

# Experimentalphysik IV

## Atom-, Molekül- und Festkörperphysik

Vorlesung von Prof. Dr. Giuseppe Sansone im Sommersemester 2019

Markus Österle   Damian Lanzenstiel

25. April 2019

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Einführung</b>	<b>2</b>
0.1	Wichtige Infos . . . . .	2
0.1.1	Programm . . . . .	2
0.1.2	Übungen . . . . .	2
0.1.3	Literatur . . . . .	2
0.2	Leistungen . . . . .	2
<b>1</b>	<b>Quantenmechanik</b>	<b>3</b>
1.1	Grundlagen . . . . .	3

# Kapitel 0

## Einführung

### 0.1 Wichtige Infos

#### 0.1.1 Programm

- Atomphysik
- Molekülphysik
- Festkörperphysik

#### 0.1.2 Übungen

- Anfang ab dem 06.05. - 10.05.
- Übungsblatt 0 zum Einstieg wird nicht bewertet

#### 0.1.3 Literatur

- Demtröder, Ex 3
- Haken-Wolf, Atom und Quantenphysik
- Christopher J. Foot, Atomic Physics
- Messiah Dover, Quantum Mechanics
- B.H. Bransden, Physics of atoms and molecules

### 0.2 Leistungen

Studienleistung: 50 % der Punkte aller Übungsblätter (kein Kriterium für die Zulassung zur Prüfung)

Prüfungsleistung: 50 % der Punkte und schriftliche Prüfung.

**Termine:**

Klausur 25.07.19 12-14 Uhr

# Kapitel 1

## Quantenmechanik

### 1.1 Grundlagen

- i) **Wellenfunktion**  $\Psi(\mathbf{r})$  mit  $\mathbf{r}$  der **Ortsdarstellung**

$$P = \int_V |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad \text{Wahrscheinlichkeit} \quad \int_V |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad \text{Normierungsbedingung}$$

- ii) **Operatoren**  $\hat{O}$

$$\hat{O}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi'(\mathbf{r})$$

Korrespondenzprinzip

$$\mathbf{r} = \hat{\mathbf{r}} \quad \hat{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi'(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\Psi(\mathbf{r}) \quad ; \quad \hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x) = \Psi'(x)$$

$$\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} \quad \hat{\mathbf{p}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi'(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\Psi(\mathbf{r}) \quad ; \quad \hat{p}_x\Psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\Psi(x) = \Psi'(x)$$

$\hat{\mathcal{H}}$  = Hamiltonian oder Hamilton-Operator.  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

- iii) **Zeitabhängige Schrödinger Gleichung**

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathcal{H}}\Psi(\mathbf{r}, t)$$

Die klassische Energie sieht so aus:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

In der QM dann folgendermaßen:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Die **Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung** sieht wie folgt aus:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

Diese Gleichung ist eine Eigenwertgleichung. Der Hamilton Operator liefert also den Energie-Eigenwert  $E$  und die Eigenzustände  $\Psi(\mathbf{r})$ .

## Stationäre Zustände

Jeder messbaren Physikalische Größe ist ein Operator  $\hat{O}$  zugeordnet. Bei einer physikalischen Messung wird der **Erwartungswert** gemessen:  $\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$ .

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi(\mathbf{r}) | \hat{O} | \Psi(\mathbf{r}) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}) \underbrace{\hat{O} \Psi(\mathbf{r})}_{\Psi'(\mathbf{r})} d\mathbf{r}$$

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \Psi(\mathbf{r}, t) | \hat{O} | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{O} \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

Diese Gleichung können wir wie folgt umformen:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t=0) \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{\text{Phasenfaktor}}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \int \Psi^*(\mathbf{r}, t=0) \cancel{e^{iEt/\hbar}} \hat{O} \Psi(\mathbf{r}, t=0) \cancel{e^{-iEt/\hbar}} d\mathbf{r} \\ &= \int \Psi^*(\mathbf{r}, t=0) \hat{O} \Psi(\mathbf{r}, t=0) d\mathbf{r} \stackrel{*}{=} \langle \hat{O}(t=0) \rangle \end{aligned}$$

\* : wenn  $\hat{O}$  nicht Zeitabhängig ist.

## Stationäre Zustände

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{mit} \quad \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-iEt/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t=0)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\Psi} = -i \frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar} \partial t$$

Lösung der DGL mittels Variablen-Trennung

$$\ln \left[ \frac{\Psi(\mathbf{r}, t)}{\Psi(\mathbf{r}, t=0)} \right] = -\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t=0)$$

$$\hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t=0) = E \Psi(\mathbf{r}, t=0)$$

Taylor Entwicklung:

$$e^x = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} = a \left( \hat{\mathcal{H}} \right)^0 + b \left( \hat{\mathcal{H}} \right)^1 + c \left( \hat{\mathcal{H}} \right)^2 + \dots$$

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t=0) &= a \Psi(\mathbf{r}, t=0) + b \hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t=0) + c \hat{\mathcal{H}} \cdot \hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t=0) + \dots \\ &= a \Psi(\mathbf{r}, t=0) + b E \Psi(\mathbf{r}, t=0) + c E^2 \Psi(\mathbf{r}, t=0) + \dots \\ &= (a + bE + cE^2 + \dots) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t=0) \\ &= e^{-iEt/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t=0) \end{aligned}$$

Wir können einen Operator in der e-Funktion schreiben, da diese mit der Taylorentwicklung als Reihe entwickelt werden kann.

iv) **Spin** (Elektronen)

$\Rightarrow$  Wasserstoffatom (Stern-Gerlach)

$\Rightarrow$  Helium (Pauli Prinzip)

## v) Quantensysteme

- Freies Teilchen, Potentialstufe (Tunneln)
- Harmonischer Oszillator  $\Rightarrow$  Molekülphysik
- Coulomb Potential  $\Rightarrow$  Wasserstoffatom

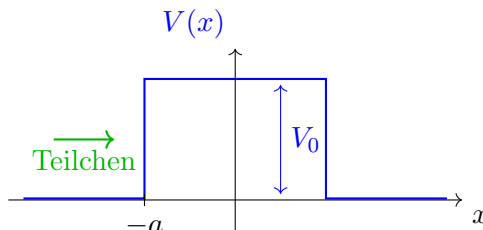


Abbildung 1.1: Darstellung einer Potentialbarriere. Beispiel für den Tunneleffekt eines hindurchfliegenden Teilchens, das eigentlich weniger Energie hat als klassisch nötig wäre um die Barriere zu überwinden. Dieses Bild wurde mit dem  $\text{\LaTeX}$ Paket Tikz erstellt.

## vi) Kommutatoren

$$\begin{aligned} \hat{x} : \mathbf{p} &= \mathbf{p}_x & [\hat{x}, \hat{p}] &= \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} \\ \hat{A}; \hat{B} : & & [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \end{aligned}$$

$$\text{Wellenfunktion } \Psi(x) \quad [\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) = \Psi'(x)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) x$$

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) &= \left\{ x \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) x \right\} \Psi(x) \\ &= x \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \Psi(x) \right) - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) x \Psi(x) \\ &= -i\hbar x \frac{d\Psi}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx} (x\Psi(x)) \\ &= \cancel{-i\hbar x \frac{d\Psi}{dx}} + \cancel{i\hbar x \frac{d\Psi}{dx}} + i\hbar \Psi(x) \underbrace{\frac{dx}{dx}}_{=1} \\ &= i\hbar \Psi(x) = \Psi'(x) \end{aligned}$$

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \quad \Rightarrow \quad \text{die zwei Operatoren vertauschen nicht !!!}$$

## Eigenschaft Kommutator

$$\hat{A}; \hat{B}$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

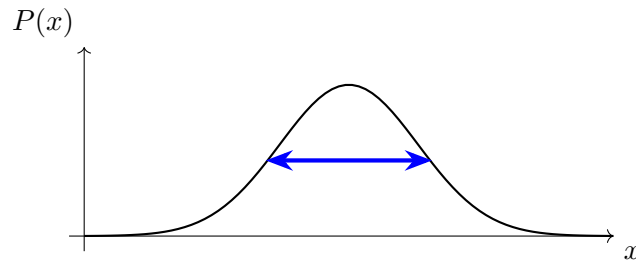


Abbildung 1.2: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Gaußkurve. Der Pfeil soll die Standardabweichung darstellen. Dieses Bild wurde mit dem L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-Paket Tikz erstellt.

$[\hat{A}, \hat{B}]$  Operator  $\Rightarrow$

$$\begin{aligned}\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle &= \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | \Psi \rangle \\ &= \int \Psi^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \Psi d\mathbf{r}\end{aligned}$$

$\Delta A, \Delta B$  Standardabweichung

$$\sigma_x = P(x) \quad \sigma_x = \left[ \int (x - \mu)^2 P(x) dx \right]^{1/2} \quad \mu = \int x P(x) dx$$

$$\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}. [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\begin{aligned}\Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \\ \Delta x \cdot \Delta p &\geq \frac{1}{2} |i\hbar| = \frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

**Morgen:**

Operatoren die vertauschen: Drehimpulsoperator  $\mathbf{l}$  mit den Komponenten  $l_x, l_y, l_z$  und  $l^2$ . Es gilt  $[l^2, l_z] = 0$

$$\Delta l^2 \cdot \Delta l_z \geq 0$$

Man kann also Zustände finden, bei denen  $\Delta l^2 = 0$ ;  $\Delta l_z = 0$  sind. Diese Zustände können im Prinzip existieren und verletzen die Unschärferelation nicht! Diese Zustände sind dann gleichzeitig Eigenzustände von  $l^2$  und  $l_z$ .

**Exkurs: Varianz und Standardabweichung in der Quantenmechanik**

Wellenfunktion  $\Psi(x)$  mit Wahrscheinlichkeit  $P(x) = |\Psi(x)|^2$

$$\begin{aligned}\mu &= \int x P(x) dx = \int x |\Psi(x)|^2 dx \\ \sigma &= \int x^2 P(x) dx = \int x^2 |\Psi(x)|^2 dx\end{aligned}$$

Die Varianz ist definiert als:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \int (x - \mu)^2 P(x) dx = \int (x^2 + \mu^2 - 2\mu x) P(x) dx \\ &= \int x^2 P(x) dx + \mu^2 \int P(x) dx - 2\mu \int x P(x) dx \\ &= \int x^2 P(x) dx + \mu^2 - 2\mu\mu = \int x^2 P(x) dx - \mu^2 \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2\end{aligned}$$