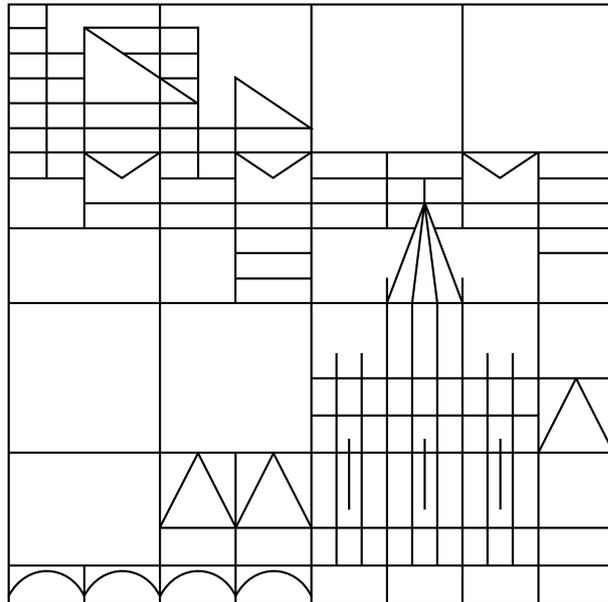


Physik, Integrierter Kurs IV - Sommersemester 10, UNI Konstanz

Mitschrift*: Alexander Kimmig
Alexander.Kimmig@uni-konstanz.de

14. Juli 2010



*Das Skript ist meine private Mitschrift der Vorlesung *Integrierter Kurs IV* (IKIV) im Sommersemester 2010. Es erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Richtigkeit! Wer Fehler findet, darf diese aber gerne an mich an Alexander.Kimmig@uni-konstanz.de melden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
1.1	Thema	2
1.2	Historischer Überblick	2
2	Atom, Bausteine des Atoms, Wechselwirkung der Bausteine	4
2.1	Atom	4
2.1.1	Größe des Atoms	4
2.1.2	Masse des Atoms	7
2.1.3	Bestimmung von N_A	8
2.2	Elektron	9
2.2.1	Entdeckung des e^- 1897: J.J. THOMSON	9
2.2.2	Bestimmung der Elementarladung	10
2.2.3	Größe des Elektrons	10
2.2.4	Masse des Elektrons	11
2.3	Massenspektrometrie	11
2.3.1	Teilchen im E - und B -Feld	11
2.3.2	Höchstauflösende Massenspektrometrie	13
2.4	Isotopie	15
2.5	Streuexperimente	16
2.5.1	Der Wirkungsquerschnitt	16
2.5.2	Streuung von Elektronen an Materie	17
2.5.3	Rutherford-Streuung	18
2.6	Photoeffekt und Photonen	25
2.6.1	Der Photoeffekt	25
2.6.2	Lichtquantenhypothese (Photonen)	28
2.7	Der Compton-Effekt	28
2.7.1	Röntgenquelle und Röntgenspektrum	28
2.7.2	Der Compton-Versuch (1921, NP 1927)	29
2.8	Elektronenbeugung	31
2.8.1	De-Broglie-Wellenlänge (1924)	31
2.8.2	Das Davisson-Germer-Experiment (1918-1927, NP 1937)	32
2.8.3	Das Debye-Scherrer-Verfahren	32
2.9	Schwarzkörperstrahlung, Planck'sches Strahlungsgesetz	34
2.9.1	Elektromagnetische Felder im Hohlraum	35
2.9.2	Planck'sches Strahlungsgesetz	37

3	Welle-Teilchen-Dualismus	41
3.1	Interferenzexperimente, Wahrscheinlichkeitsinterpretation	41
3.2	Die Wellenfunktion	44
3.3	Wellenpakete	44
3.4	Heisenberg'sche Unschärferelation	46
3.4.1	Analogieversuch zum „Welcher-Weg“-Experiment: „Quantenradierer“	47
4	Bohr'sches Atommodell	48
4.1	Grundlegende Experimente	48
4.1.1	Spektrallinien des Wasserstoffs	48
4.1.2	Franck-Hertz-Versuch	49
4.2	Bohr'sche Postulate	50
4.3	Isotopieverschiebung, Spektren H-ähnlicher, myonischer und Rydbergatome	52
4.3.1	Isotopieverschiebung	52
4.3.2	H-ähnliche Atome	52
4.3.3	Myonische Atome	52
4.3.4	Rydbergatome	53
4.4	Sommerfeld'sche Erweiterung	53
5	Die Schrödingergleichung	54
5.1	Die Schrödingergleichung für freie Teilchen	54
5.2	Einführung der Schrödingergleichung über die Hamilton-Jacobi-Theorie	55
5.3	Normierbarkeit, Erwartungswerte	59
5.4	Die Wellenfunktion im Impulsraum	61
5.5	Operatoren, der Kommutator, Unschärferelation	62
5.5.1	Der Kommutator	63
5.5.2	Hermite'sche Operatoren	65
5.5.3	Minimale Unschärfe: Heisenberg'sche Unschärferelation	66
6	Teilchen in einer Dimension	67
6.1	Randbedingungen an Unstetigkeiten	67
6.2	Potentialstufe	69
6.2.1	Teilchenstromdichte	70

6.3	Der Tunneleffekt	72
6.4	Gebundene Zustände: Potentialtopf	75
6.4.1	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden	76
6.4.2	Parität	77
6.4.3	Potentialtopf mit endlich hohen Wänden	78
6.5	Delta-Potential	81
6.6	Periodische Potentiale	82
6.7	Der harmonische Oszillator	86
7	Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik	90
7.1	Zustände und Observablen	90
7.1.1	Zustand	90
7.1.2	Observablen	91
7.2	Der Hilbertraum	91
7.3	Dualraum, Dirac-Notation	97
7.4	Lineare Operatoren	98
7.5	Das Eigenwertproblem	104
7.6	Messprozess in der Quantenmechanik	106
7.7	Postulate der Quantenmechanik	108
7.8	Anwendung: Harmonischer Oszillator II	110
8	Bewegung im Zentralfeld, H-Atom	115
8.1	Drehimpuls	115
8.2	Ortsdarstellung, Kugelflächenfunktionen	118
8.3	Bewegung im Zentralfeld	120
8.4	Das H-Atom und H-ähnliche Atome	123
9	Magnetische Momente	126
9.1	Magnetisches Moment eines klassischen Kreisstroms	126
9.2	Bahnmoment im äußeren Magnetfeld	127
9.3	Abstrahlung	128

9.3.1	Übergangswahrscheinlichkeiten	128
9.3.2	Spezialfall: H-Atom	129
9.4	H-Atom im Magnetfeld (ohne Spin), Zeeman-Effekt	130
10	Der Elektronenspin	133
10.1	Stern-Gerlach-Experiment, 1922	133
10.2	Eigenschaften des Spins	134
10.3	Messung des gyromagnetischen Verhältnisses	134
10.3.1	Einstein-de-Haas-Versuch	134
10.3.2	Resonanzmethode von Rabi	134
10.3.3	Elektronenspinresonanz (ESR), Elektronen-paramagnetische Resonanz	135
10.4	Einfluss des Spins auf die Wasserstoff-Energieniveaus	136
10.4.1	Spin-Bahn-Wechselwirkung, Feinstruktur des Spektrums	136
10.4.2	H-Atom im Magnetfeld (mit Spin)	138
10.4.3	Quantenmechanische Behandlung des Spins und des Elektrons im Magnetfeld . .	139
11	Weitere Effekte auf Spektren des H-Atoms	141
11.1	Relativistische Korrekturen	141
11.2	Die Lamb-Verschiebung	141
11.3	Die Hyperfeinstruktur	142
11.4	Weitere Kerneigenschaften	143
E	Einschub: Wechselwirkung von Strahlung mit Materie und Strahlungsdetektor	145
E.1	Wechselwirkung	145
E.1.1	geladene Teilchen	145
E.1.2	Neutrale Teilchen (hier: Photonen)	147
E.1.2.1	Nachweis zumeist über geladenes Teilchen	147
E.1.2.2	Totaler Absorptionskoeffizient für elektromagnetische Strahlung in Materie	148
	Abbildungsverzeichnis	150



IK4 Teil 1:
Integrierter Kurs 4 - Atom und
Quantenphysik

2010-04-12

Kapitel 1.

Einführung

1.1. Thema

Aufbau und Eigenschaften der Atome, ihre Wechselwirkung untereinander und mit elektrischen und magnetischen Feldern.

Nicht Thema: Wechselwirkungen im Atomkern

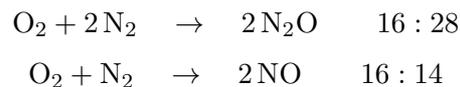
Ziele der Atom- und Quantenphysik

- Mikroskopisches Verständnis der Eigenschaften von Atomen
- Beschreibung durch wenige, fundamentale Naturkonstanten (materialunabhängig) z. B. e , m_0 , c , $\underbrace{h}_{\text{PLANCKSches Wirkungsquantum}}$
- Beispiele: Spektren der Atome
- insbesondere Phänomene, die nicht klassisch verstanden werden können → Quantenphysik

1.2. Historischer Überblick

5. und 4. Jhdt. v. Chr. DEMOKRIT, PLATON, ARISTOTELES: Begriff *Atom* als kleinste Einheit, die die Eigenschaften bestimmt

1803 DALTON: Gesetz der *multiplen Proportionen*: Die Gewichtsverhältnisse zweier sich zu verschiedenen Verbindungen vereinigender Elemente stehen im Verhältnis ganzer Zahlen.



1808 Gesetz von GAY-LUSSAC: entsprechend für Volumina von Gasen

1811 AVOGADROSche Hypothese: gleiche Volumina verschiedener Gase enthalten bei gleichen Bedingungen (Druck, Temperatur) gleich viele Bausteine (Moleküle, Atome); 1 Mol (Atomgewicht in Gramm) enthalten immer gleich viele Atome/Moleküle. *Avogadrokonstante*: $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

1815 PRONT: Die Massenzahlen der Elemente sind ganzzahlige Vielfache der Masse des Wasserstoffatoms

1868 MENDELEW: Periodensystem der Elemente

1870 CLAUDIUS, BOLTZMANN: *kinetische Gastheorie*: Erklärung der Gasgesetze aus atomaren Bewegungen und Stößen der Atome/Moleküle

1932 CHADWICK: Entdeckung des Neutrons

Atomistik der Elektrizität

1833 FARADAYS elektrolytisches Äquivalenzprinzip

- Die Menge eines abgeschiedenen Elements ist der dabei transportierten Ladung proportional (\rightarrow Elektrolyse, galvanische Abscheidung)
- Verschiedene Elemente werden von der gleichen Ladungsmenge in äquivalenten Gewichten abgeschieden \rightarrow kleinste Einheiten der Elektrizität (Elementarladung, Elektronenladung) sind mit der Materie verknüpft

1869 HITTORF: Entdeckung der Kathodenstrahlen ($\hat{=}$ Elektronenstrahlen)

1897 J.J. THOMSON: Elektron identifiziert durch $\frac{e}{m}$ -Bestimmung mit Kathodenstrahlröhre, z. B. Schattenkreuzröhre

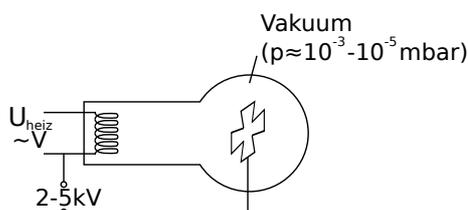


Abbildung 1.1: Aufbau einer Schattenkreuzröhre

Beobachtung Schattenwurf durch zusätzliche Strahlung (\neq Licht)

- \rightarrow Teilchen oder Wellen (*Objekte*), die sich fortbewegen
- \rightarrow Ablenkung in magnetischen und elektrischen Feldern ($\frac{e}{m}$ -Bestimmung)

2010-04-13

Atomistik der Energien

um 1850 KIRCHHOFF, BUNSEN: Experimente zur Schwarzkörperstrahlung und Atomspektren

1884 BALMER: empirische Formel für einige Spektrallinien des Wasserstoffs

1887 H. HERTZ: Entdeckung der elektromagnetischen Wellen

1887 HALLWACHS, HERTZ: Entdeckung des Photoeffekts

1895 RÖNTGEN: Entdeckung der Röntgenstrahlung (*x-Ray*)

1896 BECQUEREL: Entdeckung der Radioaktivität (α , β , γ)

1900 LUMMER, PRINGSHEIM: Abweichung vom Wien'schen Strahlungsgesetz

Powerpoint-Präsentation (s. Internet)

Kapitel 2.

Atom, Bausteine des Atoms, Wechselwirkung der Bausteine

2.1. Atom

2.1.1. Größe des Atoms

ca. 10^{-10} m = 0.1 nm = 1 Ångström

- Radius ist schlecht definiert (aufgrund des Wellencharakters der e^-)
- Bindungsabstände eines Atoms im Festkörper sind unterschiedlich z.B.
 - Magnesium in Magnesium: $d = 1.6$ Å
 - Magnesium in Magnesiumoxid: $d = 0.7$ Å

typische Atomradien:

Wasserstoffatom $\underbrace{a_0}_{\text{Bohr-Radius}} = r \approx 0.5$ Å (klein)

Magnesiumatom $r \approx 1.5$ Å (mittel)

Caesiumatom $r \approx 2.5$ Å (groß)

Experimentelle Größenbestimmung des Atoms

1. grobe Abschätzung aus makroskopischen Größen

- Betrachte Würfel und bestimme die Oberflächenenergie zur Erzeugung kleiner Würfel, die jeweils 1 Atom enthalten

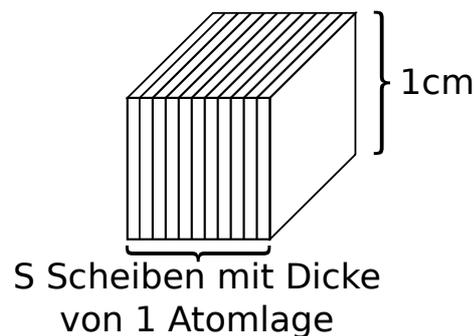


Abbildung 2.1: Zerlegung des Würfels in kleine Teilstücke → Verdampfung (Verdampfungsenergie, Oberflächenenergie)

- Zerlegung in alle 3 Raumrichtungen \rightarrow Aufteilung in einzelne Atome $\hat{=}$ $3S$ Schritte, Energieaufwand dafür entspricht der Verdampfungsenergie E_V . Bei jedem Schnitt wird eine Fläche von 2 cm^2 erzeugt \rightarrow Energieaufwand jeweils $2E_O$, E_O : Oberflächenenergie/Fläche

$$\rightarrow 3S \cdot E_O \stackrel{!}{=} E_V \Rightarrow S = \frac{l}{d} = \frac{1}{6} \frac{E_V}{E_O} \quad (2.1)$$

Zahl der Atome $N = S^3$

Werte für Wasser: $E_O = 7.3 \cdot 10^{-2} \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$, $E_V = 226 \cdot 10^9 \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$

$$\rightarrow S = 5.2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} \Rightarrow d = 1.9 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{beachte } d = 2r!) \quad (2.2)$$

2. Röntgenbeugung an Kristallen

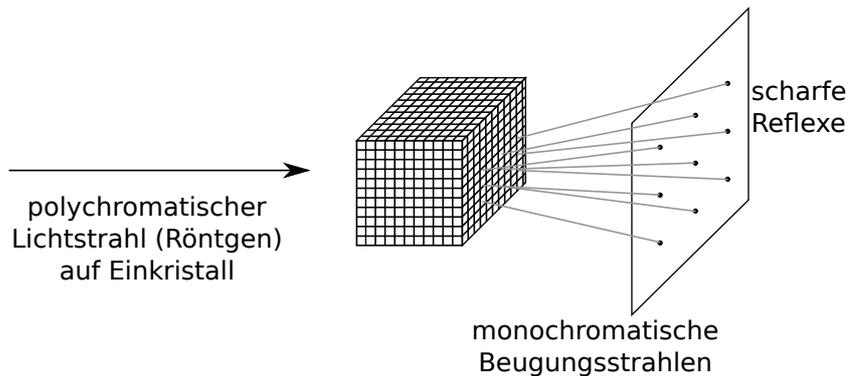


Abbildung 2.2: Schematischer Aufbau des Laue-Verfahrens

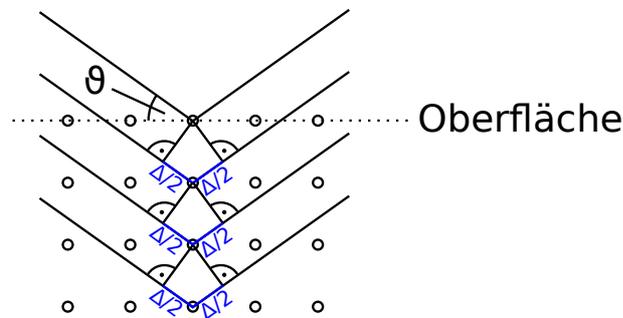


Abbildung 2.3: Beugung an Gitterebenen

Interferenz zwischen Lichtstrahlen, die an benachbarten Ebenen gebeugt werden. Bedingung für konstruktive Interferenz: $\Delta = n\lambda$

$$\Rightarrow 2d \sin \vartheta = n\lambda \quad \text{Laue-/Bragg-Bedingung} \quad (2.3)$$

\rightarrow Erzeugung von monochromatischer Röntgenstrahlung.

Monochromatische Röntgenstrahlen werden benötigt

- für Strukturbestimmung an Polykristallen (Debye-Scherrer-Verfahren, Drehkristallmethode \rightarrow Stoff der Festkörperphysik)
- Compton-Effekt

3. „optisch“ abbildende Größenbestimmung

Lichtmikroskop Auflösung begrenzt durch Wellenlänge des Lichts $\approx 5000 \text{ \AA}$ \rightarrow nicht möglich

Elektronenmikroskop Vorgriff: ein Elektronenstrahl hat ebenfalls Wellencharakter (Nachweis durch Beugung) mit De-Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$ mit $p = m_e v$ (nicht relativistisch) gilt

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_{\text{kin}}}} = \frac{12.3 \text{ \AA}}{\sqrt{U(\text{V})}} \quad (2.4)$$

wobei U : Beschleunigungsspannung und $E_{\text{kin}} = eU$

E_{kin}	10 eV	100 eV	10 keV
λ	3.9 \AA	1.2 \AA	0.12 \AA

jedoch Begrenzung durch Linsenfehler auf $1\text{-}10 \text{ \AA}$

Transmissionselektronenmikroskop (höchste Auflösung) $\approx 1 \text{ \AA}$ - 2 \AA , aber Modell notwendig zur Berücksichtigung der Beugung, um auf reale Atomanordnungen zurückrechnen zu können.

Feldemissionsmikroskop

- Feldüberhöhung an der Spitze im Experiment mit Krümmungsradius $\approx 100 \text{ nm}$

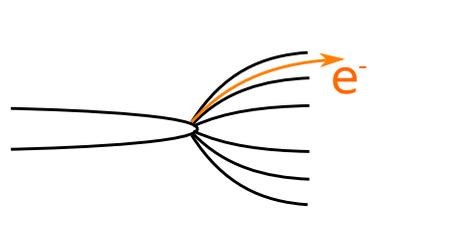


Abbildung 2.4: Feldüberhöhung an der Spitze

- Kristall hat lokal unterschiedliche Emissionswahrscheinlichkeit in verschiedenen Kristallrichtungen (Festkörperphysik) durch Bedampfen mit geringer Bedeckung eines anderen Elements

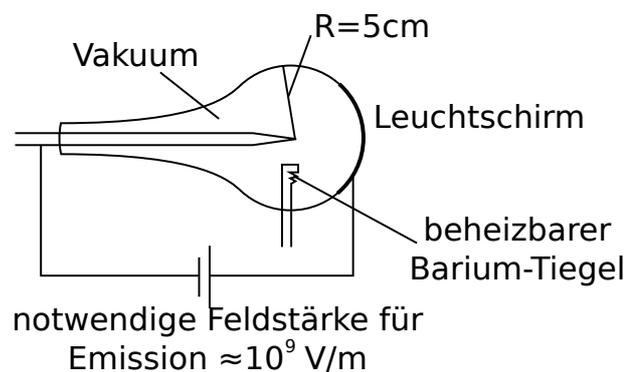


Abbildung 2.5: Schematischer Aufbau eines Feldemissionsmikroskops

- Beobachtung des Auftreffens und der Bewegung einzelner Atome und Atomgruppen aus Barium, da dieses die Emissionswahrscheinlichkeit lokal erhöht.

Vergößerung $V = \frac{R}{r} = 500.000$

Bildgröße $B \approx 1 \text{ mm}$

Objektgröße $G \approx 2 \text{ nm}$

Größe Barium-Atom $\approx 0.4 \text{ nm}$

- Beobachtung sind Beugungsscheibchen der e^- am Barium-Atom

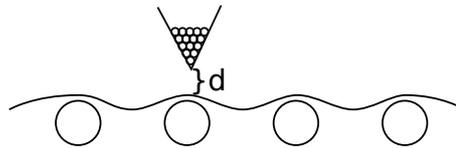


Abbildung 2.6: Aufbau eines Rastertunnelmikroskops

Rastertunnelmikroskop abtastende Spitze mit konstantem Abstand d

- Messsignal: Tunnelstrom
- Auflösung: lateral $\approx 0.05 \text{ \AA}$, vertikal $< 1 \text{ fm}$
- Einstellgenauigkeit durch Piezoelektrischen Effekt bestimmt
- Probleme: mechanische Vibrationen, konstante Temperatur notwendig

Beispiele auf Folien (s. Internet)

- Hochauflösende Elektronenmikroskopie
- Feldemissionsmikroskop
- Nickel (110) (IBM Almaden D. Eigler et. al)
- 48 Fe-Atome auf Cu (111) (IBM Almaden D. Eigler et. al)
- Atomradien

2010-04-16

2.1.2. Masse des Atoms

Relative Atommassen A_{rel} (*Atomgewichte*) aus DALTONS Gesetz der multiplen Proportionen, seit 1961 Definition der atomaren Masseneinheit (a. u. oder u)
atomic unit

$$1 \text{ u} \equiv \frac{1}{12} \text{ der Masse des Atoms } {}_6^{12}\text{C}$$

$$1 \text{ u} = (1.660\,565 \pm 0.000\,005) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

2.1.3. Bestimmung von N_A

- 1 Mol entspricht der Menge eines Stoffes, die so viel wiegt wie das Atomgewicht (Molekulargewicht) in Gramm.

$$1 \text{ Mol } {}^{12}_6\text{C} \hat{=} 12 \text{ g}$$

$$1 \text{ Mol H}_2\text{O} \approx 18 \text{ g}$$

- 1 Mol hat immer die gleiche Anzahl Atome bzw. Moleküle

$$N_A \approx N(18 \text{ g H}_2\text{O}) \approx N(2 \text{ g H}_2) \approx N(24 \text{ g Mg})$$

$$\boxed{N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \quad (2.5)$$

Messung von N_A

1. Radioaktiver Zerfall (Zählen von Zerfallsereignissen) (RUTHERFORD und ROYDS, 1909)
2. Elektrolyse (aus Faraday'schem Äquivalenzgesetz)
Erinnerung: Stoffmenge n ist proportional zur Ladung, 1 Mol einer Substanz benötigt

$$\underbrace{F}_{\text{Faraday-Konstante}} = 96485 \underbrace{\text{As}}_{\text{C}}$$

da jedes Ion die Elementarladung $|e|$ trägt.

$$\rightarrow N_A = \frac{F}{e} \quad \rightarrow \text{Voraussetzung: } e \text{ bekannt}$$

3. aus Größe des Atoms und Volumen des Festkörpers (über Röntgenbeugung)
4. Gas- und Boltzmann-Konstante (BOLTZMANN 1870)

$$k_B = \frac{R}{N_A} \quad (2.6)$$

$$R = 8.314510 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \quad (\text{aus idealem Gas } pV_{\text{mol}} = RT) \quad (2.7)$$

→ Messung von k_B entspricht Messung von N_A

- Brown'sche Molekularbewegung (BROWN 1827)
- Sedimentationsgeschwindigkeit im Schwerfeld (EINSTEIN 1905, PERRIN 1908)
→ Übungsaufgabe

5. Drehspiegelmethode

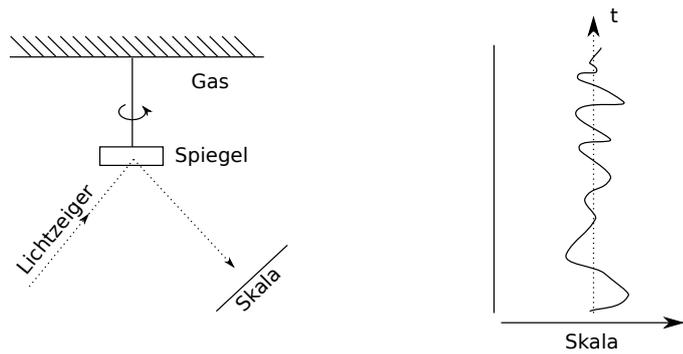


Abbildung 2.7: Aufbau der Drehspiegelmethode und zeitlicher Verlauf

Beobachtung Statistische Schwankungen eines an einem Quarzfaden in einem Gas aufgehängten Drehspiegels.

Kleine Auslenkwinkel $\Phi \rightarrow$ harmonischer Oszillator (analog zur Gravitationswaage)

Analytische Mechanik: Virialtheorem für harmonischen Oszillator (quadratisches Potential):

$$\text{mittlere kinetische Energie} = \text{mittlere potentielle Energie} \quad (2.8)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} \Theta \dot{\varphi}^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} A \varphi^2 \right\rangle \quad (2.9)$$

wobei

Θ Trägheitsmoment der Anordnung

A Winkelrichtgröße ($\hat{=}$ Federkonstante) = $\frac{\text{wirksames Drehmoment}}{\text{Auslenkung}}$

Gleichverteilungssatz für Gasmoleküle (Gleichverteilungssatz \rightarrow Übungsaufgabe)

$$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} k_B T \quad \rightarrow \quad \frac{1}{2} k_B T \quad \text{pro Freiheitsgrad} \quad (2.10)$$

$$\rightarrow \frac{1}{2} k_B T = \frac{1}{2} \overline{\varphi^2} = \frac{1}{2} A \overline{\varphi^2} \quad (2.11)$$

Messung von $\overline{\varphi^2}$ ergibt Messwert für k_B

$$\text{Literaturwert: } \boxed{k_B = 1.380662 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}} \quad (2.12)$$

2.2. Elektron

2.2.1. Entdeckung des e^- 1897: J.J. Thomson

Durch Kathodenstrahlen in Gasentladungsröhre \rightarrow Übungsaufgabe

2.2.2. Bestimmung der Elementarladung

Millikan-Öltröpfchen-Versuch (1909-1913) → Übungsaufgabe

Prinzip:

- geladener Plattenkondensator
- Zerstäubung von Öl zu Tröpfchen
- ionisierende Strahlung → viele ungeladene Öltröpfchen, einige gering geladene Öltröpfchen
- Beobachte Bewegung im Plattenkondensator

Kräfte auf Öltröpfchen (aufsteigend) $\uparrow v: \downarrow F_G, \downarrow F_R, \uparrow F_A, \uparrow F_{el}$

Gewichtskraft $F_G = mg = \rho_{\text{Öl}} V g$ (g : Erdbeschleunigung)

Reibungskraft $F_R = 6\pi\eta r v$ (η : Viskosität)

Auftriebskraft $F_A = V \rho_{\text{Luft}} g$

Beobachtung bei eingeschaltetem E -Feld gibt es diskrete Steiggeschwindigkeiten

Ausschalten → Teilchen fallen nach unten $\downarrow v: \downarrow F_G, \uparrow F_R, \uparrow F_A$

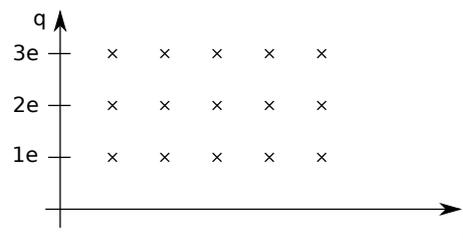


Abbildung 2.8: Messwerte des Millikan-Versuchs → diskrete Ladungswerte

Literaturwert:
$$e = 1.602192 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (2.13)$$

2.2.3. Größe des Elektrons

Betrachte e^- als Kugelkondensator mit Radius r_{el}

Abschätzung Ladungsenergie des Kugelkondensators $E = \frac{1}{2} \frac{Q^2}{C}$ entspricht Ruheenergie des e^- :
 $E = m_0 c^2$

Kapazität einer homogen geladenen Kugel: $C = 2\pi\epsilon_0 r_{el}$

$$\rightarrow r_{el} \approx 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad \textit{klassischer Elektronenradius} \quad (2.14)$$

Experimente zeigen Elektron ist kleiner!

z. B. aus e^-e^- -Streuung (vgl. Rutherford-Streuung)

$$\rightarrow r_{el} < 10^{-18} \text{ m} \quad (2.15)$$

→ Annahme eines punktförmigen Elektrons ist sehr gut

2.2.4. Masse des Elektrons

Mithilfe der Massenspektrometrie durch Kombination von elektrischen und magnetischen Feldern kann $\frac{q}{m}$ von Teilchen bestimmt werden.. $\rightarrow \frac{e}{m}$ -Bestimmung (THOMSON, Kathodenstrahl)

Voraussetzung dafür ist, dass die Ladung e bekannt ist

$$m_e = 0.1091 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 5.4859 \cdot 10^{-4} \text{ u} \quad (2.16)$$

bzw. $1 \text{ u} = 1822.84 m_e \rightarrow m_e \approx \frac{1}{2000}$ der Masse des H-Atoms

2.3. Massenspektrometrie

2.3.1. Teilchen im E - und B -Feld

Eigenschaften von Teilchen im statischen E -Feld Trajektorie hängt nur von der Energie an, nicht von der Masse.

Z. B. Zylinderkondensator

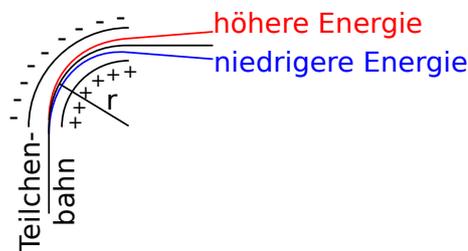


Abbildung 2.9: Massenspektrometrie I: Trajektorie von Teilchen im elektrischen Feld hängt nur von der Anfangsenergie ab

$$\text{Fliehkraft} = \text{Feldkraft} \quad (2.17)$$

$$\frac{mv^2}{r} = qE \quad (2.18)$$

$$\rightarrow r = \frac{mv^2}{qE} = \frac{2E_{\text{kin}}}{qE} \quad (2.19)$$

Teilchen im magnetischen Feld Trajektorie hängt nur vom Impuls ab

$$\text{Lorentzkraft} = \text{Fliehkraft} \quad (2.20)$$

$$\frac{qvB}{r} = \frac{mv^2}{r} \quad (2.21)$$

$$\rightarrow r = \frac{mv}{qB} = \frac{p}{qB} \quad (2.22)$$

2010-04-19

Kombination von E - und B -Feld Energiefilter liefert Teilchen mit gleicher Energie \rightarrow verschiedene Impulse bei gleicher Energie $\hat{=}$ verschiedene $\frac{q}{m}$

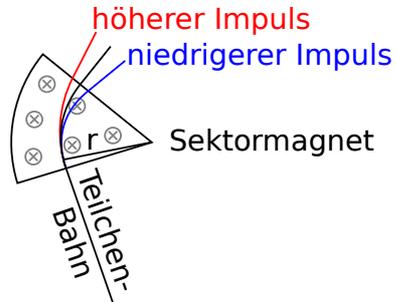


Abbildung 2.10: Massenspektrometrie II: Trajektorie von Teilchen im magnetischen Feld hängt nur vom Impuls ab

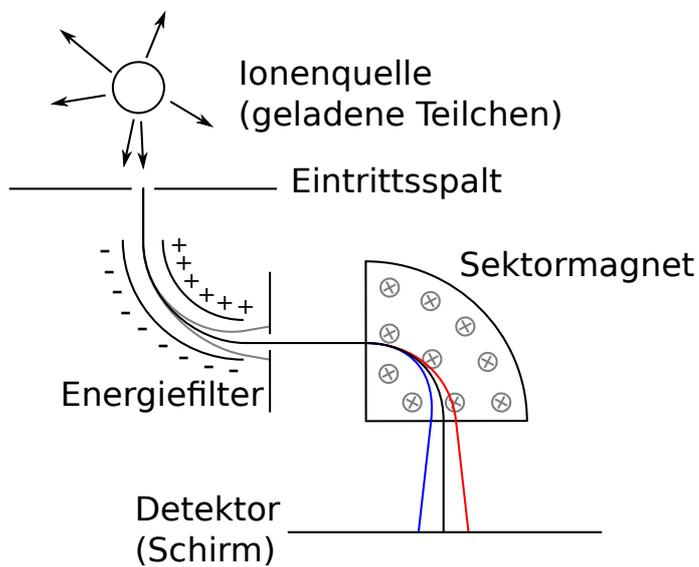


Abbildung 2.11: Kombination von E - und B -Feld zur Relisierung eines Massenspektrometers

Verschiedene Realisierungen

1. Wien'sches Filter

Teilchen spüren gleichzeitig E - und B -Feld. Kräfte kompensieren sich \rightarrow gerade Bahn

2.3.2. Höchstauflösende Massenspektrometrie

1. Geschwindigkeitsfokussierung

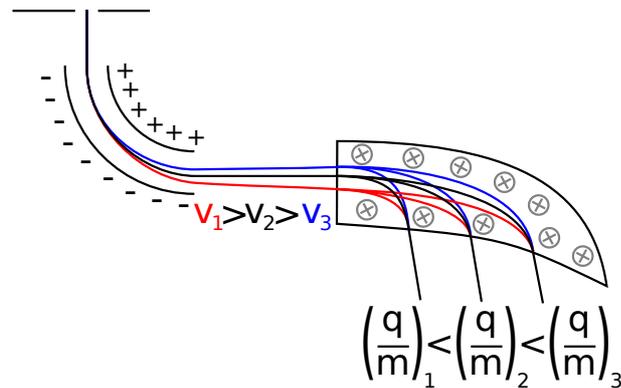


Abbildung 2.12: Geschwindigkeitsfokussierung durch Einsatz von geschickt geformtem B -Feld nach ASTON, 1919

Geschickte Wahl der Größe der Felder, B -Feld fokussiert Teilchen mit verschiedenem v an gleicher Stelle, mit verschiedenen $\frac{q}{m}$ an verschiedenen Stellen \rightarrow höhere Intensität

2. Richtungsfokussierung

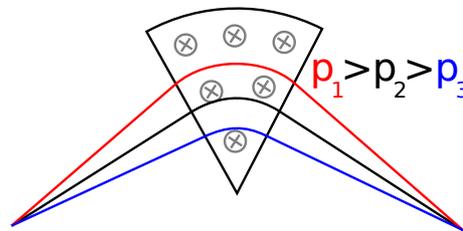


Abbildung 2.13: Richtungsfokussierung durch unterschiedliche Laufzeiten durch den Sektormagnet

Teilchen, die länger das B -Feld spüren, werden weiter abgelenkt \rightarrow bei gleichem $\frac{q}{m}$ aber leicht verschiedener Richtung werden die Teilchen im selben Punkt fokussiert.

3. Doppelfokussierung \rightarrow gleichzeitige Geschwindigkeits- und Richtungsfokussierung

4. Elektrische Wechselfelder Kondensatorspannung an C_1 und C_2 :

$$U_1 = U_2 = U_0 \sin(\omega t)$$

Zeit zum Durchlaufen der Strecke $L = vt$ verschiebt Phasenlage der Spannung an C_2 um $\omega t = \omega \frac{L}{v}$. Die Blende B lässt die Teilchen durch, die in C_1 die momentane Spannung $U_1 = 0$ gespürt haben. Für diese gilt in C_2 : $U_2 = U_0 \sin(\omega \frac{L}{v}) \rightarrow$ Ablenkung

$$x_2 = DU_0 \sin\left(\frac{\omega L}{v}\right)$$

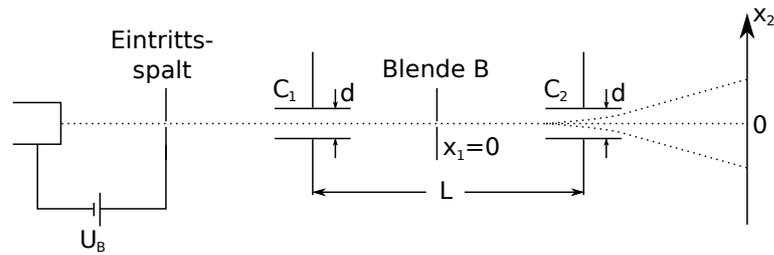


Abbildung 2.14: Massenspektrometrie durch elektrische Wechselfelder

mit Proportionalitätskonstante D .

Für $\frac{\omega L}{v} = k\pi$ ($k = 1, 2, 3, \dots$) ist auch $x_2 = 0$

$$v_0 = \frac{2\nu L}{k} \quad (\nu: \text{Frequenz } \frac{\omega}{2\pi}) \quad (2.23)$$

→ Frequenz so regeln, dass $x_2 = 0$ ist, k bestimmen durch Abzählen der Nulldurchgänge. Die Teilchen seien durch die Beschleunigungsspannung U_B beschleunigt worden, und somit gilt:

$$qU_B = \frac{1}{2}mv^2 \quad \rightarrow \quad \frac{q}{m} = \frac{2v_0^2 L^2}{k^2 U_B} \quad (2.24)$$

5. Quadrupolmassenspektrometer

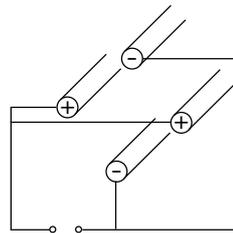


Abbildung 2.15: Quadrupolmassenspektrometer

Ähnliches Prinzip aber kompaktere Geometrie → messe Frequenz, bei der die Teilchen durchgelassen werden → Einsatz in Isotopentrennung

Nachtrag 2010-04-22

Nachtrag: Massenspektrometrie Wien'sches Geschwindigkeitsfilter

Beobachtung

- Ablenkung der e^- im B -Feld kann kompensiert werden durch geeignet gewähltes E -Feld
- geradlinige Bahn bei $F_C = F_L$, $q|\vec{E}| = qvB \Rightarrow v = \frac{|E|}{|B|}$

2010-04-19

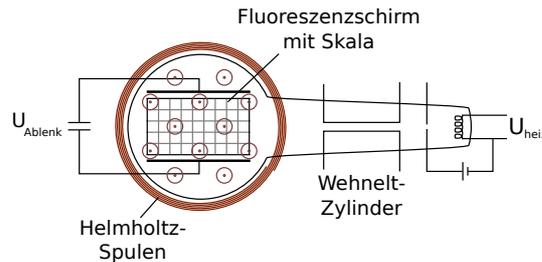


Abbildung 2.16: Wien'sches Geschwindigkeitsfilter

2.4. Isotopie

Ordnungszahl Z $\hat{=}$ Zahl der Protonen $\hat{=}$ Zahl der Elektronen; bestimmt chemische Eigenschaften

Atomgewicht A_{rel} \approx ungefähr A

Massenzahl A Anzahl der Protonen + Neutronen

Isotope eines Elements variieren in der Zahl der Neutronen.

Es gibt nur wenige Elemente mit nur einem einzigen stabilen Isotop: ${}^9_4\text{Be}$, ${}^{27}_{13}\text{Al}$, ${}^{127}_{53}\text{J}$ (Bezeichnung ${}^A_Z\text{Element}$), für diese Elemente ist $A \approx A_{\text{rel}}$

Bei einigen Elementen kommen mehrere Isotope ungefähr gleich häufig vor, z. B. ${}^{35}_{17}\text{Cl}$ (75%), ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ (25%) \rightarrow krummes Atomgewicht $A = 35.5$

Problem bei Massenspektrometrie: mehrfach geladene Teilchen möglich, z. B. ${}^{40}_{18}\text{Ar}^{++} \hat{=} {}^{20}_{10}\text{Ne}^+$

\rightarrow Übungsaufgabe

\rightarrow Anwendung der höchstauflösenden Massenspektrometrie

Isotope des Wasserstoffs

${}^1_1\text{H}$ 1 Proton, 1 Elektron $\rightarrow A = 1, Z = 1$

${}^2_1\text{H} = \text{D}$ (Deuterium) 1 Proton, 1 Neutron, 1 Elektron $\rightarrow A = 2, Z = 1$ (0.014% natürliches Vorkommen)

${}^3_1\text{H} = \text{T}$ (Tritium) 1 Proton, 2 Neutronen, 1 Elektron $\rightarrow A = 3, Z = 1$ (künstlich erzeugt in kerntechnischen Anlagen)

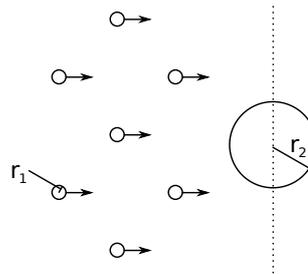
Moleküle: D^+ hat ähnliches $\frac{q}{m}$ wie H_2^+ . D hat etwas geringere Masse als H_2 (Massendefekt der Kernphysik)

- Folie: Massenspektrometrie
- Folie: Periodensystem der Elemente

Zusammenfassung 2.2-2.4 Massenverhältnisse im Atom:

Einheit	e^-	p	H
kg	$9.11 \cdot 10^{-31}$	$1.672 \cdot 10^{-27}$	$1.6735 \cdot 10^{-27}$
u	$5.48 \cdot 10^{-4}$	1.00728	1.007825
m_e	1	1836.11	1837.11
m_p	$5.4463 \cdot 10^{-4}$	1	1.005445
m_H	$5.4433 \cdot 10^{-4}$	0.9946	1

Tabelle 1: Massenverhältnisse im Atom

Abbildung 2.17: Teilchenstrom der Teilchen mit Radius r_1 trifft auf Teilchen mit Radius r_2

2.5. Streuexperimente

2.5.1. Der Wirkungsquerschnitt

Betrachte Stoß zwischen Teilchen mit Radius r_1 und mit Radius r_2 :

- Teilchenstrom der Teilchen mit Radius r_1 mit Querschnittsfläche πr_1^2 , Dichte N_0
- Ziel (Target): Teilchen mit Radius r_2 . Schichtdicke Δx , Dichte n

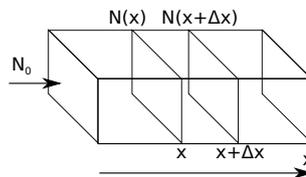


Abbildung 2.18: Teilchenstrom, gesucht: Anzahl der abgelenkten Teilchen

Wirkungsquerschnitt (Streuquerschnitt) $\sigma = (r_1 + r_2)^2 \pi$: Trefferfläche für einen Stoß

Stoßwahrscheinlichkeit $W = \frac{\text{Summe aller Trefferflächen}}{\text{Gesamtfläche } A}$

Annahme hier: keine Abdeckung eines Target-Teilchens durch andere, d. h. x und n genügend klein
 → Zerlegung in kleine Δx .

Anzahl der abgelenkten Teilchen

$$\Delta N = -WN \quad (2.25)$$

$$= -N\sigma \cdot \frac{\text{Anzahl der Teilchen}}{A} \quad (2.26)$$

$$= \dots \quad (2.27)$$

$$= -N\sigma n \Delta x \quad (2.28)$$

Mit dem Übergang $\Delta x \rightarrow dx$ ergibt sich also:

$$\boxed{\frac{dN}{N} = -n\sigma dx} \quad (2.29)$$

Integration liefert die Anzahl der nicht abgelenkten Teilchen:

$$\boxed{N(x) = N_0 \exp(-n\sigma x)} \quad (2.30)$$

2010-04-20

Anteil der abgelenkten Teilchen nach der Strecke L :

$$N_{\text{Streu}} = N_0 \left(1 - \exp\left(-\underbrace{n\sigma}_{\alpha} L\right)\right) \quad (2.31)$$

σ : totaler Streuquerschnitt, α : makroskopischer Streukoeffizient

Allgemein gilt $\alpha = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N n_i \sigma_i$, wenn verschiedene Teilchensorten existieren

Analogie Absorption in der Optik (Beer'sches Gesetz): $I(x) = I_0 \exp(-\alpha x)$, α : Absorptionskoeffizient

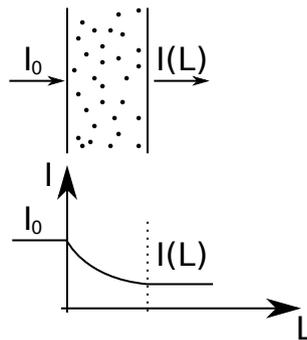


Abbildung 2.19: Verlauf der Lichtintensität durch ein Medium

Definition: mittlere freie Weglänge entspricht dem mittleren Abstand zwischen Streueignissen / Stößen

$$\lambda \frac{1}{n\sigma} = \frac{1}{\alpha} \Rightarrow N = N_0 \exp\left(-\frac{L}{\lambda}\right) \quad (2.32)$$

2.5.2. Streuung von Elektronen an Materie

Beobachtung

- $I = I_0 \exp(-\alpha x)$, I bezeichnet hier den elektrischen Strom
- α proportional zum Druck p
- bei $v = \text{const}$ gilt auch $\frac{\alpha}{\rho} = \text{const}$ (ρ : Dichte) für verschiedene Materialien/Gase
- $\frac{\alpha}{\rho}$ sinkt für zunehmendes v

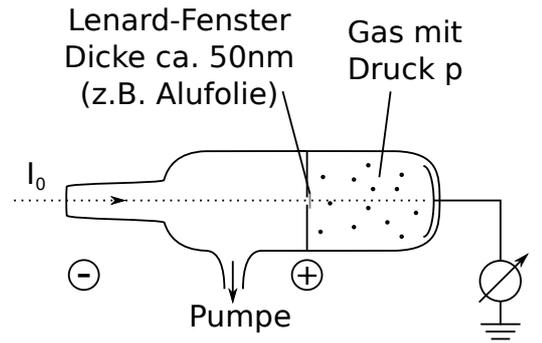


Abbildung 2.20: Messung zur Streuung von Elektronen an Materie

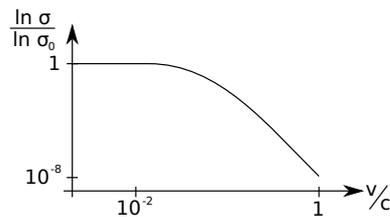


Abbildung 2.21: Messergebnisse zur Elektronenstreuung

Erkenntnis

- Atome sind fast leer
- heute: langsame e^- werden an der Atomhülle gestreut, schnelle Elektronen am Kern

2.5.3. Rutherford-Streuung

- Beschuss von Atomen mit geladenen Teilchen
- α -Teilchen: 2-fach (positiv) ionisierte Helium-Atome (2 Protonen und 2 Neutronen) $m \equiv m_\alpha \gg m_e$
- GEIGER, MARSDEN, RUTHERFORD: 1909 Experiment: Beschuss einer Goldfolie mit α -Teichen.
- Beobachtungen:
 - die meisten Teilchen werden nicht abgelenkt
 - einige Teilchen werden sehr stark abgelenkt
- Hypothesen:
 - kleiner, massiver Atomkern mit Ladung $+Ze > 0$ (z. B. Au: $Z = 79$)
 - Z Elektronen umkreisen den Kern \rightarrow Ladungsneutralität
- Thomson'sches Atommodell: „plum pudding“ (positive Ladung gleichmäßig über Atom verteilt, Elektronen sind darin positioniert)
- Rutherford'sches Atommodell (klassisches Modell):
 1. $m_{\text{Kern}} \gg m_e, m_\alpha = m$ (z. B. $\frac{m_{\text{Au}}}{m} = \frac{197}{4} \approx 50$)

2. Kernladung $Ze > 0$, Z : ganze Zahl

3. Coulomb-Wechselwirkung: $\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(2e)(Ze)}{r^2} \underbrace{\frac{\vec{r}}{r}}_{=:\hat{r}}$

Bekannt aus klassischer Mechanik (Planetenbahnen, Gravitation $\vec{F}_G \sim \frac{1}{r^2}$). Bahn des α -Teilchens:

- verläuft in einer Ebene
- ist ein Kegelschnitt (Hyperbel, da Kraft abstoßend)

4. Keine Mehrfachstreuung in Au-Folie (da Annäherung an Kern selten)

2010-04-21

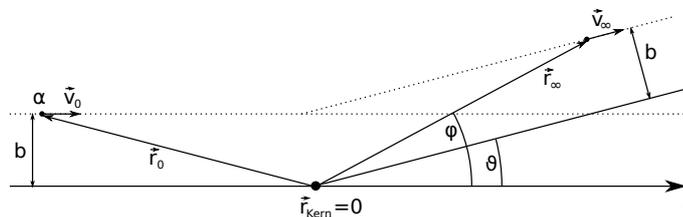


Abbildung 2.22: Rutherford-Streuung

b : Streuparameter ($\hat{=}$ Stoßparameter), ϑ : Streuwinkel

Lösung der Bewegungsgleichung Newton:

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{r}}{r^2}, \quad \hat{r} = \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.33)$$

Wandle in Polarkoordinaten um

$$\vec{r} = r \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} = r\hat{r} \quad (2.34)$$

$$\dot{\vec{r}} = \dot{r}\hat{r} + r\dot{\varphi} \underbrace{\begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix}}_{:=\hat{t}} \quad (2.35)$$

$$\ddot{\vec{r}} = \ddot{r}\hat{r} + \underbrace{\dot{r}\dot{\varphi}\hat{t} + \dot{r}\dot{\varphi}\hat{t}}_{2\dot{r}\dot{\varphi}\hat{t}} + r\ddot{\varphi}\hat{t} - r\dot{\varphi}^2\hat{r} \quad (2.36)$$

Multipliziere die Bewegungsgleichung mit \hat{r} :

$$m(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.37)$$

Multipliziere die Bewegungsgleichung mit \hat{t} :

$$m(2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi}) = 0 \quad (2.38)$$

Schreibe jetzt 2.38 als vollständige Ableitung:

$$m \frac{d}{dt}(r^2 \dot{\varphi}) = 0 \quad \Rightarrow \quad mr^2 \dot{\varphi} = \text{const} =: -L \quad (2.39)$$

→ Drehimpulserhaltung!

$$\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r} = m \dot{\vec{r}} \times \vec{r} \quad (2.40)$$

$$= m(\dot{r}\hat{r} + r\dot{\varphi}\hat{t}) \times r\hat{r} \quad (2.41)$$

$$\hat{t} \times \hat{r} \equiv -\hat{e}_z \quad -mr^2 \dot{\varphi} \hat{e}_z \equiv \underbrace{L_z}_{\equiv L} \hat{e}_z \quad (2.42)$$

Vor der Streuung gilt für $r \rightarrow \infty$:

$$L = m\vec{v}_0 \times \vec{r} = mv_0 b \quad (2.43)$$

mit $\dot{\vec{r}} = \vec{v}_0 = \begin{pmatrix} v_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{r} = \begin{pmatrix} r_x \\ b \\ 0 \end{pmatrix}$

nach der Streuung gilt für $r \rightarrow \infty$, $|\dot{\vec{r}}| = v_0$ (wegen Erhaltung der kinetischen Energie):

$$L' = mv_0 b' = L \quad \Rightarrow \quad b' = b \quad (2.44)$$

Aus 2.39 und 2.43 folgt:

$$r^2 \dot{\varphi} = -v_0 b = \text{const} \quad \Rightarrow \quad \dot{\varphi} = -\frac{v_0 b}{r^2} \quad (2.45)$$

einsetzen in 2.37 ergibt:

$$\boxed{\ddot{r} - \frac{v_0^2 b^2}{r^3} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}} \quad (2.46)$$

- direkte Methode:

1. löse 2.46 $\rightsquigarrow r(t)$

2. einsetzen in 2.45 und auflösen $\rightsquigarrow \varphi(t)$

- etwas einfacher: eliminiere t und erhalte die geometrische Bahn $r(\varphi)$:

$$r = r(\varphi) \quad : \quad \dot{r} = \frac{dr}{d\varphi} \dot{\varphi} = -\frac{v_0 b}{r^2} \frac{dr}{d\varphi} \quad (2.47)$$

definiere jetzt $r =: \frac{1}{u}$

$$\ddot{r} \stackrel{2.47}{=} \frac{d}{dt} \left(-\frac{v_0 b}{r^2} \frac{dr}{d\varphi} \right) \quad (2.48)$$

$$= \underbrace{\dot{\varphi}}_{=-v_0 b u^2} \frac{d}{d\varphi} \left(-v_0 b u^2 \underbrace{\frac{d}{d\varphi} \frac{1}{u}}_{=-\frac{1}{u^2} \frac{du}{d\varphi}} \right) \quad (2.49)$$

$$= -v_0^2 b^2 u^2 \frac{d^2 u}{d\varphi^2} \quad (2.50)$$

Einsetzen in 2.46:

$$-v_0^2 b^2 u^2 \frac{d^2 u}{d\varphi^2} = v_0^2 b^2 u^3 + \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m} u^2 \quad (2.51)$$

Somit ergibt sich die Differentialgleichung für $u(\varphi) = \frac{1}{r(\varphi)}$:

$$\frac{d^2 u}{d\varphi^2} = - \underbrace{\left(u + \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2 b^2} \right)}_{=:w} \quad (2.52)$$

$$\frac{d^2 w}{d\varphi^2} = -w \quad (2.53)$$

$$\Rightarrow w(\varphi) = A \cos(\varphi + \delta) \quad (\text{allgemeine Lösung}) \quad (2.54)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{r(\varphi)} = u(\varphi) = A \cos(\varphi + \delta) - \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2 b^2}} \quad (2.55)$$

- Lösung $r(\varphi)$ von 2.45 und 2.46
- Konstanten A und δ werden durch die Anfangsbedingungen bestimmt
- minimaler Abstand bei $\varphi = \pi - \delta$ (\rightarrow Übungen)
- leite 2.55 nach t ab:

$$-\frac{1}{r^2} \dot{r} = -A \sin(\varphi + \delta) \dot{\varphi} \stackrel{2.45}{=} A \sin(\varphi + \delta) \frac{v_0 b}{r^2} \quad (2.56)$$

$$\Rightarrow \dot{r}(\varphi) = -A v_0 b \sin(\varphi + \delta) \quad (2.57)$$

vor Streuung gilt für $r \rightarrow \infty$: $\varphi \rightarrow \pi$, $\dot{r} \rightarrow -v_0$. In 2.55 und 2.57 einsetzen:

$$A \underbrace{\cos(\pi + \delta)}_{=-\cos(\delta)} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2 b^2} \quad (2.58)$$

$$A b v_0 \underbrace{\sin(\pi + \delta)}_{=-\sin(\delta)} = -v_0 \quad (2.59)$$

- zusammengefasst:

$$\cos(\delta) = -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2 b^2 A} \quad (2.60)$$

$$\sin(\delta) = -\frac{1}{bA} \quad (2.61)$$

$$(2.62)$$

$$\Rightarrow \boxed{\tan \delta = \frac{4\pi\epsilon_0 m v_0^2 b}{2Ze^2}} \quad (2.63)$$

Bemerkung mit $0 \leq \delta < \frac{\pi}{2}$ folgt $A < 0$ (bei $b \geq 0$)

Streuwinkel ϑ aus 2.55 folgt bei $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \text{vor Streuung} & & \text{nach Streuung} \\ \cos(\pi + \delta) & = & \cos(\vartheta + \delta) \\ = \cos(\delta - \pi) & & \\ = \cos(\pi - \delta) & \leadsto & \boxed{\pi - \delta = \vartheta + \delta} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{2\delta + \vartheta = \pi} \quad (2.64)$$

$$\Rightarrow \delta = \frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta}{2} \quad (2.65)$$

$$\Rightarrow \boxed{\tan \delta = \cot \frac{\vartheta}{2}} \quad (2.66)$$

$$\Rightarrow \boxed{b = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m v_0^2} \cot \frac{\vartheta}{2}} \quad (2.67)$$

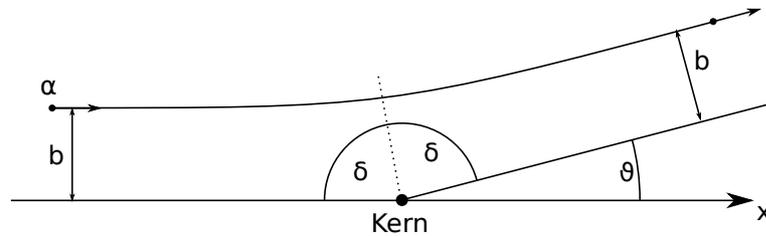


Abbildung 2.23: Zusammenhang zwischen Streuwinkel ϑ und δ bei der Rutherford-Streuung

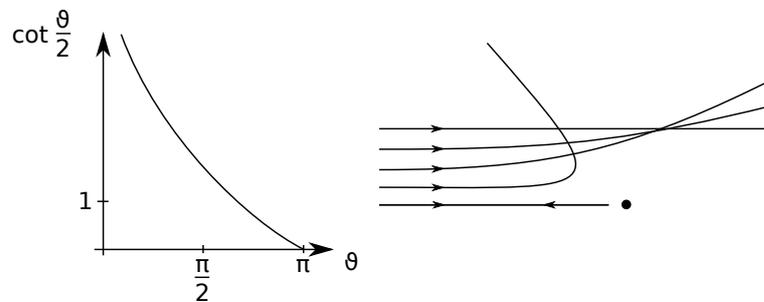


Abbildung 2.24: Zusammenhang zwischen Streuwinkel ϑ und Streuparameter $b \sim \cot \frac{\vartheta}{2}$

Differentieller Streuquerschnitt

- Wir haben einen eindeutigen Zusammenhang: $b = b(\vartheta)$ (bzw. $\vartheta = \vartheta(b)$)
- Streuquerschnitt für jedes b separat \rightarrow differentieller Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) \quad (2.68)$$

wobei $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$: Raumwinkelement

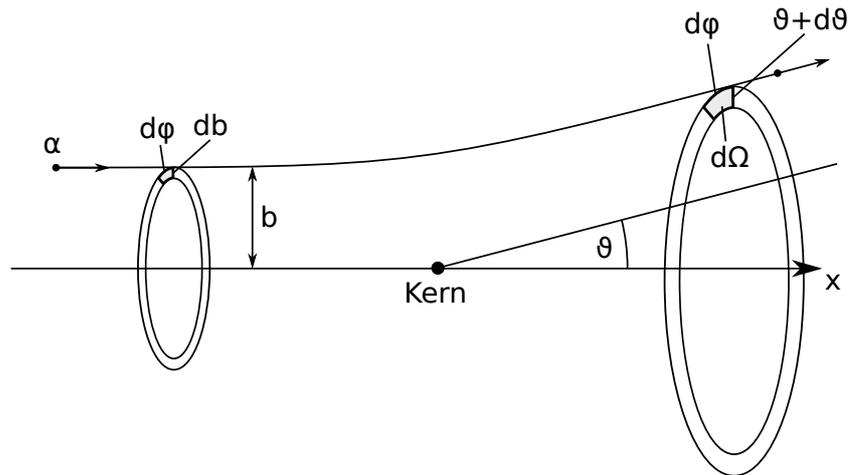


Abbildung 2.25: Herleitung zum differentiellen Streuquerschnitt

Der (totale) Streuquerschnitt ist dann

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) \quad (2.69)$$

- Anzahl der einfallenden Teilchen (pro Fläche): N
- Anzahl der einfallenden Teilchen in Flächenelement $d\sigma = b d\varphi db$: $dN = N d\sigma = Nb db d\varphi$
- Streuung: Austritt durch Flächenelement $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ wobei $[b, b + db] \xrightarrow{2.67} [\vartheta, \vartheta + d\vartheta]$

$$dN = N d\sigma = Nb db d\varphi =: N \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = N \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\vartheta d\vartheta d\varphi \quad (2.70)$$

differentieller Streuquerschnitt:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \frac{b(\vartheta)}{\sin(\vartheta)} \left| \frac{db}{d\vartheta} \right|} \quad (2.71)$$

$$b(\vartheta) \propto \cot \frac{\vartheta}{2}, \quad \cot' x = -\frac{1}{\sin^2 x}, \quad \sin(2x) = \frac{1}{2} \sin(x) \cos(x) \quad \text{mit } x = \frac{\vartheta}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{\cot \frac{\vartheta}{2}}{\sin \vartheta} = 2 \frac{\cos \frac{\vartheta}{2}}{\sin \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2}} \quad (2.72)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z^2 e^4}{m^2 v_0^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}} \quad \text{Rutherford-Streuformel} \quad (2.73)$$

2010-04-22

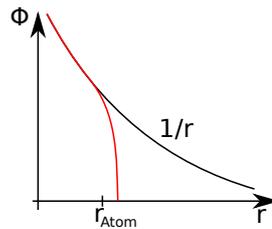


Abbildung 2.26: Potentialverlauf in Abhängigkeit des Abstandes

Diskussion der Rutherford-Streuformel

- Intensitätsverlauf $I \propto \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}$, $I \propto \frac{1}{E_{\text{kin}}^2}$
- Herleitung hier aus klassischer Physik (Newton), später quantenmechanische Behandlung mittels Born'scher Näherung liefert in 1. Ordnung das gleiche Ergebnis
- Für $\vartheta = 0$, $\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \infty$: Problem für große b . Sobald aber $b \geq r_{\text{Atom}}$ stimmt das $\frac{Z^2 e^2}{r^2}$ -Kraftgesetz nicht mehr, da die Kernladung durch e^- abgeschirmt wird (Atom ist neutral)
- Totaler Streuquerschnitt

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta \quad (2.74)$$

$$= \dots = \infty \quad (\text{wegen Divergenz}) \quad (2.75)$$

Grund für Divergenz: ∞ -Reichweite des Coulombpotentials, aber für $b \geq r_{\text{Atom}}$ wird Coulombkraft abgeschirmt

- Nicht-relativistische Rechnung erlaubt, da im Experiment typischerweise $\frac{v_0}{c} \approx \frac{1}{20}$. Typische E_{kin} von α -Teilchen: 4 – 8 MeV
- Obere Schranke für Kernradius aus minimalem Abstand (bei Rückstreuung $\vartheta = \pi$: $R_\pi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{M \frac{v_0^2}{2}}$); $R_{\text{Kern}} \lesssim \text{fm}$.
- Vergleich mit Thomson'schem Atommodell: Thomson weniger starke Ablenkung, aber für größere Anzahl einfallender Teilchen

Rutherford-Streuversuch

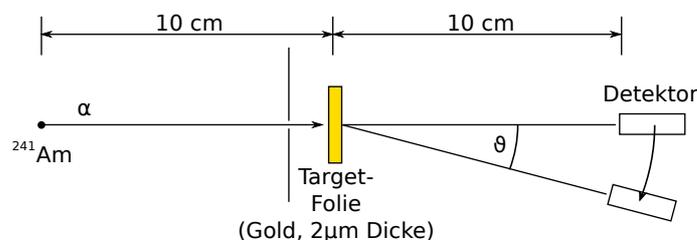


Abbildung 2.27: Aufbau des Rutherford-Streuversuchs

	Winkel	mit/oder Target	Zählrate
Zählraten im Vakuum:	0°	ohne Target	1456 in 20s
	0°	mit Target	1304 in 20s
	15°	ohne Target	1 in 60s
	15°	mit Target	120 in 60s

theoretische Abnahme: $\left(\frac{1}{\sin(7.5^\circ)}\right)^4 = 3445$

Ohne Vakuum bei 0° und $p \approx 1000$ mbar werden keine α -Teilchen gemessen

- Folie ist für α -Teilchen nahezu transparent
- Zählrate stark winkelabhängig
- Reichweite der α -Teilchen in Luft $\approx 3 - 4$ cm

2.6. Photoeffekt und Photonen

2.6.1. Der Photoeffekt

qualitativer Photoeffekt

→ UV-Licht löst e^- aus Metall aus

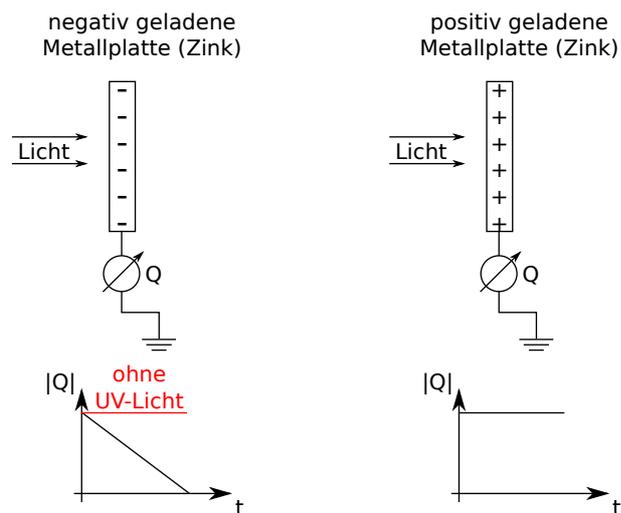


Abbildung 2.28: qualitativer Photoeffekt: negativ geladene Zinkplatte wird durch UV-Licht entladen

Anmerkung Vorlesungsversuch war nicht erfolgreich, da die Zinkplatte stark oxidiert war. Nach Reinigung der Platte konnte Entladung gezeigt werden.

quantitativer Versuch zum Photoeffekt

	U_G V	λ [nm]	ν [10^{14} Hz]	
Messwerte:	gelb	0.23	578	5.19
	grün	0.32	546	5.49
	blau	0.9	436	6.88
	violett	1.23	405	7.41

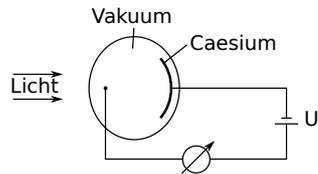


Abbildung 2.29: Aufbau einer Photozelle (Polarität der Spannung so, dass alle ausgelösten e^- zur Anode gelangen)

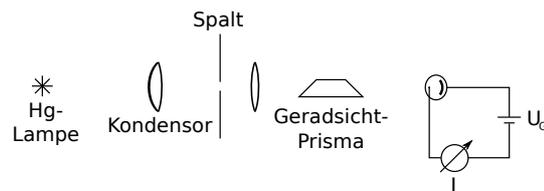


Abbildung 2.30: Versuchsaufbau zum quantitativen Photoeffekt

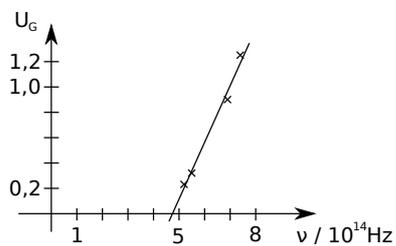


Abbildung 2.31: Ergebnisse des Photoeffekt-Versuchs

Die Ausgleichsgerade hat die Steigung

$$\frac{\Delta U}{\Delta \nu} \approx \frac{1 \text{ V}}{2.4 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}} \quad (2.76)$$

2010-04-26

Beobachtungen

1. Beleuchtung einer Metallplatte erzeugt elektrischen Strom. Empfindlichkeit erst ab einer Mindestfrequenz (maximale Wellenlänge). *Grenzfrequenz* ν_G
2. I hängt von der Intensität P ab, ν_G hängt aber nicht von P ab!
3. ν_G hängt vom Metall ab (z. B. für Na: $\lambda_G = 543 \text{ nm}$, Ca: $\lambda_G = 277 \text{ nm}$)

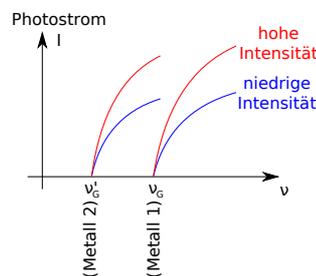


Abbildung 2.32: Abhängigkeit des Photostroms I und der Grenzfrequenz ν_G von der Intensität P und vom Metall

4. Ab einer negativen Bremsspannung U_0 wird Stromfluss verhindert.
5. U_0 hängt nicht von der Lichtintensität P ab. (Dies steht im Widerspruch zur Erwartung für klassische Lichtwellen)
6. U_0 hängt linear von der Frequenz ν ab.
7. U_0 und U_A hängen vom Kathodenmetall ab.

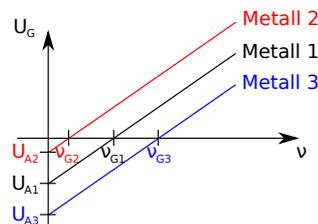


Abbildung 2.33: Abhängigkeit der Energie U_0 und der Austrittsenergie U_A von der Frequenz und vom Metall

8. Steigung hängt nicht vom Kathodenmetall ab.
9. Sättigungsstrom I_S (maximaler Strom bei fester Frequenz und festem Metall) hängt linear von P ab.

Interpretation

1. Lichtteilchen (*Photonen*) ab einer gewissen Energie lösen Elektronen aus der Kathode aus.
2. Ist U groß genug, gelangen alle e^- zur Anode \rightarrow Sättigungsstrom I_S
3. Bei Gegenspannung $U_G = U_0$ ist Geschwindigkeit der e^- gleich Null

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{U_G=U_0} = e|U_0|$$

4. ν_G : Austrittsarbeit eU_A muss aufgebracht werden, um e^- aus Festkörper herauslösen zu können

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{U_G=U_0} = e|U_0| = E_P - eU_A = \underbrace{h}_{\text{Planck'sches Wirkungsquantum}} \nu - eU_A$$

5. Bestimmung von h aus Steigung mit Werten aus Experiment:

$$h = \frac{e\Delta U}{\Delta \nu} \approx 6.8 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.77)$$

Literaturwert $h = 6.636 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$	(2.78)
---	--------

2.6.2. Lichtquantenhypothese (Photonen)

EINSTEIN postuliert (1905): Licht besteht aus Korpuskeln (Teilchen), die Photonen genannt werden, mit wohldefinierter Energie und Impuls

$$E_{\text{Photon}} = \varepsilon = h\nu = \underbrace{\hbar}_{\frac{h}{2\pi}} \omega \quad (2.79)$$

$$\vec{p}_\nu = \hbar \vec{k} \quad \leftarrow \text{experimenteller Nachweis durch Compton-Effekt} \quad (2.80)$$

\vec{k} : Wellenvektor

Zusammenhang: $|\vec{p}_\nu| = \hbar |\vec{k}|$ folgt aus Relativität $\varepsilon = c \sqrt{\underbrace{m_0^2}_{\text{Ruhemasse}} c^2 + p^2}$

Photonen bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit $v = c \Rightarrow \varepsilon = cp$ ($m_0 = 0$)

$$|\vec{p}_\nu| = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{\hbar \omega}{c} = \hbar |\vec{k}| \quad (2.81)$$

$$c = \lambda \nu = \frac{2\pi}{k} \nu = \frac{2\pi}{k} \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\omega}{k} \quad (2.82)$$

2.7. Der Compton-Effekt

2.7.1. Röntgenquelle und Röntgenspektrum

Bremsstrahlung Umkehrung des Photoeffekts: e^- verlieren im Metall kinetische Energie, diese wird an Photon abgegeben.

Grenzfrequenz ν_{\max} bzw. (λ_{\min}): $eU_B = h\nu_{\max} = \frac{hc}{\lambda_{\min}}$

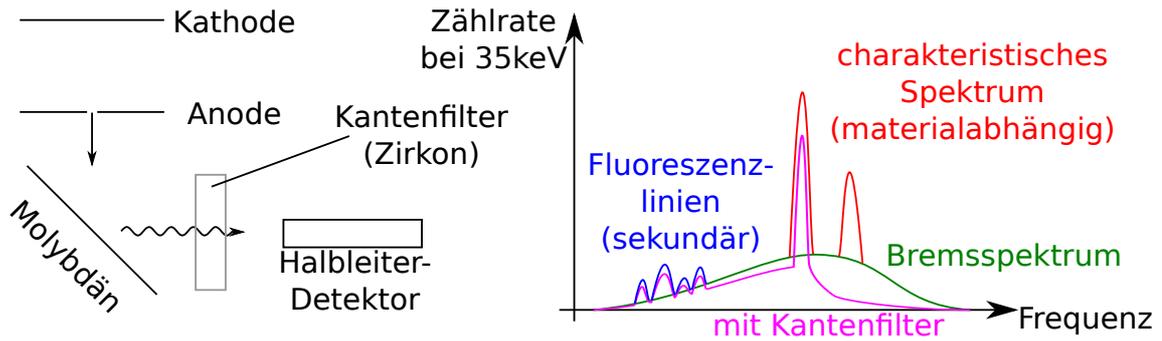


Abbildung 2.34: Aufbau zum Erzeugen von Röntgenstrahlung und Röntgenspektrum

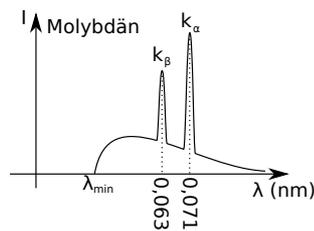


Abbildung 2.35: Intensität der Röntgenstrahlung für Molybdän

Linien der charakteristischen Strahlung Anregungen der Atomhülle

Wirkung des Kantenfilters Absorbiert alle Photonen ab einer bestimmten Energie

2.7.2. Der Compton-Versuch (1921, NP 1927)

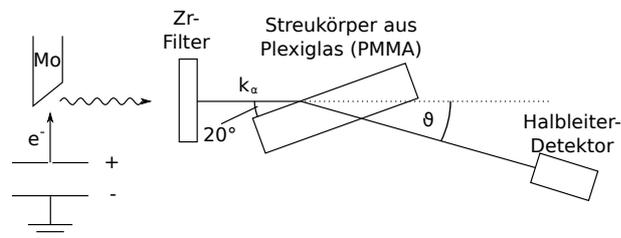


Abbildung 2.36: Aufbau des Compton-Versuchs

PMMA enthält viele (fast-) freie e^- und besteht im Wesentlichen aus C und H

Anmerkung Wirkungsquerschnitt für Photoeffekt ist proportional zu Z^5 (Z : Kernladungszahl), der für Compton-Effekt ist proportional zu Z . Der Compton Effekt ist deshalb bei leichteren Elementen einfacher zu beobachten, da bei schweren Elementen durch Photoeffekt verdeckt.

Experimentelle Beobachtungen

Bei Röntgenbeugung an Festkörpern tritt zusätzlich eine zu längeren Wellenlängen verschobene Linie auf:

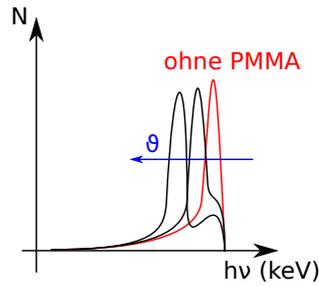


Abbildung 2.37: Experimentelle Beobachtung des Compton-Effekts: Die Intensitätsspitze wird mit zunehmendem Streuwinkel in den niederenergetischeren Bereich verschoben

- Intensitätsanteil der verschobenen Linie wächst mit dem Streuwinkel ϑ
- Wellenlängenzunahme $\Delta\lambda$ wächst mit ϑ
- Analogie zum Stoß von Punktmassen in der Mechanik

2010-04-27

Interpretation 3-Körperstoß eines Photons mit einem Elektron (niederenergetischeres Photon tritt aus)

Berechnung der Compton-Verschiebung $\Delta\lambda(\vartheta)$ Annahme: e^- vor dem Stoß in Ruhe, e^- ist schwachgebunden, Bindungsenergie $\ll h\nu$

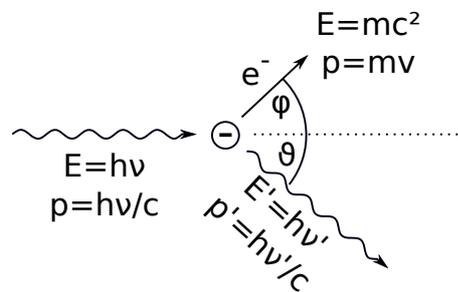


Abbildung 2.38: Stoßvorgang beim Compton-Effekt

Energiesatz

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2 \quad (2.83)$$

$$m = \gamma m_0, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

Impulssatz x -Richtung:

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos(\vartheta) + mv \cos(\varphi) = \frac{h\nu'}{c} \cos(\vartheta) + \beta\gamma cm_0 \cos(\varphi) \quad (2.84)$$

y -Richtung:

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin(\vartheta) - \beta\gamma cm_0 \sin(\varphi) \quad (2.85)$$

Normierung der Energien auf Ruheenergie des Elektrons:

$$\alpha = \frac{h\nu}{m_0c^2} \quad , \quad \alpha' = \frac{h\nu'}{m_0c^2}$$

Rechnung liefert: (Übungsaufgabe)

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\vartheta)} \quad (\text{Compton-Verschiebung}) \quad (2.86)$$

Übliche Notation durch Übergang zu Wellenlängen:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\vartheta) = \lambda_C(1 - \cos\vartheta) \quad (2.87)$$

mit der Compton-Wellenlänge des Elektrons:

$$\lambda_C = \frac{h}{m_0c} \quad (2.88)$$

Bemerkung

1. Röntgenquant mit $\lambda = \lambda_C$ hat Energie $m_0c^2 = 511 \text{ keV}$
2. $\lambda_C = 2.4 \text{ pm} = 0.024 \text{ \AA} = 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$
3. $\Delta\lambda$ hängt nicht von λ ab
4. Maximale Compton-Verschiebung beträgt $\Delta\lambda_{\max} = 2\lambda_C$ bei $\vartheta = \pi$
5. Man kann auch $\lambda_{C,\text{Proton}}$ definieren mit $m_{0,\text{Proton}}$ statt m_0 : $\lambda_{C,\text{Proton}} = 1.32 \text{ fm}$
6. Nachweis, dass e^- und Wellenlängenverschobenes Röntgenphoton gleichzeitig ausgesandt werden durch Koinzidenzmessung
7. Compton-Effekt wichtig in der Kernphysik: hochenergetische Photonen (γ -Quanten) werden stark Compton-verschoben (relative Verschiebung $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ wird größer mit abnehmenden λ , da $\Delta\lambda$ unabhängig von λ ist!)

2.8. Elektronenbeugung

2.8.1. De-Broglie-Wellenlänge (1924)

Auch Teilchen mit Ruhemasse haben eine Wellenlänge.

Erinnerung Für Photonen gilt $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (\text{De-Broglie-Wellenlänge}) \quad (2.89)$$

m : Masse des Teilchens, v : Geschwindigkeit

Verallgemeinerung gilt für massebehaftete Teilchen (wie z. B. Elektronen, Atome, Moleküle)

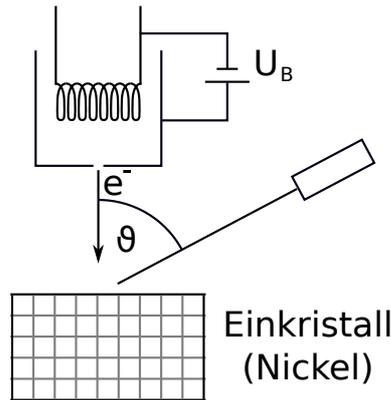


Abbildung 2.39: Aufbau zum Davisson-Germer-Versuch

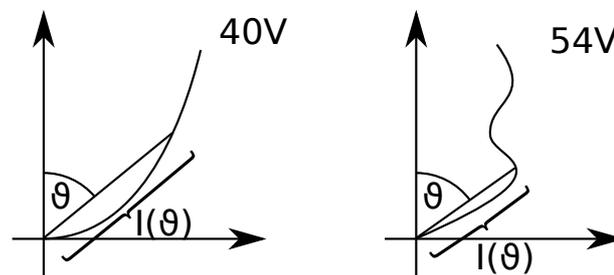


Abbildung 2.40: Polardiagramme der Ergebnisse des Davisson-Germer-Experiments bei 40 V und 54 V

2.8.2. Das Davisson-Germer-Experiment (1918-1927, NP 1937)

Versuch Reflexion langsamer Elektronen an Kristallen (50 – 100 eV)

Beobachtung

- es treten Maxima und Minima der Intensität auf als Funktion des Streuwinkels (vgl. Interferenz)
- Extrema hängen ab von der Energie der e^- und von der Kristallorientierung

2010-04-28

2.8.3. Das Debye-Scherrer-Verfahren

Erinnerung Bragg-Bedingung: $2d \sin \vartheta = n\lambda$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Wenn Probe polykristallin, dann sind alle Orientierungen vorhanden \rightarrow Rotationsymmetrie. Man erhält also ein ringförmiges Interferenzmuster mit Öffnungswinkel 2ϑ . Falls es mehrere charakteristische Abstände gibt, so gibt es mehrere Ringe.

Versuch Elektronenbeugung an polykristalliner Graphitfolie

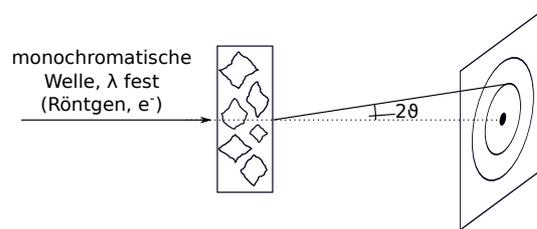


Abbildung 2.41: Aufbau zum Debye-Scherrer-Verfahren

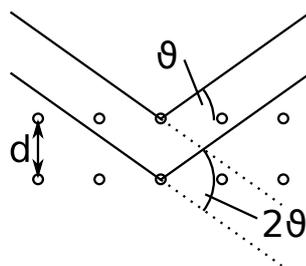


Abbildung 2.42: Bragg-Bedingung

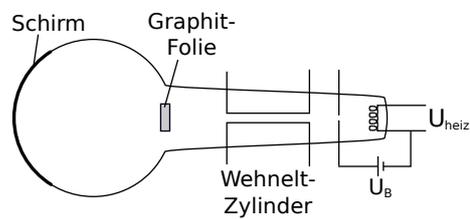


Abbildung 2.43: Elektronenbeugung an polykristalliner Graphitfolie

Beobachtung

- 2 konzentrische Interferenzringe um hellen zentralen Fleck
- Interferenzringe und zentraler Fleck durch Magnet ablenkbar
- Durchmesser der Interferenzringe sinkt mit zunehmender U_B
- Aus geometrischen Überlegungen

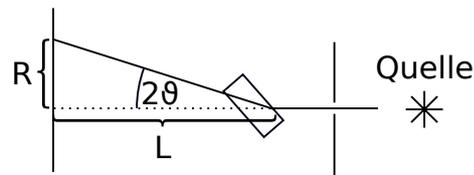


Abbildung 2.44: Geometrie der Öffnungswinkel beim Debye-Scherrer-Verfahren

folgt: $\tan(2\vartheta) = \frac{R}{L} \approx \sin(2\vartheta)$, $\sin(2\vartheta) = \frac{n\lambda}{d}$, für die Wellenlänge folgt mit der de-Broglie-Beziehung $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2emU_B}}$

Folie Doppelspaltversuch für e^- (MÖLLENSTEDT, 1956)

Folie Aharanov-Bohm-Effekt: Verschiebung der Interferenzlinien durch Magnetfeld oder magnetisches Vektorpotential

später Interferenz auch bei Atom- und Molekülstrahlen beobachtet, z. B.

He (STERN et al. 1931)

Neutronen Standardanalyseverfahren in Festkörperphysik

C60 (**Fußballmoleküle**, $\varnothing \approx 1 \text{ nm}$) (ZEILINGER, ARNDT 1995) → Folie

2.9. Schwarzkörperstrahlung, Planck'sches Strahlungsgesetz

- PLANCK 1900: Beginn der Quantenmechanik
- spektrale Intensitätsverteilung der Wärmestrahlung eines schwarzen Körpers
- schwarzer Körper: Idealisierung → heißes Metall, Sonne, Universum,...
- universelles Gesetz (KIRCHHOFF,...)
- eine Realisierung eines schwarzen Körpers: Hohlraum
- Loch ist schwarzer Körper.
- Intensitätsverteilung der austretenden Wärmestrahlung ist identisch mit derjenigen des sich im Hohlraum befindlichen elektromagnetischen Feldes.

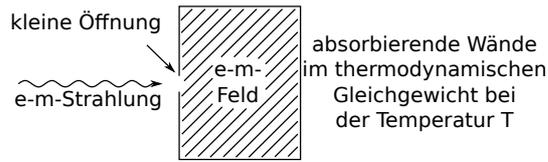


Abbildung 2.45: Hohlraum als Realisierung eines schwarzen Körpers

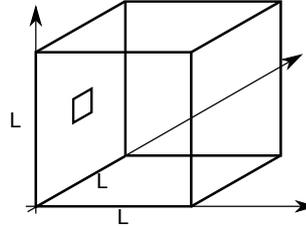


Abbildung 2.46: Hohlraum mit Öffnung

2.9.1. Elektromagnetische Felder im Hohlraum

Betrachte kubischen Hohlraum mit Kantenlänge L :

Wände sollen leitend sein, dann gilt:

$$\vec{E}_{\parallel} \Big|_{\substack{x=0, L \\ y=0, L \\ z=0, L}} = 0 \quad (2.90)$$

Maxwell-Gleichungen \rightarrow Wellengleichungen:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E} = 0 \quad (2.91)$$

mit den Randbedingungen 2.90:

$$\vec{E}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}, t) = a_{\vec{k},\lambda} \begin{pmatrix} E_{\vec{k},\lambda}^{(x)} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_{\vec{k},\lambda}^{(y)} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_{\vec{k},\lambda}^{(z)} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

mit

$$\boxed{k_i = \frac{\pi}{L} n_i} \quad , \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad , \quad i = x, y, z \quad (2.93)$$

ergibt sich:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \Rightarrow E_{\vec{k},\lambda}^{(x)} k_x + E_{\vec{k},\lambda}^{(y)} k_y + E_{\vec{k},\lambda}^{(z)} k_z = \vec{E}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{k} = 0 \quad (2.94)$$

\rightarrow für jedes $\vec{k} = \frac{\pi}{L} \vec{n} = \frac{\pi}{L} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$ gibt es zwei mögliche (zu \vec{k} senkrecht stehende, linear unabhängige)

Polarisationsvektoren (Polarisationen), $\lambda = 1, 2$.

Setze 2.92 in 2.91 ein:

$$\nabla^2 \rightarrow -k^2 = -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 \rightsquigarrow -k^2 a_{\vec{k},\lambda} - \frac{1}{c^2} \ddot{a}_{\vec{k},\lambda} = 0 \quad (2.95)$$

$$\boxed{\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}| = ck} \Rightarrow \ddot{a}_{\vec{k},\lambda} = -\omega_{\vec{k}}^2 a_{\vec{k},\lambda} \quad (2.96)$$

d. h. jede Mode (\vec{k}, λ) des elektromagnetischen Feldes entspricht einem harmonischen Oszillator.
klassisch

$$a_{\vec{k},\lambda}(t) = a_{\vec{k},\lambda}(0) \cos(\omega_{\vec{k}} t) \quad (2.97)$$

allgemeine Lösung

$$\vec{E} = \sum_{\vec{k},\lambda} \vec{E}_{\vec{k},\lambda} \quad (2.98)$$

Energiedichte des elektromagnetischen Feldes (im Vakuum)

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 E(\vec{r})^2 + \frac{1}{\mu_0} B(\vec{r})^2 \right) \quad (2.99)$$

Mittelung über eine Wellenlänge:

$$\begin{aligned} U &= \langle U(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \langle E(\vec{r})^2 \rangle + \frac{1}{\mu_0} \langle B(\vec{r})^2 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\lambda} \left(\underbrace{\left(\frac{1}{2} \right)^3 \epsilon_0 a_{\vec{k},\lambda}^2}_{E\text{-Feld}} + \underbrace{\left(\frac{1}{2} \right)^3 \epsilon_0 a_{\vec{k},\lambda}^2}_{B\text{-Feld}} \right) \\ &= \sum_{\vec{k},\lambda} \left(\frac{1}{2} \right)^3 \epsilon_0 a_{\vec{k},\lambda}^2 \\ &=: \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\lambda} \varepsilon_{\vec{k},\lambda} \\ U &= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k},\lambda} \underbrace{\varepsilon_{\vec{k},\lambda}}_{\substack{\text{Energie der} \\ \text{Mode } (\vec{k}, \lambda)}}} \end{aligned} \quad (2.100)$$

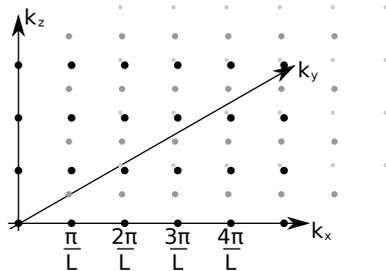


Abbildung 2.47: Moden im 3-dimensionalen Koordinatensystem im \vec{k} -Raum, $k_i > 0$

Bilde den Kontinuumsimes:

$$\sum_{\vec{k},\lambda} \rightarrow \underbrace{\frac{1}{8}}_{k_i > 0} \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 \int d^3k \quad (2.101)$$

$$U = \frac{1}{8} \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 \frac{1}{L^3} \int d^3k \varepsilon_{\vec{k},\lambda} \quad (2.102)$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d^3k \varepsilon_{\vec{k},\lambda} \quad (2.103)$$

Mittlere Energie im thermischen Gleichgewicht bei einer Temperatur T :

$$\langle \varepsilon_{\vec{k}, \lambda} \rangle_T = \langle \varepsilon_k \rangle_T \quad \text{unpolarisiertes, isotropes Feld} \quad (2.104)$$

$$U(T) = \frac{1}{8\pi^3} \cdot \underbrace{2}_{\text{Polarisierungen}} \cdot 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \langle \varepsilon_k \rangle_T \quad (2.105)$$

Umrechnung in Frequenzen: $\omega = 2\pi\nu = ck \Rightarrow k = \frac{2\pi}{c}\nu$ liefert

$$U(T) = \frac{1}{8\pi^3} \cdot 2 \cdot 4\pi \left(\frac{2\pi}{c}\right)^3 \int_0^\infty d\nu \nu^2 \langle \varepsilon_\nu \rangle_T \quad (2.106)$$

$$= \frac{8\pi}{c^3} \int_0^\infty d\nu \nu^2 \langle \varepsilon_\nu \rangle_T \quad (2.107)$$

$$=: \int_0^\infty d\nu u(\nu, T) \quad (2.108)$$

mit der spektralen Energiedichte

$$\boxed{u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \langle \varepsilon_\nu \rangle_T} \quad (2.109)$$

$\frac{8\pi}{c^3} \nu^2$: Zustandsdichte des elektromagnetischen Feldes: Anzahl der Zustände im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ ist $\frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu$.

Es bleibt: Berechnung von $\langle \varepsilon_\nu \rangle_T$ = mittlere Energie eines harmonischen Oszillators der Frequenz ν bei der Temperatur T

klassisch (\rightarrow Übungsaufgabe)

$$\langle \varepsilon_\nu \rangle_T = k_B T$$

$$\text{mit } \xrightarrow{2.109} u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \quad \text{Rayleigh-Jeans-Gesetz} \quad (2.110)$$

Problem:

$$\begin{aligned} u(T) &= \int_0^\infty d\nu u(\nu, T) \\ &= \frac{8\pi}{c^3} k_B T \int_0^\infty d\nu \nu^2 \rightarrow \infty \quad \text{„UV-Katastrophe“} \end{aligned}$$

2.9.2. Planck'sches Strahlungsgesetz

Quantenhypothese: $\varepsilon_\nu = nh\nu$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Wahrscheinlichkeit, dass sich der harmonische Oszillator im Zustand mit n Quanten befindet:

$$p_n = C e^{-\varepsilon_\nu / k_B T} = C \underbrace{e^{-nh\nu / k_B T}}_{=: \tilde{p}_n} = C \tilde{p}_n \quad (2.111)$$

wobei man \tilde{p}_n als Boltzmann-Faktor bezeichnet.

$$\langle \varepsilon_\nu \rangle_T \equiv \langle \varepsilon_\nu \rangle = \langle nh\nu \rangle = h\nu \langle n \rangle \quad (2.112)$$

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^\infty n \tilde{p}_n}{\sum_{n=0}^\infty \tilde{p}_n} \stackrel{\frac{h\nu}{k_B T} =: x}{=} \frac{\sum_{n=0}^\infty n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-nx}} \quad (2.113)$$

Es gilt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-x})^n = \frac{1}{1 - e^{-x}} \quad (2.114)$$

und

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \quad (2.115)$$

Daraus folgt:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^x - 1}$$

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \quad \text{Bose-Einstein-Verteilung} \quad (2.116)$$

$$\boxed{\langle \varepsilon_\nu \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \quad (2.117)$$

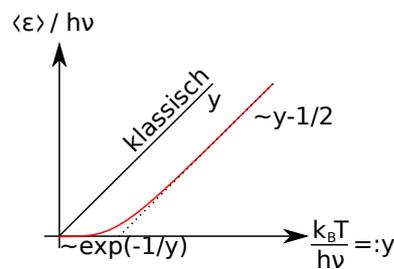


Abbildung 2.48: Vergleich der $\langle \varepsilon_\nu \rangle$ für den klassischen Fall und nach der Quantenhypothese

Einsetzen in 2.109:

$$\boxed{u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^3 \frac{h}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \quad \text{Planck'sche Strahlungsformel} \quad (2.118)$$

1. Quantenhypothese: $\varepsilon_\nu = nh\nu$ kann aus dem Formalismus der Quantenmechanik hergeleitet werden \rightarrow später: harmonischer Oszillator

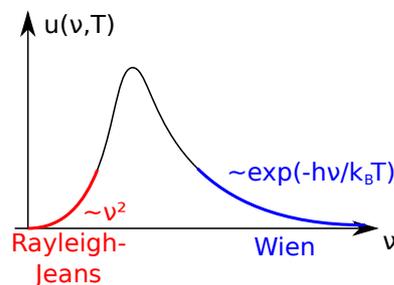


Abbildung 2.49: Verlauf der Planck'schen Strahlungsformel

2. Grenzfälle:

- $h\nu \ll k_B T$:

$$e^{h\nu/k_B T} - 1 \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1 + \dots \approx \frac{h\nu}{k_B T}$$

$$\Rightarrow u \approx \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \quad (\text{Rayleigh-Jeans}) \quad (2.119)$$

- $h\nu \gg k_B T$:

$$u \approx \frac{8\pi}{c^3} \nu^3 h e^{-h\nu/k_B T} \quad (\text{Wien}) \quad (2.120)$$

3. Gesamte räumliche Energiedichte:

$$U(T) = \int_0^\infty d\nu u(\nu, T)$$

$$= \frac{8\pi}{c^3} h \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

$$x := \frac{h\nu}{k_B T} \iff \nu = \frac{k_B T x}{h}$$

$$= \frac{8\pi}{c^3} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^4 \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\pi^4/15}$$

$$U(T) = \underbrace{\frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^4}}_{=: \sigma} T^4 \quad (\text{Stefan-Boltzmann-Gesetz}) \quad (2.121)$$

4. Wien'sches Gesetz:

$$u(\nu, T) = \nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right) \quad (2.122)$$

wobei g eine universelle Funktion ist, die nur noch vom Verhältnis $\frac{\nu}{T}$ abhängt.

5. Wien'sches Verschiebungsgesetz

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{du}{d\nu} \Big|_{\nu=\nu_0} = 3\nu_0^2 g\left(\frac{\nu_0}{T}\right) + \nu_0^3 g'\left(\frac{\nu_0}{T}\right) \frac{1}{T} \quad \Big| \cdot \frac{T}{\nu_0^3}, \quad x_0 := \frac{\nu_0}{T}$$

$$= \frac{3}{x_0} g(x_0) + g'(x_0) = 0$$

$$\Rightarrow x_0 = \frac{\nu_0}{T} = \text{const}$$

$$\Rightarrow \boxed{\nu \propto T} \quad (2.123)$$

Die Proportionalitätskonstante folgt direkt aus dem Planck'schen Strahlungsgesetz

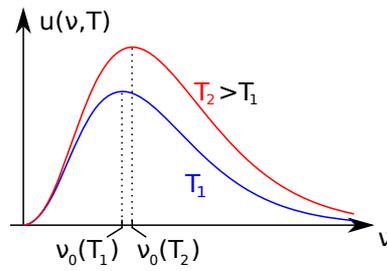


Abbildung 2.50: Abhängigkeit der Planck'schen Strahlungsformel von der Temperatur

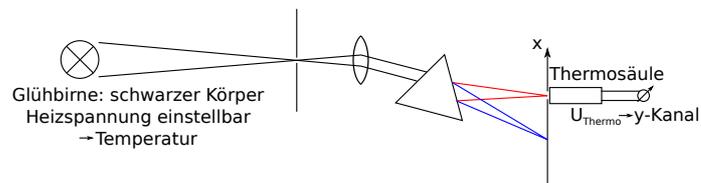


Abbildung 2.51: Aufbau zur Messung des Planck'schen Strahlungsgesetzes

Kapitel 3.

Welle-Teilchen-Dualismus

Frage Ist ein Elektron (Photon) eine Welle oder ein Teilchen?

Antwort → sowohl als auch

Teilchen $\frac{e}{m}$, Massenspektrometer, Photoeffekt, Compton-Streuung

Welle Beugung, Interferenz

Quantenmechanik weder Welle noch Teilchen, sondern etwas Neues
→ Sprachgebrauch: „*Teilchen*“ (manchmal auch „*Wellen*“)

3.1. Interferenzexperimente, Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Interferenz am Doppelspalt

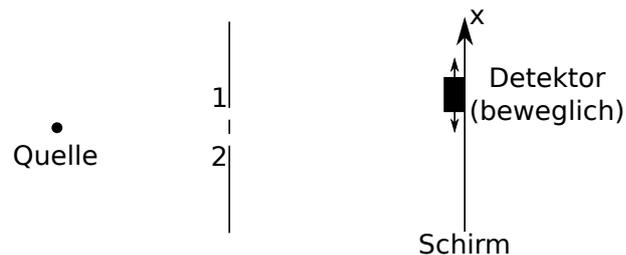


Abbildung 3.1: Grundsätzlicher Aufbau des Doppelspaltexperiments

1. klassisches Teilchen (Kugeln, Schrot, Tennisbälle, ...)

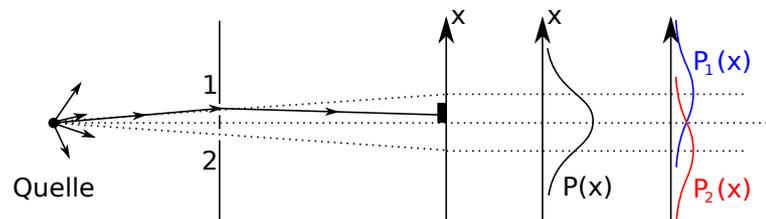


Abbildung 3.2: Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung

- fahre mit dem Detektor nacheinander eine Reihe von Positionen x an
- zähle an jeder Position die Anzahl der eintreffenden Teilchen während einer festen Zeit T : $N(X) \geq 0$

- wähle Schrittweite so klein, dass $N(x)$ als kontinuierliche Funktion von x aufgefasst werden kann
- $N_D = \int N(x) dx \hat{=}$ Anzahl der Teilchen, die den Doppelspalt während der Zeit T passieren, $N_0 \leq N$ (N : insgesamt durch die quelle emittierte Teilchen in der Zeit T)
- Wahrscheinlichkeitsverteilung ($N, N_D \gg 1$):

$$P(x) := \frac{N(x)}{N} \quad , \quad \int P(x) dx = \frac{N_D}{N} \leq 1 \quad (3.1)$$

- Ein Loch wird abgedeckt:
 $P_1(x)$ nur Loch 1 offen
 $P_2(x)$ nur Loch 2 offen
- es gilt:

$$\boxed{P(x) = P_1(x) + P_2(x)} \quad (3.2)$$

→ jedes Teilchen, welches auf den Schirm trifft, ist **entweder** durch Loch 1 **oder** durch Loch 2 geflogen

2. klassische Wellen (Wasser,...) am Doppelspalt

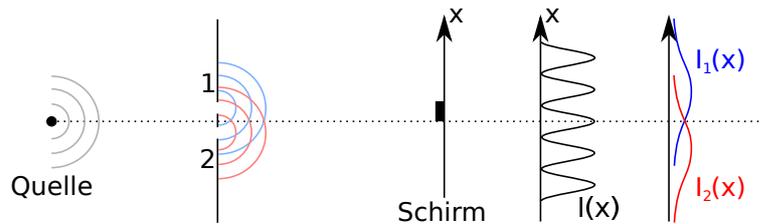


Abbildung 3.3: Doppelspaltexperiment mit klassischen Wellen und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung

- Wenn die Spaltbreite $d \ll \lambda$, dann werden an den beiden Öffnungen zwei Kugelwellen erzeugt (Huygens'sches Prinzip).
- **Amplituden** $h(x)$ (Höhe der Wasserwelle bzgl. der ruhenden Wasseroberfläche) oszillieren, können sowohl positive als auch negative Werte annehmen.
- Detektor misst **Intensität** der Welle $\boxed{I(x) = |h(x)|^2}$, man kann $h(x) \sim e^{ikx}$ komplex wählen → $h_{\text{phys}} = \text{Re } h$.
- Bei abgedecktem Loch $I_1(x) = |h_1(x)|^2$, $I_2(x) = |h_2(x)|^2$
- Amplituden addieren sich: $h(x) = h_1(x) + h_2(x)$
- Intensität:

$$I(x) = |h(x)|^2 = |h_1(x) + h_2(x)|^2 \quad (3.3)$$

$$= |h_1(x)|^2 + |h_2(x)|^2 + 2\text{Re } h_1^*(x)h_2(x) \quad (3.4)$$

$$= I_1(x) + I_2(x) + 2 \underbrace{\cos(\varphi_1 - \varphi_2)}_{\text{relative Phase der Teilwellen}} \sqrt{I_1 I_2} \quad \left| \quad I_i = |I_i| e^{i\varphi_i} \quad (3.5)$$

es gilt offensichtlich

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad (3.6)$$

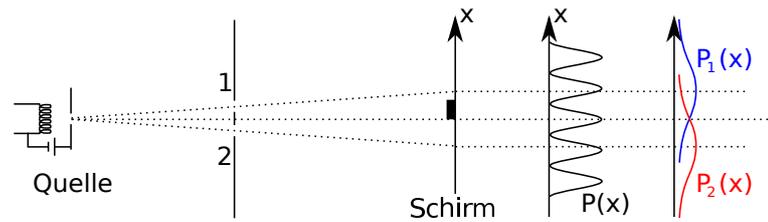


Abbildung 3.4: Doppelspaltexperiment mit Elektronen (Photonen) und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung

3. Elektronen (Photonen) am Doppelspalt

- Detektion: wie bei 1: „Teilchen“, $P(x) = \frac{N(x)}{N}$
- Beobachtung: wenn eines der Löcher abgedeckt wird: wie bei 1
- wenn beide Löcher offen sind, so erscheint Interferenz! → „Wellen“
- Wahrscheinlichkeitsverteilung entspricht Intensität. Quadrat einer Amplitude:

$$\boxed{P(x) = |\Psi(x)|^2} \quad (3.7)$$

- $\Psi(x)$: Wahrscheinlichkeitsamplitude, Wellenfunktion
- hier: $\Psi(x)$ tatsächlich komplex! Im Allgemeinen nicht direkt beobachtbar.
- Interferenz:

$$P(x) = |\Psi(x)|^2 = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \quad (3.8)$$

$$= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 + 2\text{Re} \Psi_1^*(x)\Psi_2(x) \quad (3.9)$$

$$= P_1(x) + P_2(x) + 2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \sqrt{P_1 P_2} \quad \left| \Psi_i = |\Psi_i| e^{i\varphi_i} \right. \quad (3.10)$$

Diskussion

1. klassische Teilchen: müssten diese nicht auch interferieren? → im Prinzip ja, aber: die de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$ ist für makroskopische Objekte sehr klein
2. klassisch: „Teilchen“ kommt **entweder** durch Loch 1 **oder** durch Loch 2 zum Schirm → $P = P_1 + P_2$

→ ist aber nicht der Fall (Gleichung 3.10), d. h. diese Aussage gilt hier nicht mehr!

Wieso nicht „hinschauen“ (messen), welchen Weg das Teilchen nimmt? → wenn man dies tut (z. B. Detektor bei den Löchern), dann verschwindet die Interferenz → $P = P_1 + P_2$

Grund: Messung des Weges (Ort) stört die Bewegung des Elektrons. Im Gegensatz zur klassischen Physik ist diese Limitierung **grundsätzlicher Natur**, d. h. es ist prinzipiell unmöglich, den Weg der Elektronen zu bestimmen **und** gleichzeitig Interferenz zu messen.

→ Heisenberg'sche Unschärferelation

3.2. Die Wellenfunktion

PLANCK, EINSTEIN:

$$E = h\nu = \underbrace{\hbar}_{h/2\pi} \quad (3.11)$$

DE-BROGLIE:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (3.12)$$

Gleichung 3.11 gilt auch für massive Teilchen, im nicht-relativistischen Fall gilt: $\vec{p} = m\vec{v}$ und $E = \frac{p^2}{2m}$. Deshalb gilt:

$$E = \hbar\omega = \begin{cases} \hbar ck & \text{für Photonen } (m = 0) \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & \text{für Elektronen } (m > 0) \rightarrow \text{Materiewelle} \end{cases} \quad (3.13)$$

freie Teilchen \rightarrow ebene Wellen

$$\Psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = C e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} \quad (3.14)$$

Interpretation Ψ : Wahrscheinlichkeitsamplitude, d. h. Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.15)$$

für ebene Wellen:

$$P(\vec{r}, t) = |C|^2 = \text{const}$$

Lege Normierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung fest:

$$\int_V d^3r P(\vec{r}, t) = 1 \quad (\text{für alle } t) \quad (3.16)$$

$$\Rightarrow |C|^2 V = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (\text{Phase irrelevant}) \Rightarrow P(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} = \text{const} \quad (3.17)$$

$V' < V$:

$$P_{V'} = \frac{V'}{V}$$

Zusammenfassend

1. ebene Welle hat einen wohldefinierten Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$
2. Ort des Teilchens ist völlig unbestimmt (Wahrscheinlichkeit für Ort des Teilchens ist gleichmäßig über den Raum verteilt)

3.3. Wellenpakete

Wie beschreibt man ein Teilchen, welches einen genauer definierten Aufenthaltsort besitzt?

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \underbrace{\hat{\Psi}(\vec{k})}_{\text{FT von } \Psi(\vec{r}, t=0)} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \underbrace{\frac{\hbar k^2}{2m}}_{\omega(\vec{k})} t)} \quad (3.18)$$

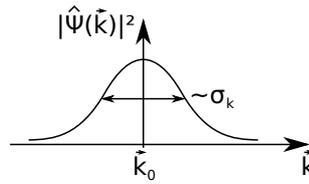


Abbildung 3.5: Gauß'sches Wellenpaket

Gauß'sches Wellenpaket

$$\hat{\Psi}(\vec{k}) = A e^{-(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/4\sigma_k^2} \quad (3.19)$$

berechne $\Psi(\vec{r}, t)$ bzw. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ durch quadratisches Ergänzen (\rightarrow Übung)
Ergebnis in 3D:

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)}\right)^{3/2} e^{-(\vec{r}-\vec{v}t)/2\sigma(t)^2} \quad (3.20)$$

Diskussion

- Wellenpaket bewegt sich

$$\langle \vec{r} \rangle = \int d^3r \vec{r} P(\vec{r}, t) = \vec{v}t$$

mit

$$\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} = \left. \frac{\partial \omega(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right|_{\vec{k}_0} \quad \text{Gruppengeschwindigkeit} \quad (3.21)$$

- Wellenpaket im Ortsraum ist ebenfalls Gauß-Funktion, bei $t = 0$:

$$\sigma(0) = \frac{1}{2\sigma_k} \quad (3.22)$$

- „Zerfließen“ des Wellenpakets ($t > 0$):

$$\sigma(t)^2 = \sigma(0)^2 + \left(\frac{\hbar t}{2\sigma(0)m}\right)^2 > \sigma(0)^2 \quad (3.23)$$

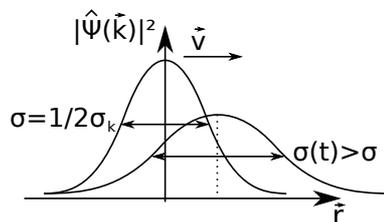


Abbildung 3.6: Gauß'sches Wellenpaket im Ortsraum zerfließt mit der Zeit

3.4. Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Fouriertransformierte in 3.18 erhält Quadratnorm (Parseval-Theorem)

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t = 0)|^2 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |\hat{\Psi}(\vec{k})|^2 \quad (3.24)$$

mit $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ folgt:

$$1 = \int \underbrace{d^3r |\Psi(\vec{r}, t = 0)|^2}_{P\text{-Verteilung des Ortes}} = \int \underbrace{\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\hat{\Psi}(\vec{p})|^2}_{P\text{-Verteilung des Impulses}} \quad (3.25)$$

$$\Rightarrow W(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} |\Psi(\vec{p})|^2 = \frac{|A|^2}{(2\pi\hbar)^3} e^{-(\vec{p}-\vec{p}_0)^2/4\hbar^2\sigma_k^2} \quad (3.26)$$

ist Wahrscheinlichkeitsverteilung im Impulsraum

$P(\vec{r})\Delta V = |\Psi(\vec{r})|^2\Delta V$: Wahrscheinlichkeit, Teilchen im Volumen ΔV um \vec{r} zu finden.

$W(\vec{p})\Delta V_p$: Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen einen Impuls im Bereich ΔV_p um \vec{p} hat.

Mittelwerte von \vec{r} :

$$\langle \vec{r} \rangle = \int d^3r P(\vec{r})\vec{r} = \vec{v}t = \frac{\vec{p}_0}{m}t$$

Schwankungsquadrat:

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &:= \langle (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \rangle = \sigma(0)^2 + \left(\frac{\hbar t}{2\sigma(0)m} \right)^2 \geq \sigma(0)^2 \\ &\Rightarrow \boxed{\Delta x \geq \sigma} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Mittelwert von \vec{p} :

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} \rangle &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} W(\vec{p})\vec{p} = \int \underbrace{\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} (\vec{p} - \vec{p}_0)}_{=: \vec{p}'} W(\vec{p}) + \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p}_0 W(\vec{p}) = \vec{p}_0 = \hbar\vec{k}_0 \\ &= 0, \text{ da } \int x e^{-x^2} dx = 0 \end{aligned}$$

Schwankungsquadrat für \vec{p} :

$$\begin{aligned} \Delta p^2 &= \langle (\vec{p} - \langle \vec{p} \rangle)^2 \rangle = \hbar^2\sigma_k^2 \\ &\Rightarrow \boxed{\Delta p = \hbar\sigma_k = \frac{\hbar}{2\sigma}} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Aus 3.27 und 3.28 folgt dann:

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation} \quad (3.29)$$

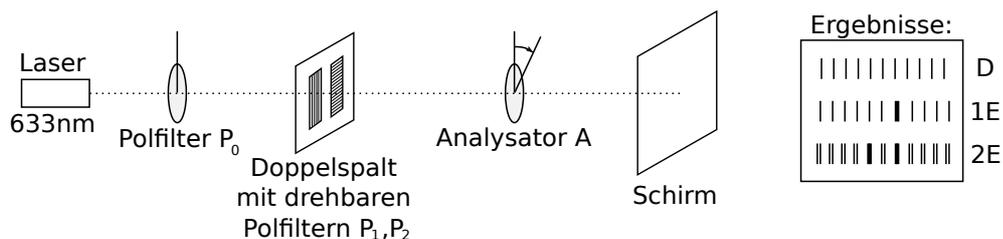


Abbildung 3.7: Aufbau zum „Quantenradierer“

3.4.1. Analogieversuch zum „Welcher-Weg“-Experiment: „Quantenradierer“

Beobachtung

- Wenn $P_1 \parallel P_2$: Doppelspaltinterferenzmuster (D) ist beobachtbar; wenn $P_1 \parallel P_2 \perp A$ oder $\perp P_0$ verschwindet gesamte Intensität wegen Absorption.
- Wenn $P_1 \perp P_2$ und eines der beiden $\parallel P_0$ ist nur Einzelspaltinterferenz eines Spaltes (1E) beobachtbar für beliebige Stellung von A .

Erklärung Der Spalt $\perp P_0$ lässt keine Intensität durch.

- Wenn $P_1 \perp P_2$ und keines der beiden $\parallel P_0$ ist nur Einzelspaltinterferenz von beiden Spalten (2E) zu beobachten.

Erklärung Durch Messung der Polarisation der Lichtwelle auf dem Schirm wäre „Welcher-Weg“-Information vorhanden \rightarrow Komplementarität verlangt, dass Interferenz der Doppelspalte verschwindet.

- Wenn $P_1 \perp P_2$ und keines der beiden $\parallel P_0$, und A unter $\pm 45^\circ$ zu P_1 und P_2 , dann erscheint das Doppelspaltinterferenzmuster wieder mit reduzierter Intensität.

Erklärung hinter A ist „Welcher-Weg“-Information wieder gelöscht („Quantenradierer“)

Bemerkung Die Polarisation der elektromagnetischen Welle entspricht dem Spin der Photonen (später mehr dazu).

Achtung hier *kein* Quantenexperiment, sondern durch klassische Theorie der elektromagnetischen Wellen beschreibbar, aber das Experiment wurde auch schon mit gleichem Ergebnis mit Einzelphotonen (inzwischen auch mit Atomen) durchgeführt.

Kapitel 4.

Bohr'sches Atommodell

4.1. Grundlegende Experimente

- Bereits beim Photoeffekt gesehen: Spektrum der Hg-Hochdrucklampe zeigt scharfe Linien
- Röntgenspektrum: scharfe Linien, z. B. k_α

4.1.1. Spektrallinien des Wasserstoffs

Balmerserie Aufbau: Glimmentladungsröhre, gefüllt mit Wasserstoff, Energieübertrag durch e^- -Stöße führen zur Dissoziation der H_2 -Moleküle \rightarrow atomarer Wasserstoff, und Anregung zum Leuchten.

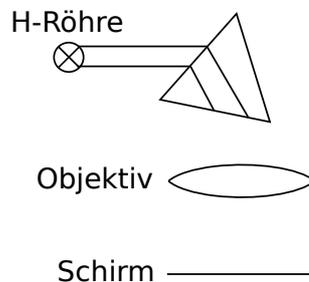


Abbildung 4.1: Aufbau zur Messung der Spektrallinien

Beobachtung 4 Linien im sichtbaren Bereich

Farbe	Bezeichnung	λ [nm]
rot	H_α	656
blau	H_β	486
violett I	H_γ	434
violett II	H_δ	410

Gleicher Versuch mit Hg und Gitterspektrometer: gelbe Linie ist aufgespalten, $\Delta\lambda = 2$ nm ($\lambda_1 = 577$ nm, $\lambda_2 = 579$ nm). Für Na ergibt sich $\Delta\lambda = 0.6$ nm ($\lambda_1 = 589.99$ nm, $\lambda_2 = 590.59$ nm)

zu klären

- Warum gibt es diskrete Linien?
- Warum genau diese Wellenlängen?

Für Wasserstoff: empirische Formel von BALMER: $\lambda = \frac{m^2}{m^2-4}G$ mit $m = 3, 4, \dots$ und $G = 364.56$ nm.

Umschreibung der Balmer-Formel

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (4.1)$$

mit $R_H = \frac{4}{G} = 10967758.1 \text{ m}^{-1}$

Grenzwellenlänge der Balmer Serie

$$\frac{1}{\lambda_{\infty}} = \frac{R_H}{4} \quad \text{mit} \quad m = \infty \quad \Rightarrow \quad \lambda_{2,\infty} = 364.56 \text{ nm} \hat{=} h\nu = 3.4 \text{ eV} \quad (4.2)$$

Vorhersage weiterer Linien außerhalb des sichtbaren Bereichs durch *Rydberg-Ritz-Formel*:

$$\frac{1}{\lambda_{n,m}} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \text{mit} \quad n < m \in \mathbb{N} \quad (4.3)$$

$n = 1$: **Lyman-Serie (UV)**

$m = 2$ 121.6 nm

$m = 5$ 95 nm

$\lambda_{1,\infty}$ 91.1 nm $\hat{=} h\nu = 13.6 \text{ eV}$

$n = 3$: **Paschen-Serie (IR)**

$m = 4$ 1875 nm

$\lambda_{3,\infty}$ 820 nm $\hat{=} h\nu = 1.51 \text{ eV}$

$n = 4$: **Brackett-Serie (fernes IR)**

$\lambda_{4,\infty}$ 1458 nm $\hat{=} h\nu = 0.85 \text{ eV}$

Ritz'sches Kombinationsprinzip Durch Addition und Subtraktion der Frequenzen (inverse Wellenlänge) der bekannten Spektrallinien findet man weitere Spektrallinien

2010-05-07

Versuch: Messung der Na-Doppellinie

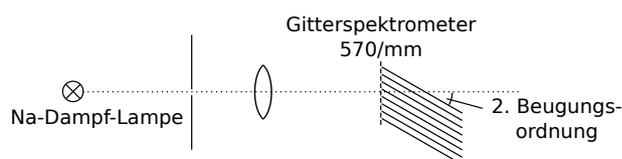


Abbildung 4.2: Messung der gelben Na-Doppellinie mit Hilfe eines Gitterspektrometers

Ritz'sches Kombinationsprinzip

4.1.2. Franck-Hertz-Versuch

Aus der Kathode werden e^- emittiert und durch Sägezahnspannung zum Gitter G beschleunigt. Sie können nur zur Anode A gelangen, wenn ihre kinetische Energie ausreicht um U_{Brems} zu überwinden. Messe den Strom $I_{K \rightarrow A}$ durch Messverstärker.

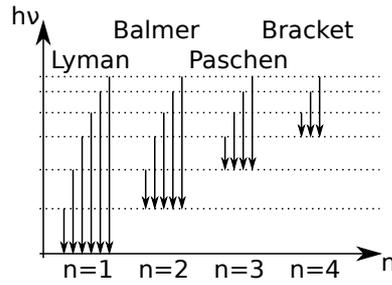


Abbildung 4.3: Ritz'sches Kombinationsprinzip → Vermutung gleicher, diskreter Energieniveaus der \$e^-\$ im Atom

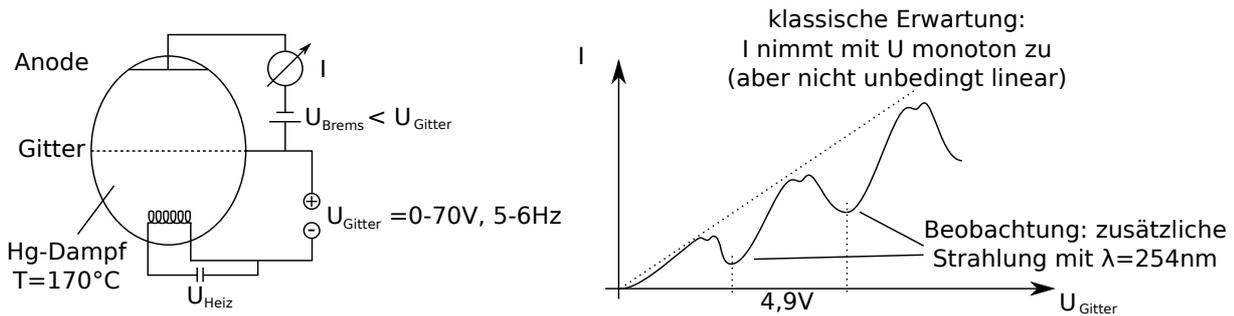


Abbildung 4.4: Aufbau des Franck-Hertz-Versuchs und dessen Ergebnis

Interpretation Haben die \$e^-\$ die Energie \$4.9\text{eV}\$ erreicht, verlieren die die kinetische Energie durch Anregung eines Hg-Atoms. Das Hg-Atom strahlt die (bekannte) Linie mit \$\lambda = 254\text{nm}\$ aus \$\hat{=} h\nu = 4.9\text{eV}\$. \$e^-\$, die Stoßanregungen gemacht haben, gelangen nicht mehr nach \$A \rightarrow I\$ sinkt. Wenn \$E_{\text{kin}} = 9.8\text{eV}\$ erreicht, dann kann jedes \$e^-\$ zwei Hg-Atome anregen \$\rightarrow\$ im Atom gibt es diskrete Energieniveaus: zum Übergang ist ein bestimmter Energiebetrag notwendig. Anregungsenergie kann durch elektromagnetische Strahlung abgegeben werden \$\rightarrow\$ Spektrallinien sind Übergänge zwischen Energieniveaus. Maximale Energie ist die Ionisierungsenergie.

4.2. Bohr'sche Postulate

1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen um positiv geladenen Kern mit diskreten Energien (\$E_n\$, strahlungslos) \$\rightarrow\$ stationäre Zustände (Erweiterung des Rutherford'schen Atommodells, nach welchem Kreisbahnen mit beliebigen Radien und Energien erlaubt waren)
2. Übergänge zwischen stationären Zuständen sind mit Emission oder Absorption (Versuch: Resonanzfluoreszenz) eines Photons der Energie \$h\nu = E_{n_1} - E_{n_2}\$ verbunden.
3. Drehimpuls auf stationären Bahnen ist diskret (gequantelt)

$$J = \int p \, dx = n\hbar \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}$$

Anmerkung Bohr'sches Atommodell veraltet, aber Zusammenhänge zwischen Kernladungszahl \$Z\$, den Energien \$E_n\$, den Radien \$r_n\$ behalten auch bei quantenmechanischer Behandlung Gültigkeit!

Bestimmung der Energien \$E_n\$, der Radien \$r_n\$ und Zusammenhang mit \$R_H\$ aus Coulomb-Gesetz, Energieerhaltung und dem 3. Postulat (Drehimpulsquantisierung)

Gesamtenergie eines e^- im Coulombpotential

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

für Wasserstoffähnliche Atome mit Kernladungszahl Z aber nur $1e^-$ (H: $Z = 1$)

- Auf stationären Bahnen gilt: $|F_{\text{Coulomb}}| = |F_{\text{Zentrifugal}}|$
- Virialtheorem: $E_{\text{pot}} = -2E_{\text{kin}}$
- Drehimpulserhaltungssatz und 3. Postulat $J = n\hbar$:

$$\boxed{r_n = \frac{J}{mv} = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{Zme^2}} \quad \text{Radius} \quad (4.4)$$

$$\boxed{E_{\text{ges},n} = -\frac{Z^2 e^4 m}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}} \quad \text{Energie} \quad (4.5)$$

$$\Rightarrow r_n \propto \frac{1}{Z} \quad , \quad r_n \propto n^2 \quad , \quad r_n \propto \frac{1}{m} \quad (4.6)$$

$$\Rightarrow E_n \propto Z^2 \quad , \quad E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad , \quad E_n \propto m \quad (4.7)$$

2010-05-10

Bemerkung

1. Feinstrukturkonstante

$$\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \quad (4.8)$$

$$r_n = \frac{\hbar}{\alpha m c Z} n^2 \quad , \quad E_{\text{ges},n} = -\frac{\alpha^2 m c^2 Z^2}{2n} \quad (4.9)$$

2. Bisher betrachtet: Näherung mit unendlich schwerem Kern

a) Schwerpunktsystem

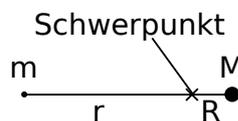


Abbildung 4.5: Zur Berechnung im Schwerpunktsystem

es gilt: $mr = MR$, $\frac{R}{r} = \frac{m}{M} =: \mu \ll 1$

daraus ergibt sich: r_n unverändert $(E_{\text{ges},n})_S = \frac{E_{\text{ges},n}}{1+\mu}$

für H-Atom gilt $\mu \approx \frac{1}{1800} < 10^{-3}$

- b) Betrachtung im Ruhesystem des Kerns $r_{\text{relativ}} = r + R$, $v_{\text{relativ}} = v + V$ mit reduzierter Masse $m_R = \frac{m}{1+\mu} = \frac{mM}{m+M}$

daraus ergibt sich:

$$(r_n)_{\text{rel}} = \frac{\hbar}{\alpha m_R c} n^2 \frac{1}{Z^2}$$

$$(E_{\text{ges},n})_{\text{rel}} = -\frac{\alpha^2 m_R c^2}{2} \frac{1}{n^2} Z^2$$

3. Zahlenwerte

$$(E_{\text{ges},n})_S = -\underbrace{\frac{\alpha^2 m c^2}{2(1+\mu)}}_{E_{1,H}} \frac{Z^2}{n^2}$$

wobei $E_{1,H} = -13.59 \text{ eV}$ die Ionisierungsenergie des Wasserstoffs ist.

Für größere wasserstoffähnliche Atome gilt

- $E_1(Z) = Z^2 E_{1,H}$
- $R_H = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 \hbar^3 c (1+\mu)} = 10967758.1 \text{ m}^{-1}$
- Radius des H-Atoms: $a_0 := r_1 = r(Z=1, n=1) = \frac{\hbar}{\alpha m c} = 0.529 \text{ \AA} \approx 0.5 \text{ \AA}$

4.3. Isotopieverschiebung, Spektren H-ähnlicher Atome, myonische Atome, Rydbergatome

4.3.1. Isotopieverschiebung

Spektrallinien der Isotope mit gleichem Z aber unterschiedlichem A sind leicht verschieden, da μ verschieden.

Beispiel

Wasserstoff H: $Z = 1$, $A = 1$

Deuterium D: $Z = 1$, $A = 2$

$\Rightarrow \mu = \frac{m}{M} \Rightarrow \mu_D = 2\mu_H$ (\rightarrow Übungsaufgabe)

4.3.2. H-ähnliche Atome

z. B. He^+ , Li^{++} , Be^{+++} , U^{91+} , ...

$$\frac{1}{\lambda_x} = Z^2 \frac{1}{\lambda_H} \frac{1+\mu_H}{1+\mu_x}$$

4.3.3. Myonische Atome

Ersetze e^- durch Myon μ^-

- μ^- hat ebenfalls negative Elementarladung ($Q_{\mu^-} = -e$), aber $m_\mu = 207m_e$.
- μ^- entsteht bei Zerfällen von Pionen, Lebensdauer $\approx 2 \mu\text{s}$, zerfällt dann weiter in e^- und Neutrinos. Können für kurze Zeit eingefangen werden und *myonische Atome* bilden.

- $r_{n,\mu} \approx r_n \frac{m_e}{m_\mu} \Rightarrow$ 200 mal kleiner.
- Photonenenergien $h\nu_\mu \approx h\nu_e \frac{m_\mu}{m_e} \Rightarrow$ 200 mal größer \rightarrow Röntgen- und γ -Strahlung.
- Da μ^- näher an den Kern herankommt, kann dadurch Ladungsverteilung im Kern studiert werden.
- Bemerkung: In manchen Büchern wird das Myon „ μ -Meson“ genannt, obwohl es sich nicht um ein Meson in üblicher Klassifizierung handelt sondern um ein Lepton.

4.3.4. Rydbergatome

Rydbergatome sind hoch angeregte Atome (d. h. n ist groß) $\rightarrow r_n$ sehr groß $\approx 10^{-5}$ m \rightarrow mikroskopisch nachweisbar \rightarrow Übungsaufgabe

4.4. Sommerfeld'sche Erweiterung, relativistische Korrekturen und Mängel des Bohr'schen Atommodells

1. Wie bei Kepler gibt es nicht nur Kreisbahnen sondern auch Ellipsenbahnen. Energie bleibt gleich, aber Drehimpuls anders \rightarrow Einführung einer zweiten Quantenzahl, welche die Form der Bahn und Drehimpuls beschreibt \rightarrow es gibt mehrere stationäre Zustände mit gleicher Energie \rightarrow *Entartung*

2. Relativistische Korrekturen (Bohr-Sommerfeld relativistisch):

Auch in E_{ges} taucht die Drehimpulsquantenzahl j auf:

Für H-Atom:

$$E_{\text{ges}} \approx \underbrace{m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2}\right)}_{\text{Bohr-Sommerfeld}} - \underbrace{\frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)}_{\text{Korrekturen}} \pm \dots \mathcal{O}(\alpha^6)$$

Beispiel dafür ist die Aufspaltung der gelben Na-Doppellinie.

3. Mängel des Bohr'schen Atommodells

- Verquickung von klassischer Physik und Quantenphysik ohne Rechtfertigung
- Für größere Atome und Moleküle (ab $2e^-$) quantitativ falsch
- magnetische Eigenschaften der Atome werden falsch beschrieben

\Rightarrow vollständig neue Beschreibung durch Quantenmechanik nötig

Kapitel 5.

Die Schrödingergleichung

Ziel Wellengleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Psi(\vec{r}, t)$
zur Erinnerung: $P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$

5.1. Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Wellenpaket

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\Psi}(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar} \quad (5.1)$$

wobei $\hat{\Psi}(\vec{p})$ die Fourier-Transformierte von $\Psi(\vec{r}, t = 0)$, d.h. durch die Anfangsbedingung $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ vollständig bestimmt.

Um die Wellengleichung zu finden, bilde die Ableitung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\Psi}(\vec{p}) \left(-\frac{ip^2}{2m\hbar} \right) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar} \quad (5.2)$$

Idee:

$$\vec{\nabla} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = \frac{i\vec{p}}{\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \quad (5.3)$$

$$\nabla^2 e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = -\frac{p^2}{\hbar^2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \quad (5.4)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \dots = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\Psi}(\vec{p}) \left(-\frac{i}{2m\hbar} \right) (-\hbar^2 \nabla^2) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar} \quad (5.5)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \underbrace{\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\Psi}(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}}_{= \Psi(\vec{r}, t)} \quad (5.6)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad \Big| \cdot i\hbar \quad (5.7)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t)} \quad \text{zeitabhängige Schrödingergleichung für freie Teilchen} \quad (5.8)$$

Bemerkung

1. lineare, homogene, partielle Differentialgleichung für $\Psi(\vec{r}, t)$
2. erste Ordnung in $\frac{\partial}{\partial t} \equiv \partial_t$
3. Anfangsbedingung $\Psi(\vec{r}, 0)$ bestimmt die Lösung vollständig.
4. Weshalb ist die Gleichung 1. Ordnung? klassisch (Newton): $\dot{x} = \frac{p}{m}$, $\dot{p} = F(x) \Rightarrow \ddot{x} = \frac{F(x)}{m}$
Grund: $\Psi(\vec{r}, 0) \longleftrightarrow \hat{\Psi}(\vec{p}) \Rightarrow \Psi$ enthält bereits Informationen über Ort und Impuls!

5. Separationsansatz: $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\chi(t)$ in 5.8 einsetzen liefert

$$\Rightarrow \varphi i\hbar \partial_t \chi = \chi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 \varphi \quad \Big| : \chi \varphi \quad (5.9)$$

$$i\hbar \partial_t \ln \chi(t) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla^2 \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} =: E = \text{const} \quad (5.10)$$

$$\ln \chi(t) = -\frac{iE}{\hbar} t + \text{const} \Rightarrow \chi(t) = C_1 e^{-iEt/\hbar} \quad (5.11)$$

und

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})} \quad \text{zeitunabhängige Schrödingergleichung für freie Teilchen} \quad (5.12)$$

mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \varphi(\vec{r}) = C_2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

5.2. Einführung der Schrödingergleichung über die Hamilton-Jacobi-Theorie

(→ Nolting 5/1, Kapitel 2)

- auch hier: induktives „Erraten“, keine Herleitung!
- Erinnerung: analytische Mechanik: kanonische Transformation

$$\{q_i\}, \{p_i\} \rightarrow \{q'_i\}, \{p'_i\} \quad i = 1, \dots, s$$

erzeugende Funktion: $S(\{q_i\}, \{p'_i\}, t)$ mit

$$p_j = \frac{\partial S}{\partial q_j} \quad (5.13)$$

$$q'_j = \frac{\partial S}{\partial p'_j} \quad (5.14)$$

$$H' = H + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.15)$$

Wähle S so, dass $q'_j = \text{const}$, $p'_j = \text{const}$ für $j = 1, \dots, s$

Erfüllt, falls $H' = 0$, d. h. mit 5.15 und 5.13

$$H\left(q_1, \dots, q_s, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (5.16)$$

hier: einzelnes Teilchen, konservatives Kraftfeld

$$H = T + V = E = \text{const} \quad (5.17)$$

kinetische Energie $T = \frac{p^2}{2m}$, Potential $V = V(\vec{r})$

Separationsansatz

$$S(\vec{r}, \vec{p}', t) = W(\vec{r}, \vec{p}') - Et \quad (5.18)$$

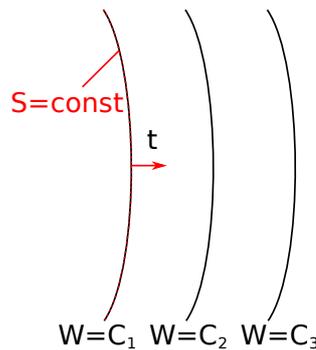
Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(\vec{r}, \vec{\nabla}W) = E \quad (5.19)$$

mit 5.17:

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla}W)^2 = E - V(\vec{r}) \quad (5.20)$$

$\vec{p}' = \text{const}$, $W = \text{const}$ definiert Flächen im Raum, über die sich Wellenfronten $S = \text{const}$ mit der Zeit hinwegschieben.

Abbildung 5.1: Wellenfronten bewegen sich über die Flächen mit $\vec{p}' = \text{const}$ und $W = \text{const}$ hinweg**Geschwindigkeit der Wellenfronten**

$$0 = dS = \vec{\nabla}W \cdot d\vec{r} - E dt \quad (5.21)$$

$$\vec{u} = \frac{d\vec{r}}{dt}, \quad \vec{u} \cdot \underbrace{\vec{\nabla}W}_{=\vec{p}'} = E$$

$$\vec{u} \parallel \vec{\nabla}W \quad \Rightarrow \quad u = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V(\vec{r}))}} \quad (5.22)$$

ein 5.20 einsetzen:

$$\boxed{(\vec{\nabla}W)^2 = \frac{E^2}{u^2}} \quad (5.23)$$

zurück zu S mit 5.18

$$\boxed{(\vec{\nabla}S)^2 = \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^2} \quad \text{Wellengleichung der klassischen Mechanik (Wirkungswellen)} \quad (5.24)$$

Analogie zur Optik

$$\boxed{\nabla^2 \varphi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0} \quad (\text{Wellenoptik}) \quad (5.25)$$

hier: $u = \frac{c}{n}$, n : Brechungsindex, c : Vakuumlichtgeschwindigkeit

klassische Mechanik		geometrische Optik
W		$\hbar \frac{k}{n} L$
E		$\hbar \frac{k}{n} c$
$\vec{p} = \vec{\nabla} W$		$\hbar \frac{k}{n} \vec{\nabla} L$ ebene Welle, $n=1 \rightarrow \hbar k$
$\Psi \sim e^{i(W-Et)\hbar}$	\leftarrow	$\varphi \sim e^{i\frac{k}{n}(L-ct)}$
Teilchentrajektorie	\longleftrightarrow	Lichtstrahl
Wellenmechanik (?)	\longrightarrow	Wellenoptik (5.25)

- Fall $n = \text{const}$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

mit $\omega = uk = \frac{c}{n}k$

- Fall $n = n(\vec{r})$

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi_0(\vec{r}) e^{i\left[\frac{k}{n}(L(\vec{r}) - ct)\right]}$$

wobei φ_0 jetzt schwach ortsabhängig ist, und $L(\vec{r})$ den Lichtweg, bzw. Eikonal bezeichnet. Für eine ebene Welle gilt: $\vec{L}(\vec{r}) = \hat{k} \cdot \vec{r}$

Durch Einsetzen in 5.25 und durch die Annahme, dass sich $n(\vec{r})$ auf der Längenskala von $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ nur schwach ändert, erhält man

$$\boxed{(\vec{\nabla} L)^2 = n^2 = \frac{c^2}{u^2}} \quad \text{Eikonalgleichung} \quad (5.26)$$

Vergleiche geometrische Optik 5.26 und klassische Mechanik 5.23:

$$\underbrace{\nabla^2 \varphi}_{\Psi} + \underbrace{\frac{1}{u^2}}_{\frac{2m(E-V)}{E^2}} \underbrace{\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}}_{-\left(\frac{ck}{n}\right)^2 \varphi} = \underbrace{\frac{E^2}{\hbar^2}}_{\frac{E^2}{\hbar^2}} \Psi$$

mit $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\frac{k}{n}c \rightarrow -\frac{iE}{\hbar}$.

$$\Rightarrow \nabla^2 \Psi + \frac{2m^2}{\hbar} (E - V) \Psi = 0$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi = E \Psi} \quad \text{zeitunabhängige Schrödingergleichung} \quad (5.27)$$

2010-05-12

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad , \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad , \quad E \Psi = i\hbar \frac{\partial E}{\partial t}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi} \quad \text{zeitabhängige Schrödingergleichung} \quad (5.28)$$

Definition Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (5.29)$$

damit:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi} \quad \text{zeitabhängige Schrödingergleichung} \quad (5.30)$$

$$\boxed{\hat{H}\Psi = E\Psi} \quad \text{zeitunabhängige Schrödingergleichung} \quad (5.31)$$

Diskussion

1. \hat{H} bildet Funktion Ψ auf neue Funktion $\hat{H}\Psi$ ab. \hat{H} ist ein linearer Operator auf dem Raum der Funktionen Ψ_n :

$$\hat{H}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{H}\Psi_1 + c_2\hat{H}\Psi_2$$

später: \hat{H} ist hermitescher Operator auf dem Hilbertraum \mathcal{H}

2. 5.30 ist ein Anfangswertproblem, d. h. für gegebenes \hat{H} erhalte aus $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ für alle t
3. 5.31 ist ein Eigenwertproblem, d. h. \hat{H} gegeben, Ψ und E gesucht. Später: \hat{H} hermitesch \Rightarrow 5.31 lösbar mit $E \in \mathbb{R}$

Eigenvektoren und Eigenwerte (Ψ_n, E_n) , $n = 1, 2, \dots$, Eigenvektoren Ψ_n bilden eine Basis von \mathcal{H}

4. freies Teilchen ($V = 0$) $\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
5. \hat{H} kann aus klassischer Hamiltonfunktion $H(\vec{r}, p) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ erhalten werden durch $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$
6. im allgemeinen kann 5.30 für $V(\vec{r}, t)$ mit

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}, t) \quad (5.32)$$

behandelt werden (\rightarrow Anfangswertproblem)

7. nur falls $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, d. h. falls $V = V(\vec{r})$ gelangt man über den Separationsansatz

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})\chi(t) \quad (5.33)$$

auf 5.31 mit $\chi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

8. in diesem Fall ($\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$) falls 5.31 vollständig gelöst, d. h. $\hat{H}\Psi_n = E\Psi_n$ mit allen (Ψ_n, E_n) , $n = 1, 2, \dots$ bekannt, dann ist auch 5.30 gelöst.

entwickle

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t)\Psi_n(\vec{r}) \quad (5.34)$$

in 5.30:

$$i\hbar \sum_n \dot{c}_n \Psi_n = \sum_n c_n(t) \hat{H} \Psi_n = \sum_n c_n(t) E_n \Psi_n$$

$\sum_n (i\hbar\dot{c}_n - c_n E_n)\Psi_n = 0$, weil Ψ_n linear unabhängig (Eigenvektoren von \hat{H}), folgt

$$\Rightarrow i\hbar\dot{c}_n - c_n E_n = 0 \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad \iff \quad \dot{c}_n = -i\frac{E_n}{\hbar}c_n \quad (5.35)$$

Lösung:

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (5.36)$$

$c_n(0)$ folgt aus Anfangsbedingung

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n(0)\Psi_n(0) \quad \rightarrow \quad c_n(0) \quad (5.37)$$

die allgemeine Lösung folgt aus 5.34:

$$\boxed{\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(0)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(\vec{r})} \quad (5.38)$$

9. $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$: $\varphi_n(\vec{r})$ beschreiben *stationäre Zustände*.

aus 5.33 folgt: $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_n(\vec{r})e^{i\frac{E_n t}{\hbar}}$

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi_n(\vec{r})|^2 \underbrace{\left| e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \right|^2}_{=1} = |\Psi_n(\vec{r})|^2 \quad (5.39)$$

5.3. Normierbarkeit, Erwartungswerte

Interpretation der Wellenfunktion: Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad \text{ist Wahrscheinlichkeitsverteilung} \quad (5.40)$$

deswegen:

$$\int d^3r P(\vec{r}, t) = \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (5.41)$$

allerdings reicht auch, wenn

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = A \quad (5.42)$$

existiert.

Sprechweise $\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ existiert: $\Psi(\vec{r}, t)$ quadratintegrierbar, dann definiere allgemein:

$$P(\vec{r}, t) = \frac{|\Psi(\vec{r}, t)|^2}{A} = \frac{|\Psi(\vec{r}, t)|^2}{\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2} \quad (5.43)$$

Bemerkung trotzdem sind damit z. B. ebene Wellen im unendlich ausgedehnten Raum (\mathbb{R}^3) nicht normierbar:

$$\int d^3r \underbrace{\left| e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right|^2}_{=1} \rightarrow \infty$$

Möglichkeit Box-Normierung

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \iff \int_V d^3r |\Psi|^2 = 1$$

Vorteil von 5.42: Ψ bilden komplexen Vektorraum \rightarrow Superpositionsprinzip: Ψ_1, Ψ_2 sind Lösungen der Schrödingergleichung $\Rightarrow \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2$ eine Lösung \rightarrow Interferenz.

Faktor A hat keine physikalische Bedeutung \rightarrow Wellenfunktionen $\Psi(\vec{r}, t)$ und $B\Psi(\vec{r}, t)$ beschreiben denselben Zustand, wobei $B = 0$ und unabhängig von \vec{r}, t .

Identifiziere Ψ mit $B\Psi$ ($B \neq 0$) als „Strahl“ im Vektorraum \mathcal{H} .

2010-05-14

Schrödingergleichungen:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{zeitabhängig, d. h. } \hat{H} = \hat{H}(t) \quad (5.44)$$

$$\hat{H} \Psi = E \Psi \quad \text{zeitunabhängig, d. h. } \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad (5.45)$$

Ψ : Wellenfunktion, *Zustand*. Lösungen von 5.45:

ψ_n : Eigenvektoren = Eigenzustände

E_n : Eigenwerte von \hat{H} = Eigenenergien

Zeitunabhängigkeit der Normierung

$$\frac{dA}{dt} = \frac{d}{dt} \int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{d}{dt} \int d^3r \Psi^* \Psi = \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) d^3r$$

zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi$$

komplex konjugiert:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V(\vec{r}, t) \Psi^*$$

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi|^2 = \frac{1}{i\hbar} \int \left[-\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V \Psi^* \right) \Psi + \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \right) \right] d^3r \quad (5.46)$$

$$V \Psi^* \Psi \equiv \Psi^* V \Psi - \frac{i\hbar}{2m} \int d^3r (\Psi \nabla^2 \Psi^* - \Psi^* \nabla^2 \Psi) \quad (5.47)$$

$$= \int d^3r \vec{\nabla} \cdot \underbrace{\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)}_{=: \vec{j}(\vec{r})} \quad (5.48)$$

$$= \int d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}) \quad (5.49)$$

$$\stackrel{\text{Gauß}}{=} \int_{\text{Rand}} d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{r}) = 0 \quad (\text{unendlich ausgedehntes Volumen} \rightarrow \text{ohne Rand}) \quad (5.50)$$

Lokal

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t))$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad \text{Kontinuitätsgleichung} \quad (5.51)$$

Erwartungswerte Ort:

$$\langle \vec{r} \rangle(t) = \int d^3r r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (5.52)$$

Beliebige Funktion des Ortes:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle(t) = \int d^3r f(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (5.53)$$

Falls Ψ nicht auf 1 normiert, aber quadratintegabel:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle(t) = \frac{\int d^3r f(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2}{\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2} \quad (5.54)$$

5.4. Die Wellenfunktion im Impulsraum

Wellenpaket: $\hat{\Psi}(\vec{p}) \xleftrightarrow{\text{FRT}} \Psi(\vec{r}, t=0)$

Wir können $\Psi(\vec{r}, t)$ für beliebige (feste) Zeit t in eine ebene Welle entwickeln (FT)

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \hat{\Psi}(\vec{p}, t) e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \quad (5.55)$$

$$\hat{\Psi}(\vec{p}, t) = \int d^3r \Psi(\vec{r}, t) e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \quad (5.56)$$

Daraus:

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2, \quad W(\vec{p}, t) = |\hat{\Psi}(\vec{p}, t)|^2$$

Parseval-Theorem der FT: $\Psi(\vec{r}, t)$ normiert $\iff \hat{\Psi}(\vec{p}, t)$ normiert
Erwartungswerte von $f(\vec{r})$ und $g(\vec{p})$:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle(t) = \int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 f(\vec{r}) \quad (5.57)$$

$$\langle g(\vec{p}) \rangle(t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\hat{\Psi}(\vec{p}, t)|^2 g(\vec{p}) \quad (5.58)$$

Wie berechnet man $\langle h \rangle$ für $h(\vec{r}, \vec{p})$ z.B. Energie, Drehimpuls? \rightarrow nächster Abschnitt.

5.5. Operatoren, der Kommutator, Unschärferelation

Versuche alle Erwartungswerte im Ortsraum (d. h. mit $\Psi(\vec{r}, t)$) zu berechnen. Wie erhält man $\langle \vec{p} \rangle$ (lasse t weg, t fest)

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} \rangle &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{|\hat{\Psi}(\vec{p})|^2}_{=\hat{\Psi}^* \hat{\Psi}} \vec{p} \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} \int d^3 \vec{r}' \int d^3 \vec{r} \Psi^*(\vec{r}') e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}'}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 \vec{r}' \int d^3 \vec{r} \Psi^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}) i\hbar \vec{\nabla} e^{-i\frac{\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}}\end{aligned}$$

partielle Integration (Gauß'scher Satz), Randterme=0

$$\begin{aligned}&= - \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 \vec{r}' \int d^3 \vec{r} \Psi^*(\vec{r}') i\hbar \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) e^{-i\frac{\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}} \\ &= - \int d^3 \vec{r}' \int d^3 \vec{r} \Psi^*(\vec{r}') i\hbar \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) \underbrace{\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\frac{\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}}}_{=\delta(\vec{r}-\vec{r}')} \\ &= \int d^3 \vec{r} \Psi^*(\vec{r}) (-i\hbar \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}) =: \langle -i\hbar \vec{\nabla} \rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \vec{p} \rangle = \int d^3 r \Psi^*(\vec{r}) \underbrace{(-i\hbar \vec{\nabla})}_{=\hat{\vec{p}}} \Psi(\vec{r})} \quad (5.59)$$

Impulsoperator:

$$\hat{\vec{p}} := i\hbar \vec{\nabla} \quad (5.60)$$

$\hat{\vec{p}}$ ist ein Operator, der auf Wellenfunktionen im Ortsraum wirkt. Allgemein in der Quantenmechanik: Messgrößen (Observablen) \longleftrightarrow Operatoren.

Beispiel

$$\hat{H} = H(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) = H(\vec{r}, \hat{\vec{p}})$$

Bemerkungen

1. $\vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$ Vektor $\Rightarrow \hat{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix}$ Vektor von Operatoren, die komponentenweise wirken.

2. Messgrößen (Observablen) entsprechen in der Quantenmechanik Operatoren, z. B:

Energie \hat{H}

Impuls $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$

Ort $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ gemeint: $\hat{\vec{r}}\Psi(\vec{r}, t) = \vec{r}\Psi(\vec{r}, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}, t)$

3. Eigenzustände Ψ eines Operators \hat{O} sind solche, in denen die jeweilige Messgröße *scharf* definiert ist.

$$\begin{aligned}\hat{O}\Psi &= \lambda\Psi \\ \Rightarrow \langle \hat{O}^2 \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \hat{O}^2 \Psi(\vec{r}) \\ &= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \lambda^2 \Psi(\vec{r}) \\ &= \lambda^2\end{aligned}$$

und damit

$$\langle \Delta \hat{O}^2 \rangle = \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0 \quad (5.61)$$

→ keine Schwankung → \hat{O} scharf definiert.

Beispiele

Energie • $\hat{O} = \hat{H}$, $\hat{H}\Psi = E\Psi$

- Ψ : Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung, stationäre Zustände
- Ψ hat feste Energie

Impuls • $\hat{O} = \hat{p}$, $\hat{p}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i} \Psi = p_i \Psi$ ($i = x, y, z$)

- ebene Wellen, $\Psi = C e^{i \frac{p_i r_i}{\hbar}}$

Ort • $\hat{O} = \hat{r}$, $\hat{r}\Psi(\vec{r}) = \vec{r}\Psi(\vec{r}) = \vec{r}_0\Psi(\vec{r})$ ($\vec{r}_0 = \text{const}$)

- $\Psi(\vec{r}) = C \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

5.5.1. Der Kommutator

klassische Mechanik (Physik) gleichzeitig können (im Prinzip) beliebige Observablen bestimmt werden, z. B. Ort und Impuls, Ort und Energie, E - und B -Feld, ...

Quantenmechanik z. B. Ort und Impuls eines Wellenpakets → Observablen können nicht immer gleichzeitig scharf bestimmt werden. Wann können \hat{A} und \hat{B} beide scharf bestimmt werden?

→ Zustand, der gleichzeitig Eigenzustand von \hat{A} und \hat{B} ist (→ mittlere Schwankungsquadrate=0)

→ allgemein: alle Eigenzustände von \hat{A} sollen auch Eigenzustände von \hat{B} sein:

$$\left. \begin{aligned} \hat{A}\Psi_n &= a_n \Psi_n \\ \hat{B}\Psi_n &= b_n \Psi_n \end{aligned} \right\} \langle \Delta A^2 \rangle = \langle \Delta B^2 \rangle = 0 \quad (5.62)$$

wann ist dies möglich?

Wähle Ψ beliebig. Schreibe $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$, dann:

$$\begin{aligned}\hat{A}\Psi &= \sum_n c_n \hat{A}\Psi_n = \sum_n c_n a_n \Psi_n \\ \hat{B}\Psi &= \sum_n c_n \hat{B}\Psi_n = \sum_n c_n b_n \Psi_n \\ \hat{B}\hat{A}\Psi &= \sum_n c_n a_n \hat{B}\Psi_n = \sum_n c_n a_n b_n \Psi_n \\ \hat{A}\hat{B}\Psi &= \sum_n c_n b_n \hat{A}\Psi_n = \sum_n c_n b_n a_n \Psi_n\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi \text{ für beliebige } \Psi \Rightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

Definition Der Kommutator von \hat{A} und \hat{B} ist $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Notwendige Bedingung dafür, dass \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig scharf bestimmbar sind ist:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (5.63)$$

Bedingung 5.63 ist auch hinreichend, denn: falls $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ und $\hat{A}\Psi_n = a_n \Psi_n$ ($n = 1, 2, \dots$), dann folgt $\hat{B}\hat{A}\Psi_n = a_n \hat{B}\Psi_n$, $\hat{A}\hat{B}\Psi_n = a_n \hat{B}\Psi_n \Rightarrow \hat{B}\Psi_n$ ist eigenzustand von \hat{A} mit Eigenwert a_n .

→ im einfachsten Fall: alle a_n verschieden (keine Entartung), dann ist $\hat{B}\Psi_n \propto \Psi_n$, schreibe $\hat{B}\Psi_n = b_n \Psi_n$: Ψ_n ist gleichzeitig Eigenzustand von \hat{A} und \hat{B} .

→ falls mehrere a_n gleich, dann kann man immer Linearkombinationen der Ψ_n finden, sodass $\hat{A}\tilde{\Psi}_n = a_n \tilde{\Psi}_n$, $\hat{B}\tilde{\Psi}_n = b_n \tilde{\Psi}_n$

Satz \hat{A} , \hat{B} Observablen, \hat{A} und \hat{B} sind gleichzeitig messbar $\iff [\hat{A}, \hat{B}] = 0$ („ \hat{A} und \hat{B} sind kompatibel“)

Beispiele

1. \hat{r} und $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

$$\begin{aligned}\hat{p}_i \hat{r}_i \Psi(\vec{r}) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_i} r_i \Psi(\vec{r}) & i = x, y, z \\ &= -i\hbar \Psi(\vec{r}) - i\hbar r_i \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial r_i} \\ &= -i\hbar \Psi(\vec{r}) + \hat{r}_i \hat{p}_i \Psi(\vec{r})\end{aligned}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_i] \Psi(\vec{r}) = -i\hbar \Psi(\vec{r})$$

Ψ ist beliebig $\Rightarrow [\hat{p}_i, \hat{r}_i] = -i\hbar$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{r}_i, \hat{p}_i] = i\hbar} \quad (5.64)$$

was ist mit \hat{r}_i und \hat{p}_j ($i \neq j$)? $\Rightarrow [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = 0$ für ($i \neq j$)

Allgemein:

$$\boxed{[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}} \quad (5.65)$$

2.

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \quad (5.66)$$

$$3. \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (5.67)$$

$$4. \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) \quad [\hat{H}, \hat{r}_i] \neq 0 \quad (5.68)$$

es gibt keinen stationären Zustand mit scharfem Ort \rightarrow Zerfließen des Wellenpakets

$$5. \quad \text{freie Teilchen: } V = 0 \text{ (oder } V = \text{const)} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \quad (5.69)$$

$$6. \quad \hat{O} \text{ beliebig:} \quad [\hat{O}, \hat{O}] = 0 \quad (5.70)$$

Was passiert, falls $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \rightarrow$ minimale Unschärfe.
Zuerst noch:

5.5.2. Hermite'sche Operatoren

Definition Ein Operator \hat{O} heißt hermitesch, falls für beliebige $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{H}$

$$\int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}) \hat{O} \Psi_2(\vec{r}) = \int d^3r (\hat{O} \Psi_1(\vec{r}))^* \Psi_2(\vec{r}) \quad (5.71)$$

gilt.

Beispiele

- Ort: $\hat{O} = \hat{r}, \hat{r}^* = \hat{r} \Rightarrow \hat{r}$ ist hermitesch
- beliebige reelle Funktion von \vec{r} , z. B. $V(\vec{r})$
- Impuls $\hat{O} = \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, Beweis:

$$\begin{aligned} \int \Psi_1^*(-i\hbar\vec{\nabla})\Psi_2 &\stackrel{\text{partielle}}{\text{Integration}} -(-i\hbar) \int (\vec{\nabla}\Psi_1^*)\Psi_2 \\ &= -(-i\hbar) \int (\vec{\nabla}\Psi_1)^*\Psi_2 \\ &= \int (-i\hbar\vec{\nabla}\Psi_1)^*\Psi_2 \end{aligned}$$

\Rightarrow ist hermitesch

- $\lambda\hat{O}$ (wobei \hat{O} hermitesch, $\lambda \in \mathbb{R}$) ist ebenfalls hermitesch
- Potenzen von hermiteschen Operatoren: \hat{O}^n , falls \hat{O} hermitesch, z. B. p_x^2, x^2, \dots
- Summen von hermiteschen Operatoren, z. B. $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, somit ist auch $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\vec{r})$ hermitesch
- $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ (wobei \hat{A} und \hat{B} hermitesch) ist wieder hermitesch
- $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = i[\hat{A}, \hat{B}]$ ist hermitesch, falls \hat{A} und \hat{B} hermitesch

Physikalisch Observablen \longleftrightarrow hermitesche Operatoren, denn: Erwartungswerte von hermiteschen Operatoren sind reell:

$$\langle \hat{O} \rangle^* = \left(\int \Psi^* \hat{O} \Psi \right)^* = \int \Psi (\hat{O} \Psi)^* = \int (\hat{O} \Psi)^* \Psi = \int \Psi^* \hat{O} \Psi = \langle \hat{O} \rangle$$

damit: Eigenwerte von \hat{O} reell, in Eigenzustand Ψ_n ist $\langle \hat{O} \rangle = \lambda_n \in \mathbb{R}$

5.5.3. Minimale Unschärfe: Heisenberg'sche Unschärferelation

gegeben: Ψ beliebig mit $|\Psi|^2 = 1$, \hat{A}, \hat{B} hermitesche Operatoren.

definierte $\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi$, $\langle \hat{B} \rangle = \int \Psi^* \hat{B} \Psi$, $\Delta \hat{A} := \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\Delta \hat{B} := \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$, $\tilde{\Psi}_A := \Delta \hat{A} \Psi = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi$, $\tilde{\Psi}_B := \Delta \hat{B} \Psi = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi$ (\rightarrow nicht normiert)

Norm:

$$\begin{aligned} \int |\tilde{\Psi}_A|^2 &= \int \tilde{\Psi}_A^* \tilde{\Psi}_A = \int (\Delta \hat{A} \Psi)^* \Delta \hat{A} \Psi \\ &\stackrel{\Delta \hat{A}}{=} \int \Psi^* (\Delta \hat{A})^2 \Psi \\ &\stackrel{\text{hermitesch}}{=} \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \\ &= \langle (\hat{A}^2 - \langle \hat{A} \rangle^2) \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 =: \Delta A^2 \end{aligned}$$

ebenso für B : $\int |\tilde{\Psi}_B|^2 = \Delta B^2$

normiere $\tilde{\Psi}_{A,B}$:

$$\Psi_A := \frac{\tilde{\Psi}_A}{\sqrt{\int |\tilde{\Psi}_A|^2}} = \frac{\tilde{\Psi}_A}{\Delta A}, \quad \Psi_B := \frac{\tilde{\Psi}_B}{\sqrt{\int |\tilde{\Psi}_B|^2}} = \frac{\tilde{\Psi}_B}{\Delta B}$$

definiere $\xi_{\pm} := \Psi_A \pm \Psi_B$

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int |\xi_{\pm}|^2 = \int |\Psi_A|^2 + \int |\Psi_B|^2 \pm i \int \Psi_A^* \Psi_B \mp i \int \Psi_B^* \Psi_A \\ 1 &\geq \mp \frac{i}{2} \int (\Psi_A^* \Psi_B - \Psi_B^* \Psi_A) && \left| \cdot \Delta A \Delta B \right. \\ \Delta A \Delta B &\geq \mp \frac{i}{2} \int (\tilde{\Psi}_A^* \tilde{\Psi}_B - \tilde{\Psi}_B^* \tilde{\Psi}_A) \\ &\stackrel{\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}}{=} \mp \frac{i}{2} \int \Psi^* (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) \Psi \\ &\stackrel{\text{hermitesch}}{=} \mp \frac{i}{2} \int \Psi^* (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) \Psi \\ &= \mp \frac{i}{2} (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle + \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle) \\ &\Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \mp \frac{i}{2} (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle) = \mp \frac{i}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \end{aligned} \tag{5.72}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation} \tag{5.73}$$

Beispiel $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$

Kapitel 6.

Teilchen in einer Dimension

Anwendung des Formalismus aus Kapitel 5

Motivation

- Lösen der Schrödingergleichung an konkreten Beispielen üben
- vergleichsweise geringer Rechenaufwand in einer Dimension
- allgemeine Eigenschaften der Quantenmechanik bereits in einer Dimension vorhanden
- einige „echte“ Probleme sind eindimensional:
 - niedrig-dimensionale Systeme: Kohlenstoff-Nanoröhrchen, Halbleiter-Nanodrähte
 - Systeme mit Translationssymmetrie in zwei Raumrichtungen: $V(\vec{r}) = V(x)$; separiere $\Psi(\vec{r}) = \underbrace{\Psi(x)}_{\text{eindimensionale Schrödingergleichung}} e^{ip_y y/\hbar} e^{ip_x x/\hbar}$

Nicht eindimensional lösbar

- zentralsymmetrische Probleme, z. B. H-Atom, aber
- Radialproblem bei H ist eindimensional!

Schrödingergleichung in einer Dimension zeitabhängig ($\Psi(x, t)$):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (6.1)$$

(Anmerkung: Operatoren ab jetzt ohne Dach!)

zeitunabhängig ($\Psi(x)$):

$$H\Psi = E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V(x)\Psi \quad (6.2)$$

hier: zeitunabhängige Probleme, d. h. löse 6.2. Z. T. betrachten wir auch nicht-stationäre Lösungen (Streulösungen, Wellenpakete). Jetzt löse $H\Psi = E\Psi$ für eine Reihe von $V(x)$

6.1. Randbedingungen an Unstetigkeiten

betrachte: stückweise konstantes $V(x)$

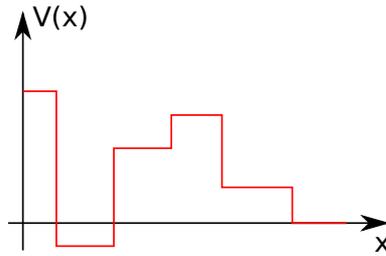


Abbildung 6.1: stückweise konstantes $V(x)$

Lösung für $V = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \rightarrow \Psi = Ce^{ikx} \quad , \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \quad , \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

- $E \geq 0 \rightarrow k$ reell, ebene Welle, Ψ normierbar für beliebiges V
 - $E < 0 \rightarrow k$ imaginär, $e^{ikx} \sim e^{\kappa x}$ mit $\kappa \in \mathbb{R}$, nicht normierbar \rightarrow unphysikalische Lösungen
- $\rightarrow H$ hat kontinuierliches Spektrum von Eigenwerten (Energien) bei $E \geq 0$

Lösung für $V = \text{const}$ nur unwesentlich verschieden:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = (E - V)\Psi$$

\Rightarrow ebene Wellen mit $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)}$

Was passiert für $E < V$? $k = i\kappa$, $\kappa \in \mathbb{R} \rightarrow$ gedämpfte Welle $e^{\mp\kappa x} \rightarrow$ nur im endlichen (oder halbenendlichen) Raum normierbar:

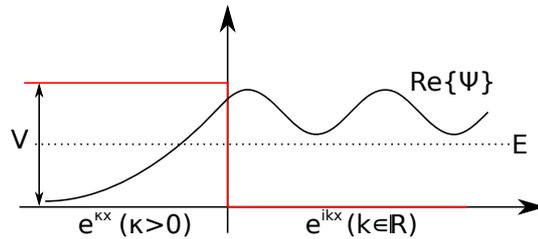


Abbildung 6.2: Wellenfunktion an Potentialstufe

Wie geht das „zusammenkleben“ von Lösungen an den Stufen von $V(x)$? Nehme an, $V(x)$ habe eine endliche Stufe (Unstetigkeit) bei $x = x_0$. Behauptung: $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ stetig bei $x = x_0$

Beweis: nehme an

1. Ψ sei unstetig bei $x = x_0 \Rightarrow \Psi'(x) \sim \delta(x - x_0)$
2. Ψ' sei unstetig bei $x = x_0 \Rightarrow \Psi''(x) \sim \delta'(x - x_0)$

aber Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = \underbrace{(V(x) - E)}_{\text{hat höchstens endliche Stufe}} \Psi(x)$$

\Rightarrow Widerspruch $\Rightarrow \Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ müssen stetig sein falls $|V(x)| < \infty$

Warnung: gilt nicht für $V(x) \sim \delta(x - x_0) \rightarrow$ s. später!

2010-05-19

6.2. Potentialstufe

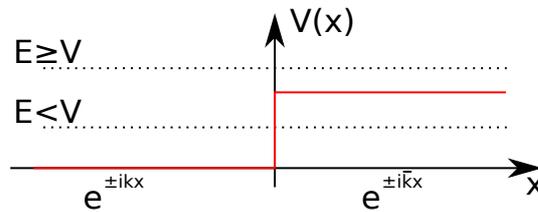


Abbildung 6.3: Potentialstufe

Wir nehmen folgendes Potential an:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad x < 0 \\ V & ; \quad x \geq 0 \end{cases}$$

mit $V > 0$. Lösungen existieren für $E > 0$, zwei Fälle: $E \geq V$ oder $0 < E < V$

allgemein

- für $x < 0$ ist $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$
- für $x \geq 0$ ist $\bar{p} = \hbar \bar{k} = \sqrt{2m(E - V)}$

Fall 1: $E \geq V$

- Lösung für $x \geq 0$ ist $e^{\pm i\bar{k}x}$ mit \bar{k} reell
- klassisch: Aufenthalt des Teilchens auf beiden Seiten der Stufe erlaubt, mit der de-Broglie-Beziehung $p = \hbar k$

Fall 2: $E < 0$

- $x \geq 0$: $e^{i\bar{k}x}$ mit imaginärem \bar{k}
- klassisch: Aufenthalt nicht erlaubt
- schreibe $\bar{k} = i\kappa$: $e^{-\kappa x}$, $\kappa = \sqrt{2m(V - E)}/\hbar$, κ reell, $\kappa > 0$
- $e^{+\kappa x}$ ist nicht normierbar!
- $e^{-\kappa x}$: exponentiell gedämpfte Welle

Behandle ersten Fall als Streuproblem, d. h.:

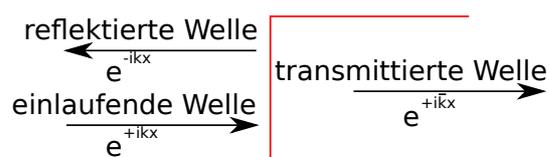


Abbildung 6.4: Ansatz zum Streuproblem

Ansatz:

$$\Psi(x) = A \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & ; x < 0 \\ \bar{t}e^{i\bar{k}x} & ; x \geq 0 \end{cases} \quad (6.3)$$

Stetigkeit bei $x = 0$ bedeutet

für $\Psi(x)$: $A(1+r) = A\bar{t} \Rightarrow 1+r = \bar{t}$

für $\Psi'(x)$: $A(ik - ikr) = Ai\bar{k}\bar{t} \Rightarrow k(1-r) = \bar{k}\bar{t}$

eliminiere \bar{t}

$$1+r = \bar{t} = \frac{k}{\bar{k}}(1-r) \quad \Rightarrow \quad r = \frac{k/\bar{k} - 1}{k/\bar{k} + 1} = \frac{k - \bar{k}}{k + \bar{k}} \quad (6.4)$$

einsetzen:

$$\bar{t} = 1+r = \frac{2k}{k + \bar{k}} \quad (6.5)$$

6.2.1. Teilchenstromdichte

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*(x)\Psi'(x) - \Psi(x)\Psi'^*(x)) = \frac{\hbar}{m}\text{Im}\{\Psi^*(x)\Psi'(x)\} \quad (6.6)$$

$x \leq 0$

$$\begin{aligned} j(x) &= |A|^2 \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ (e^{-ikx} + r^*e^{ikx})(ike^{ikx} - ikre^{-ikx}) \right\} \\ &= |A|^2 \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ ik - ik|r|^2 \underbrace{-ikre^{-2ikx} + ikre^{+2ikx}}_{\text{reell (da } z + z^*)} \right\} \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2) = j \end{aligned}$$

$x > 0$

$$\begin{aligned} j(x) &= |A|^2 \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ |\bar{t}|^2 i\bar{k} \} \\ &= |A|^2 \frac{\hbar \bar{k}}{m} |\bar{t}|^2 \quad \left| \quad t := \sqrt{\frac{\bar{k}}{k}} \bar{t} \right. \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} |t|^2 \end{aligned}$$

zusammen

$$j(x) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \begin{cases} 1 - |r|^2 & ; x \leq 0 \\ |t|^2 & ; x > 0 \end{cases} \quad (6.7)$$

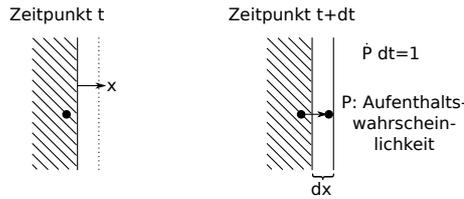


Abbildung 6.5: Zur Normierung der Teilchenstromdichte

Normierung einlaufende Welle \longleftrightarrow 1 Teilchen mit Geschwindigkeit $\frac{p}{m}$
 Kontinuitätsgleichung:

$$j = \dot{P} dx = \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} = v$$

normiere die einlaufende Welle $|A|^2 e^{ikx}$ auf 1 Teilchen mit Geschwindigkeit $\frac{p}{m} \Rightarrow |A|^2 = 1$, wähle A reell, $A = 1$

gezeigt: eine Möglichkeit, ebene Wellen zu normieren.

$$|r|^2 = r^2 = \frac{(k - \bar{k})^2}{(k + \bar{k})^2}, \quad |t|^2 = t^2 = \frac{\bar{k}}{k} \bar{t}^2 = \frac{\bar{k}}{k} \frac{4k^2}{(k + \bar{k})^2} = \frac{2k\bar{k}}{(k + \bar{k})^2} \quad (6.8)$$

$$\Rightarrow |r|^2 + |t|^2 = \frac{(k + \bar{k})^2}{(k + \bar{k})^2} = 1 \quad (6.9)$$

$$j = \frac{p}{m}(1 - |r|^2) = \frac{p}{m}|t|^2 = \text{const} \quad (6.10)$$

Bemerkungen zu Fall 1 ($E > V$)

1. Zeitabhängige Lösungen: Wellenpakete

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \int_0^\infty \tilde{\Psi}(p) (e^{ipk/\hbar} + \frac{p-\bar{p}}{p+\bar{p}} e^{-ipx/\hbar}) e^{-iE(p)t/\hbar} & ; x \leq 0 \\ \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{\Psi}(p) (e^{ipx/\hbar}) e^{-iE(p)t/\hbar} & ; x > 0 \end{cases} \quad (6.11)$$

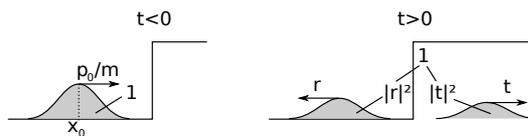


Abbildung 6.6: Aufspaltung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit

2. bei $t > 0$ wurde das Teilchen nicht aufgespalten! $|\Psi(x, t > 0)|^2$: Wahrscheinlichkeitsverteilung, $|t|^2$: Wahrscheinlichkeit, dass man das Teilchen rechts der Stufe findet.

3. $\bar{p} \neq p$: Impuls nicht erhalten, für $\Psi(x)$ (statischer Zustand): Impuls nicht scharf definiert.

- klassisch: $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, $\{H, p\} \neq 0$ (Bemerkung: $\{\cdot, \cdot\}$: Poisson-Klammer)
- quantenmechanisch: $[p, H] \neq 0$, Heisenberg'sche Unschärferelation

4. Reflektion für $E > V$:

- Welle: klassisch erwartet, z. B. Impedanzunterschied bei Wellenleitern

- Teilchen: klassisch nicht möglich, dass Teilchen reflektiert wird!

5. klassischer Limes existiert für Potentialstufe nicht, da die Länge, auf der sich das Potential ändert hierfür größer als die Wellenlänge sein muss!

Behandlung Fall 2 ($E < V$) $\bar{k} = i\kappa$, $\kappa \in \mathbb{R}$, $\kappa > 0$

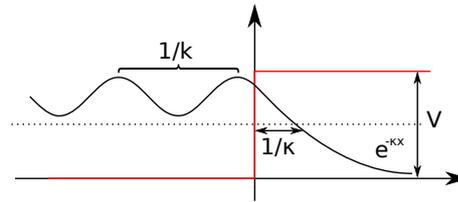


Abbildung 6.7: Wellenfunktion an Potentialstufe für $E < V$

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & ; \text{ links von Potentialstufe} \\ \bar{t}e^{-\kappa x} & ; \text{ rechts von Potentialstufe} \end{cases}$$

hier: $\kappa = \sqrt{2m(V - E)} > 0$

Randbedingungen: $1 + r = \bar{t}$, $ik - ikr = -\bar{t}\kappa \Rightarrow \bar{t} = -i\frac{k}{\kappa}(1 - r)$

$$\Rightarrow r = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad |r|^2 = 1$$

Stromdichte:

$$j(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m}(1 - |r|^2) = 0 & ; x < 0 \\ \frac{\hbar}{m}|\bar{t}|^2 \text{Im}\{-\kappa\} = 0 & ; x > 0 \end{cases}$$

vollständige Reflektion an der Stufe, aber: Teilchen kann sich mit endlicher Wahrscheinlichkeit rechts der Barriere ($x > 0$) im *klassisch verbotenen Bereich* aufhalten!

Wie kann es sein, dass das Teilchen bei $x > 0$ ist, wenn die Energie nicht ausreicht? → Unschärfelation $[H, x] \neq 0$. Wenn Teilchen bei $x > 0$ ist, dann ist $\Delta x \sim \frac{1}{\kappa} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$

$$\Delta E \Delta x \geq \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle [H, x] \rangle}_{\frac{\hbar p}{m}} \right| \rightarrow \Delta E \geq \frac{\bar{p}^2}{2m} = E - V \quad (6.12)$$

2010-05-21

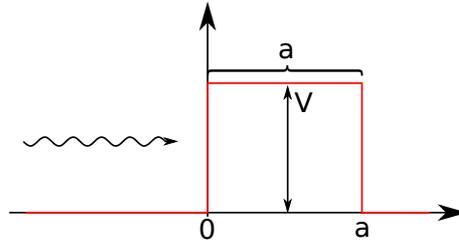
6.3. Der Tunneleffekt

Im vorherigen Abschnitt gesehen: Teilchen kann mit endlicher Wahrscheinlichkeit in ein *klassisch verbotenes Gebiet*, in welchem $E < V$ gilt, eindringen. Als Konsequenz daraus folgt der Tunneleffekt.

Betrachte nun die Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V & ; 0 \leq x \leq a \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} \quad (6.13)$$

mit $V > 0$

Abbildung 6.8: Potentialbarriere der Breite a und der Höhe V

Ansatz für $0 < E < V$

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & ; \quad x < 0 \\ Ce^{-\kappa x} + De^{+\kappa x} & ; \quad 0 \leq x \leq a \\ te^{ik(x-a)} & ; \quad x > a \end{cases} \quad (6.14)$$

mit $k = \frac{p}{\hbar} = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $\kappa = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$

Randbedingungen bei $x = 0, a$:

	Ψ	Ψ'
$x = 0$	$1 + r = C + D$	$ik(1 - r) = \kappa(C - D)$
$x = a$	$Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = t$	$\kappa(-Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a}) = ikt$

eliminiere t :

$$Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = t = i\frac{\kappa}{k}(Ce^{-\kappa a} - De^{\kappa a}) \quad (6.15)$$

eliminiere r :

$$C + D - 1 = r = -i\frac{\kappa}{k}(C - D) \quad (6.16)$$

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) & e^{\kappa a} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) \\ 1 + \frac{i\kappa}{k} & 1 - \frac{i\kappa}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

mit $1 + \frac{i\kappa}{k} =: z$ und $1 - \frac{i\kappa}{k} =: z^*$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} D &= -e^{-2\kappa a} \frac{z^*}{z} C = \frac{2}{z^*} - \frac{z}{z^*} C \\ C &= \frac{2}{z^*} \frac{|z|^2}{z^2 - e^{-2\kappa a} (z^*)^2} = \frac{2}{z - e^{-2\kappa a} (z^*)^2 / z} \\ t &= C \left(e^{-\kappa a} - e^{\kappa a} e^{2\kappa a} \frac{z^*}{z} \right) = Ce^{-\kappa a} \left(1 - \frac{z^*}{z} \right) = Ce^{-\kappa a} \frac{z - z^*}{z} \\ \Rightarrow t &= \frac{4i \operatorname{Im} z}{z^2 e^{\kappa a} - e^{-\kappa a} (z^*)^2} \end{aligned}$$

jetzt $e^{\pm\kappa a} = \cosh(\kappa a) \pm \sinh(\kappa a)$

$$\Rightarrow t = \frac{4i \operatorname{Im} z}{(z^2 - (z^*)^2) \cosh(\kappa a) + (z^2 + (z^*)^2) \sinh(\kappa a)} \quad (6.18)$$

mit $z = 1 + i\frac{\kappa}{k}$, $z^2 = 1 + 2i\frac{\kappa}{k} - \frac{\kappa^2}{k^2}$, $(z^*)^2 = 1 - 2i\frac{\kappa}{k} - \frac{\kappa^2}{k^2}$ ergibt sich $z^2 + (z^*)^2 = 2\left(1 - \frac{\kappa^2}{k^2}\right)$ und $z^2 - (z^*)^2 = 4i\frac{\kappa}{k}$. Durch Einsetzen erhält man schließlich:

$$t = \frac{4i\kappa/k}{4i\frac{\kappa}{k} \cosh(\kappa a) + 2\left(1 - \frac{\kappa^2}{k^2}\right) \sinh(\kappa a)} \quad (6.19)$$

$$\Rightarrow t = S(E) = \frac{2i\kappa k}{2i\kappa k \cosh(\kappa a) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa a)} \quad (6.20)$$

mit $\epsilon = \frac{\kappa^2 - k^2}{\kappa k}$ ergibt sich noch

$$S(E) = \frac{1}{\cosh(\kappa a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(\kappa a)} \quad (6.21)$$

Transmissionskoeffizient:

$$\begin{aligned} |S(E)|^2 &= \frac{1}{\underbrace{\cosh^2(\kappa a)}_{1 + \sinh^2(\kappa a)} + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2(\kappa a)} \\ &= \frac{1}{1 + \left(\frac{\epsilon^2}{4} + 1\right) \sinh^2(\kappa a)} \end{aligned}$$

mit $\epsilon = \frac{\kappa^2 - k^2}{\kappa k} = \frac{V - 2E}{\sqrt{(V - E)E}}$, $\epsilon^2 = \frac{(V - 2E)^2}{(V - E)E}$ ergibt sich

$$\epsilon^2 + 4 = \frac{(V - 2E)^2 + 4(V - E)E}{(V - E)E} = \frac{V^2}{E(V - E)}$$

Eingesetzt ergibt sich

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V^2}{4E(V - E)} \sinh^2(\sqrt{2m(V - E)}a/\hbar)} \quad (6.22)$$

Klassischer Grenzfall: „ $\hbar \rightarrow 0$ “: $|S(E)|^2 \rightarrow 0$

Grenzfall: hohe und breite Barriere: $\kappa a \gg 1$

$$\sinh(\kappa a) \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a} \gg 1 \quad \Rightarrow \quad |S(E)|^2 \approx \frac{16E(V - E)}{V^2} e^{-2\kappa a}$$

Der Vorfaktor der Exponentialfunktion kann als logarithmische Korrektur des Exponenten betrachtet werden. Für $0.1 \lesssim E/V \lesssim 0.9$ kann diese vernachlässigt werden:

$$\Rightarrow |S(E)|^2 \approx e^{-2\kappa a} = e^{-2\sqrt{2m(V - E)}a/\hbar} \quad (6.23)$$

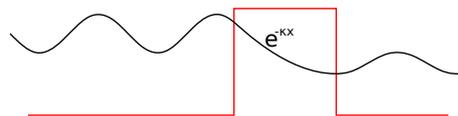


Abbildung 6.9: Tunnelung durch eine Potentialbarriere

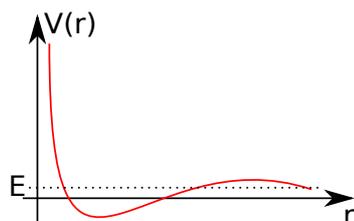
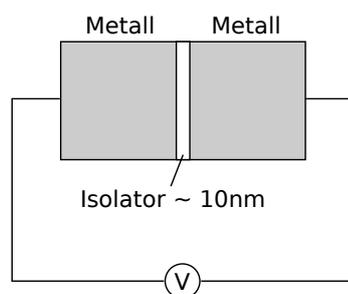
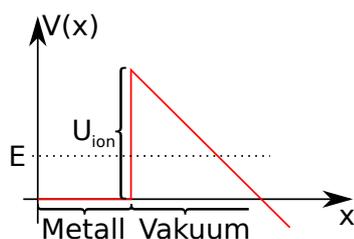
Abbildung 6.10: Potentialverlauf beim α -Zerfall

Abbildung 6.11: Messung des Tunnelstroms durch einen Isolator

Anwendungen

1. α -Zerfall
 - Lebenszeit von Atomkernen (Wahrscheinlichkeit pro Zeit) (\rightarrow Übungsaufgabe)
2. Festkörperphysik
 - Tunnelstrom $I(V)$
 - ersetze Metall durch Supraleiter (Josephson-Effekt)
3. kalte Emission von e^-

Abbildung 6.12: Potentialverlauf bei kalter Emission von e^-

6.4. Gebundene Zustände: Potentialtopf

bisher

- nur ausgedehnte Zustände, weil $V \rightarrow 0$ für $|x| \rightarrow \infty$ und $V \geq 0$
- kontinuierliches Spektrum $E \geq 0$ (alle $E \geq 0$ sind Eigenwerte von H)

jetzt

- gebundene Zustände (endlicher Raumbereich)
- bilden sich in Raumbereichen, wo $V < V_\infty$, wobei $V(x) \rightarrow V_\infty$ für $|x| \rightarrow \infty$



Abbildung 6.13: Potentialtopf mit $V < V_\infty$

- auch hier gibt es (zusätzlich) ausgedehnte Zustände für $E \geq V_\infty$ (Kontinuum)
- entspricht Situation bei Atomen

6.4.1. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

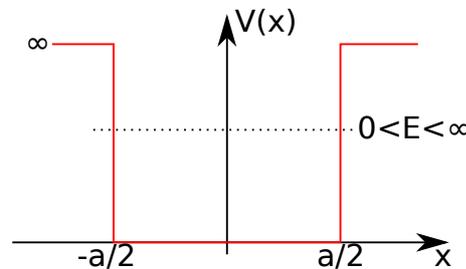


Abbildung 6.14: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; |x| \leq \frac{a}{2} \\ \infty & ; |x| > a \end{cases}$$

$$\kappa = \sqrt{2m(V - E)} \rightarrow \infty \Rightarrow e^{-\kappa a} \rightarrow 0, \Psi\left(|x| > \frac{a}{2}\right) = 0$$

2010-05-25

Randbedingungen $\Psi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$

Ansatz (für $|x| \leq \frac{a}{2}$):

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE} \quad (6.24)$$

in Randbedingungen:

$$\Psi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = Ae^{\pm ika/2} + Be^{\mp ika/2} = 0 \quad (6.25)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{ika/2} & e^{-ika/2} \\ e^{-ika/2} & e^{ika/2} \end{pmatrix}}_{=: M} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (6.26)$$

Lösungen außer $A = B = 0$ ($\Psi \equiv 0$, nicht normierbar) gibt es nur, falls:

$$\det M = e^{ika} - e^{-ika} = 2i \sin(ka) = 0 \quad (6.27)$$

also für

$$\boxed{k = k_n = \frac{\pi}{a}n}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.28)$$

Lösung für $n = 0$ ergibt $\Psi = 0$, also nicht normierbar \rightarrow keine Lösung. Lösungen für negative Werte für n vertauschen lediglich A und $B \rightarrow$ keine neuen Lösungen.

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.29)$$

einsetzen:

$$e^{\pm ika/a} = e^{\pm i\frac{\pi}{2}n} = \left(e^{\pm i\frac{\pi}{2}}\right)^n = (\pm i)^n = (\pm 1)^n i^n$$

in M einsetzen:

$$A + (-1)^n B = 0 \quad (+ \text{ Normierung})$$

1. $n = 1, 3, 5, \dots$ ungerade $\Rightarrow A = B$:

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(n \frac{\pi}{a} x\right)} \quad (6.30)$$

2. $n = 2, 4, 6, \dots$ gerade $\Rightarrow A = -B$:

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)} \quad (6.31)$$

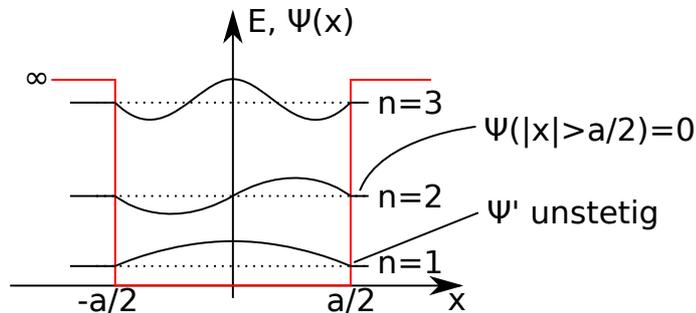


Abbildung 6.15: Lösungen der Wellengleichung im Potentialtopf

Bemerkung

1. $E_1 > 0$ wegen Unschärferelation (\rightarrow Übung)
2. Anzahl der Knoten von Ψ in $|x| < \frac{a}{2}$ ist $n - 1$
3. Ψ' unstetig bei $x \pm \frac{a}{2}$ wegen $V = \infty$

6.4.2. Parität

Definition Paritätsoperator (Parität):

$$P\Psi(x) = \Psi(-x) \quad (6.32)$$

Eigenschaften

1. P ist hermitescher Operator
2. $P^2 = \mathbb{1}$ (wobei $\mathbb{1}\Psi(x) = \Psi(x)$)
3. Eigenwerte sind ± 1 (folgt aus $P^2\Psi = \lambda^2\Psi \Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$)
Betrachte $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ mit $V(-x) = V(x)$, für alle Ψ gilt dann

$$\begin{aligned}
 PH\Psi(x) &= P\left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)\Psi(x) \\
 &= \left(\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V(-x)}_{=V(x)}\right)\Psi(-x) \\
 &= H\Psi(-x) = HP\Psi(x) \\
 \Rightarrow PH &= HP \quad \Rightarrow \quad [P, H] = 0
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

\Rightarrow stationäre Zustände (Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung) $\hat{=}$ Eigenzustände von H können Eigenzustände von P sein

Eigenzustände von P

- $\lambda = +1$: $P\Psi(x) = \Psi(x)$, d. h. $\Psi(-x) = \Psi(x) \rightarrow$ symmetrisches $\Psi(x) \rightarrow \cos$
- $\lambda = -1$: $P\Psi(x) = -\Psi(x)$, d. h. $\Psi(-x) = -\Psi(x) \rightarrow$ antisymmetrisches $\Psi(x) \rightarrow \sin$

2010-05-26

6.4.3. Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

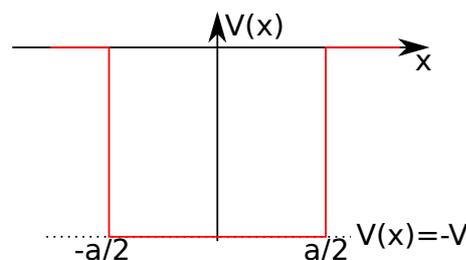


Abbildung 6.16: Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} -V & ; \quad |x| \leq a/2 \\ 0 & ; \quad |x| > a/2 \end{cases}, \quad (V \geq 0)$$

1. gebundene Zustände ($-V \leq E \leq 0$), allgemeiner Ansatz:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{2}e^{ikx} + \frac{B}{2}e^{-ikx} & ; \quad |x| < a/2 \\ Ce^{\kappa x} & ; \quad x < -a/2 \\ De^{-\kappa x} & ; \quad x > a/2 \end{cases} \tag{6.34}$$

mit $k = \sqrt{2m(V + E)}/\hbar$ und $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$

Symmetrieüberlegung: $V(x) = V(-x) \xrightarrow{6.4.2} \Psi(-x) = \pm\Psi(x) \Rightarrow B = \pm A, D = \pm C$

neuer Ansatz:

symmetrisch (gerade)

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \cos(kx) & ; \quad |x| \leq a/2 \\ C e^{-\kappa|x|} & ; \quad |x| > a/2 \end{cases} \quad (6.35)$$

antisymmetrisch (ungerade)

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx) & ; \quad |x| \leq a/2 \\ C e^{-\kappa|x|} \operatorname{sgn}(x) & ; \quad |x| > a/2 \end{cases} \quad (6.36)$$

Die möglichen Lösungen werden durch die Randbedingungen bei $x = \pm a/2$ bestimmt:

gerade Lösungen:

$$\begin{aligned} A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) &= C e^{-\kappa a/2} && \text{(Stetigkeit von } \Psi) \\ -Ak \sin\left(\frac{ka}{2}\right) &= -C\kappa e^{-\kappa a/2} && \text{(Stetigkeit von } \Psi') \end{aligned}$$

dividiere untere durch obere Gleichung:

$$\boxed{k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \kappa} \quad (6.37)$$

ungerade Lösungen:

$$\boxed{-k \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = \kappa} \quad (6.38)$$

mit $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$ und $k = \sqrt{2m(E + V)}/\hbar$ sind 6.37 und 6.38 die Bestimmungsgleichungen für E . Diese können nicht analytisch, sondern nur numerisch oder graphisch gelöst werden. Mit $\kappa^2 = -2mE/\hbar^2 = -k^2 + 2mV/\hbar^2$, $z := \frac{ka}{2} = \frac{a}{2}\sqrt{2m(E + V)}/\hbar$ und $\zeta := \frac{a}{2}\sqrt{2mV}/\hbar \rightarrow \frac{\kappa}{a} = \frac{\kappa a/2}{ka/2} = \frac{\sqrt{\zeta^2 - z^2}}{z}$ ergibt sich:

$$\tan(z) = \frac{\sqrt{\zeta^2 - z^2}}{z} \quad (6.39)$$

$$\cot(z) = -\frac{\sqrt{\zeta^2 - z^2}}{z} \quad (6.40)$$

$$z = \frac{ka}{2} = \frac{a}{2\hbar}\sqrt{2m(E + V)} \geq 0$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{4z^2\hbar^2}{2ma^2} - V} \quad (6.41)$$

$$\zeta = \frac{a}{2\hbar}\sqrt{2mV} \geq 0$$

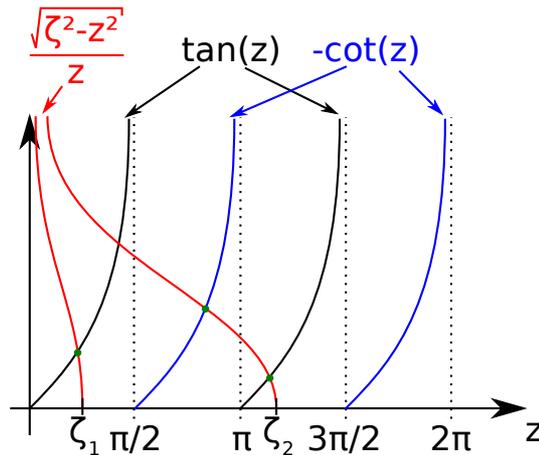


Abbildung 6.17: Grafische Lösungen der Gleichungen 6.39 und 6.40

Bemerkungen

- a) $V \rightarrow 0 \Rightarrow \zeta \rightarrow 0 \Rightarrow z \rightarrow n\frac{\pi}{2}$, $\tilde{E} := E + V = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$
 b) für beliebig kleine $V > 0$ gibt es immer eine symmetrische Lösung, aber sobald $\zeta < \frac{\pi}{2}$ ist, gibt es keine antisymmetrische Lösung mehr.
 c) V klein, $\zeta \ll 1$: weil $z \leq \zeta \ll 1 \Rightarrow z \ll 1$. $\tan(z) \approx z$ und 6.39 $\rightarrow z^2 \approx \sqrt{\zeta^2 - z^2}$

$$z^4 + z^2 - \zeta^2 = 0 \Rightarrow z^2 = \frac{1}{2}(-1 \pm \sqrt{1 + 4\zeta^2}) \cong \begin{cases} -1 - \zeta^2 & \text{nicht möglich, da } z > 0 \\ \zeta^2 - \zeta^4 & \end{cases}$$

Taylor-Entwicklung: $1 + 2\zeta^2 - 2\zeta^4$

in 6.41 einsetzen:

$$E = -\frac{a^2 m V^2}{2\hbar^2}$$

2. $E > 0$: ausgedehnte Zustände: Resonanzen (\rightarrow Übung)

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{2}(e^{ikx} \pm e^{-ikx}) & ; |x| \leq a/2 \\ e^{iqx} + r e^{-iqx} & ; x < -a/2 \\ S(E)e^{iqx} & ; x > a/2 \end{cases} \quad (6.42)$$

mit $k = \sqrt{2m(E+V)}/\hbar$ und $q = \sqrt{2mE}/\hbar$

Ergebnis:

$$S(E) = \left(\cos(ka) - \frac{i}{2} \frac{k^2 + q^2}{kq} \sin(ka) \right)^{-1} \quad (6.43)$$

$$\Rightarrow |S(E)|^2 = \left(1 + \frac{V^2}{4E(V+E)} \sin^2(\sqrt{2m(E+V)}a/\hbar) \right)^{-1} \quad (6.44)$$

- a) Vergleiche Transmissionskoeffizient 6.44 mit $|S(E)|^2$ für Tunnelbarriere (6.22):
 Übergang $V \rightarrow -V$ und $\sin(ix) \rightarrow i \sinh(x)$ in 6.44 führt auf Gleichung 6.22
 b) $|S(E)|^2 = 1$, wenn $\sin = 0$, d. h. für

$$\sqrt{2m(E+V)}a/\hbar = n\pi \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

d. h. falls $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 - V \geq 0$, wobei $n = 1, 2, \dots$, so dass $E_n \geq 0$

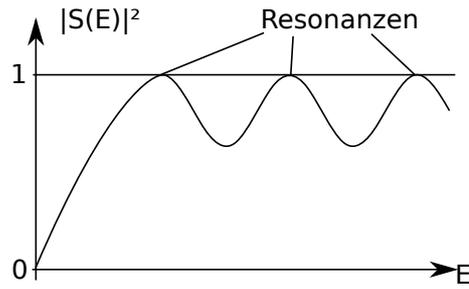


Abbildung 6.18: Resonanzen

- c) Vergleiche 6.43 mit Lösungen für $E < 0$: setze $S(E)$ analytisch fort für $E < 0$: $S(E)$ hat Pol, falls
- $$\begin{cases} k \tan(ka/2) = \kappa \\ k \cot(ka/2) = -\kappa \end{cases} \quad \text{mit } \kappa = \sqrt{-2mE} = iq$$
- $S(E) \rightarrow \infty$:
- auslaufende Welle ohne einlaufende Welle
 - auslaufende Welle ist gedämpft
- \Rightarrow Pole von $S(E)$ entsprechen gebundenen Zuständen!

2010-05-28

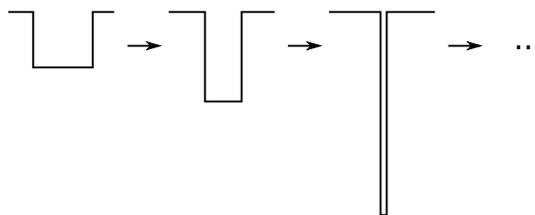
6.5. Delta-Potential

Potentialtopf mit endlichen Wänden:

$$V \rightarrow 0 \Rightarrow E \approx -\frac{ma^2V^2}{2\hbar^2} \rightarrow 0$$

$$a \rightarrow 0 \Rightarrow E \rightarrow 0$$

jetzt: $aV = \text{const} = \lambda$, $a \rightarrow 0$, $V \rightarrow \infty$

Abbildung 6.19: Delta-Potential: $aV = \text{const}$

Behauptung Im Grenzfall $a \rightarrow 0$, $V \rightarrow \infty$ mit $aV = \lambda = \text{const}$ existiert ein gebundener Zustand ($\lambda < 0$)

Grenzfall: $V(x) = \lambda\delta(x)$

Lösung ($E < 0$):

$$\Psi(x) = C \begin{cases} e^{\kappa x} & ; \quad x < 0 \\ e^{-\kappa x} & ; \quad x > 0 \end{cases} = C e^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (6.45)$$

- erfüllt bereits: $\Psi(x)$ stetig bei $x = 0$
- $\Psi'(x)$ ist nicht stetig bei $x = 0$

Bedingung bei $x = 0$: Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = (E - \lambda\delta(x))\Psi(x)$$

Integriere von $-\epsilon$ bis ϵ (und anschließend $\epsilon \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) dx &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} (E - \lambda\delta(x))\Psi(x) dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)) &= E \underbrace{\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \Psi(x) dx}_{\rightarrow 0} - \lambda\Psi(0) \end{aligned}$$

$$\epsilon \rightarrow 0 : \quad \boxed{\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi(0)} \quad (6.46)$$

$$\Psi'(x) = C\kappa \begin{cases} e^{\kappa x} & ; x < 0 \\ -e^{-\kappa x} & ; x > 0 \end{cases}$$

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = C\kappa(-1 - 1) = -2C\kappa = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda C$$

$$\Rightarrow \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = -\frac{m}{\hbar^2}\lambda \Rightarrow \boxed{E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}} \quad (6.47)$$

Normierung

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \\ &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\kappa|x|} dx \\ &= 2|C|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \\ &= 2|C|^2 \left. \frac{1}{-2\kappa} e^{-2\kappa x} \right|_0^{\infty} = \frac{|C|^2}{\kappa} \\ \Rightarrow |C|^2 &= \kappa \\ \text{wähle } C &= \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar} \end{aligned}$$

6.6. Periodische Potentiale

- Eindimensionale Kristallgitter
- Anwendung: Festkörperphysik (meistens in 3D)

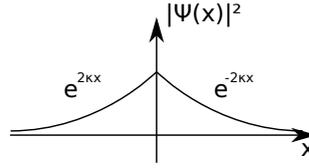


Abbildung 6.20: Gebundener Zustand am Delta-Potential

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

mit

$$V(x+a) = V(x) \quad \forall x \quad (6.48)$$

Symmetrie: Translation. Translationsoperator:

$$T_a \Psi(x) := \Psi(x+a) \quad (6.49)$$

Es gilt $[T_a, H] = 0$. Eigenzustände von T_a : $T_a \Psi(x) = \Psi(x+a) = \lambda \Psi(x)$. Damit $\lambda \Psi(x) = \Psi(x+a)$ wieder normiert ist, muss $|\lambda|^2 = 1$ sein.

$$|\lambda|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda = e^{i\varphi} \quad , \quad \varphi \in \mathbb{R}$$

definiere jetzt $k := \frac{\varphi}{a}$ und erhalte damit $\lambda = e^{ikx}$.

$$\Rightarrow T_a \Psi(x) = \Psi(x+a) = e^{ika} \Psi(x)$$

Definiere: $u_k(x) := e^{-ikx} \Psi(x)$, dann gilt $u_k(x+a) = u_k(x)$

Bloch-Theorem Die Eigenzustände eines *periodischen Problems* mit $[H, T_a] = 0$ haben die Form $\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$, wobei $u_k(x)$ periodisch ist: $u_k(x+a) = u_k(x)$.

Bemerkungen

1. $V = 0$: ebene Wellen ($u_k = \text{const}$); $V \neq 0$ und periodisch: ebene Wellen, moduliert mit periodischer Funktion u_k
2. Wertebereich von k : Eigenwerte: $\lambda = e^{ika} = e^{ik'a}$ falls $k = k' + \frac{2\pi}{a}n$. Somit kann k im Bereich $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$ gewählt werden.

Setze $\Psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$ in Schrödingergleichung $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \Psi(x) = E \Psi(x)$ ein und benutze

$$\begin{aligned} \Psi'(x) &= \frac{d}{dx} e^{ikx} u_k(x) = ike^{ikx} u_k(x) + e^{ikx} \frac{du_k}{dx} \\ \Psi''(x) &= -k^2 e^{-ikx} u_k(x) + 2ike^{ikx} \frac{du_k}{dx} + e^{ikx} \frac{d^2 u_k}{dx^2} = e^{ikx} \left(\frac{d}{dx} ik \right)^2 u_k(x) \end{aligned}$$

Dividiere durch e^{ikx}

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 + V(x) \right] u_k(x) = E_k u_k(x) \quad (6.50)$$

$V(x), u_k(x)$ periodisch \rightarrow Fourier-Reihe

$$V(x) = \sum_q V(q)e^{iqx} \quad , \quad q = \frac{2\pi}{a}n \quad , \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$V(q) = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} dx V(x)e^{-iqx}$$

$$v(x) = \sum_q u_k(q)e^{iqx}$$

einsetzen in 6.50: $\frac{d}{dx} \rightarrow iq$

$$\sum_q \left[\frac{\hbar^2}{2m}(q+k)^2 - E_k \right] u_k(q)e^{iqx} + \sum_{q'q''} V(q'')u_k(q')e^{i(q'+q'')x} = 0$$

$$\sum_q \left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m}(q+k)^2 - E_k \right] u_k(q)e^{iqx} + \sum_{q'} V(q-q')u_k(q') \right\} e^{iqx} = 0$$

Fourier-Reihe von 0 \Rightarrow alle Koeffizienten = 0, d. h.

$$\boxed{\left[\frac{\hbar^2}{2m}(q+k)^2 - E_k \right] u_k(q)e^{iqx} + \sum_{q'} V(q-q')u_k(q') = 0} \tag{6.51}$$

1. Für jedes feste $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ ist dies ein lineares Gleichungssystem für $u_k(q), q = \frac{2\pi}{a}n, n \in \mathbb{Z}$
2. E_k unbekannt \rightarrow Eigenwertproblem für $u_k(q)$ und E_k
3. Im Allgemeinen unendlich viele Gleichungen und unendlich viele Unbekannte
4. Lösungen (für festes k):

$$\begin{pmatrix} \uparrow & \cdots & & \\ \infty & & \cdots & \\ & & & \ddots \\ & & & \downarrow \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ u_k(q) \\ \vdots \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} \vdots \\ u_k(q) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

5. freie Elektronen $V = 0$, Eigenwerte $E_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k+q)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)^2$ reduziertes Zonenschema

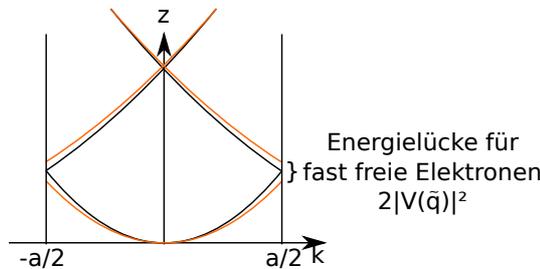


Abbildung 6.21: freie Elektronen in einem periodischen Potential: reduziertes Zonenschema

- 6. $V(x) = \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$ Kronig-Penney-Modell (\rightarrow Übung)
- 7. fast freie Elektronen: V klein \rightarrow Energielücke $u_k(0)$, $u_k\left(\frac{2\pi}{a}\right)$

2010-06-01

- 1. freie Elektronen $V = 0$, Eigenwerte $E_k = \frac{\hbar^2}{2m}(k+q)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)^2$ reduziertes Zonenschema

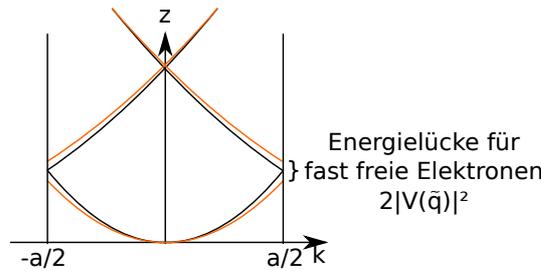


Abbildung 6.22: freie Elektronen in einem periodischen Potential: reduziertes Zonenschema

- 2. $V(x) = \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$ Kronig-Penney-Modell (\rightarrow Übung)
- 3. fast freie Elektronen: V klein \rightarrow Energielücke $u_k(0)$, $u_k\left(\frac{2\pi}{a}\right)$
 Zustände: näherungsweise ebene Wellen e^{ikx} ($u_k(0) \approx 1$)

$$u_k(q) \approx \frac{V(q)}{\frac{\hbar^2}{2m}(k+q)^2 - \underbrace{E_k}_{= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}} \underbrace{u_k(0)}_{\approx 1} \tag{6.52}$$

Nenner = 0, falls $(k + q)^2 = k^2$ (Bragg-Bedingung)

$$q = \frac{2\pi}{a}n \quad , \quad n \in \mathbb{Z} \quad ; \quad n = 1 \Rightarrow q = \frac{2\pi}{a}$$

Näherung: berücksichtige nur 2 Fourier-Koeffizienten von $u_k(x)$: $u_k(0)$ und $u_k(q)$, $q = \frac{2\pi}{a}$ bei $k = \pm \frac{\pi}{a} \rightarrow 2 \times 2$ -Gleichungssystem aus Gleichung 6.51:

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & V(-\tilde{q}) \\ V(\tilde{q}) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k(0) \\ u_k(\tilde{q}) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k(0) \\ u_k(\tilde{q}) \end{pmatrix} \quad , \quad V(-\tilde{q}) = V(\tilde{q})^* \tag{6.53}$$

$$\boxed{E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm |V(\tilde{q})|^2} \quad , \quad k = \pm \frac{\pi}{a} \tag{6.54}$$

2010-06-02 (gehalten von S. Gerlach)

6.7. Der harmonische Oszillator

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$F = -kx = -m\omega^2 x = -\partial_x V(x) \quad , \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

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

Quantenmechanik

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) \Psi = E\Psi$$

$$\langle p^2 \rangle = \int \Psi^* p^2 \Psi dx = \int \Psi^* p^* p \Psi dx = \|p\Psi\|^2 \geq 0 \Rightarrow E \geq V_{\min} = 0$$

- diskretes Spektrum
- keine Entartung (später: 3D \rightarrow Rotationssymmetrie: Drehimpuls-Entartung)
- Parität: $[H, P] = 0 \Rightarrow \Psi(-x) = \pm \Psi(x)$
- $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + V(x)\Psi = E\Psi \rightarrow$ je größer die Krümmung, desto höher muss die Energie sein!
- Unschärferelation: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

Anwendungen

- Molekülphysik

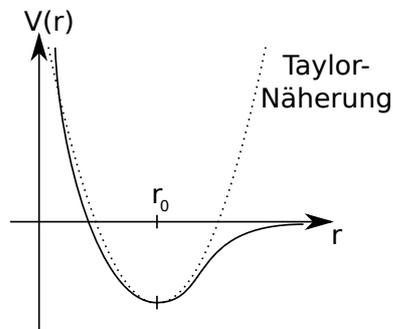


Abbildung 6.23: Morse-Potential \rightarrow Näherung als harmonischer Oszillator

$$V(r) \approx V(r_0) + \frac{V''(r)}{2} \Big|_{r_0} (r - r_0)^2 = C + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

- Festkörperphysik: Gitterschwingungen (*Einstein-Modell*)
- Atomphysik (Atomfallen)
- Quantenoptik (Quantenelektrodynamik)
- Vielteilchentheorie (Quantenfeldtheorie)

im Ortsraum gilt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad \text{Ortsraum} \quad \hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar\partial_x$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

mit \hbar , m , ω als Parametern:

- $[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}] = \text{m} = [x]$
- $[\sqrt{\hbar m\omega}] = \frac{\text{kg m}}{\text{s}} = [p]$
- $x \rightarrow \xi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \partial_x \rightarrow \frac{\partial_\xi}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$
- $H = \frac{\hbar\omega}{2}(-\partial_\xi^2 + \xi^2)$

$$\Rightarrow \boxed{(-\partial_\xi^2 + \xi^2)\Psi(\xi) = \frac{2E}{\hbar\omega}\Psi(\xi) =: \epsilon\Psi(\xi)}$$

im Impulsraum gilt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad \text{Impulsraum} \quad \hat{x} \rightarrow i\hbar\partial_p, \quad \hat{p} \rightarrow p$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\partial_p^2$$

mit \hbar , m , ω als Parametern:

- $[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}] = \text{m} = [x]$
- $[\sqrt{\hbar m\omega}] = \frac{\text{kg m}}{\text{s}} = [p]$
- $p \rightarrow \chi\sqrt{\hbar m\omega}, \partial_p \rightarrow \frac{\partial_\chi}{\sqrt{\hbar m\omega}}$

$$\Rightarrow \boxed{(-\partial_\chi^2 + \chi^2)\Psi(\chi) = \frac{2E}{\hbar\omega}\Psi(\chi) =: \epsilon\Psi(\chi)}$$

\Rightarrow Lösungen im Orts- und Impulsraum identisch!

Lösung von

$$(-\partial_\xi^2 + \xi^2)\Psi(\xi) = \epsilon\Psi(\xi) \quad (6.55)$$

- algebraische Methode (DIRAC, 1926: *Quantum Mechanics*)

$$H = \frac{1}{2}(\xi^2 + \chi^2) = \frac{1}{2}(\xi - i\chi)(\xi + i\chi) = a^*a \quad (6.56)$$

s. Kapitel 7

- Polynommethode (SOMMERFELD)

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x) = 0 \quad \xi^2 \gg \epsilon \quad \partial_\xi^2 \Psi(\xi) = \xi^2 \Psi(\xi)$$

- $\Psi(\xi) \sim e^{\pm \xi^2/2}$
- $\partial_\xi \Psi(\xi) = \pm \xi e^{\pm \xi^2/2}$
- $\partial_\xi^2 \Psi(\xi) = \pm e^{\pm \xi^2/2} + \xi^2 e^{\pm \xi^2/2} = (\xi^2 \pm 1) e^{\pm \xi^2/2} \approx \xi^2 e^{\pm \xi^2/2} = \xi^2 \Psi(\xi)$
- $\Psi(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2}$
- $\partial_\xi \Psi(\xi) = H'(\xi) e^{-\xi^2/2} - H(\xi) \xi e^{-\xi^2/2} = e^{-\xi^2/2} (H'(\xi) - \xi H(\xi))$
- $\partial_\xi^2 \Psi(\xi) = -\xi e^{-\xi^2/2} (H'(\xi) - \xi H(\xi)) + e^{-\xi^2/2} (H''(\xi) - H(\xi) - \xi H'(\xi)) = e^{-\xi^2/2} (H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\xi^2 - 1)H(\xi))$

einsetzen in 6.55:

$$e^{-\xi^2/2} (H'' - 2\xi H' + (\xi^2 - 1)H - \xi^2 H + \epsilon H) = 0$$

$$\boxed{[\partial_\xi^2 - 2\xi \partial_\xi + (\epsilon - 1)]H(\xi) = 0} \quad \text{Hermite Differentialgleichung} \quad (6.57)$$

$$\begin{array}{lll} H(\xi) = 1 & \epsilon - 1 = 0 & \epsilon = 1 \quad E = \frac{\hbar\omega}{2} \\ H(\xi) = \xi & -2\xi + (\epsilon - 1)\xi = 0 & \epsilon = 3 \quad E = \frac{3}{2}\hbar\omega \\ H(\xi) = 2\xi^2 - 1 & & \epsilon = 5 \quad E = \frac{5}{2}\hbar\omega \end{array}$$

- $H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$
- $\partial_\xi H = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$
- $\partial_\xi^2 H = \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) n a_n \xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} \xi^n$
- $\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{[(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2na_n + (\epsilon-1)a_n]}_{=0 \forall n} \xi^n = 0$

$$\Rightarrow \boxed{a_{n+2} = \frac{-\epsilon + 1 + 2n}{(n+1)(n+2)} a_n} \quad \text{Rekursionsformel} \quad (6.58)$$

- für $n \gg 1$: $a_{n+1} \sim \frac{2}{n} a_n \Rightarrow a_{2n} \sim \frac{1}{n!}$

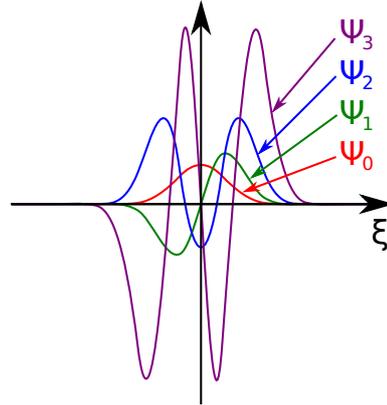
$$\Rightarrow H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} \xi^{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi^{2n} = e^{\xi^2}$$

\Rightarrow Potenzreihe muss abbrechen, sonst ist Ψ nicht normierbar! D. h. es gibt ein $\epsilon_n = 2n + 1$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

$$\boxed{\Psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}} \quad (6.59)$$

- Hermite-Polynome: $H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \dots$

Abbildung 6.24: Ψ -Funktion mit Hermite-Polynomen

$$\epsilon = 2n + 1: (\partial_\xi^2 - 2\xi\partial_\xi + 2n)H_n(\xi) = 0$$

Orthonormiert:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}_{=\sqrt{\pi}} H_n(\xi)H_m(\xi) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = \int \Psi^*(x)\Psi(x) dx = 1$$

$$\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar} x^2}$$

$$\tilde{\Psi}_n(p) \sim H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}$$

$$H_n(\xi) = e^{+\xi^2} (-\partial_\xi)^n e^{-\xi^2} = e^{\xi^2/2} (\xi - \partial_\xi)^n e^{-\xi^2/2}$$

Erzeugende Funktion

$$e^{\xi^2 - (t - \xi^2)} = e^{2t\xi - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} t^n \quad (6.60)$$

Rekursionsformel

$$\partial_\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \Rightarrow \boxed{H_{n+1} - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0} \quad (6.61)$$

Kapitel 7.

Mathematischer Formalismus der Quantenmechanik

bisher: induktiver Aufbau der Gesetze der Quantenmechanik aus den Beobachtungen

jetzt: Formulierung der Gesetze in fundamentalen Prinzipien (*Axiome der Quantenmechanik*). Daraus folgen deduktiv die Aussagen, die mit den Beobachtungen verglichen werden können.

Literatur: Nolting 5/1, Kapitel 5

7.1. Zustände und Observablen

vgl. Analytische Mechanik

7.1.1. Zustand

Minimaler Satz an Informationen, der alle mechanische Eigenschaften des Systems vollständig bestimmt.

klassische Mechanik Zustand \longleftrightarrow generalisierte Koordinaten und Impulse $(q_1, \dots, q_S, p_1, \dots, p_S)$, einzelnes Teilchen (ohne Zwangsbedingungen): (\vec{r}, \vec{p})

Quantenmechanik

1. Unschärferelation: \vec{r} und \vec{p} können nicht gleichzeitig scharf bestimmt werden.
2. gesamte Information über Ort und Impuls ist in der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r})$ enthalten \rightarrow Zustand in der Quantenmechanik: $\Psi(\vec{r})$
3. Wellenfunktion im Impulsraum $\hat{\Psi}(\vec{p})$ enthält exakt dieselbe Information wie $\Psi(\vec{r})$. Deshalb ist $\hat{\Psi}(\vec{p})$ ebenfalls eine Beschreibung des Zustandes. Weitere Darstellungen sind möglich (später). \rightarrow Möchte weder \vec{r} - noch \vec{p} -Darstellung (noch irgendeine andere) hervorheben \rightarrow führe abstrakten Begriff des Zustandes ein:
 - (Dirac-) Zustand $|\Psi\rangle$
 - später: kann $\Psi(\vec{r})$ und $\hat{\Psi}(\vec{p})$ aus $|\Psi\rangle$ berechnen
4. Allgemein: Zustand: Wahrscheinlichkeitsamplitude in Abhängigkeit einer oder mehrerer Observablen

Observable	Operator	Eigenwerte	Zustand
Ort	\vec{r}	$\vec{r} \in \mathbb{R}^3$	$\Psi(\vec{r})$
Impuls	\hat{p}	$\vec{p} \in \mathbb{R}^3$	$\Psi(\vec{p})$

Bedingung:

- a) genügend viele Observablen verwenden, damit der Zustand eindeutig ist
- b) bei mehreren Observablen A, B, C, \dots müssen diese *kompatibel* (*verträglich*) sein, d. h. gleichzeitig scharf gemessen werden können: $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = \dots = 0$
5. Präparation: Messung eines verträglichen, vollständigen Satzes von Observablen.
6. Gegensatz zur klassischen Mechanik: Obwohl der Zustand $|\Psi\rangle$ bekannt ist, sind nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich, z. B. $P(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$
- Einschränkung durch Unschärferelation
 - größtmögliche Menge an Information: (reiner) Zustand $|\Psi\rangle$
 - weniger Informationen als möglich: gemischter Zustand (statistische Mechanik)

7.1.2. Observablen

klassisch $f(q_1, \dots, q_S, p_1, \dots, p_S), f(\vec{r}, \vec{p})$

quantenmechanisch Operator \hat{O} , wirkt auf $|\Psi\rangle$

7.2. Der Hilbertraum

Quantensystem \longleftrightarrow Hilbertraum \mathcal{H}

reiner Zustand \longleftrightarrow Vektor $|\Psi\rangle$

Observablen \longleftrightarrow Operatoren \hat{O} auf \mathcal{H}

ein Hilbertraum \mathcal{H} ist eine Menge (hier: Menge der Zustände), welche folgende Eigenschaften hat:

1. \mathcal{H} ist ein komplexer Vektorraum
2. Auf \mathcal{H} ist ein Skalarprodukt definiert
3. \mathcal{H} ist separabel
4. \mathcal{H} ist vollständig

Bemerkung

- zu 1: Zustände sind Vektoren (*Zustandsvektoren*), physikalisch: Superpositionsprinzip
- zu 3: kann in der Quantenmechanik gelockert werden
- später: $\Psi(\vec{r})$ bilden tatsächlich einen Hilbertraum

Erklärungen

1. \mathcal{H} ist ein komplexer Vektorraum, d. h. es gibt zwei Abbildungen:

Addition $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}: |\alpha\rangle + |\beta\rangle \in \mathcal{H}$

skalare Multiplikation $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, c \in \mathbb{C}: c|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$

Eigenschaften

a) Kommutativgesetz:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \quad , \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H} \quad (7.1)$$

b) Assoziativgesetz:

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle \quad (7.2)$$

$$(c_1 c_2)|\alpha\rangle = c_1(c_2|\alpha\rangle) \quad (7.3)$$

c) Existenz eines Nullvektors: $\mathbf{0} \in \mathcal{H}$:

$$|\alpha\rangle + \mathbf{0} = |\alpha\rangle \quad , \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad (7.4)$$

es gilt außerdem:

$$0|\alpha\rangle = \mathbf{0} \quad , \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad (7.5)$$

$$c\mathbf{0} = \mathbf{0} \quad (7.6)$$

d) Existenz des Inversen: $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ gibt es ein $-|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ mit

$$|\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = \mathbf{0} \quad (7.7)$$

definiere Subtraktion:

$$|\alpha\rangle - |\beta\rangle := |\alpha\rangle + (-|\beta\rangle) \quad (7.8)$$

e) Distributivgesetz:

$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle \quad (7.9)$$

$$(c_1 + c_2)|\alpha\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle \quad (7.10)$$

weitere Begriffea) $|\Phi_1\rangle, \dots, |\Phi_n\rangle$ sind genau dann *linear unabhängig*, wenn

$$\sum_{i=1}^n c_i |\Phi_i\rangle = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$$

b) *Basis* von \mathcal{H} : maximaler Satz linear unabhängiger Vektorenc) *Dimension* von \mathcal{H} : maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren.Bemerkung: Dimension kann unendlich sein: $\{|\Phi_i\rangle\}$ linear unabhängig, falls jede endliche Untermenge linear unabhängig ist2. Skalarprodukt: jedem Paar $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ wird eine Zahl $\langle\alpha|\beta\rangle \in \mathbb{C}$ zugeordnet mit folgenden Eigenschaften:

a)

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad (7.11)$$

b)

$$|\beta\rangle = |\beta_1\rangle + |\beta_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta_1\rangle + \langle\alpha|\beta_2\rangle \quad (7.12)$$

$$c) \quad |\gamma\rangle = c|\beta\rangle, c \in \mathbb{C} \quad \Rightarrow \quad \langle\alpha|\gamma\rangle = c\langle\alpha|\beta\rangle \quad (7.13)$$

aus 7.11 und 7.13 folgt:

$$|\delta\rangle = c|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\delta|\beta\rangle = c^*\langle\alpha|\beta\rangle \quad (7.14)$$

$$d) \quad \langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad (7.15)$$

und

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \iff |\alpha\rangle = \mathbf{0} \quad (7.16)$$

Bemerkungen

- Notation: $\langle\alpha|\beta\rangle$ (DIRAC), mathematisch aber $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)$
- Vorwegnahme von Tatsachen (\rightarrow später)
- Bequemlichkeit der Notation

abgeleitete Begriffe

a) $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ heißen *orthogonal*, falls $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$

Bemerkung: orthogonale Vektoren sind linear unabhängig (nicht immer umgekehrt)

b) *Norm (Länge)* eines Vektors: $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\|\alpha\| \equiv \||\alpha\rangle\| := \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \in \mathbb{R} \quad (7.17)$$

c) *Abstand (Metrik)*:

$$d(|\alpha\rangle, |\beta\rangle) := \||\alpha\rangle - |\beta\rangle\| \quad (7.18)$$

d) *Konvergenz*: Folge $|\alpha_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) konvergiert (stark) gegen $|\alpha\rangle$, falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \||\alpha_n\rangle - |\alpha\rangle\| = 0 \quad (7.19)$$

e) *Cauchy-Folge*: $\forall \epsilon > 0$ existiert ein $N(\epsilon) \in \mathbb{N}$

$$\||\alpha_n\rangle - |\alpha_m\rangle\| < \epsilon \quad \forall n, m > N(\epsilon) \quad (7.20)$$

es gilt immer: (stark) konvergierende Folge ist auch Cauchy-Folge (umgekehrt aber nicht immer)

2010-06-07

Eigenschaften (Beweis \rightarrow Übungsaufgabe)

- $|\langle\alpha|\beta\rangle| \leq \|\alpha\| \|\beta\|$ (Schwarz'sche Ungleichung)
- $|\|\alpha\| - \|\beta\|| \leq \||\alpha\rangle + |\beta\rangle\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$ (Dreiecksungleichung)

Bisher Hilbertraum \mathcal{H} ist ein komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt. Für endlichdimensionalen \mathcal{H} reichen diese Axiome aus. Weshalb?

Entwicklung von $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ in einer Basis

- a) Seien $|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \dots, |\Phi_n\rangle \in \mathcal{H}$ linear unabhängige Vektoren. $n \in \mathbb{N}$ sei die Dimension von \mathcal{H} , d. h. $\{|\Phi_i\rangle\}_{i=1, \dots, n}$ ist Basis von \mathcal{H}
- b) Wähle beliebiges $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$. Die Menge $\{|\Psi\rangle, |\Phi_1\rangle, \dots, |\Phi_n\rangle\}$ ist linear abhängig. Dann gibt es $c_1, c_2, \dots, c_{n+1} \in \mathbb{C}$ (nicht alle = 0) mit

$$\sum_{i=1}^n c_i |\Phi_i\rangle + c_{n+1} |\Psi\rangle = \mathbf{0} \quad (7.21)$$

$c_{n+1} \neq 0$, weil sonst wegen der linearen Unabhängigkeit der $|\Phi_i\rangle$ auch $c_i = 0$ gelten müsste, dann wären alle $c_i = 0 \Rightarrow$ Widerspruch zur Annahme.

Dividiere durch $c_{n+1} \neq 0$, definiere $d_i := -\frac{c_i}{c_{n+1}}$ ($i = 1, \dots, n$)

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n d_i |\Phi_i\rangle \quad (7.22)$$

So kann man jeden beliebigen Vektor $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ in einer beliebigen Basis $\{|\Phi_i\rangle\}$ entwickeln

- c) Weiter: kann $\{|\Phi_i\rangle\}$ orthogonalisieren, z. B. mit Gram-Schmidt-Verfahren; erhalte dann $|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle$ linear unabhängig und orthogonal, d. h.

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = 0 \quad , \quad i \neq j \quad (7.23)$$

- d) $\|\alpha_i\| \neq 0$ (linear unabhängig) \rightarrow kann $|\alpha_i\rangle$ normieren, d. h.

$$\|\alpha_i\| \equiv \||\alpha_i\rangle\| = \sqrt{\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle} = 1 \quad (7.24)$$

Damit ist $\{|\alpha_i\rangle\}_{i=1, \dots, n}$ eine Basis mit

$$\boxed{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}} \quad (7.25)$$

eine *Orthonormalbasis* (ONB) oder *vollständiges Orthonormalsystem* (VONS)

- e) Entwicklung von $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ durch $\{|\alpha_i\rangle\}_{i=1, \dots, n}$

$$\boxed{|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n e_i |\alpha_i\rangle} \quad (7.26)$$

Skalarprodukt mit $|\alpha_j\rangle$:

$$\langle \alpha_j | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^n e_i \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle = e_j \quad (7.27)$$

Berechnung der e_i :

$$\boxed{e_i = \langle \alpha_i | \Psi \rangle} \quad (7.28)$$

- gilt zunächst für endlich-dimensionale Vektorräume
- die meisten physikalischen Probleme → unendlich-dimensionale Hilberträume
- unendlich-dimensionaler Fall: mathematisch komplexer
- für unendlich-dimensionale Hilberträume benötigen wir die Axiome 3 und 4

3. \mathcal{H} ist separabel:

Es gibt in \mathcal{H} (mindestens) eine *überall dichte* Folge $|\alpha_n\rangle$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)

Überall dicht heißt, dass die Folge jedem $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ beliebig nahe kommt. Also

$$\forall \epsilon > 0 \exists m \in \mathbb{N} : \left\| |a_m\rangle - |\Psi\rangle \right\| < \epsilon$$

Diese Forderung erlaubt uns auch in unendlich-dimensionalen Hilberträumen eine Orthonormalbasis zu finden (ohne Beweis). Wegen 3 enthält eine Orthonormalbasis *abzählbar unendlich* viele Elemente: $\{|\alpha_i\rangle \mid i \in \mathbb{N}\}$. Wähle $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ beliebig und entwickle:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} e_i |\alpha_i\rangle \quad , \quad e_i = \langle \alpha_i | \Psi \rangle \quad (7.29)$$

Unendliche Reihe → Konvergenz?

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{i,j=1}^{\infty} e_i e_j \underbrace{\langle \alpha_j | \alpha_i \rangle}_{= \delta_{ij}} = \sum_{i=1}^{\infty} |e_i|^2 < \infty \quad (7.30)$$

d. h. die Reihe $\sum_{i=1}^{\infty} |e_i|^2$ muss konvergent sein, bzw. die Folge $\{e_i\}_{i=1, \dots}$ muss im ℓ_2 sein (→ Übung). Notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für Konvergenz von 7.29

Definition $|\beta_k\rangle := \sum_{i=1}^k e_i |\alpha_i\rangle$, damit: $|\Psi\rangle = \lim_{k \rightarrow \infty} |\beta_k\rangle$ → existiert dieser Grenzwert?

Betrachte:

$$\left\| |\beta_k\rangle - |\beta_l\rangle \right\|^2 = \left\| \sum_{i=k+1}^l e_i |\alpha_i\rangle \right\|^2 = \sum_{i=k+1}^l |e_i|^2 =: |s_l - s_k| \quad (7.31)$$

weil $\sum_{i=1}^{\infty} |e_i|^2$ konvergent, bilden die s_k eine Cauchy-Folge, somit auch die $|\beta_k\rangle$

Theorem (aus der Analysis) In vollständigen Räumen \mathcal{H} gilt: Cauchy-Folgen sind konvergent → deshalb die Forderung 4: \mathcal{H} ist vollständig.

Zusammenfassung Hilbertraumaxiome 1-4 garantieren, dass jeder Zustand $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ in einer Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle\}_{i=1, \dots}$ entwickelt werden kann:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \quad (\text{Entwicklungssatz}) \quad (7.32)$$

Die Entwicklungskoeffizienten

$$c_i = \langle \alpha_i | \Psi \rangle \quad \Rightarrow \quad \Psi = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \Psi \rangle \quad (7.33)$$

sind eindeutig! Somit ist $\{c_i\}_{i=1, \dots}$ eine äquivalente Darstellung von $|\Psi\rangle$

Skalarprodukt

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \quad , \quad |\Phi\rangle = \sum_i d_i |\alpha_i\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_i d_i^* c_i \quad (7.34)$$

Beispiel Hilbertraum der quadratintegriblen Funktionen $\mathcal{H} = L^2$, vgl. Kapitel 5: Zustand eines einzelnen Teilchens \leftrightarrow quadratintegriblen Funktion $\Psi(\vec{r})$

Definition

$$L^2 := \left\{ \Psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 < \infty \right\} \quad (7.35)$$

Behauptung L^2 ist ein Hilbertraum

1. mit $c \in \mathbb{C}$ definiere:

$$c\Psi : \vec{r} \mapsto c\Psi(\vec{r}) \quad (7.36)$$

und $\Psi_1, \Psi_2 \in L^2$:

$$\Psi_1 + \Psi_2 : \vec{r} \mapsto \Psi_1(\vec{r}) + \Psi_2(\vec{r}) \quad (7.37)$$

Null: $\Psi_0(\vec{r}) = 0$

2. Definiere:

$$\boxed{\langle \Phi | \Psi \rangle := \int d^3r \Phi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})} \in \mathbb{C} \quad (7.38)$$

Norm: $\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sqrt{\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2}$ bekannte Norm aus Kapitel 3

normierter Zustand: $\tilde{\Psi}(\vec{r}) := \frac{\Psi(\vec{r})}{\|\Psi\|}$, $\|\tilde{\Psi}\| = 1$

3. und 4. beweisen wir hier nicht; mathematische Tatsache: L^2 ist separabel und vollständig

2010-06-08

uneigentliche (Dirac-) Vektoren In manchen Fällen reicht ein abzählbar-unendlichdimensionaler Hilbertraum nicht aus

Beispiele

1. Ortsmessung \hat{r} hat Eigenwerte in ganz \mathbb{R}^3 , d.h. überabzählbare Menge und überabzählbar viele Eigenvektoren

$$\Psi_{\vec{r}'}(\vec{r}) \longleftrightarrow |\Psi_{\vec{r}'}\rangle \quad , \quad \vec{r}' \in \mathbb{R}^3 \quad (7.39)$$

$\Psi_{\vec{r}'}(\vec{r}) \sim \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ $\notin L^2$, alle linear unabhängig

2. ebene Wellen (Eigenzustände von \hat{p})

$$\Psi(\vec{r}) = C e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad , \quad \Psi \notin L^2 \quad (7.40)$$

$\vec{k} \in \mathbb{R}^3$, überabzählbar viele, linear unabhängige Vektoren.

Idee Beginne mit diskreter (abzählbarer) Basis, z. B.

1. Wellenpakete mit $\Delta r \rightarrow 0$
2. endliche Box mit kantenlänge L , $k_i = \frac{2\pi}{L}n_i$: diskrete Basis (abzählbar), abzählbare Basis im Hilbertraum (im strikten Sinn), dann bilde den Kontinuumsimes ($L \rightarrow \infty$)

Entwicklungssatz:

$$|\Psi\rangle = \sum_p \underbrace{\langle \alpha_p | \Psi \rangle}_{= c_p} \underbrace{|\alpha_p\rangle}_{\text{diskrete ONB}} \quad (7.41)$$

$$= \sum_p \Delta p \frac{\langle \alpha_p | \Psi \rangle}{\sqrt{\Delta p}} \frac{|\alpha_p\rangle}{\sqrt{\Delta p}} \quad \left| \tilde{\alpha}_p \right\rangle := \lim_{\Delta p \rightarrow 0} \frac{|\alpha_p\rangle}{\sqrt{\Delta p}} \quad (7.42)$$

$$\xrightarrow{\Delta p \rightarrow 0} \int_p dp \langle \tilde{\alpha}_p | \Psi \rangle \underbrace{|\tilde{\alpha}_p\rangle}_{\text{kontinuierliche ONB}} \quad (7.43)$$

Skalarprodukt mit $|\tilde{\alpha}_{p'}\rangle$:

$$\langle \tilde{\alpha}_{p'} | \Psi \rangle = \int_p dp \langle \tilde{\alpha}_p | \Psi \rangle \langle \tilde{\alpha}_{p'} | \tilde{\alpha}_p \rangle \quad (7.44)$$

nur möglich, falls $\langle \tilde{\alpha}_{p'} | \tilde{\alpha}_p \rangle = \delta(p - p')$ gilt

\Rightarrow „ $|\tilde{\alpha}_p\rangle$ ist (überabzählbare) Orthonormalbasis“

\rightarrow uneigentliche (Dirac-) Vektoren sind auf δ -Funktionen normiert!

7.3. Dualraum, Dirac-Notation

Lineare Algebra: Dualraum \mathcal{H}^* zu \mathcal{H} ist die Menge aller linearen Abbildungen $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ (lineare Funktionale) $f: |\Psi\rangle \mapsto f(|\Psi\rangle)$

- \mathcal{H}^* ist auch ein komplexer Vektorraum

$$\begin{aligned} cf: |\Psi\rangle &\mapsto cf(|\Psi\rangle) \\ f_1 + f_2: |\Psi\rangle &\mapsto f_1(|\Psi\rangle) + f_2(|\Psi\rangle) \end{aligned}$$

- verwende Skalarprodukt um Abbildungen $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ (lineare Funktionale) zu konstruieren. Wähle $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ und definiere

$$f_\Phi: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad |\Psi\rangle \mapsto \langle \Phi | \Psi \rangle$$

d. h. jedem $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ ist ein $f_\Phi \in \mathcal{H}^*$ zugeordnet

Behauptung zu jedem $h \in \mathcal{H}^*$ existiert (genau) ein $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ mit $h = f_\Phi$ (Riesz'scher Darstellungssatz)

Beweis wähle $h \in \mathcal{H}^*$ beliebig, $h: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, suche $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ mit

$$h(|\Psi\rangle) = \langle \Phi | \Psi \rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle\}$: $|\Phi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$ mit $c_i = \langle \alpha_i | \Phi \rangle$, wähle $|\Psi\rangle = |\alpha_i\rangle$:

$$\begin{aligned} h(|\alpha_i\rangle) &= \langle \Phi | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i | \Phi \rangle^* = c_i^* \\ \Rightarrow |\Phi\rangle &= \sum_i h(|\alpha_i\rangle)^* |\alpha_i\rangle \end{aligned}$$

Überprüfung: $\langle \Phi | \Psi \rangle = \underbrace{\dots}_{h \text{ linear}} = h(|\Psi\rangle)$

Notation (DIRAC)

$$\boxed{f_\Phi =: \langle \Phi |} \quad (7.45)$$

D.h. das Skalarprodukt ist „Produkt“ eines Vektors $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ (*ket-Vektor*) mit einem Vektor $\langle \Phi | \in \mathcal{H}$ (*bra-Vektor*)

2010-06-09

7.4. Lineare Operatoren

Observablen \longleftrightarrow lineare Operatoren auf \mathcal{H}

Operator A : Abbildung, die jedem $|\alpha\rangle \in D_A \subseteq \mathcal{H}$ einen Wert $A|\alpha\rangle \in R_A \subseteq \mathcal{H}$ zuordnet.

Linearer Operator:

- $A(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle) = A|\Psi_1\rangle + A|\Psi_2\rangle$
- $A(c|\Psi\rangle) = cA|\Psi\rangle$

Gleichheit von zwei Operatoren:

$$A = B : \iff D_A = D_B =: D \quad \text{und} \quad A|\alpha\rangle = B|\alpha\rangle \quad , \quad \forall |\alpha\rangle \in D$$

Summe und Produkt von Operatoren:

- $(A_1 + A_2)|\alpha\rangle = A_1|\alpha\rangle + A_2|\alpha\rangle \quad , \quad |\alpha\rangle \in D_{A_1} \cap D_{A_2} = D_{A_1+A_2}$
- $(cA)|\alpha\rangle = cA|\alpha\rangle \quad , \quad |\alpha\rangle \in D_A = D_{cA} \quad , \quad c \in \mathbb{C}$
- $(A_1 A_2)|\alpha\rangle = A_1(A_2|\alpha\rangle) \quad , \quad |\alpha\rangle \in D_{A_2} \quad , \quad A_2|\alpha\rangle \in D_{A_1}$

Nulloperator:

$$0|\alpha\rangle = \mathbf{0} \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$$

Identitätsoperator:

$$\mathbb{1}|\alpha\rangle \equiv 1|\alpha\rangle := |\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$$

Adjungierter Operator A Operator auf \mathcal{H} , $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$: $A|\alpha\rangle =: |\tilde{\alpha}\rangle$, betrachte $\langle\beta|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|A|\alpha\rangle$
 A linear, Skalarprodukt linear im zweiten Argument, $|\beta\rangle \in \mathcal{H}$ fest:

$$|\alpha\rangle \mapsto \langle\beta|A|\alpha\rangle \quad \text{linear}$$

\Rightarrow diese Abbildung ist ein lineares Funktional, d. h. es existiert ein

$$|\tilde{\beta}\rangle \quad \text{mit} \quad \langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\beta}|\alpha\rangle \quad (7.46)$$

Wie hängt $|\tilde{\beta}\rangle$ von $|\beta\rangle$ ab?

- lineare Abhängigkeit
- Abhängigkeit von A

Definition

$$|\tilde{\beta}\rangle =: A^\dagger|\beta\rangle \quad (7.47)$$

A^\dagger heißt zu A *adjungierter Operator*

Bemerkungen

1. falls $D_A \neq \mathcal{H}$ muss $|\tilde{\beta}\rangle$ nicht für jede Wahl von $|\beta\rangle$ existieren, d. h. der Definitionsbereich von A^\dagger enthält dann alle $|\beta\rangle$, für die $|\tilde{\beta}\rangle$ mit 7.46 existiert.
2. $D_A = \mathcal{H} \Rightarrow D_{A^\dagger} = \mathcal{H}$ (Riesz'scher Darstellungssatz)
3. $|\alpha\rangle \in D_A$, $|\beta\rangle \in D_{A^\dagger}$, dann gilt mit 7.46

$$\boxed{\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\beta}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\tilde{\beta}\rangle^* = \langle\alpha|A^\dagger|\beta\rangle^*} \quad (7.48)$$

$$4. |\tilde{\tilde{\alpha}}\rangle = A|\alpha\rangle \quad \langle\tilde{\alpha}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\tilde{\alpha}\rangle^* = \langle\Psi|A|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|A^\dagger|\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (7.49)$$

$\Rightarrow \langle\tilde{\alpha}| = \langle\alpha|A^\dagger$, d. h. A^\dagger wirkt in \mathcal{H}^* wie A in \mathcal{H}

5. Rechenregeln (ohne Angabe der Definitionsbereiche)

- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
- $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
- $(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$, $c \in \mathbb{C}$

6. Im L^2 : adjungierter Operator zu A :

$$\begin{aligned} \langle\Psi_B|A|\Psi_A\rangle &= \int \Psi_B^*(\vec{r}) A \Psi_A(\vec{r}) d^3r \\ &= \int (A^\dagger \Psi_B(\vec{r}))^* \Psi_A(\vec{r}) d^3r \\ &= \langle\Psi_A|A^\dagger|\Psi_B\rangle^* \end{aligned}$$

Definition: hermitescher Operator A

1. $D_A = D_{A^\dagger} = \mathcal{H}$

2. $A^\dagger = A$

physikalische Bedeutung: Observablen

Nachtrag vom 2010-06-11

In der Physik wird hermitesch so definiert, z. T. ohne 1., mathematisch ist dies aber etwas ungenau. Genauer: brauche Unterscheidung zwischen beschränkten und unbeschränkten Operatoren.

Definition Der Operator A heißt beschränkt, falls es ein $a \in \mathbb{R}$ gibt mit $\|A|\alpha\rangle\| \leq a\|\alpha\|$, $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$

Definition Sei A beschränkt und $D_A = D_{A^\dagger}$ und $A = A^\dagger$, dann heißt A *selbst-adjungiert* oder *hermitesch*.

Insbesondere: Alle linearen Operatoren auf endlich-dimensionalen Hilberträumen sind beschränkt. „Leider“ sind in der Quantenmechanik die Hilberträume oft unendlich-dimensional und die relevanten Operatoren, z. B. $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, sind unbeschränkt!

Definition Der Operator A heißt *dicht-definiert* in \mathcal{H} , falls $\overline{D_A} = \mathcal{H}$

Definition Ein dicht-definierter Operator A in \mathcal{H} , für den $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in D_A$ mit $A|\alpha\rangle = |\tilde{\alpha}\rangle$, $A|\beta\rangle = |\tilde{\beta}\rangle$ gilt, dass $\langle \tilde{\alpha} | \beta \rangle = \langle \alpha | \tilde{\beta} \rangle$, heißt *symmetrisch*.

A symmetrisch $\rightarrow A \subset A^\dagger$, d. h. $D_A \subset D_{A^\dagger}$ und $A = A^\dagger|_{D_A}$

Definition Ein dicht-definierter Operator A in \mathcal{H} heißt *selbst-adjungiert*, falls $A^\dagger = A$

- A selbstadjungiert \rightarrow symmetrisch.
- die Umkehrung gilt nicht immer!
- Physik: Unterscheidung zwischen *symmetrisch* und *selbst-adjungiert* wird oft nicht gemacht. Für beide Fälle wird der Begriff *hermitesch* verwendet.

2010-06-09

Beispiele von Operatoren

1. Dyadisches Produkt, gegeben $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$

$$D_{\alpha\beta} = |\alpha\rangle\langle\beta|$$

ist definiert als

$$D_{\alpha\beta}|\Psi\rangle = |\alpha\rangle \underbrace{\langle\beta|\Psi\rangle}_{\in \mathbb{C}} = \langle\beta|\Psi\rangle|\alpha\rangle$$

Gegeben: Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle\}$. Behauptung: jeder beliebige, lineare Operator A kann in dyadischen Produkten der $|\alpha_i\rangle$ entwickelt werden:

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j|$$

Beweis:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i q_i |\alpha_i\rangle \\ A|\Psi\rangle &= \sum_i q_i A|\alpha_i\rangle \\ &= \sum_i r_i |\alpha_i\rangle \end{aligned}$$

Skalarprodukt mit $|\alpha_j\rangle$:

$$\langle \alpha_j | A | \Psi \rangle = \sum_i q_i \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle = \sum_i r_i \underbrace{\langle \alpha_j | \alpha_i \rangle}_{= \delta_{ij}} = r_j$$

einsetzen:

$$\begin{aligned} A|\Psi\rangle &= \sum_j r_j |\alpha_j\rangle = \sum_{i,j} q_i \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle |\alpha_j\rangle = \sum_{i,j} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | \Psi \rangle \\ \Rightarrow & \boxed{A = \sum_{i,j} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i| = \sum_{i,j} \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle |\alpha_j\rangle \langle \alpha_i|} \end{aligned} \quad (7.50)$$

Spezialfall: $A = \mathbb{1}$: $\langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_j | \mathbb{1} | \alpha_i \rangle = \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle = \delta_{ij}$

$$\mathbb{1} = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \quad (7.51)$$

- Vollständigkeit der Basis $\{|\alpha_i\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \mathbb{1}|\Psi\rangle = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \Psi \rangle$$

- praktisch: „Auflösung der $\mathbb{1}$ “, Ausdruck in Operatorform z.B. $AB \rightarrow$ Matrixelemente, Zahlen

$$AB = \mathbb{1}A\mathbb{1}B\mathbb{1} = \sum_{i,j,k} |\alpha_i\rangle \underbrace{\langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | B | \alpha_k \rangle}_{\text{Matrixmultiplikation}} \langle \alpha_k|$$

2. Projektoren, Projektionsoperatoren

gegeben: $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ mit $\|\alpha\| = 1$

$$\begin{aligned} P_{|\alpha\rangle} &:= |\alpha\rangle \langle \alpha| \\ P_{|\alpha\rangle}^2 &= |\alpha\rangle \underbrace{\langle \alpha | \alpha \rangle}_{\|\alpha\|^2 = 1} \langle \alpha| = |\alpha\rangle \langle \alpha| = P_{|\alpha\rangle} \end{aligned}$$

\rightarrow Projektionsoperator

- $\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \Rightarrow P_{|\alpha\rangle} P_{|\beta\rangle} = 0$
- $P_{|\alpha\rangle}$ hermitesch, d. h. $P_{|\alpha\rangle}^\dagger = P_{|\alpha\rangle}$
- $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_k\rangle, \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}, k \leq \text{Dimension von } \mathcal{H}$
- $P = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$ auch Projektionsoperator

3. inverser Operator von A :

falls $D_A = R_A$ und $BA = AB = \mathbb{1}$, dann ist $B =: A^{-1}$ der zu A inverse Operator (existiert nicht immer!)

2010-06-11

4. unitäre Operatoren

Operatoren, die das Skalarprodukt (und damit die Norm) invariant lassen:

$$|\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad , \quad |\tilde{\Phi}\rangle = U|\Phi\rangle \quad , \quad |\tilde{\Psi}\rangle = U|\Psi\rangle$$

$$\langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Phi | U^\dagger U | \Psi \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Phi | \Psi \rangle \quad \forall |\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

Die Forderung ist erfüllt, falls $U^\dagger U = \mathbb{1}$

$$\Rightarrow U^\dagger |\tilde{\Phi}\rangle = U^\dagger U |\Phi\rangle = \mathbb{1} |\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad \text{und} \quad U^\dagger |\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle$$

und

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Phi} | U U^\dagger | \tilde{\Psi} \rangle \stackrel{!}{=} \langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Psi} \rangle$$

erfüllt, falls $U U^\dagger = \mathbb{1}$

Definition U heißt *unitär*, falls gilt

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1} \iff U^\dagger = U^{-1} \quad (7.52)$$

Erwartungswerte

$$\langle O \rangle = \langle \Psi | O | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \underbrace{U O U^\dagger}_{=\tilde{O}} | \tilde{\Psi} \rangle$$

→ Erwartungswerte sind unter unitären Transformationen ebenfalls erhalten, falls Operatoren mittransformiert werden:

$$\tilde{O} = U O U^\dagger \quad (7.53)$$

Anwendung in der Quantenmechanik: Basiswechsel gegeben: zwei verschiedene Orthonormalbasen: $\{|\alpha_i\rangle\}_i$ und $\{|\beta_i\rangle\}_i, |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\Psi\rangle = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle = \sum_i b_i |\beta_i\rangle$$

Normierung:

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \sum_i |a_i|^2 = \sum_i |b_i|^2 = 1$$

- sowohl $\{a_i\}$ als auch $\{b_i\}$ enthalten die gesamte Information über $|\Psi\rangle$

- wie hängen $\{a_i\}$ und $\{b_i\}$ zusammen?

$$b_i = \langle \beta_i | \Psi \rangle = \sum_j a_j \underbrace{\langle \beta_i | \alpha_j \rangle}_{=: U_{ij}}$$

$$a_i = \langle \alpha_i | \Psi \rangle = \sum_j b_j \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \sum_j b_j \underbrace{\langle \beta_j^* | \alpha_i \rangle}_{=: U_{ji}^*} = \sum_j b_j U_{ji}^*$$

definiere Matrix $U_{ij} = \langle \beta_i | \alpha_j \rangle$, $(U^\dagger)_{ij} = U_{ji}^*$, definiere Vektoren $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, $\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \underline{b} = U \underline{a} \quad \text{und} \quad \underline{a} = U^\dagger \underline{b} \quad (7.54)$$

$$U^\dagger \underline{b} = U^\dagger U \underline{a} = \underline{a} \quad \Rightarrow \quad U^\dagger U = \mathbb{1}$$

und analog dazu: $UU^\dagger = \mathbb{1}$

$\Rightarrow U$ ist eine unitäre Matrix

Matrixdarstellung von Operatoren Die Dimension von \mathcal{H} sei endlich ($= n$)

$$|\Phi\rangle = A|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^n A|\alpha_j\rangle c_j = \sum_{j=1}^n A|\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \Psi \rangle$$

$$\underbrace{\langle \alpha_i | \Phi \rangle}_{=: d_i} = \langle \alpha_i | A | \Psi \rangle = \sum_{j=1}^n \underbrace{\langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle}_{A_{ij}} \underbrace{\langle \alpha_j | \Psi \rangle}_{=: c_j}$$

d_i : Entwicklungskoeffizienten von $|\Phi\rangle$, n -Vektor

$(A)_{ij}$: $n \times n$ -Matrix

c_j : Entwicklungskoeffizienten von $|\Psi\rangle$, n -Vektor

1. Operator $A \longleftrightarrow n \times n$ -Matrix
2. A_{ij} hängen von der Wahl der Basis ab
3. $(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj} \rightarrow$ Matrixmultiplikation
4. $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$, $\langle \alpha_i | A^\dagger | \alpha_j \rangle = \langle \alpha_j | A | \alpha_i \rangle^* = A_{ji}^*$
5. $A = A^\dagger \Rightarrow A_{ij} = A_{ji}^*$ (insbesondere $A_{ii} \in \mathbb{R}$)

Basiswechsel für Operatoren

$$A_{ij} = \langle \alpha_i | O | \alpha_j \rangle$$

$$B_{ij} = \langle \beta_i | O | \beta_j \rangle$$

$$|\beta_j\rangle = \underbrace{\sum_k |\alpha_k\rangle \langle \alpha_k |}_{=: \mathbb{1}} |\beta_j\rangle$$

$$B_{ij} = \sum_{k,l} \underbrace{\langle \beta_i | \alpha_k \rangle}_{=: U_{ik}} \underbrace{\langle \alpha_k | O | \alpha_l \rangle}_{=: A_{kl}} \underbrace{\langle \alpha_l | \beta_j \rangle}_{=: U_{jl}^* = (U^\dagger)_{lj}}$$

Matrixmultiplikation

$$B = UAU^\dagger \quad (7.55)$$

→ unitäre Matrizen (Operatoren) beschreiben Basiswechsel (zwischen zwei Orthonormalbasen)

7.5. Das Eigenwertproblem

Typische Problemstellung in der Quantenmechanik: gegebener Operator A , finde $|\Psi\rangle \neq 0$ und Skalar λ mit

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad (7.56)$$

Beispiele

1. Zustände $|\Psi\rangle$ mit scharfem Wert λ einer Observablen A
2. $A = H$: zeitunabhängige Schrödingergleichung, $\lambda = E$: Energie, $|\Psi\rangle$: stationäre Zustände

Begriffe

1. λ heißt *Eigenwert* von A .
2. $|\Psi\rangle$ heißt *Eigenvektor* (*Eigenzustand*) von A zu λ .
3. Falls es zum selben Eigenwert λ mehrere (linear unabhängige) Eigenvektoren gibt, so nennt man λ *entartet*.
4. $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ Eigenvektoren zum selben Eigenwert λ , dann auch $a_1|\Psi_1\rangle + a_2|\Psi_2\rangle$: Die Menge aller Eigenvektoren zu λ : $E_\lambda \subseteq \mathcal{H}$ ist ein Unterraum von \mathcal{H} , genannt *Eigenraum* zu λ . $\dim(E_\lambda) =$ Anzahl (linear unabhängiger) Eigenvektoren zu $\lambda =$ Entartungsgrad. Orthonormalbasis des Eigenraumes → normierte Eigenvektoren
5. Menge aller Eigenwerte $S_A \subseteq \mathbb{C}$ von A bezeichnet man als *Spektrum* von A . Mögliche Arten eines Spektrums: diskret, kontinuierlich oder gemischt

Beispiel

$$A = H \quad : \quad H\Psi = E\Psi \quad (\text{zeitunabhängige Schrödingergleichung})$$

Spektrum von H : erlaubte Energien der stationären Zustände

unendlich tiefer Potentialtopf: diskret ($E_n = \frac{c}{n^2}$, $S_H = \{\frac{c}{n^2} ; n = 1, 2, \dots\}$)

freie Teilchen: ebene Wellen: kontinuierlich ($E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $S_H = \{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} ; k \in \mathbb{R}\} = \mathbb{R}_+$)

endlich hoher Potentialtopf: gemischt

2010-06-14

Existenz von Lösungen von 7.56 Spektralsatz der linearen Algebra: Falls A normal ist, d. h. $[A, A^\dagger] = 0$, dann gibt es eine Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle\}$ von Eigenzuständen mit

$$A|\alpha_i\rangle = \lambda_i|\alpha_i\rangle$$

und

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}$$

Spezialfälle

- Hermitesche Operatoren $A = A^\dagger \Rightarrow [A, A^\dagger] = 0$ (meistens in der Quantenmechanik)
- Unitäre Operatoren $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$

Man sagt: A ist diagonalisierbar, denn

$$A_{ij} = \langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle = \lambda_j \langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \lambda_i \delta_{ij}$$

d. h. (A_{ij}) ist eine Diagonalmatrix

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

Eigenschaften von hermiteschen Operatoren

1. Erwartungswerte sind reell: $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$: $\langle A \rangle := \langle \Psi | A | \Psi \rangle$

Beweis:

$$\langle A^\dagger \rangle = \langle \Psi | A^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle^* = \langle A \rangle^*$$

$$A^\dagger = A \Rightarrow \langle A \rangle = \langle A \rangle^* \Rightarrow \langle A \rangle \in \mathbb{R}$$

2. Eigenwerte sind reell, $S_A \subseteq \mathbb{R}$

$$\lambda \in S_A : A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \Rightarrow \langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \lambda \underbrace{\langle \Psi | \Psi \rangle}_{=1} = \lambda$$

3. Eigenzustände sind orthogonal (folgt aus Spektralsatz)

- a) $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten $\lambda_1 \neq \lambda_2$

$$A|\Psi_1\rangle = \lambda_1|\Psi_1\rangle$$

$$A|\Psi_2\rangle = \lambda_2|\Psi_2\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_2 | A | \Psi_1 \rangle = \lambda_1 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_1 | \underbrace{A^\dagger}_{=A} | \Psi_2 \rangle^* = \langle \Psi_1 | A | \Psi_2 \rangle = \lambda_2^* \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle^* = \lambda_2 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle \underbrace{(\lambda_1 - \lambda_2)}_{\neq 0} = 0 \Rightarrow \boxed{\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = 0}$$

- b) $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$ Eigenzustände zum selben Eigenwert $\lambda \rightarrow$ wähle Orthonormalbasis im Eigenraum E_λ

4. Eigenzustände bilden eine Orthonormalbasis (s. oben) \Rightarrow beliebiger $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ kann in dieser Orthonormalbasis entwickelt werden:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \Psi \rangle$$

Wirkung von A auf $|\Psi\rangle$

$$A|\Psi\rangle = \sum_i \underbrace{A|\alpha_i\rangle}_{=\lambda_i|\alpha_i\rangle} = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \Psi \rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

5. Spektraldarstellung

$$\boxed{A = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|} \quad (7.57)$$

6. $A = \mathbb{1} \Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation für Orthonormalbasis $\{|\alpha_i\rangle\}$

$$\mathbb{1} = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$$

7. Funktionen von Operatoren

a) Potenzen:

$$A^n = AA^{n-1} = A^{n-1}A, \quad A^0 := \mathbb{1}$$

b) Polynome

$$p_n(A) := c_0 \mathbb{1} + c_1 A + c_2 A^2 + \dots + c_n A^n$$

c) Potenzreihen, z. B. Exponentialfunktion:

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n$$

d) analytische Funktion $f(A)$, Taylorreihe:

$$f(A) := \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n$$

e) allgemein: Spektralsatz:

$$A^n = \sum_i \lambda_i^n |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$$

$$f(A) := \sum_i f(\lambda_i) |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$$

8. Ableitung nach einem Operator: gegeben: $f(A)$

$$\frac{d}{dA} f(A) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(A + \epsilon \mathbb{1}) - f(A)}{\epsilon}$$

mit denselben Rechenregeln wie auch für Zahlen

7.6. Messprozess in der Quantenmechanik

Beobachter \Rightarrow Messapparatur \Rightarrow System

klassisch: kann (im Prinzip) Einfluss der Messung auf das System beliebig klein machen

quantenmechanisch: minimale Störung des Systems durch Messung (\rightarrow Heisenberg'sche Unschärferelation)

physikalische Observable \longleftrightarrow hermitescher Operator $O = O^\dagger$

Was passiert bei einer Messung? Eigenwertproblem für O : $O|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

Notation: $|\lambda\rangle$ ist Eigenzustand von O mit Eigenwert λ . Bei Entartung $|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle, \dots$

- $\{|\lambda\rangle\}$ bilden eine Orthonormalbasis: $\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$
- $O^\dagger = O \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$

Messung in der Quantenmechanik: physikalische Tatsachen (ohne Entartung)

1. mögliche Messergebnisse: Eigenwerte λ
2. Wahrscheinlichkeit, dass λ gemessen wird:

$$P(\lambda) = |\langle\lambda|\Psi\rangle|^2 \quad (7.58)$$

3. Zustand des Systems nach der Messung mit Ergebnis λ : Eigenzustand $|\lambda\rangle$ (*Kollaps der Wellenfunktion*)

→ durch Messung von O lassen sich dessen Eigenzustände präparieren

→ Bei nochmaliger Messung: gleiches Ergebnis λ mit Sicherheit $P(\lambda) = 1$

Beispiel Ortsoperator \hat{r} (drei verträgliche Operatoren \hat{x} , \hat{y} , \hat{z}) mit Eigenwerten $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$, Eigenzustände $|\vec{r}\rangle$ (uneigentliche Dirac-Vektoren)

Wahrscheinlichkeit \vec{r} zu messen:

$$P(\vec{r}) = |\langle\vec{r}|\Psi\rangle|^2 \stackrel{\text{Kap. 3}}{=} |\Psi(\vec{r})|^2 \Rightarrow \boxed{\Psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\Psi\rangle} \quad (7.59)$$

entwickle $\{|\vec{r}\rangle\}$ in Orthonormalbasis:

$$\boxed{|\Psi\rangle = \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\Psi\rangle = \int d^3r \Psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle} \quad (7.60)$$

Darstellung von Messungen durch Projektionsoperatoren Spektraldarstellung:

$$O = \sum_{\lambda} \lambda \underbrace{|\lambda\rangle\langle\lambda|}_{=: P_{\lambda}}$$

$P_{\lambda} = |\lambda\rangle\langle\lambda|$: Projektor auf Eigenvektor $|\lambda\rangle$, mit Entartung:

$$A = \sum_{\lambda} \lambda \underbrace{\sum_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|}_{=: P_{\lambda}}$$

$$\boxed{P_{\lambda} = \sum_{i=1}^{d_{\lambda}} |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|} \quad \text{Projektor auf Eigenraum } E_{\lambda} \text{ zum Eigenwert } \lambda \quad (7.61)$$

Messprozess in der Quantenmechanik (allgemein, mit Entartung)

1. mögliche Messergebnisse: λ
2. Wahrscheinlichkeit, dass λ auftritt:

$$P(\lambda) = \sum_{i=1}^{d_\lambda} |\langle \lambda_i | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | P_\lambda | \Psi \rangle$$

Summe:

$$\sum_{\lambda} P(\lambda) = \sum_{\lambda, i} |\langle \lambda_i | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | \underbrace{\sum_{\lambda, i} |\lambda_i\rangle\langle \lambda_i|}_{= \mathbb{1}} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

3. Zustand nach Messung von λ :

$$|\Psi'\rangle = \frac{P_\lambda |\Psi\rangle}{\|P_\lambda |\Psi\rangle\|} = \frac{P_\lambda |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_\lambda^\dagger P_\lambda | \Psi \rangle}} = \frac{P_\lambda |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_\lambda | \Psi \rangle}} = \frac{P_\lambda |\Psi\rangle}{\sqrt{P(\lambda)}} \quad (7.62)$$

wobei verwendet wurde: $P_\lambda^\dagger = P_\lambda$ und $P_\lambda^2 = P_\lambda$.

nicht-entarteter Fall: $|\Psi'\rangle = |\lambda\rangle$

2010-06-15

7.7. Postulate der Quantenmechanik

1. Zustände des Systems entsprechen Vektoren $|\Psi\rangle$ im Hilbertraum \mathcal{H} .

Ortsdarstellung:

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$$

($|\vec{r}\rangle$ Eigenzustände von \hat{r})

Wahrscheinlichkeitsdichte für Aufenthalt des Teilchens bei \vec{r} :

$$P(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 = |\langle \vec{r} | \Psi \rangle|^2$$

2. Messung einer physikalischen Größe (Observable) entspricht einem linearen, hermiteschen Operator

$$A = \sum_{\lambda} \lambda P_\lambda$$

P_λ : Projektor auf Eigenraum E_λ , $\lambda \in \mathbb{R}$: Eigenwert

- a) mögliche Messergebnisse: Eigenwerte λ von A
- b) Wahrscheinlichkeit, dass λ gemessen wird: $P(\lambda) = \langle \Psi | P_\lambda | \Psi \rangle$
- c) Zustand nach der Messung $|\Psi'\rangle = \frac{P_\lambda |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_\lambda | \Psi \rangle}} \Rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$

3. Zeitentwicklung von $|\Psi\rangle$: zeitabhängige Schrödingergleichung

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

wobei $H = H(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$ der Hamiltonoperator ist.

Ortsdarstellung: $\langle \vec{r}' |$ und $\mathbb{1} = \int d^3r' |r'\rangle \langle r'|$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}) = H \Psi(\vec{r})$$

mit $H = H(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla})$

Erweiterung: gemischte Zustände bisher:

- (reine) Zustände
- Ergebnis vollständiger Präparation
- wir „kennen“ den Zustand
- trotzdem können nicht alle Observablen gleichzeitig scharf gemessen werden \rightarrow Heisenberg'sche Unschärferelation

jetzt:

- gemischte Zustände
- unvollständige Präparation
- wir „kennen“ den Zustand nur zum Teil

Beispiele

- statistische Mechanik, viele Teilchen
- Teilchensystem, welches mit der Umgebung wechselwirkt

formale Beschreibung Vektor $|\Psi\rangle \in \mathcal{H} \rightarrow$ Dichtematrix ρ (statistischer Operator)

Annahme System befinde sich mit Wahrscheinlichkeit p_m im Zustand $|\Psi_m\rangle$, wobei $\{|\Psi_m\rangle\}$ eine Orthonormalbasis ist.

Es gilt: $0 \leq p_m \leq 1$, $\sum_m p_m = 1$

Erwartungswert einer Observablen:

$$\langle A \rangle = \sum_m p_m \langle \Psi_m | A | \Psi_m \rangle$$

wähle beliebige Orthonormalbasis $\{|\Phi_i\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_m \sum_{i,j} p_m \langle \Psi_m | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | A | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | \Psi_m \rangle \\ &= \sum_{i,j} \underbrace{\langle \Phi_i | A | \Phi_j \rangle}_{=: A_{ij}} \underbrace{\sum_m p_m \langle \Phi_j | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \Phi_i \rangle}_{=: \rho_{ji}} \\ &= \sum_{i,j} A_{ij} \rho_{ji} = \sum_i (A \rho)_{ii} \end{aligned}$$

Definition: Dichtematrix

$$\rho := \sum_m p_m |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m| \quad (7.63)$$

Definition: Spur einer Matrix (eines Operators) O Sei $\{|\Phi_i\rangle\}$ eine Orthonormalbasis:

$$\text{Sp}(O) \equiv \text{Tr}(O) := \sum_i O_{ii} = \sum_i \langle \Phi_i | O | \Phi_i \rangle \quad (7.64)$$

Behauptung: $\text{Sp}(O)$ hängt nicht von der Wahl der Basis ab (Beweis \rightarrow Übung)

Erwartungswert einer Observablen A im gemischten Zustand ρ

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(A\rho) \quad (7.65)$$

reine Zustände: $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$

weitere Eigenschaften

1. $\rho^\dagger = \rho$
2. $\rho \geq 0$ ($\iff \langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0$) positiv semidefinit
3. $\text{Sp}(\rho) = 1$
4. reiner Zustand: $|\Psi\rangle$: $\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| = P_\Psi$
5. $\text{Sp}(\rho^2) \begin{cases} = 1 & \text{reiner Zustand} \\ < 1 & \text{gemischter Zustand} \end{cases}$
6. Schrödingergleichung

$$\Rightarrow \dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \quad (7.66)$$

2010-06-16

7.8. Anwendung: Harmonischer Oszillator II

Methode nach DIRAC, ohne spezifische Basis (z. B. Ort)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (7.67)$$

Längen- und Impulsskala:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \text{ (Länge)} \quad , \quad p_0 = \frac{\hbar}{x_0} = \sqrt{m\omega\hbar} \text{ (Impuls)}$$

definiere dimensionslose Größen:

$$X := \frac{x}{x_0} \quad , \quad P := \frac{p}{p_0} \quad \Rightarrow \quad X^\dagger = X \quad , \quad P^\dagger = P$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} X \quad , \quad p = \sqrt{m\omega\hbar} P \quad (7.68)$$

einsetzen:

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega P^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega X^2 \quad \Rightarrow \quad H = \frac{1}{2}\hbar\omega(P^2 + X^2) \quad (7.69)$$

Kommutator:

$$[x, p] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad [X, P] = \underbrace{\frac{i\hbar}{x_0 p_0}}_{= \hbar} = i$$

Definiere

$$\boxed{a := \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) \quad \Rightarrow \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP)} \quad (7.70)$$

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2}(X - iP)(X + iP) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 + iXP - iPX) \\ aa^\dagger &= \frac{1}{2}(X + iP)(X - iP) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 - iXP + iPX) \\ a^\dagger a + aa^\dagger &= X^2 + P^2 \\ \Rightarrow H &= \frac{1}{2}\hbar\omega(a^\dagger a + aa^\dagger) \end{aligned}$$

Kommutator:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[X + iP, X - iP] = \frac{1}{2}(-i\underbrace{[X, P]}_{=i} + i\underbrace{[P, X]}_{=-i}) = 1 \\ \Rightarrow \boxed{[a, a^\dagger] = 1} &\quad \Rightarrow \quad aa^\dagger = a^\dagger a + 1 \end{aligned} \quad (7.71)$$

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)} \quad (7.72)$$

Eigenwertproblem für $H \rightarrow$ Eigenwertproblem für

$$\boxed{a^\dagger a =: \hat{n}} \quad (7.73)$$

\rightarrow Eigenwerte n , Zustände $|n\rangle$

$$\Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad ; \quad |n\rangle$$

Bemerkungen

1. \hat{n} hermitesch:

$$\hat{n}^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a = \hat{n} \quad \Rightarrow \quad n \in \mathbb{R}$$

2.

$$\begin{aligned} [\hat{n}, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1} a = -a \\ [\hat{n}, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=a} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{=0} a = a^\dagger \end{aligned}$$

3. Eigenwerte von \hat{n} sind nicht negativ: $n \geq 0$ ($n = 0: a|0\rangle = 0$)

$$\text{Beweis: } \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \langle n|\hat{n}|n\rangle = n \underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = n \Rightarrow n = \langle n|\hat{n}|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \|a|n\rangle\|^2 \geq 0$$

4. $|n\rangle$ Eigenzustand von \hat{n} zum Eigenwert n , dann sind auch

$$|n-1\rangle \propto a|n\rangle$$

$$|n+1\rangle \propto a^\dagger|n\rangle$$

Eigenvektoren von \hat{n} mit Eigenvektoren $n-1$ bzw. $n+1$ falls die so erhaltenen Zustände $|n+1\rangle \neq 0$

Beweis:

$$\hat{n}a|n\rangle = a\hat{n}|n\rangle + [\hat{n}, a]|n\rangle = an|n\rangle - a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$$

$\Rightarrow a|n\rangle$ ist Eigenzustand von \hat{n} mit Eigenwert $n-1$

$$\hat{n}a^\dagger|n\rangle = a^\dagger\hat{n}|n\rangle + [\hat{n}, a^\dagger]|n\rangle = na^\dagger|n\rangle + a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$$

$\Rightarrow a^\dagger|n\rangle$ ist Eigenzustand von \hat{n} mit Eigenwert $n+1$

Normierung: $\|a|n\rangle\|^2 = \langle n|\underbrace{a^\dagger a}_{=\hat{n}}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle} \neq 0 \quad (n \neq 0) \quad (7.74)$$

$$\|a^\dagger|n\rangle\|^2 = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = n+1$$

$$\boxed{a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle} \neq 0 \quad (7.75)$$

5. n ganzzahlig, kleinster Eigenwert: $n = 0$

Beweis durch Widerspruch:

- a) nehme an, $|\gamma\rangle$ zum Eigenwert $\gamma \notin \mathbb{Z}$

$$a^n|\gamma\rangle = \underbrace{a a \cdots a}_n|\gamma\rangle = \sqrt{\gamma(\gamma-1)\cdots(\gamma-n)}|\gamma-n\rangle$$

Eigenzustand zu $\gamma-n$: wähle $n > \gamma \Rightarrow \gamma-n < 0 \Rightarrow$ Widerspruch

- b) $n > 0$ sei kleinster Eigenwert, aber $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \neq 0$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $n-1 < n \Rightarrow$ Widerspruch

6. das Spektrum ist nach oben unbeschränkt

Beweis: nehme an, n_{\max} sei größter Eigenwert, dann ist

$$a^\dagger|n_{\max}\rangle = \sqrt{n_{\max}+1}|n_{\max}+1\rangle$$

Eigenzustand zum Eigenwert $n_{\max}+1 > n_{\max} \Rightarrow$ Widerspruch

7. Eigenwerte sind nicht entartet (aufgrund X, P)

Beweis: nehme an, zum Eigenwert n gäbe es zwei Eigenzustände $|n, 1\rangle, |n, 2\rangle$ mit $\langle n, 1|n, 2\rangle = 0$

→ Observable: z. B. $O = |n, 1\rangle\langle n, 1|$, welche diese Zustände unterscheidet:

$$\langle n, i|O|n, j\rangle = \delta_{ij}$$

→ O müsste Funktion von X, P sein, bzw. von a, a^\dagger , d. h.

$$O = \sum_{n,m} c_{nm} (a^\dagger)^n a^m$$

$|n, 1\rangle, |n, 2\rangle$ entartet $\Rightarrow [O, \hat{n}] = 0 \Rightarrow c_{nm} = 0$ für $n \neq m$

$$\Rightarrow O = \sum_n c_{nn} \hat{n}^n$$

$\Rightarrow O$ kann $|n, 1\rangle, |n, 2\rangle$ nicht unterscheiden \Rightarrow Widerspruch

Zusammenfassung

- $S_{\hat{n}} = \{0, 1, 2, 3, \dots\} = \mathbb{N}_0$, \hat{n} : Anzahloperator, n : Anzahl Quanten
- $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$
- $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$
- $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$
- $a|0\rangle = 0$ ($|0\rangle$: Grundzustand: *Vakuum*)
- Erzeugen von beliebigen Eigenzuständen aus $|0\rangle$:

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle} \quad (7.76)$$

- Mit $H = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ sind $|n\rangle$ auch Eigenzustände von H mit Energien

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.77)$$

→ Quantisierung des elektromagnetischen Feldes (→ PLANCK), $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$ (Nullpunktsfluktuation → Heisenberg'sche Unschärferelation)

Übergang in die Ortsdarstellung

$$\Psi_n(x) = \langle x|n\rangle$$

$$\tilde{\Psi}_n(X) = \langle X|n\rangle = \tilde{\Psi}_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

Grundzustand: $\tilde{\Psi}_0(X) = \langle X|0\rangle$

$$a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP)|0\rangle \quad \left| \text{von links: } \langle X'| \right.$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \int dX \langle X'|X + iP|X\rangle \underbrace{\langle X|0\rangle}_{= \tilde{\Psi}_0(X)} = 0$$

$$\langle X'|X|X\rangle = X\delta(X - X')$$

$$\langle X'|P|X\rangle = -i\frac{d}{dX}\delta(X - X')$$

$$\Rightarrow \left(X + \frac{d}{dX}\right)\tilde{\Psi}_0(X) = 0$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0(X) \propto e^{-X^2/2}$$

$$\Psi_n(X) = \langle X|n\rangle \propto \langle X|(a^\dagger)^n|0\rangle$$

$$\propto e^{-X^2/2} e^{X^2/2} \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \underbrace{\tilde{\Psi}_0(X)}_{\propto e^{-X^2/2}}$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{= H_n(X): \text{ Hermite-Polynome}}$$

Kapitel 8.

Bewegung im Zentralfeld, H-Atom

8.1. Drehimpuls

bisher: 1-dimensional (\rightarrow Kapitel 6)

jetzt: 3-dimensional, Ziel: H-Atom

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

$$H\Psi = E\Psi$$

für $\Psi(\vec{r})$, $\vec{r} = (x, y, z)$, E : Eigenenergien

Rechnungen komplexer als im 1-dimensionalen Fall \rightarrow Symmetrien ausnutzen!

Atome:

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = V(r) \quad , \quad r := |\vec{r}| \quad (8.1)$$

\rightarrow Invarianz unter Drehungen um den Kern (Ursprung 0)

\rightarrow Symmetriegruppe: $SO(3)$

\rightarrow Darstellung von $SO(3)$ auf \mathcal{H} :

$$R \in SO(3) : \boxed{\tilde{\Psi}(\vec{r}) := U_R \Psi(\vec{r}) := \Psi(R\vec{r})} \quad (8.2)$$

man kann zeigen:

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Phi} \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle \Rightarrow U_R^\dagger U_R = U_R U_R^\dagger = \mathbb{1}$$

Infinitesimale Drehungen

$$R: \vec{r} \mapsto \vec{r} + \vec{\omega} \times \vec{r} \equiv R\vec{r}$$

$$\begin{aligned} U_R \Psi(\vec{r}) &= \Psi(\vec{r} + \vec{\omega} \times \vec{r}) \\ &\simeq \Psi(\vec{r}) + (\vec{\omega} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) \\ &\simeq \Psi(\vec{r}) + \vec{\omega} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}) \\ &\simeq \Psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \underbrace{(\vec{r} \times \vec{p})}_{=: \vec{L}} \Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{U_R = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{L}} \quad (8.3)$$

mit dem Drehimpulsoperator

$$\boxed{\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}} \quad (8.4)$$

Komponenten: $\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$, hermitesch:

$$L_x^\dagger = (yp_z - zp_y)^\dagger = p_z^\dagger y^\dagger - p_y^\dagger z^\dagger = p_z y - p_y z = yp_z - zp_y = L_x$$

analog für L_y, L_z .

Wegen $V(\vec{r}) = V(r)$ Zentralproblem:

$$[U_R, H] = 0 \quad \forall R \in \text{SO}(3)$$

$$\boxed{[\vec{L}, H] = 0} \iff [L_x, H] = [L_y, H] = [L_z, H] = 0 \quad (8.5)$$

→ Eigenzustände zu $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ können gleichzeitig als Eigenzustände einer Komponente von \vec{L} gewählt werden. Allerdings: Drehimpulskomponenten sind untereinander nicht verträglich!

$$[L_i, L_j] \neq 0 \quad \text{für } i \neq j$$

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

allgemein:

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} L_k} \quad (8.6)$$

mit $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$ und $\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$, andere $\epsilon_{ijk} = 0$.

Drehimpulsalgebra kurze Schreibweise:

$$\boxed{\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}} \quad (8.7)$$

→ man kann nur eine Komponente von \vec{L} gleichzeitig scharf bestimmen.

aber:

$$\begin{aligned} L^2 &:= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ [L^2, L_z] &= [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + \underbrace{[L_z^2, L_z]}_{=0} = L_x \underbrace{[L_x, L_z]}_{=-i\hbar L_y} + \underbrace{[L_x, L_z]}_{=-i\hbar L_y} L_x + L_y \underbrace{[L_y, L_z]}_{=i\hbar L_x} + \underbrace{[L_y, L_z]}_{=i\hbar L_x} L_y = 0 \end{aligned}$$

allgemein:

$$\boxed{[L^2, L_i] = 0} \quad (i = x, y, z) \quad (8.8)$$

→ konstruiere gemeinsame Eigenzustände zu L^2, L_z :

1. L^2 ist hermitesch und positiv (semi-) definit, d. h.

$$\langle \Psi | L^2 | \Psi \rangle \geq 0 \quad \forall |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

⇒ Eigenwerte sind reell, nicht-negativ

$$L^2 |\Psi\rangle = \hbar^2 \lambda |\Psi\rangle \quad , \quad \lambda \in \mathbb{R}, \lambda \geq 0$$

2. definiere:

$$L_{\pm} := L_x \pm iL_y \quad (\text{Leiteroperatoren}) \quad (8.9)$$

Eigenschaften: (vgl. a, a^\dagger bei harmonischem Oszillator)

- a) $(L_{\pm})^\dagger = L_{\mp}$
- b) $[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$
- c) $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$
- d) $[L^2, L_{\pm}] = 0$
- e) $L_+L_- = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z$
- f) $L^2 = L_-L_+ + \hbar L_z + L_z^2$

3. • $L_z|\Psi\rangle = \underbrace{\hbar m}_{\text{Eigenwert von } L_z}|\Psi\rangle, m \in \mathbb{R}$

Behauptung: $L_{\pm}|\Psi\rangle$ wieder Eigenzustände von L_z mit Eigenwerten $\hbar(m \pm 1)$

Beweis: $L_zL_{\pm}|\Psi\rangle = L_{\pm}L_z|\Psi\rangle \pm \hbar L_{\pm}|\Psi\rangle = \hbar(m \pm 1)L_{\pm}|\Psi\rangle$

- $L^2|\Psi\rangle = \hbar^2\lambda|\Psi\rangle \Rightarrow L_{\pm}|\Psi\rangle$ wieder Eigenzustände von L_z, L^2

$$\begin{aligned} \|L_{\pm}|\Psi\rangle\|^2 &= \langle\Psi|L_{\pm}^\dagger L_{\pm}|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|L_{\mp} L_{\pm}|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|L^2 - L_z \mp \hbar L_z|\Psi\rangle \\ &= \hbar^2(\lambda - m^2 \mp m) \geq 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} m \geq 0 & : \quad \lambda \geq m^2 + m = m(m+1) = |m|(|m|+1) \\ m < 0 & : \quad \lambda \geq m^2 - m = m(m-1) = |m|(|m|+1) \end{cases}$$

$$\Rightarrow |m|(|m|+1) \leq \lambda =: l(l+1) \quad \text{mit } l \geq 0 \quad \text{der maximale Wert von } |m|$$

Eigenzustände: $|\Psi_{lm}\rangle$

2010-06-21

Zahlenwerte für l, m ? Wähle l fest, sei m der maximale durch $|m| \leq l$ zugelassene Wert, d. h. $l-1 < m \leq l$ (falls $m \leq l-1$, erhöhe m um 1 mit L_+), dann muss $L_+|\Psi_{lm}\rangle = 0$, sonst gäbe es $|\Psi_{lm+1}\rangle$ mit $m+1 \geq l \Rightarrow m = l$

analog: kleinstes m ist $m = -l$

$\Rightarrow m$ kann Werte $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ annehmen, Dies sind $2l+1$ mögliche Werte. Dies ist nur möglich, falls $2l \geq 0$ ganzzahlig.

Zusammenfassend:

$$\boxed{\begin{aligned} l &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned}} \quad (8.10)$$

(folgt aus Drehimpulsalgebra)

8.2. Ortsdarstellung, Kugelflächenfunktionen

Drehimpuls: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \vec{r} \times (-i\hbar\vec{\nabla})$, z. B.

$$L_z = xp_y - yp_x \rightarrow i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

Kugelkoordinaten

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{L}^2 &= -\hbar \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \\ L_z &= -\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}} \quad (8.11)$$

gemeinsame Eigenfunktion $Y(\vartheta, \varphi)$ (manchmal auch $F(\vartheta, \varphi)$)

$$L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{Kugelflächenfunktionen})$$

$$L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{stetig, eindeutig auf Oberfläche der Einheitskugel})$$

Separationsansatz

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Phi(\varphi) P(\vartheta)$$

in Eigenwertgleichung für L_z

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) P(\vartheta) &= \hbar m \Phi(\varphi) P(\vartheta) \\ \Rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) &= m \Phi(\varphi) \end{aligned}$$

Lösung

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (8.12)$$

Φ muss 2π -Periodisch sein $\rightarrow m$ ganzzahlig!

Ohne Beweis: $\Phi_m(\varphi)$ bilden Orthonormalsystem im Intervall $0 < \varphi < 2\pi$

Eigenwertgleichung von L^2

$$-\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] e^{im\varphi} P(\vartheta) = l(l+1) e^{im\varphi} P(\vartheta) \quad (8.13)$$

setze $\xi = \cos \vartheta$, $0 \leq \vartheta \leq \pi \rightarrow -1 \leq \xi \leq 1$

(Nebenrechnung: $\frac{d}{d\xi}(\dots) = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta}(\dots)$)

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dP}{d\xi} \right] + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) P = 0$$

$$\boxed{(1 - \xi^2) \frac{d^2 P}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dP}{d\xi} + l(l+1)P - \frac{m^2}{1 - \xi^2} P = 0} \quad (8.14)$$

1. Schritt Zeigen, dass für l ganzzahlig eine normierbare Lösung im Bereich $\xi \in [-1, 1]$ existiert.
Zunächst: $m = 0$

$$\boxed{(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} P - 2\xi \frac{d}{d\xi} P + l(l+1)P = 0} \quad \text{Legendre-Differentialgleichung} \quad (8.15)$$

Potenzreihenansatz:

$$P(\xi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \xi^{\nu}$$

Koeffizientenvergleich von ξ^{ν} :

$$(\nu + 2)(\nu + 1)a_{\nu+2} - \nu(\nu - 1)a_{\nu} - 2\nu a_{\nu} + l(l + 1)a_{\nu} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{a_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu + 1) - l(l + 1)}{(\nu + 2)(\nu + 1)} a_{\nu}} \quad (8.16)$$

→ 2 unabhängige Lösungen:

$$a_0 \neq 0, a_1 = 0 \Rightarrow P \text{ gerade}$$

$$a_0 = 0, a_1 \neq 0 \Rightarrow P \text{ ungerade}$$

Asymptotisches Verhalten für $\nu \rightarrow \infty$ und $\xi \rightarrow \pm 1$:

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_{\nu}} \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} 1 \Rightarrow \sum \xi^{\nu} \text{ divergiert für } \xi \rightarrow \pm 1$$

Endliche Lösung bei $\xi = \pm 1$ verlangt Abbruch der Potenzreihe → l muss ganzzahlig und größer als 0 sein, d. h. $a_{l+2} = 0 \rightarrow P = P_l(\xi)$ ist Polynom l -ten Grades mit

$$\boxed{P_l(\xi) = (-1)^l P_l(-\xi)} \quad \text{Legendre-Polynome} \quad (8.17)$$

Explizite Form:

$$\boxed{P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l} \quad (8.18)$$

→ $P_l(\cos \vartheta)$ sind Eigenfunktionen für $m = 0$ (d. h. $L_z = 0$) von L^2

Beispiele

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = \xi$$

$$P_2 = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 1)$$

$$P_3 = \frac{1}{2}(5\xi^3 - 3\xi)$$

(→ Übungsaufgabe)

2. Schritt $m > 0$

(ohne Beweis) Ansatz $P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} v_l^m(\xi)$, aus asymptotischem Verhalten, so dass sich Terme $\propto (1 - \xi^2)^{-1}$ aufheben

→ einsetzen in 8.14, rechnen, ...: Abbruchbedingung $v_l^{m+1} = (v_l^m)' \rightarrow m \leq l$

→ explizite Form:

$$\boxed{P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)} \quad (m = 0, 1, \dots, l) \quad (\text{zugeordnete Legendre-Polynome}) \quad (8.19)$$

analog für $m < 0$

Endergebnis Eigenfunktionen von L^2 und L_z mit Eigenwerten $\hbar^2 l(l+1)$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad , \quad m \geq 0 \quad (8.20)$$

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad (8.21)$$

mit $l = 0, 1, 2, \dots$ und $|m| \leq l$ ($2l+1$ Werte)

Bemerkungen

- Y_{lm} : Kugelflächenfunktionen, bilden vollständiges Orthonormalsystem auf der Kugeloberfläche

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} \sin \vartheta d\vartheta Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') = \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta') \delta(\varphi - \varphi')$$

- Parität:

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \quad (\text{Raumspiegelung})$$

$$\vartheta \rightarrow \vartheta - \pi$$

$$\varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

$$\cos \vartheta \rightarrow -\cos \vartheta \quad (\xi \rightarrow -\xi)$$

$$e^{im\varphi} = (-1)^m e^{im\varphi}$$

$$P_l^m(-\xi) = (-1)^{l-m} P_l^m(\xi)$$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\pi - \vartheta, \pi + \varphi)$$

l gerade \rightarrow Parität $+$, l ungerade \rightarrow Parität $-$

- Veranschaulichung: Polardiagramm: Folie „Quadrate der Winkelfunktionen im Polardiagramm“

2010-06-22

8.3. Bewegung im Zentralfeld

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad , \quad r = |\vec{r}| \quad (\text{Zentralpotential})$$

Ortsdarstellung kinetische Energie: $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \underbrace{\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]}_{= -\frac{L^2}{\hbar^2 r^2}}$$

$[H, L] = [H, L^2] = [H, L_z] = 0 \Rightarrow L^2$ ist Konstante der Bewegung \rightarrow es gibt gemeinsame Eigenzustände von H, L^2, L_z : $|E, l, m\rangle$. Außerdem gilt $[H, L_{\pm}] = 0$

Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m_0 r^2} + V(r) - E \right) \Psi = 0 \quad (8.22)$$

Separationsansatz, da Ψ Eigenfunktion zu L^2, L_z ist

$$\Psi(\vec{r}) = P_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

da H nur von L^2 und nicht von L_z abhängt.

Normierung: $\int d^3r |\Psi|^2 = 1$

$\Psi(\vec{r})$ einsetzen in Schrödingergleichung

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right) R_l(r) = 0} \quad (\text{Radialgleichung}) \quad (8.23)$$

$\rightarrow E$ abhängig von $V(r)$ und l , nicht von $m \rightarrow 2l + 1$ -fache Entartung.

Der Term $\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2}$ nennt man Zentrifugalbarriere, abstoßend für kleine r : verhindert, dass Teilchen mit $l \neq 0$ nahe ans Zentrum gelangen

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

Ansatz: $R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}$, 8.23 durchmultiplizieren mit r :

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{= V_{\text{eff}}(r)} + V(r) - E \right) u_l(r) = 0} \quad (8.24)$$

\rightarrow 1-dimensionale Schrödingergleichung, aber mit Potential $V_{\text{eff}}(r)$ und $0 \leq r < \infty$

$r \rightarrow \infty$ Sei $V(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) - E \right) u_l(r) = 0$$

- $E > 0$:

$$u_l = e^{\pm ikr}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$$R_l \approx c_1 \frac{e^{ikr}}{r} + c_2 \frac{e^{-ikr}}{r}$$

- $E < 0$:

$$u_l = e^{\pm\kappa r}$$

$$E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0}$$

$$R_l \approx c_1 \frac{e^{\kappa r}}{r} + c_2 \frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

→ gebundene Zustände

$r \rightarrow 0$ Sei $r^2 V(r \rightarrow 0) \rightarrow 0$ (gilt z. B. für Coulombpotential) und $l \neq 0$. Dann überwiegen 1. Term und Zentrifugalbarriere.

Ansatz: $u_l(r) \propto r^n$ für $r \rightarrow 0$

$$\rightarrow -n(n-1) + l(l+1) = 0$$

$$n = \begin{cases} -l & R_l \propto r^{-(l+1)} \text{ nicht normierbar} \\ l+1 & R_l \propto r^l \end{cases}$$

Wie sieht das Eigenspektrum prinzipiell aus?

- $E > 0$: Kugelwellen, 2 Konstanzen, deren Verhältnis von E abhängt → kontinuierliches Spektrum (entspricht klassisch offenen Bahnen)
- $E < 0$: Ausschluss exponentiell wachsender Terme ($c_2 = 0$), nur für bestimmte E -Werte erfüllbar → diskretes Spektrum

Beispiel

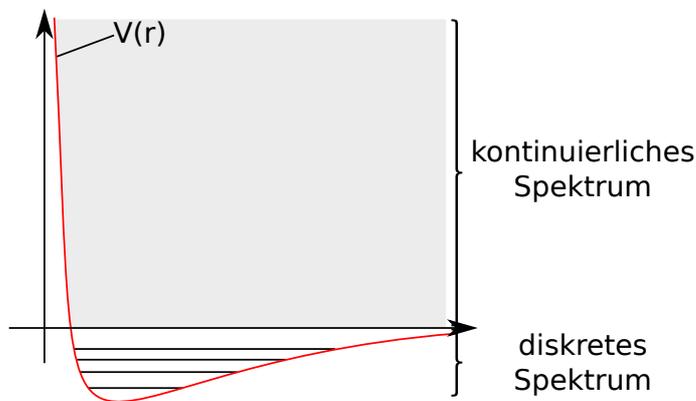


Abbildung 8.1: Beispiel für ein Eigenspektrum eines Potentialverlaufs

Quantenzahlen im diskreten Spektrum

- hängen ab von $V(r)$
- Wellenfunktionen $R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit n_r : radiale Quantenzahl, beschreibt charakteristische Energie
- l : Bahndrehimpulsquantenzahl

8.4. Das H-Atom und H-ähnliche Atome

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Bemerkung Auch algebraische Behandlung möglich über verallgemeinerten Lenz-Runge-Vektor
Wellenfunktion (gebundene Zustände) $\Psi = R_{n,l}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$
Radialgleichung für $R = \frac{u}{r}$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E\right)u = 0 \quad (8.25)$$

Dimensionslose Variablen:

$$\epsilon = \frac{E}{Z^2 R_y} \quad , \quad R_y = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} \quad , \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 l^2} \text{ (Bohr-Radius)} \quad , \quad \rho = \frac{Zr}{a_0} 2\sqrt{|\epsilon|}$$

Division der Gleichung durch $Z^2 R_y 4(-\epsilon)$:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{\rho\sqrt{-\epsilon}} + \frac{1}{4}\right)u(\rho) = 0 \quad (8.26)$$

Verhalten für

- $\rho \rightarrow 0$: $u \propto \rho^{l+1}$
- $\rho \rightarrow \infty$: $u \sim e^{-\rho/2}$

Ansatz: $u = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} F(\rho)$ wobei $F(\rho \rightarrow 0) \rightarrow \text{const}$ und nicht wachsend als Potenzen für $\rho \rightarrow \infty$

- $(a \cdot b \cdot c)'' = \dots$
- Division durch $\rho^{l+1} e^{-\rho/2}$

$$\rho F'' + \underbrace{(2(l+1) - \rho)}_{\beta} F' - \underbrace{\left(l+1 + \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}}\right)}_{\alpha} F = 0$$

$$\boxed{\rho F'' + (\beta - \rho)F' - \alpha F = 0} \quad (\text{Laguerre'sche Differentialgleichung}) \quad (8.27)$$

Lösung durch Potenzreihenansatz:

$$F \equiv F(\alpha, \beta, \rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu}$$

o. B. d. A. sei $a_0 = 1$

Abbruch der Reihe: Verschwinden der Koeffizienten von ρ^{ν}

$$a_{\nu} = \frac{1}{\nu!} \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+\nu-1)}{\beta(\beta+1) \cdots (\beta+\nu-1)} \underbrace{a_0}_{=1}$$

Falls α ganze Zahl $M \leq 0$: Abbruch $\rightarrow F$ Polynom

Falls α keine ganze Zahl: $F(\alpha, \beta, \rho) \rightarrow e^{\rho}$ asymptotisch $\rightarrow R$ divergiert für $\rho \rightarrow \infty$

Für $\alpha = 0$: $F(\rho) = a_0 = 1$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}} - (l+1) = n_r \quad \text{mit} \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

$F(\alpha, \beta, \rho)$: Polynom n_r -ten Grades, Laguerre'sche Polynome.

Festlegung der Eigenwerte: wähle $n := n_r + l + 1$ *Hauptquantenzahl*

$$\boxed{\epsilon = -\frac{1}{n^2} \quad \text{oder} \quad E_n = \frac{Z^2 R_y}{n^2}} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.28)$$

Mögliche Werte für l : $0 \leq l \leq n - 1$

Entartung des n -ten Niveaus

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Zusätzliche Entartung um Faktor 2 durch Spin: $G = 2n^2$

- Ursache der m -Entartung: Zentralpotential, wird aufgehoben durch Brechen der Rotations-symmetrie z. B. mit Magnetfeld \rightarrow Zeeman-Effekt
- Ursache der l -Entartung ist folge des $\frac{1}{r}$ -Potentials

Spektrum des H-Atoms

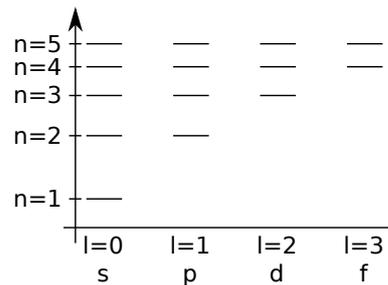


Abbildung 8.2: Spektroskopische Bezeichnung: „s-Orbital“

Radialfunktion

$$R_{nl} = a_0^{-3/2} N_{nl} \rho^l e^{-\rho/2} F_{nl}(\rho)$$

$$F_{nl}(x) = L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \quad (\text{verallgemeinertes Laguerre'sches Polynom})$$

$$L_p^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{p+k}^0 \text{ vom Grad } p$$

$$L_p^0(x) = e^x \frac{d^p}{dx^p} (x^p e^{-x}) \text{ (Laguerre'sch Polynome)}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \text{ (Normierungsfaktor)}$$

N_{nl} so gewählt, dass

$$\int_0^\infty dr r^2 |P_{nl}(r)|^2 = 1$$

Gesamtwellenfunktion

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Beispiel

$$R_{1,0} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

$r^2 |R_{1,0}|$: radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r^3 |R_{1,0}|^2 = \frac{3}{2} a_0$$

$$R_{2,0} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$R_{2,1} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-r/2a_0}$$

Für hohe l bei festem n „wächst“ die Ausdehnung der Elektronenwolke $\langle r \rangle$ an.

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)]$$

Folien:

- Radialteil der Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im H-Atom
- Beispiele für die wellenmechanische Behandlung

2010-06-25

- Kugelflächenfunktionen und Sommerfeld'sches Vektormodell der Drehimpulse

Nachtrag Problem: Wellenfunktion für $m \neq 0$ sind komplex \rightarrow erzeuge reelle Wellenfunktion durch Linearkombination der Wellenfunktionen zu gleichem l aber verschiedenem m :

$$\Psi_{n,p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n,1,-1} - \Psi_{n,1,1}) = \sqrt{\frac{4}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x}{r}$$

$$\Psi_{n,p_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n,1,-1} + \Psi_{n,1,1}) = \sqrt{\frac{4}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{y}{r}$$

$$\Psi_{n,p_z} = \Psi_{n,1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{z}{r}$$

\rightarrow analog d -Orbitale ($l = 2$)

$$d_{zx}, d_{zy}, d_{xy}, d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}$$

Kapitel 9.

Magnetische Momente

- Bahnmoment des Elektrons $\hat{=}$ Kreisstrom; ganzzahlige l, m
 - Spinnmoment des Elektrons $\hat{=}$ kein klassisches Analogon; halbzahlige Quantenzahlen s, m_s
- Spin-Bahn-Kopplung → Feinstruktur der Atomspektren

9.1. Magnetisches Moment eines klassischen Kreisstroms

Wiederholung IK2:

$$\vec{L} = m\vec{r} \times \vec{v} \quad , \quad |\vec{v}| = v \quad (\text{Bahngeschwindigkeit})$$

Strom:

$$I = \frac{q}{t} = -\frac{e}{T} = -\frac{ev}{2\pi r}$$

Magnetisches Moment:

$$\text{Strom} \times \text{Fläche} \quad , \quad \vec{\mu} = \vec{I} \times \vec{A}$$

$ \vec{\mu} = I \pi r^2 = \frac{eL}{2m_0}$ $\vec{\mu} = I = -\frac{e}{2m_0}\vec{L}$ <p>m_0: Ruhemasse des Elektrons</p> <p><i>Bahnmoment für Elektron auf Kreisbahn</i></p>
--

Maßeinheit: Bohr'sches Magneton

magnetisches Moment für Bahndrehimpuls $|\vec{L}| = 1\hbar$

$$\mu_B = \frac{e}{2m_0}\hbar = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2 = 5.77 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

Allgemein

$$\mu_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

$\vec{\mu}_l = -g_l \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$
--

mit g -Faktor $g_l = 1$ für Bahndrehimpuls

Bemerkung Es gibt verschiedene g -Faktoren für Bahndrehmoment und Spinnmoment und Kombination derer

1. Aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld → Zeeman-Effekt (s. u.)
2. Einstein-de-Haas-Effekt (s. u.)
3. De-Haas-van-Alphen-Effekt (Festkörperphysik)
4. Elektronenspinresonanz (ESR) (s. u.)

9.2. Bahnmoment im äußeren Magnetfeld

- Präzession mit Kreisfrequenz ω
- Winkel α zwischen \vec{L} und \vec{B}
- $\omega = \frac{\text{Drehmoment}}{\text{Drehimpuls} \sin \alpha}$
- Drehmoment: $|\vec{\mu} \times \vec{B}| = \mu B \sin \alpha$

$$\omega_L = \frac{\mu B}{L} = \frac{e}{2m_0} B \quad (\text{Larmor-Frequenz}) \quad (9.1)$$

- ω_L hängt für Bahndrehimpuls nicht von μ und L ab, sondern nur vom Magnetfeld
- Für beliebige Momente (Spin+Bahn)

$$\omega_L = \frac{g\mu_B}{\hbar} B = \gamma B \quad , \quad \gamma : \text{gyromagnetisches Verhältnis} \quad (9.2)$$

Suche geeigneten Operator für Schrödingergleichung: Energie eines magnetischen Dipols im Magnetfeld $V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

$$V_{\text{mag}} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

Das magnetische Moment $\vec{\mu}$ entspricht bis auf einen Faktor dem Drehimpuls \vec{L}

→ Eigenschaften des quantenmechanischen $\vec{\mu}$ entsprechen denen eines quantenmechanischen \vec{L}

→ gleichzeitig beobachtbar: $\vec{\mu}^2, \mu_z$

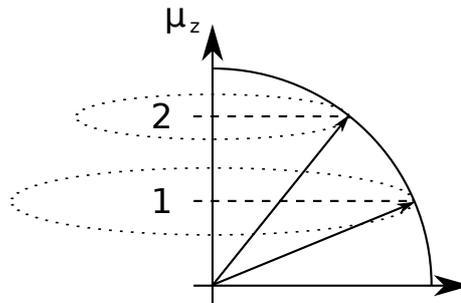


Abbildung 9.1: hier fehlt noch eine passende Bildunterschrift!

Änderung von \vec{L}_z um $1\hbar$ entspricht Änderung der Energie um $\Delta V_{\text{mag}} = \Delta \mu_z B = g\mu_B B = \hbar\omega_L$
 → Drehung des Dipols um eine Einheit $\Delta m = \frac{\Delta L_z}{\hbar} = 1$ kann durch Absorption oder Emission eines Photons mit der Energie $\hbar\omega_L$ erfolgen.

Welche Änderungen sind kompatibel zu Erhaltungssätzen?

9.3. Abstrahlung

9.3.1. Übergangswahrscheinlichkeiten

Bisher: nur stationäre Zustände

Jetzt: Wahrscheinlichkeit, mit der ein e^- vom Anfangszustand $|i\rangle$ in einen Endzustand $|f\rangle$ übergeht.

Experiment: Übergänge im Atom erfolgen durch Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung, überwiegend Dipolstrahlung.

IK3: für klassische Dipole (parallel zu z schwingend)

$$\dot{W} = -\frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \langle \ddot{Z}^2 \rangle$$

\dot{W} : ausgestrahlte Energie pro Zeiteinheit \rightarrow proportional zum mittleren Beschleunigungsquadrat.

Quantenmechanik: zusätzlich Mittelung über Erwartungswerte z_{fi} ; $\langle z_{fi} \rangle$: Maß für Übergangswahrscheinlichkeit, also Intensität des Übergangs $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$, „Matrizelement“ (exakte Herleitung: Störungstheorie)

Beispiel Berechne $\langle z_{fi} \rangle$ in Ortsdarstellung für zeitabhängige Wellenfunktionen $|i\rangle$ und $|f\rangle$

$$u_i(\vec{r}, t) = \Psi_i(\vec{r})e^{-i\omega_i t} \quad , \quad u_f(\vec{r}, t) = \Psi_f(\vec{r})e^{-i\omega_f t}$$

u_i, u_f normierbar, bildenvollständiges Orthonormalsystem.

Wegen Hermitizität (aus Störungstheorie):

$$\begin{aligned} \langle z_{fi} \rangle &= \int u_i^* z u_f d^3r + \underbrace{\int u_f^* z u_i d^3r}_{\text{wegen Hermitizität}} \\ \langle z_{fi} \rangle &= e^{i(\omega_f - \omega_i)t} \int \Psi_i^* z \Psi_f d^3r + \text{h. c.} \\ &= e^{i(\omega_f - \omega_i)t} M_{if} + e^{-i(\omega_f - \omega_i)t} M_{fi} \\ \rightarrow \langle \ddot{z}_{fi} \rangle &= -(\omega_i - \omega_f)^2 \langle z_{fi} \rangle \\ \langle \ddot{z}_{fi} \rangle^2 &= (\omega_i - \omega_f)^4 (e^{2i(\omega_i - \omega_f)t} (M_{if})^2 + e^{-2i(\omega_i - \omega_f)t} (M_{fi})^2 + \underbrace{2M_{if}M_{fi}^*}_{= 2|M_{if}|^2}) \end{aligned}$$

es gilt:

- $\mu_{if}^* = \mu_{if}$
 - zeitliche Mittelung: $\langle e^{2i(\cdot)t} \rangle = 0$
- $\rightarrow \langle \langle \ddot{z}_{if} \rangle^2 \rangle = 2(\omega_i - \omega_f)^4 |M_{if}|^2$
- \rightarrow wenn Ψ_i, Ψ_f bekannt, dann sind M_{if} bekannt
- M_{if} kann für bestimmte i, f verschwinden \rightarrow *Auswahlregeln* \rightarrow kein optischer Übergang möglich, „verboten“

2010-06-28

9.3.2. Spezialfall: H-Atom

$$\Psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm} \quad , \quad Y_{lm} = \underbrace{c_{lm}}_{\text{Normierung}} \varphi_m P_l^m \quad , \quad \varphi_m = e^{im\varphi}$$

1. M_{fi}^z : Schwingung der e^- in z -Richtung

$$\begin{aligned} |M_{fi}^z| &= |\langle z_{fi} | = \int \underbrace{\Psi_{n'l'm'}^*}_{\langle f |} z \underbrace{\Psi_{nlm}}_{|i\rangle} d^3r \\ &= \iiint R_{n'l'm'}^* c_{l'm'}^* P_{l'}^{m'*} \underbrace{\varphi_{m'}^*}_{e^{-im'\varphi}} \underbrace{r \cos \vartheta}_z R_{nl} c_{lm} P_l^m \underbrace{\varphi_m}_{e^{im\varphi}} r^2 \sin \vartheta d\vartheta dr d\varphi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \underbrace{e^{i(m-m')\varphi}}_{\Rightarrow 1. \text{ Auswahlregel: } \Delta m = m - m' = 0} d\varphi \int \dots d\vartheta \int \dots dr \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq m' \\ 1 & \text{für } m = m' \end{cases} \Rightarrow 1. \text{ Auswahlregel: } \Delta m = m - m' = 0 \end{aligned}$$

$$M_{if}^z \neq 0 \text{ für } \Delta m = m - m' = 0$$

2. e^- macht Kreisbahn im x - y -Ebene

$$x^+ := x + iy = r \sin \vartheta e^{i\varphi} \quad \text{rechtssinnig}$$

$$x^- := x - iy = r \sin \vartheta e^{-i\varphi} \quad \text{linkssinnig}$$

$$\begin{aligned} |M_{fi}^{x^\pm}| &= \iiint \Psi_{n'l'm'}^* \underbrace{r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}}_{x^\pm} \Psi_{nlm} d^3r \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \underbrace{e^{i(m-m'\pm 1)\varphi}}_{\Rightarrow 2. \text{ Auswahlregel: } \Delta m = \pm 1} d\varphi \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } m - m' \neq \pm 1 \\ 1 & \text{für } m - m' = \pm 1 \end{cases} \Rightarrow 2. \text{ Auswahlregel: } \Delta m = \pm 1 \end{aligned}$$

3. Auswertung des Integrals über ϑ liefert $\Delta l \pm 1$ (Drehimpulserhaltungssatz), da Photon $l_{\text{ph}} = 1\hbar$ hat

4. Integral über r : keine weitere Auswahlregel, Δn beliebig

→ beim H-Atom gibt es nur optische Übergänge mit $\Delta m = 0, \pm 1$ und $\Delta l = \pm 1$

Gedankenexperiment Drehimpuls sei durch Magnetfeld in z -Richtung quantisiert

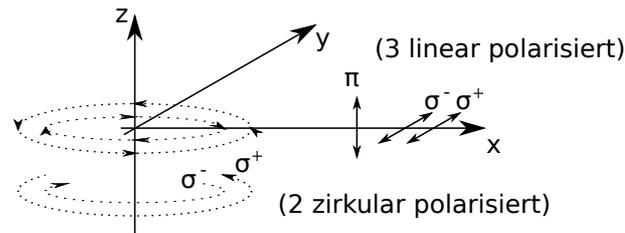


Abbildung 9.2: Polarisierungen beim Zeeman-Effekt

Beobachtung $\parallel z$:

- \updownarrow : $\Delta m = 0$, keine Emission, linear polarisiert $\parallel z$
- \odot, \ominus : $\Delta m = \pm 1$, zirkular polarisiert \rightarrow linear-polarisiert in x - y -Ebene

9.4. H-Atom im Magnetfeld (ohne Spin), Zeeman-Effekt

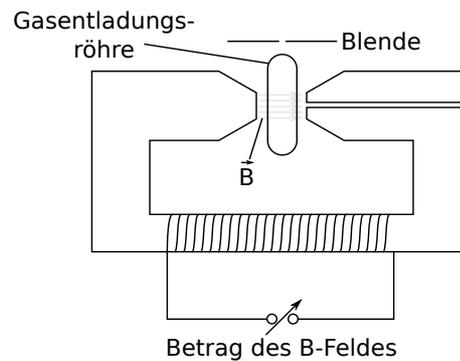


Abbildung 9.3: Aufbau des Versuchs zur Messung des Zeeman-Effekts

Experimenteller Aufbau

- $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$: Auflösungsvermögen eines spektral-optischen Instruments
- Gitterspektrometer $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = m n$
- Fabry-Perot-Interferometer
- Lummer-Gehrke-Platte

Beobachtung Aufspaltung der Spektrallinien ist proportional zur Stärke des (nicht zu starken) Magnetfeldes $|B| \approx 3 \text{ T}$

- Normaler Zeeman-Effekt (selten, klassisch erklärbar), z. B. bei Cd
- Anormaler Zeeman-Effekt (häufig, nicht klassisch erklärbar), z. B. H, Na-Doppellinie

Hier zunächst normaler Zeeman-Effekt:

\rightarrow nur 9 erlaubte optische Übergänge

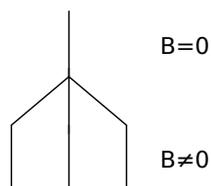


Abbildung 9.4: Normaler Zeeman-Effekt: äquidistante Aufspaltung, ungerade Anzahl

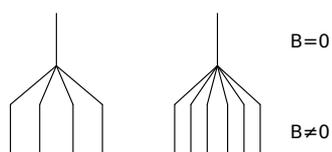
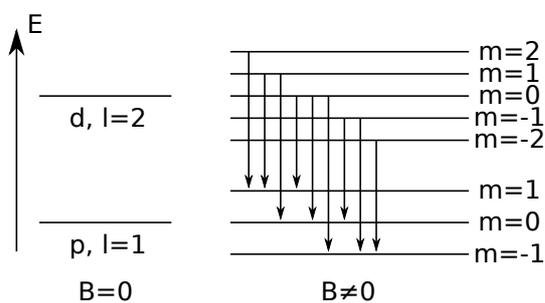
Abbildung 9.5: Anormaler Zeeman-Effekt: äquidistante Aufspaltung innerhalb eines *Multipletts*, gerade Anzahl

Abbildung 9.6: mögliche Übergänge beim Zeeman-Effekt

- nur 3 verschiedene Frequenzen
- analyse der Polarisationen: $\Delta m = 0$ linear polarisiert in z -Richtung
 - nicht in z -Richtung beobachtbar
 - nur 2 Linien ($\Delta m = \pm 1$)

Kapitel 10.

Der Elektronenspin

10.1. Stern-Gerlach-Experiment, 1922

Vorbemerkungen Kraft auf magnetisches Moment $\vec{\mu} = -\frac{ge}{2m_0}\vec{L}$:

$$V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad , \quad F_z = \mu_z \frac{dB}{dz} \quad (\rightarrow \text{inhomogenes Magnetfeld})$$

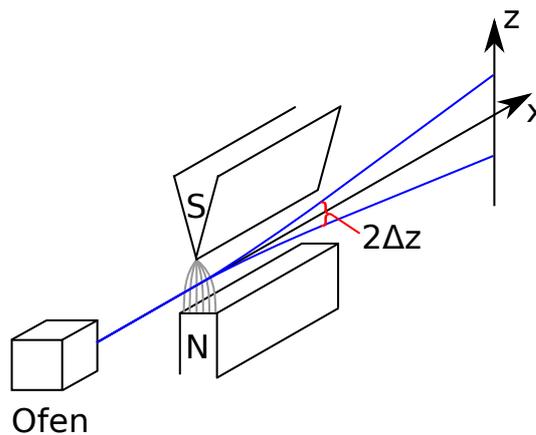


Abbildung 10.1: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments

Durchführung Atomstrahl der Energie E_{kin} mit zunächst ungeordneten magnetischen Momenten durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld, $\vec{v} \perp \vec{B}$, $\vec{v} \perp \nabla \cdot |B|$, $\vec{B} \parallel \vec{\nabla} \cdot |B|$.

Experiment zunächst mit Ag, H, Na, K, ...

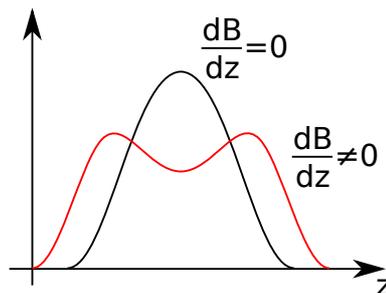


Abbildung 10.2: Beobachtung für Ag: Aufspaltung in 2 Flecke, klassische Erwartung: 1 großer Fleck

Aufspaltung in 2 Flecke: kann kein Bahndrehimpuls sein, da die Aufspaltung in nur 2 Anteile erfolgt!

2010-06-29

Interpretation neue Quanteneigenschaft, kein Bahndrehimpuls sondern *Eigendrehimpuls (Spin)*.
Quantitative Auswertung des Stern-Gerlach-Versuchs → Übungsaufgabe

Ergebnis (für Ag-Atome)

$$\mu_z = \pm \mu_B \quad , \quad \mu_z = gm$$

Weitere Beobachtungen

- ablenkende Kraft ist gleich für alle Atome, die nur ein s -Elektron haben ($l = 0$) \rightarrow Spinmagnetismus
- für Atome mit $l \neq 0$: komplexere Aufspaltung
- für $l = 0$.: zwei Einstellmöglichkeiten: $m_s = \pm \frac{1}{2} \rightarrow s = \frac{1}{2}$

$$\vec{S}^2 |\Psi\rangle = \hbar s(s+1) |\Psi\rangle$$

$$S_z |\Psi\rangle = m_s \hbar |\Psi\rangle$$

Allgemein Gesamtdrehimpuls \vec{J} des Elektrons setzt sich zusammen aus Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S} : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$

10.2. Eigenschaften des Spins

UHLENBECK und GOUDSMIT, 1925

Elektron besitzt eigendrehimpuls \vec{S} mit $|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ mit magnetischem Moment $\vec{\mu}_S = -g_s \frac{e}{2m_0} \vec{S}$ mit $s = \frac{1}{2}$ und $g_s = 2.0023$

10.3. Messung des gyromagnetischen Verhältnisses**10.3.1. Einstein-de-Haas-Versuch**

Idee Zu jedem magnetischen Moment μ_z gehört ein mechanischer Drehimpuls J_z

$$-\frac{\mu_z}{J_z} = \gamma = g \frac{\mu_z}{\hbar} = g \frac{e}{m_0}$$

μ_z und J_z sehr klein \rightarrow messe große Anzahl gleichzeitig \rightarrow Festkörper mit N Elementarmagneten mit jeweils magnetischem Moment μ_z

$$\gamma = \left| \frac{N\mu_z}{NJ_z} \right| = \frac{\mu_z}{J_z} = \frac{\text{Magnetisierung}}{\text{Drehimpuls auf Festkörper}}$$

Erzeuge Magnetisierung durch äußeres Magnetfeld und messe Rotation des Festkörpers (\rightarrow Übung)

10.3.2. Resonanzmethode von Rabi

I, III: inhomogene B -Felder mit entgegengesetztem Gradienten

II: homogenes B -Feld ($\vec{B} \perp \vec{v}$) und zusätzlich betragsmäßig kleines Wechselfeld B_{HF} ($\vec{B}_{\text{HF}} \parallel \vec{v}$) mit Frequenz ω

rote Bahn: Atome mit $m_z = \frac{1}{2}$ so dass diese im Detektornachgewiesen werden, solange $\hbar\omega \neq g\mu_B B$, ansonsten Resonanzbedingung erfüllt $\rightarrow z$ -Komponente klappt um zu $m_z = -\frac{1}{2} \rightarrow$ Ablenkung in III umgekehrt (blaue Bahn) \rightarrow erreichen den Detektor nicht mehr. \rightarrow Minimum des Detektorsignals bei $\omega = \omega_R$, $\omega_R \approx 10^{10}$ Hz für e^-

2010-06-30

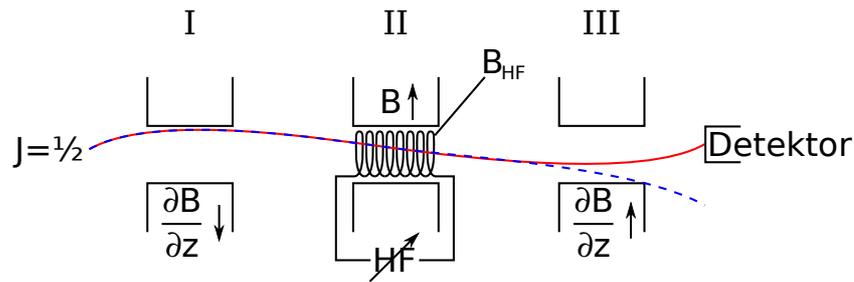


Abbildung 10.3: Schematischer Aufbau der Resonanzmessung von Rabi

Bemerkungen

- Sehr genaue Methode \rightarrow auch Kernspin messbar mit Kernmagneton $(\mu_B)_{\text{Kern}} \equiv \mu_K = \frac{e\hbar}{2M_p} \approx \frac{1}{2000} \mu_B$
wenn $\mu_{\text{Elektron}} = 0$: „nackte“ Kerne oder diamagnetische Atome (Elektronenspins heben sich auf) ω_R im MHz-Bereich
- Rabioszillationen: induzierte Übergänge zwischen 2 Zuständen

10.3.3. Elektronenspinresonanz (ESR), Elektronen-paramagnetische Resonanz

Analog zu Rabioszillationen

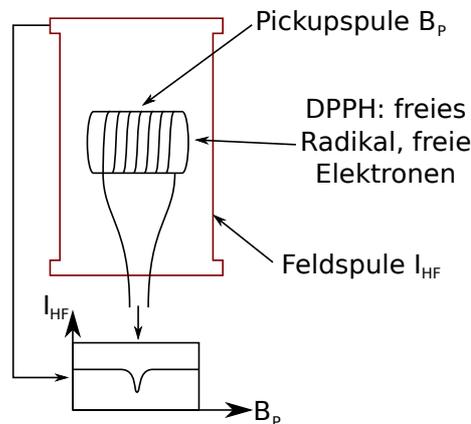


Abbildung 10.4: Aufbau zur Messung der Elektronenspinresonanz

Feldspule wird in Resonanz betrieben, Umklappen der Spins in Probe stört Resonanzbedingung, Feedbackschleife hält Resonanz aufrecht. Messe Signal, das zur Aufrechterhaltung notwendig ist. Messe Resonanzamplitude als Funktion der Feldstärke B_p

- Breite wird bestimmt durch Relaxation der Spins in Ausgangszustand \rightarrow Messung der Wechselwirkung der Spins mit Umgebung
- B_R durch Feldstärke am Ort des Spins
- Variante: Kernspinresonanz \rightarrow Medizin, Hyperfeinaufspaltung

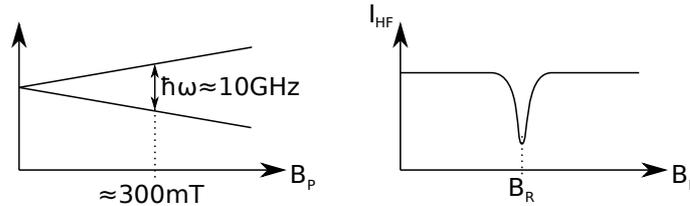


Abbildung 10.5: Messergebnis der Elektronenspinresonanz

10.4. Einfluss des Spins auf die Wasserstoff-Energieniveaus

10.4.1. Spin-Bahn-Wechselwirkung, Feinstruktur des Spektrums

Experimentelle Beobachtung Auch ohne äußeres Magnetfeld sind die Spektrallinien in zwei Komponenten aufgespalten (*Dubletts*): *Feinstruktur*

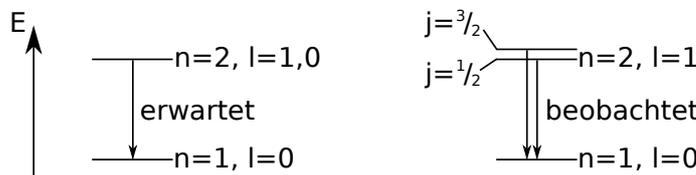


Abbildung 10.6: Aufspaltung der Spektrallinien

Ursache Bahnbewegung des e^- im Coulombfeld erzeugt Magnetfeld, Spin des Elektrons wechselwirkt mit diesem Magnetfeld \vec{B}_L

$$\vec{B}_L \propto \vec{v} \times \vec{E} \rightarrow \vec{B}_L \parallel \vec{L}$$

→ $\vec{\mu}_S$ wechselwirkt mit \vec{B}_L : 2 Einstellmöglichkeiten

→ zusätzlicher Term in Hamilton-Funktion der Form

$$V_{LS} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}_L$$

→ Spin-Bahn-Kopplung

Da $\vec{B}_L \propto \vec{L}$: $V_{LS} = f(\vec{L}, \vec{S})$, Energie hängt von relativer Einstellung von \vec{L} und \vec{S} ab. Rechnung liefert für Coulombpotential

$$V_{LS} = \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} (\vec{L} \cdot \vec{S})$$

Typische $|\vec{B}_L|$ im H-Atom: $B_L \approx 1\text{ T} \rightarrow V_{LS} \approx 10^{-4}\text{ eV}$ (klassische Rechnung im Rahmen des Bohr'schen Atommodells)

Neue Erhaltungsgröße: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, gleichzeitig scharf bestimmbar: $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ und $j_z = \hbar m_j$ mit $j_z = l_z + s_z$, aber m_l und m_s nicht separat scharf messbar → keine guten Quantenzahlen.

Präzessionsbewegung von \vec{L} und von \vec{S} um \vec{J}

\vec{J} erfüllt die üblichen Drehimpulsregeln:

$$J^2 = \hbar^2 j(j + 1)$$

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

H-Atom: $s = \frac{1}{2} \rightarrow j = l \pm \frac{1}{2}$, je 2 j -Werte für 1 $l \rightarrow$ Aufspaltung der Energieniveaus in 2 Unterniveaus, z. B. $n = 2, l = 1$:

$j = l + s$	$s = \frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$
	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$
$ \vec{J} $	$\hbar\sqrt{\frac{3}{2}(\frac{3}{2} + 1)} \approx 3.8\hbar$	$\hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} \approx 0.8\hbar$
$ \vec{S} $	$\hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} \approx 0.8\hbar$	$\hbar\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} \approx 0.8\hbar$
$ \vec{L} $	$\hbar\sqrt{1(1 + 1)} \approx 1.4\hbar$	$\hbar\sqrt{1(1 + 1)} \approx 1.4\hbar$

Allgemein

- Vektoraddition zweier Drehimpuls \vec{L}, \vec{S} zu \vec{J} : Folie: Vektordiagramm zur Berechnung des Zeeman-Effekts
- Wenn mehr als 1 Elektron, dann kann j ganzzahlig werden $m_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$
- Für 1 Elektron: j halbzahlig $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$
- immer $2j + 1$ Einstellmöglichkeiten
- Mögliche $|\vec{J}|$ -Werte: $|l - s| \leq j \leq |l + s|$ mit $\Delta j = 1 \rightarrow$ Zahl der j -Werte: $2\min\{s, l\} + 1$, stets gilt $|m_j| \leq j$

2010-07-02

$$E_{LS} \sim \frac{Z^4}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

Zusammenfassung

- $\vec{\mu}_S$ kann zwei Einstellungen bezüglich $\vec{\mu}_L$ einnehmen (*parallel* und *antiparallel* oder *up* und *down*)
- Kopplung der Drehimpulse zu neuen Quantenzahlen J^2, L^2, S^2 und J_z
- $l = 0 \rightarrow$ keine Aufspaltung
- höheres j energetisch höher
- $E_{LS} \propto Z^4 \rightarrow$ bei Na gut sichtbar
- Aufspaltung am größten für kleine n

10.4.2. H-Atom im Magnetfeld (mit Spin)

Effekt: Aufhebung der Entartung bzgl. J_z

1. schwaches Magnetfeld: $V_{\text{mag}} = -\vec{\mu}_j \cdot \vec{B} \ll V_{LS}$ (äußeres \vec{B} -Feld zu schwach um Spin-Bahn-Kopplung aufzuheben)

→ \vec{L} und \vec{S} bleiben zu \vec{J} gekoppelt, m_j ist gute Quantenzahl

→ Energieniveaus spalten auf in $2j + 1$ Komponenten

$$E_{nj} = E_{nj}(B = 0) - \mu_B g_j B m_j$$

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (\text{Landé-Faktor})$$

Für Einelektronensystem:

$$g_j = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} \rightarrow \frac{2}{3} < g_j < 2$$

→ Anormaler Zeeman-Effekt, z. B. Na - D-Linie (Notation: $n^{2s+1}L_J$)

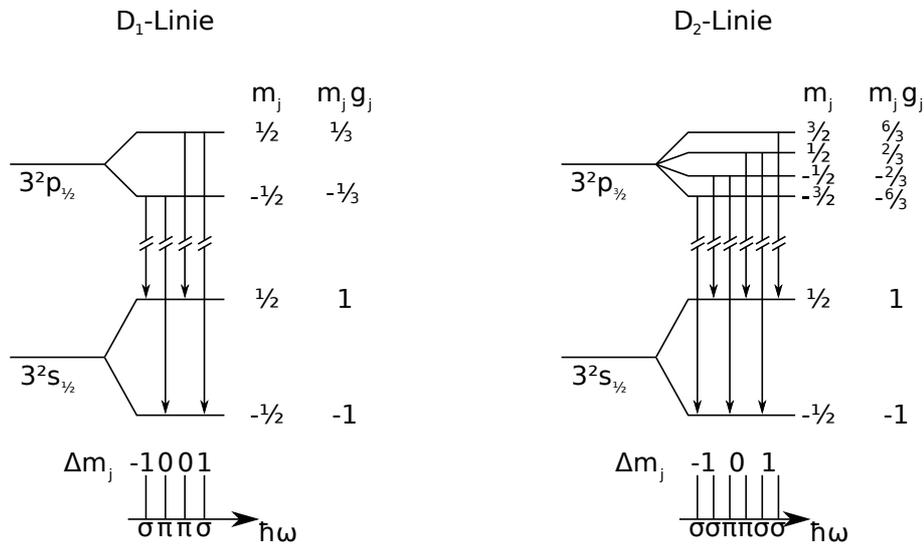


Abbildung 10.7: optische Übergänge beim anomalen Zeeman-Effekt

→ Termanalyse durch Messung des Zeeman-Effekts

2. starkes Magnetfeld $V_{\text{mag}} > V_{LS}$

→ Entkopplung von \vec{L} und \vec{S} → \vec{L} und \vec{S} präzedieren unabhängig voneinander um \vec{B}

→ L_z und S_z sind Erhaltungsgrößen → m_l und m_s sind gute Quantenzahlen

$$E_{n,l,m_l,m_s} = E(B = 0) - \mu_B B (g_l m_l + g_s m_s)$$

mit $g_s = 2$.

Auswahlregeln: $\Delta m_l = 0, \pm 1, \Delta m_s = 0$

Beispiel: Na - D-Linie: jeweils 2 der 6 Linien fallen zusammen → Aufspaltung der Multipletts wird gleich → 4 Linien wie beim normalen Zeeman-Effekt

→ Paschen-Back-Effekt: Folie

10.4.3. Quantenmechanische Behandlung des Spins und des Elektrons im Magnetfeld

(nur kurze Skizze)

1. e^- im Magnetfeld

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} \quad \rightarrow \quad H = \frac{1}{2m_0} \left(\underbrace{\vec{p}}_{\rightarrow -i\hbar\nabla} + e\vec{A} \right)^2 + V(r)$$

\hat{H} -Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} (-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2 + V(r)$$

2. Spin: Paulimatrizen

$$\vec{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle$$

$$S_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle$$

Elektron: $s = \frac{1}{2} \rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Spin up})$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{Spin down})$$

$$\left. \begin{array}{l} S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \right\} \Rightarrow S_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Definiere:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Paulimatrizen})$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad \sigma_i^\dagger = \sigma_i, \quad \sigma_i^2 = 1$$

B -Feld: $V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ für e^- :

$$\vec{\mu} = -\frac{eg}{2m_0} \vec{S}$$

Eigenwertgleichung:

$$\frac{g_s e}{2m_0} \vec{S} \cdot \vec{S} \chi = E \chi$$

Zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$\frac{ge\hbar}{4m_0} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

solange Spinfreiheitsgrad unabhängig von anderen Freiheitsgraden \rightarrow Produktansatz:

$$\Psi_\uparrow = \Psi(\vec{r}) \chi^+(s)$$

$$\Psi_{\downarrow} = \Psi(\vec{r})\chi^{-}(s)$$

χ^{\pm} : Eigenfunktionen zu S_z

Wellenfunktion mit beliebigem S_z :

$$\begin{aligned}\Psi_{\nearrow} &= \alpha^+ \Psi_{\uparrow} + \alpha^- \Psi_{\downarrow} \quad \text{mit} \quad |\alpha^+|^2 + |\alpha^-|^2 = 1 \\ \Rightarrow \Psi_{\nearrow} &= \Psi_r(\alpha^+ \chi^+ + \alpha^- \chi^-)\end{aligned}$$

3. Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$\frac{\mu_0 Z e^2 \hbar}{16\pi m_0^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{\sigma} = V_{LS} \quad (\text{als Operator})$$

Schrödinger gleichung insgesamt (*Pauli-Gleichung*):

$$\left[\frac{1}{2m_0} (-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2 + V(r) + \frac{g_s e \hbar}{4m_0} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{\mu_0 Z e^2 \hbar}{16\pi m_0^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{\sigma} \right] \Psi = E\Psi$$

Kapitel 11.

Weitere Effekte auf Spektren des H-Atoms

11.1. Relativistische Korrekturen

Weiterer Beitrag zur Feinstruktur. Zunächst klassisch, nicht-relativistisch:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V$$

relativistisch:

$$H_R = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 + V$$

$$\approx \frac{p^2}{2m_0} - \underbrace{\frac{p^4}{8m_0^3 c^2}}_{\text{relativistische Korrektur}} + V$$

quantenmechanisch:

$$p^4 \rightarrow \Delta^2 \quad (\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla})$$

physikalische Ursache: relativistische Massenzunahme durch Bahnbewegung \rightarrow Erzeugung eines effektiven Magnetfeldes \rightarrow Wechselwirkung mit magnetischem Moment

$$\Delta E_{\text{FS}} = \Delta E_{l_s} + \Delta E_{\text{rel}} = \Delta E_{n,j}$$

$$\Delta E_{n,j} = -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (\text{Dirac})$$

2010-07-05

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_0}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (\text{Feinstrukturkonstante})$$

Zusammenfassung H-Atom mit Feinstruktur-Korrektur (Notation: $n^{2s+1}l_j$)

- Entartung bzgl. j , keine Entartung bzgl. l
- $(2j + 1)$ -fache Entartung bzgl. j_z

2010-07-07

11.2. Die Lamb-Verschiebung

1952: Experimentelle Beobachtung: Auch beim H-Atom gibt es Aufhebung der l -Entartung bei gleichem j . s -Zustände sind systematisch höher als p -Zustände.

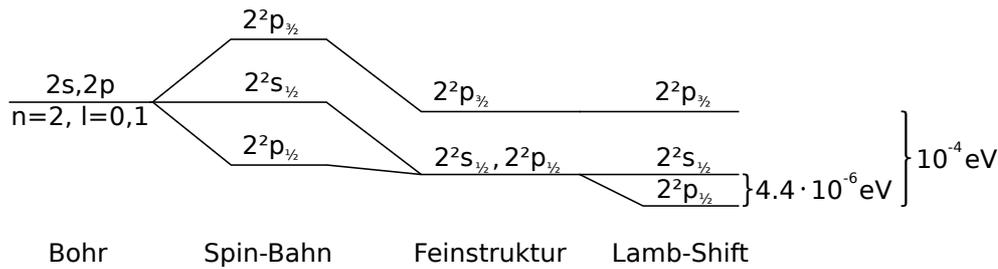


Abbildung 11.1: Spektrallinieaufspaltung durch Spin-Bahn-Kopplung, Feinstruktur und Lamb-Verschiebung

Quantenelektrodynamik (QED)

- Auch Felder sind quantisiert
 - Photonen sind Feldquanten des elektromagnetischen Feldes
 - Proton und Elektron tauschen ständig virtuelle Photonen (\vec{p} imaginär, E negativ) miteinander aus
 - Stichworte: Vakuumfluktuationen, Selbstenergie
- Renormierung der Masse und auch der Ladung des e^-
- QED-Vorhersage: Abschwächung des $\frac{1}{r}$ -Potentials für kleine r .
 - Nur s -Elektronen haben endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kernort → Bindungsenergie für s -Elektronen geringer → energetisch höher → großer Erfolg der QED.

11.3. Die Hyperfeinstruktur

Auch der Atomkern hat magnetisches Moment.

Proton: Spin $\frac{1}{2}$, anomaler g -Faktor: $g_P = 5.58$, magnetisches Moment: $\mu_P = g_P \mu_K I$ (μ_K : Kernmagneton, I : Kernspin)

$$\frac{\mu_{s,e}}{\mu_P} = \frac{g_{s,e} \mu_B}{g_P \mu_K} = \frac{2}{5.58} \cdot 1836 \approx 660$$

→ $\vec{\mu}_K$ hat verschiedene Einstellmöglichkeiten im magnetischen Feld das am Kernort durch die e^- erzeugt wird: \vec{B}_0

$$V_{\text{HFS}} = -\vec{\mu}_K \vec{B}_0$$

(Der Wert von \vec{B}_0 ist im Allgemeinen schwer zu berechnen)

- Kopplung der Drehimpulse des Kerns und der Elektronenhülle zu neuer Erhaltungsgröße

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$$

(\vec{F} : Gesamtdrehimpuls des Atoms, \vec{I} : Kernspin, \vec{J} : Drehimpuls der Elektronen $\vec{L} + \vec{S}$)

$$\vec{F}^2 = \hbar^2 F(F + 1)$$

$$F_Z = m_F \hbar$$

$$m_f = -F, -F + 1, \dots, F - 1, F$$

Größe der Energieaufspaltung $\Delta E_{\text{HFS}} \approx 6 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$

Beispiel: H-Atom

$$I = \frac{1}{2} \quad , \quad S = \frac{1}{2} \quad , \quad F = 0 (\uparrow\downarrow) \quad \text{oder} \quad F = 1 (\uparrow\uparrow)$$

Messung und Anwendung

- Analog zum Zeeman-Effekt, aber höher auflösendes Spektrometer (Fabry-Perot-Interferometer)
- NMR: Nuclear-Magnetic-Resonance, Kernspinresonanz (wie ESR aber mit Hyperfeinniveaus)
 - medizinische Diagnostik: NMR am Proton (Wasserstoff), Messung der Protonenverteilung
 - Chemie: chemische Bindung verändert \vec{B}_0 → Verschiebung der Resonanzlinien
 - Cs-Atomuhr: Rabioszillationen zwischen zwei Hyperfein-Niveaus des ^{137}Cs , $I = \frac{7}{2}$, $J = \frac{1}{2}$
 - $F = 3, 4$
 - Quantenoptik

11.4. Weitere Kerneigenschaften

1. Isotopieverschiebung: Endliche Masse, endliche Ausdehnung der Ladungsverteilung des Kerns
→ Abweichung vom Coulomb-Potential → Verschiebung der Energieniveaus → Untersuchung mit myonischen Atomen (da näher am Kern).
2. NQR: Nuclear-Quadrupol-Resonance: Abweichung des Kerns von Kugelgestalt → Aufspaltung der Niveaus durch Quadrupolmoment.

IK4 Teil 2:

Einschub

Kapitel E.

Einschub: Wechselwirkung von Strahlung mit Materie und Strahlungsdetektor

Bemerkung

inelastische Streuung Teil der E_{kin} der Stoßpartner geht in Anregungsenergie über

$$\sum E_{\text{kin,vorher}} \neq \sum E_{\text{kin,nachher}}$$

elastische Streuung E_{kin} wird zwischen Stoßpartnern ausgetauscht

$$\sum E_{\text{kin,vorher}} = \sum E_{\text{kin,nachher}}$$

E.1. Wechselwirkung

E.1.1. geladene Teilchen

(geordnet nach Häufigkeit)

1. inelastische Streuung an Elektronen: geladenes Teilchen (α , e^-) verliert Energie an die e^- der Atome oder Moleküle. Atome werden dabei angeregt oder *ionisiert*, wenn Energie $>$ Bindungsenergie
2. elastische Streuung am Kern oder an den inneren Schalen der Atome: Teilchen werden bei Annäherung an den positiv geladenen Kern gestreut und beschleunigt bzw. abgebremst. Aber der Kern wird nicht angeregt. Rückstoßenergie klein, wenn Massenunterschied zwischen streuenden Teilchen und Targetteilchen groß.
3. Inelastische Streuung am Kern: Bei hochangeregten schweren Kernen können diese angeregt werden oder sogar Kernreaktionen (z. B. Einbau des Beschussteilchens in Kern) auftreten.
4. Elastische Streuung an Elektronen: Bei geringen Energien $E_{\text{kin}} < 100\text{eV}$ möglich, bei hohen Energien zu vernachlässigen

Bremsstrahlung e^- erfährt im Coulombfeld des Kerns eine Beschleunigung \rightarrow Abstrahlung von Photonen $\rightarrow e^-$ verliert E_{kin}

- $\lambda_{\text{min}} = \frac{hc}{E_{\text{kin}}}$
- charakteristisches Spektrum: Übergänge zwischen der e^- in der Atomhülle

Moseley'sches Gesetz $\nu_{K\alpha} = \frac{3}{4}hc(Z-1)^2$ (Frequenz der langwelligsten charakteristischen Linie eines Elements), $K\alpha$: Übergang von $n=2$ auf $n=1$

Bethe-Bloch-Formel Energieverlust, Bremsvermögen (*stopping power*): $\frac{dE}{dx}$

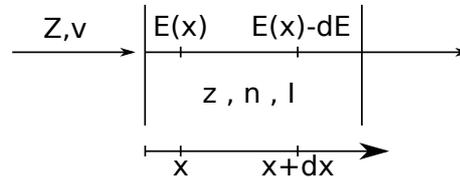


Abbildung E.1: Zur Herleitung der Bethe-Bloch-Formel

z, Z : Ladung des einfallenden und des Targetteilchens

v : Geschwindigkeit des einfallenden Teilchensorten

nZ : Ladungsdichte

I : Ionisierungspotential ($I \approx 13.6e \text{ V} \cdot Z$)

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{4\pi e^2}{m_e} nZ \frac{z^2}{v^2} \left[\ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 - \frac{A}{Z} \right] \quad (\text{E.1})$$

m_e : Elektronenmasse

$$\beta = \frac{v}{c}$$

A : Konstante, die die Bindung der e^- in verschiedenen Zuständen berücksichtigt

Interpretation

$\frac{dE}{dx} \propto n$ proportional zu der Anzahl der Stöße

$\frac{dE}{dx} \propto x^2$ hochgeladene Teilchen werden stark gebremst

$\frac{dE}{dx}$ hängt nicht von der Masse der einfallenden Teilchen ab $\rightarrow \frac{dE}{dx}$ ist für alle Teilchen gleicher Geschwindigkeit und Ladung gleich

Annahmen

1. Geschossteilchen hat konstante Ladung

2. Neutrale, nicht-ionisierte Materie

3. $E > I$

- $E \lesssim 500I \rightarrow \ln \frac{2mv^2}{I}$ steigt stark an

- $500I < E < Mc^2 \rightarrow \ln \frac{v^2}{I} \approx \text{const}$, weitere Terme vernachlässigbar $\rightarrow -\frac{dE}{dx} \propto \frac{1}{E}$

- Für $E \gtrsim 3Mc^2$: relativistische Korrekturen

\rightarrow schnelle Teilchen verlieren weniger Energie pro Strecke

\rightarrow größter Teil der Energie wird kurz vordem Stoppen abgegeben (später mehr in E2: Detektoren)

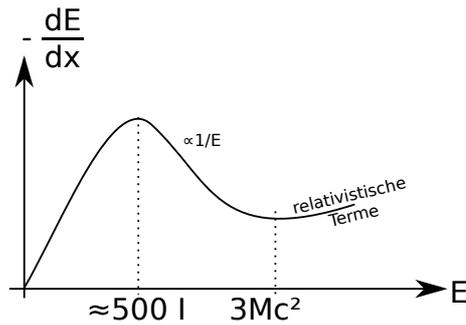


Abbildung E.2: Ergebnis der Bethe-Block-Formel

E.1.2. Neutrale Teilchen (hier: Photonen)

E.1.2.1. Nachweis zumeist über geladenes Teilchen

1. Paarbildung

Erlaubte Energien für relativistische Elektronen

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + E_0^2} \quad (\text{E.2})$$

E_0 : Ruheenergie des e^- , $E_0 = m_e c^2 = 511 \text{ keV}$

Dirac-Theorie: $E > E_0$: Elektron, $E < -E_0$: Positron (positive Ladung, gleiche Ruhemasse)

→ wenn Photonenenergie ausreicht $h\nu < 2E_0$ und Impulssatz erfüllt werden kann (schweres Teilchen in der Nähe), kann $e^- e^+$ -Paar erzeugt werden. e^+ werden wieder vernichtet durch Stoß mit e^- unter Abstrahlung zweier Photonen mit $h\nu = 511 \text{ keV}$

2. Compton-Effekt

Betrachte e^- , an dem gestreut wurde. Bei Rückwärtsstreuung des Photons hat e^- maximale Energie

$$E_{\text{kin,max}} = \frac{E}{1 + \frac{E_0}{2} E}$$

$E = h\nu$, $E_0 = m_e c^2$: Ruheenergie des e^-

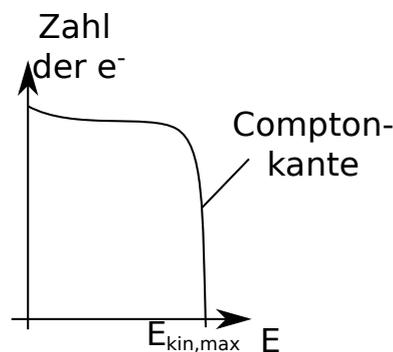


Abbildung E.3: Compton-Strahlung

3. Photoeffekt

Ionisierung eines Atoms durch Absorption eines Photons

$$E_{\text{kin}} = E - W = h\nu - W$$

→ gesamte Energie des Photons wird an e^- übertragen (bis auf kleine Austrittsarbeit $W \sim 5eV$)

Angereffekt: Anregungsenergie wird anderem e^- übertragen.

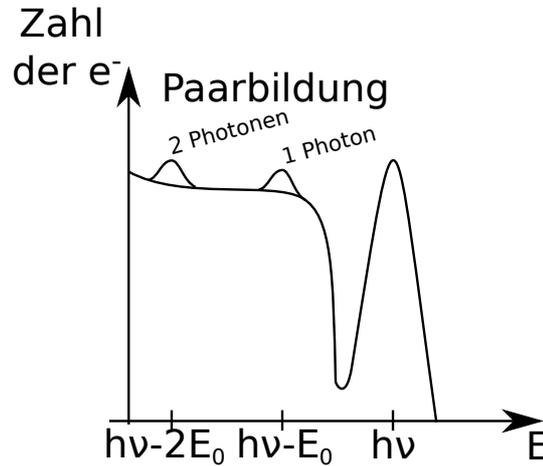


Abbildung E.4: Spektrum bei Wechselwirkung eines Photons mit Materie

E.1.2.2. Totaler Absorptionskoeffizient für elektromagnetische Strahlung in Materie

vgl. IK3:

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x} \quad , \quad \alpha = \frac{1}{\lambda} \tag{E.3}$$

α : linearer Absorptionskoeffizient, λ : mittlere freie Weglänge

$$\alpha = \alpha_{\text{Comptoneffekt}} + \alpha_{\text{Photoeffekt}} + \alpha_{\text{Paarbildung}} \tag{E.4}$$

Zusammenhang mit Wirkungsquerschnitten:

$$\alpha = \underbrace{N}_{\text{Teilchendichte}} (\sigma_C + \sigma_{\text{Ph}} + \sigma_{\text{Paar}}) \tag{E.5}$$

σ und α sind alle element- und energieabhängig. Herleitung aufwändig, hier nur Ergebnisse, z. B. Aluminium: leichtes Element und viele freie Elektronen: Comptoneffekt außerdem Photoeffekt bei kleinen Energien, Paarbildung bei hohen Energien. (S. Folie 3.21: Die Energieabhängigkeit der linearen Absorptionskoeffizienten)

	Energieabhängigkeit	Kernladungsabhängigkeit	überwiegt bei
Comptoneffekt	$\propto \frac{1}{E^2}$	$\propto \frac{1}{Z}$	Z klein, $E \lesssim 1 \text{ MeV}$
Photoeffekt	$\propto E^{-7/2}$	$\propto Z^4 \text{ bis } Z^5$	Z groß, E klein
Paarbildung	$\log E$ ab $E > 2E_0$	$\propto Z^2$	Z groß, E groß

Wiederholung IK2, IK3: Nachweis und Erzeugung niederenergetischer Photonen: Infrarot, Mikrowellen, Radiowellen → Übungsaufgabe

IK4 Teil 3:

Anhang

Abbildungsverzeichnis

1.1	Aufbau einer Schattenkreuzröhre	3
2.1	Zerlegung des Würfels in kleine Teilstücke → Verdampfung (Verdampfungsenergie, Oberflächenenergie)	4
2.2	Schematischer Aufbau des Laue-Verfahrens	5
2.3	Beugung an Gitterebenen	5
2.4	Feldüberhöhung an der Spitze	6
2.5	Schematischer Aufbau eines Feldemissionsmikroskops	6
2.6	Aufbau eines Rastertunnelmikroskops	7
2.7	Aufbau der Drehspiegelmethode und zeitlicher Verlauf	9
2.8	Messwerte des Millikan-Versuchs → diskrete Ladungswerte	10
2.9	Massenspektrometrie I: Trajektorie von Teilchen im elektrischen Feld hängt nur von der Anfangsenergie ab	11
2.10	Massenspektrometrie II: Trajektorie von Teilchen im magnetischen Feld hängt nur vom Impuls ab	12
2.11	Kombination von E - und B -Feld zur Relisierung eines Massenspektrometers	12
2.12	Geschwindigkeitsfokussierung durch Einsatz von geschickt geformtem B -Feld nach ASTON, 1919	13
2.13	Richtungsfokussierung durch unterschiedliche Laufzeiten durch den Sektormagnet	13
2.14	Massenspektrometrie durch elektrische Wechselfelder	14
2.15	Quadrupolmassenspektrometer	14
2.16	Wien'sches Geschwindigkeitsfilter	15
2.17	Teilchenstrom der Teilchen mit Radius r_1 trifft auf Teilchen mit Radius r_2	16
2.18	Teilchenstrom, gesucht: Anzahl der abgelenkten Teilchen	16
2.19	Verlauf der Lichtintensität durch ein Medium	17
2.20	Messung zur Streuung von Elektronen an Materie	18
2.21	Messergebnisse zur Elektronenstreuung	18
2.22	Rutherford-Streuung	19
2.23	Zusammenhang zwischen Streuwinkel ϑ und δ bei der Rutherford-Streuung	22
2.24	Zusammenhang zwischen Streuwinkel ϑ und Streuparameter $b \sim \cot \frac{\vartheta}{2}$	22
2.25	Herleitung zum differentiellen Streuquerschnitt	23
2.26	Potentialverlauf in Abhängigkeit des Abstandes	24
2.27	Aufbau des Rutherford-Streuversuchs	24
2.28	qualitativer Photoeffekt: negativ geladene Zinkplatte wird durch UV-Licht entladen	25
2.29	Aufbau einer Photozelle (Polarität der Spannung so, dass alle ausgelösten e^- zur Anode gelangen)	26
2.30	Versuchsaufbau zum quantitativen Photoeffekt	26
2.31	Ergebnisse des Photoeffekt-Versuchs	26
2.32	Abhängigkeit des Photostroms I und der Grenzfrequenz ν_G von der Intensität P und vom Metall	27
2.33	Abhängigkeit der Energie U_0 und der Austrittsenergie U_A von der Frequenz und vom Metall	27
2.34	Aufbau zum Erzeugen von Röntgenstrahlung und Röntgenspektrum	29
2.35	Intensität der Röntgenstrahlung für Molybdän	29
2.36	Aufbau des Compton-Versuchs	29

2.37	Experimentelle Beobachtung des Compton-Effekts: Die Intensitätsspitze wird mit zunehmendem Streuwinkel in den niederenergetischeren Bereich verschoben	30
2.38	Stoßvorgang beim Compton-Effekt	30
2.39	Aufbau zum Davisson-Germer-Versuch	32
2.40	Polardiagramme der Ergebnisse des Davisson-Germer-Experiments bei 40 V und 54 V	32
2.41	Aufbau zum Debye-Scherrer-Verfahren	33
2.42	Bragg-Bedingung	33
2.43	Elektronenbeugung an polykristalliner Graphitfolie	33
2.44	Geometrie der Öffnungswinkel beim Debye-Scherrer-Verfahren	34
2.45	Hohlraum als Realisierung eines schwarzen Körpers	35
2.46	Hohlraum mit Öffnung	35
2.47	Moden im 3-dimensionalen Koordinatensystem im \vec{k} -Raum, $k_i > 0$	36
2.48	Vergleich der $\langle \varepsilon_\nu \rangle$ für den klassischen Fall und nach der Quantenhypothese	38
2.49	Verlauf der Planck'schen Strahlungsformel	38
2.50	Abhängigkeit der Planck'schen Strahlungsformel von der Temperatur	40
2.51	Aufbau zur Messung des Planck'schen Strahlungsgesetzes	40
3.1	Grundsätzlicher Aufbau des Doppelspaltexperiments	41
3.2	Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung	41
3.3	Doppelspaltexperiment mit klassischen Wellen und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung	42
3.4	Doppelspaltexperiment mit Elektronen (Photonen) und dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung	43
3.5	Gauß'sches Wellenpaket	45
3.6	Gauß'sches Wellenpaket im Ortsraum zerfließt mit der Zeit	45
3.7	Aufbau zum „Quantenradierer“	47
4.1	Aufbau zur Messung der Spektrallinien	48
4.2	Messung der gelben Na-Doppellinie mit Hilfe eines Gitterspektrometers	49
4.3	Ritz'sches Kombinationsprinzip \rightarrow Vermutung gleicher, diskreter Energieniveaus der e^- im Atom	50
4.4	Aufbau des Franck-Hertz-Versuchs und dessen Ergebnis	50
4.5	Zur Berechnung im Schwerpunktsystem	51
5.1	Wellenfronten bewegen sich über die Flächen mit $\vec{p}' = \text{const}$ und $W = \text{const}$ hinweg	56
6.1	stückweise konstantes $V(x)$	68
6.2	Wellenfunktion an Potentialstufe	68
6.3	Potentialstufe	69
6.4	Ansatz zum Streuproblem	69
6.5	Zur Normierung der Teilchenstromdichte	71
6.6	Aufspaltung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit	71
6.7	Wellenfunktion an Potentialstufe für $E < V$	72
6.8	Potentialbarriere der Breite a und der Höhe V	73
6.9	Tunnelung durch eine Potentialbarriere	74
6.10	Potentialverlauf beim α -Zerfall	75
6.11	Messung des Tunnelstroms durch einen Isolator	75
6.12	Potentialverlauf bei kalter Emission von e^-	75
6.13	Potentialtopf mit $V < V_\infty$	76

6.14	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden	76
6.15	Lösungen der Wellengleichung im Potentialtopf	77
6.16	Potentialtopf mit endlich hohen Wänden	78
6.17	Grafische Lösungen der Gleichungen 6.39 und 6.40	80
6.18	Resonanzen	81
6.19	Delta-Potential: $aV = \text{const}$	81
6.20	Gebundener Zustand am Delta-Potential	83
6.21	freie Elektronen in einem periodischen Potential: reduziertes Zonenschema . .	84
6.22	freie Elektronen in einem periodischen Potential: reduziertes Zonenschema . .	85
6.23	Morse-Potential \rightarrow Näherung als harmonischer Oszillator	86
6.24	Ψ -Funktion mit Hermite-Polynomen	89
8.1	Beispiel für ein Eigenspektrum eines Potentialverlaufs	122
8.2	Spektroskopische Bezeichnung: „s-Orbital“	124
9.1	hier fehlt noch eine passende Bildunterschrift!	127
9.2	Polarisationen beim Zeeman-Effekt	130
9.3	Aufbau des Versuchs zur Messung des Zeeman-Effekts	130
9.4	Normaler Zeeman-Effekt: äquidistante Aufspaltung, ungerade Anzahl	131
9.5	Anormaler Zeeman-Effekt: äquidistante Aufspaltung innerhalb eines <i>Multipletts</i> , gerade Anzahl	131
9.6	mögliche Übergänge beim Zeeman-Effekt	131
10.1	Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments	133
10.2	Beobachtung für Ag: Aufspaltung in 2 Flecke, klassische Erwartung: 1 großer Fleck	133
10.3	Schematischer Aufbau der Resonanzmessung von Rabi	135
10.4	Aufbau zur Messung der Elektronenspinresonanz	135
10.5	Messergebnis der Elektronenspinresonanz	136
10.6	Aufspaltung der Spektrallinien	136
10.7	optische Übergänge beim anormalen Zeeman-Effekt	138
11.1	Spektrallinieanaufspaltung durch Spin-Bahn-Kopplung, Feinstruktur und Lamb- Verschiebung	142
E.1	Zur Herleitung der Bethe-Bloch-Formel	146
E.2	Ergebnis der Bethe-Block-Formel	147
E.3	Compton-Strahlung	147
E.4	Spektrum bei Wechselwirkung eines Photons mit Materie	148