad \&\& S_y |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \quad \&\& S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \\ &&& |\psi\rangle \& = |\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

3

Literatur

- [1] Louis de Broglie. "XXXV. A tentative theory of light quanta". In: *Philosophical Magazine Series 6* 47.278 (1924), S. 446–458.