Lukas Martin Huber
Matrikelnummer 3374893
Mathematik BSc 100%, 5. Semester

1 De-Broglie-Wellen

Wellendarstellung/Interferenz Phasengeschwindigkeit $|\vec{v}_{ph}| = \frac{\omega}{|\vec{k}|}$
Gruppengeschw. $v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k}$
Intensität der Welle Φ: $|\Phi|^2$ $E = mc^2$, $E = h\nu_0 = hm_0 \frac{c^2}{h}$

Zwei-Pfad-Interferenz Opt. Strahlteiler: $\begin{pmatrix} A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = T_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$, T_1, T_3 Strahlteiler, T_2 Propagationsstrecke
E-Erhaltung: $|A_1|^2 + |A_2|^2 = |A_3|^2 + |A_4|^2$
Endzustand: $\begin{pmatrix} A_7 \\ A_8 \end{pmatrix} = T_3 T_2 T_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$

De-Broglie-Wellen quadr. gemittelte Geschw. $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$
Impuls $p = mv$
dB-Wellenlänge $\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p}$
Gas ideal: $\frac{m}{2}\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \implies \langle \lambda_{\text{dB}} \rangle = \frac{h}{m_e v_{\text{th}}}$
Planck. W'quantum $6.626\,099\,34(89) \times 10^{-34}$ Js
$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2$, $\hbar k = mv$, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

2 Wellenpakete, Dispersion

Wellenpaket Ausbreitung
$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) \exp(i(kx - \omega t))\, dk$
$E_{dB} = \frac{\hbar^2 k_{dB}^2}{2m}$

Fourierreihe Fourier dient Trafo vom Orts- in Impulsraum
period. Fkt. $f(x) = f(x+d)$ in Fourierreihe: $f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx}$ mit F-Koeff. $g_n = \frac{1}{d} \int f(x) e^{-inGx}\, dx$, $G = \frac{2\pi}{d}$

Dispersion Diskrete Superposition: $\phi(x,t) = \sum_{j=-N}^{N} \exp(i(k_j x - \omega_j t))$, $k_j = bj$, zeichne Phasen: $\varphi_j(t) = \frac{\hbar}{2m} b^2 j^2 t = \beta j^2 t$
Wann sind Summanden in Phase? $|\varphi_{j+1}(T_r) - \varphi_j(T_r)| = l 2\pi$
Sei nun $\omega_j = c k_j \implies cb(j+1)T_r - cbjT_r = l2\pi$

Gaußsches Wellenpaket Geg.: $\phi(x)$ und Fourierzerlegung
Wahrscheinlichkeit $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2\, dx = 1$

Dispersionsrelation Taylor $\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0}(k - k_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}|_{k=k_0}(k-k_0)^2$
$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{i(kx - \omega t)}\, dk$
$= e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{-i((\omega_0' t - x)(k-k_0) + \omega_0''/2 (k-k_0)^2)}\, dk$
Streuung an N-Spalten-Gitter: $\Psi(x) = N \sum_{N=-\infty}^{\infty} g_n e^{inGx}$ m. $g_n = \frac{1}{n\pi} \sin(n \frac{\pi B}{d})$, $g_0 = \frac{B}{d}$, $G = \frac{2\pi}{d}$

Atom-Interferometer Interferenzmuster durch Verschiebung des Gitters
W'keit, Teilchen zu detektieren: $|\Psi|^2$ mit $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = \eta^2 e^{ikL_1} + \eta^2 e^{ikL_2}$.
Fall $\Delta L = L_2 - L_1 = 0 \implies |\Psi|^2 = |2\eta^2|^2 = 4\eta^4$
$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V \implies k' = k\sqrt{1 - V/E} \approx k(1 - V/(2E)) = K n_{dB}$
Brechungsindex $n = \frac{k_{\text{med}}}{k_{\text{vac}}} = \frac{k_{\text{pot}}}{k_{\text{frei}}} = \frac{\lambda_{dB}^{\text{frei}}}{\lambda_{dB}^{\text{pot}}}$

3 QM, Phasengitter, Wahrscheinlichkeit

Einführung in die QM Ortsdarst.: $\psi(x) = |\psi| e^{i\phi}$, Impulsdarst. $\tilde{\psi}(k) = |\tilde{\psi}| e^{i\phi}$
Es gilt: $\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x})\, d^3x = \int \tilde{\varphi}^*(k) \tilde{\psi}(k)\, dk$
Wellenpaket als Superposition dB-Wellen $|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(k) |k\rangle\, dk$
Operatoren in Orts- u. Impulsdarstellung:
$\hat{x}|\psi\rangle = x|\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial k} |\psi\rangle$
$\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} |\psi\rangle = \hbar k |\psi\rangle$
$\hat{H}|\psi\rangle = -i\hbar \Delta |\psi\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\psi\rangle$

Wahrscheinlichkeit Normierungskonstante N_n mit $\langle n | n \rangle = 1$
Erwartungswert $\langle \hat{x} \rangle = \langle \phi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{x}) x \psi(\vec{x})\, d^3x$
Varianz $\text{Var}(x) = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$, $\text{Var}(p) = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2$, für Eigenzustände Var = 0
Impulserwartungswert $\langle \hat{p} \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle$, $\bar{p} = \int pP(p)\, dp$
Erw.wert Energie Impulszustand $\hat{H}|k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |k\rangle$
Zeitentw. EE-Zust. $|\psi(t)\rangle = |\psi(t=0)\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t}$
Gesamtenergie $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$
Operator-Gleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

Schrödinger-Gleichung für nichtrel. QM $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t)$
$|\psi|^2\, dV = 1$

4 Doppelmuldenpotential

Zeitentwicklung $|\psi(t)\rangle$: $|♀(t)\rangle = e^{-i(\Omega/2)t} |+\rangle$, $|♂(t)\rangle = e^{i(\Omega/2)t} |-\rangle$
Zustand $|\psi(t)\rangle$ als Fkt. der EEZ $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|♀(t)\rangle + |♂(t)\rangle)$

5 Kasten, Harm. Osz.

Beispiele für 1-Teilchen-QM Streuung freier Teilchen an Potentialstufe
Fall 1: klassische Reflektion ($E_{kin} < V_0$)
$\phi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
$\phi_2(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$, $D = 0$, $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)$
wegen $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V \implies k'^2 = \frac{2m}{\hbar}(E - V)$
zeitl. Enwicklung: komplexe Rotation $e^{-i\omega t} = e^{-i\frac{E}{\hbar} t}$
Randbedingungen:
Stetigkeit: $\phi_1(x=0) = \phi_2(x=0)$
Diff.barkeit: $\partial_x \phi_1(x=0) = \partial_x \phi_2(x=0)$
$\implies A + B = C \implies V = A\frac{ik+\alpha}{ik-\alpha} \implies Aik - Bik = -C\alpha \implies C = A\frac{2ik}{ik-\alpha}$
$\implies \phi_1(x,t) = A\frac{2ik}{ik-\alpha} e^{-i\frac{E}{\hbar}t}(\cos(kx) - \sin(kx))$
$\implies \phi_1(x,t) = A\frac{2ik}{ik-\alpha} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{-\alpha x}$
Fall 2: klassische Transmission ($E_{\text{kin}} > V_0$)
$B = \frac{k - k_2}{k + k_2} A$, $C = \frac{2k}{k+k_2} A$
Transmission durch Potentialbarriere (Tunneleffekt)
Transmissionsw'keit $T = \frac{|\psi_2(d)|^2}{|\psi_2(0)|^2} e^{-\tilde{2}\alpha d}$
Kastenpotential (Limes $V_0 \to \infty$)
$\psi_2(0) = 0 = \psi_2(d)$
Ansatz Schrödinger: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \implies A = -B$, $kx = n\pi$
$\implies \phi_n(x) = \sqrt{2/d} \sin(\frac{n\pi}{d} x)$ mit $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} n^2$

Zustände im Kasten Teilchen, Masse m, Breite d, $V(x) = 0$ für $0 \leq x \leq d$, sonst ∞
Aufenthalts-W'keit außerhalb Kasten verschwindet. Randbed. für Wellenfkt. $\Phi(x) = \langle x | \phi \rangle$: $\Phi(x) = \phi(x)$ innerhalb Kasten, sonst 0
Allg. Form der Ortsdarst. $|\langle x | n_x \rangle|^2$, Abhängigkt. von n_x: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.
Gesucht sind Eigenfkt.en mit $\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$. Lösung ist Harm. Osz. $A\sin(kx) + B\cos(kx)$. Randbed. $\implies B = 0$ und $k = \frac{n_x \pi}{d}$. Also diskrete Eigenenergien $E_{n_r} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(n_x \frac{\pi}{d}\right)^2$. Norm.konst. $\int_0^d \sin^2(n_x \frac{\pi}{d} x)\, dx = d/2 = 1 \implies A = \sqrt{\frac{2}{d}} e^{i\phi}$
Knotenanzahl innerhalb Kasten: $n_x - 1$
Energiespektrum f. $d = a_0$, $d = 2a_0$: $E = \mathcal{E}(n_x/d)^2 \implies \mathcal{E} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}$
Erweiterung auf 2D mit Breite $3d$ in y-Richtung: Energien von $|n_x, n_y\rangle$: $\phi_x(x) = A\sin\left(n_x \frac{\pi}{d} x\right)$, $\phi_y(y) = \sin\left(n_y \frac{\pi}{3d} y\right)$
$\implies \hat{H}\Phi(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\phi_x(x)\phi_y(y) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{d}\right)^2\left(n_x^2 + \left(\frac{n_y}{3}\right)^2\right)\phi_x(x)\phi_y(y) \implies$ Eigenenergien $E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{d}\right)^2\left(n_x^2 + \left(\frac{n_y}{3}\right)^2\right)$

Wellenfunktion H. Osz./WR Hermite-Polynome $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$, $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$
Phasenfkt. $\phi_n(x) = N_n H_n\left(\frac{x}{\sigma}\right) e^{-(x^2/\sigma^2)/2}$, $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
$I_n = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^n e^{-(x/\sigma)^2}\, dx = \sigma\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$

6 Potentialbarrierre

$\phi_n(x) = a_n e^{ik_n x} + b_n e^{-ik_n x}$, $k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_n)}$, in Matrix $\phi_n(x) = \begin{pmatrix} a_n e^{ik_n x} \\ b_n e^{-ik_n x} \end{pmatrix}$; gesucht $\phi_2(x_2) = D(d_2, k_2) \cdot \phi_2(x_3) \implies D(d_n, k_n) = \begin{pmatrix} e^{-ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{ik_n d_n} \end{pmatrix}$
Transfermatrix $T_{n,m} = T(k_n, k_m)$: Anf.bed. $\phi_n(0) = \phi_m(0)$ und $\frac{d\phi_n(x)}{dx} = \frac{d\phi_m(x)}{dx}$ in $x = 0 \implies a_n + b_n = a_m + b_m$ und $k_n a_n - k_n b_n = k_m a_m - k_m b_m \implies T(k_n, k_m) = \begin{pmatrix} (k_n + k_m)/(2k_n) & (k_n - k_m)/(2k_n) \\ (k_n - k_m)/(2k_n) & (k_n + k_m)/(2k_n) \end{pmatrix}$

Lukas Martin Huber
Matrikelnummer 3374893
Mathematik BSc 100%, 5. Semester

7 Gitter, Drehimpuls

Gitterspektrometer Methode zur Bestimmung von Spektren
Photonenergien $E_{\nu_i} = 2\pi \frac{\hbar c}{\lambda_i}$
Energieeigenwerte Wasserstoffatom $E_n = -R_y \frac{1}{n^2}$, R_y Rydbergkonst. (= 13.6 eV), Energien d. Photonen entsprechen Differenzen der EEW: $E_\nu = |E_{\nu_1} - E_{\nu_2}|$
Anzahl Gitterlinien $N = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$

Eigenfunktionen des Drehimpulses $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$
z-Komp. in Kugelkoord.: $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$
EW-Gleichung $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\vec{x}|l,m\rangle = \hbar m\langle\vec{x}|l,m\rangle \Longrightarrow \langle\vec{x}|l,m\rangle = Ce^{im\phi}$
Quadrat Drehimpulsoperator m. EW-Gl.
$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2})\right]Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)Y_m^l(\theta,\phi)$ wird gelöst durch $\hat{\vec{L}}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle$ und $\hat{\vec{L}}_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$
Überlagerung Eigenfkt. m. gleicher Energie löst auch Schrödinger!
$F_{x,y}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^1(\theta,\phi) \mp Y_1^{-1}(\theta,\phi))$
F_x, F_y Eigenzustände von $\hat{\vec{L}}^2$, aber nicht von $\hat{\vec{L}}_z$.

8 Wasserstoffatom

Hamilton Hamiltonian im Laborsystem: $\hat{H} = \hat{E}_{\text{pot}} + \hat{E}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_k - \vec{r}_e|}$
Hamiltonian im System des Kerns: $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$, $\mu = \frac{m_e m_k}{m_e + m_k}$
Externe Dynamik: dB-Welle mit $\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{2ME_s}$
Interne Dynamik: $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)P(\theta)R(\phi)$ (Separationsansatz)

Radiale Wellenfunktion Bohrscher Atomradius $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$
Skalierter Radius $\rho = 2z\frac{R}{a'_B n}$, $a'_B = (1 + \frac{m_e}{m_k})a_B$
Separationsansatz der Dgl. liefert
$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu}l(l+1)\frac{1}{r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r)$
Lsg.en mit $\rho = \frac{2Zr}{na'_b}$, $a'_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu\epsilon^2}$:
$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na'_B}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$
Laguerre-Polynome $L_m^k(x) = (-1)^k\frac{d^k}{dx^k}L_{m+k}(x)$, $L_m(x) = \frac{e^x}{m!}\frac{d^m}{dx^m}(x^m e^{-x})$
Kugelschale $[r, r+dr]$ mit der höchsten W'keit: $l_{\max} = n-1 \Longrightarrow \tilde{P}(\rho) = \frac{|R_{n,n-1}|^2\rho^2}{N_{nl}^2}$, $\frac{\partial\tilde{P}}{\partial\rho} = 0 \Longrightarrow$ finde r
W'keit Grundzust.-Elektron innerhalb H-Kern: $n = 1, l = 0 \Longrightarrow P_k = \int_0^{R_k}|R_{10}(r)^2 r^2\, dr|$
Allg.: $dP = |R_{n,l}(r)|^2 4\pi r\, dr$

Dipolmomente im H-Atom QM-Dipolmoment $\langle\vec{d}\rangle = -e\langle\psi|\vec{r}|\psi\rangle$
Zustände $|1s\rangle = |1,0,0\rangle$, $|2s\rangle = |2,0,0\rangle$, $|2p_x\rangle = |2,1,0\rangle$, $|M\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle + |2s\rangle)$, $|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle + |2p_z\rangle)$
Dipolmoment verschwindet: Auswertung Ortsbereich $\int x|\Psi_{nlm}|^2\, dV$. $|\Psi_{n00}|^2$ radialsymmetrisch, Integral verschwindet wg. Fkt ungerade. $|\Psi_{n10}|^2$ gerade Fkt., verschwindet auch. Funktioniert nur bei $|M\rangle$ als Superposition radialsymmetrischer Fkt.
Zeitabhängigkeit von $|M\rangle$, $|D\rangle$: $\beta = \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} \Longrightarrow |M(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1s\rangle + e^{i\beta}|2s\rangle)$, analog für D
Ber. z-Komponente $\langle d_z\rangle_D = -e\langle D(t)|\hat{z}|D(t)\rangle$
Frequenz Welle $f_{21} = \frac{E_2 - E_1}{2\pi\hbar} = \frac{1}{h}R_y(\frac{1}{4} - 1)$, Wellenlänge $\lambda_{21} = \frac{c}{f_{21}}$

Drehimpuls Operator $\hat{L} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\partial_\phi$
Eigenwerte: $\hat{\vec{L}}^2|n,l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle$, $\hat{L}_z|n,l,m\rangle = \hbar m|n,l,m\rangle$
$\Longrightarrow |\hat{\vec{L}}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$
Es gilt für l: $s = 0, 1 = p, 2 = d, 3 = f, 4 = g$

9 Exotische Atome, Zeeman-Effekt

Exotische Atome Muonisches H-Atom besteht aus Proton und Muon μ^-. Wellenlänge d. Übergangs von $n = 2$-Schale zu $n = 1$-Schale λ geg. Wellenlänge λ_H: $\tilde{E} = E_2 - E_1 = -(1 - \frac{1}{4})R_y \Longrightarrow \lambda_H = \frac{2\pi\hbar c}{\tilde{E}}$
Muon-Masse: $R_M = R_H\frac{\mu_M}{\mu_H} = \frac{2\pi\hbar c}{3\lambda_M/4}$ und somit $m_M = \frac{\mu_M m_p}{m_p - \mu_M}$
Größe des muonischen H-Atoms: $r_M = \frac{n^2 4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu_M e^2} = a'_B(H)\frac{\mu_H}{\mu_M} = a'_B\frac{m_c}{187m_e}$ mit $\mu_H = m_c$
Positronium mit e^+ Positron und e^- Elektron. Größenvgl.: $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m} = \frac{m_e}{2}$.
Setze oben ein $\Longrightarrow r_p$; Vgl. zu H: $r_e = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{r_p}{2}$
Ionisationsenergie=Rydbergenergie $\Longrightarrow$ Positronium: $R_{y_p} = \frac{R_y}{2} = \frac{1}{2}\frac{m_e e}{8\hbar^2 e_0^2}$, analog Muon
Wellenlänge Lyman-α-Serie: λ_m geg., $\frac{hc}{\lambda_e} = \frac{3}{4}R_y$, $\frac{hc}{\lambda_p} = \frac{3}{4}R_{y_p}$

Zeeman-Effekt Aufspaltung von Spektrallinien durch Magnetfeld, unterschiedliche Verschiebung von Energieniveaus einzelner Zustände unter Einwirkung des Magnetfeldes. Spin führt zu um $\frac{1}{2}$ feinerer Aufsplitterung.
$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}(\hat{\vec{p}}^2 + e\{\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}}\hat{\vec{p}}\} + e^2\hat{\vec{A}}^2) + V(\vec{x})$
$\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}}\hat{\vec{p}} = -i\hbar B_z\hat{L}_z \Longrightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e}B_z\hat{L}_z$
$E_{nm} = E_0 + \frac{e\hbar}{2m_e}mB_z =: E_0 + \mu_B m B_z$, $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m}\vec{L}$ zirkular polarisiertes Licht ändert m, lineares nicht

10 Stern-Gerlach, Spin

Stern-Gerlach $E_{\text{pot}} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \Longrightarrow \vec{F}_z = -\nabla E_{\text{pot}} = |\vec{\mu}_s| \cdot \partial_z\vec{B}$ mit $\vec{\mu}_s = -g\frac{\mu_H}{\hbar}\vec{S}$, $|\vec{S}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, $S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$, $g \approx 2$
pot. Energie d. Spinkomponenten im magn. Feld: $\hat{V}_{\text{mag}} = -\hat{\vec{\mu}}\vec{B} = g\mu_B\hbar B_z\hat{S}_z = gmu_B B_z(\pm\frac{1}{2}) \Longrightarrow$ Kraft $F_z = g\mu_B\frac{\partial B_z}{\partial z}(\pm\frac{1}{2})$. z-Position und -Geschw. $z_1 = \frac{F_z}{2m}t_1^2 = \left(\frac{\Delta y_1}{v}\right)^2$, $\dot{z}_1 \Longrightarrow$ Separation $z_2 = z_1 + \dot{z}_1\left(\frac{\Delta y_2}{v}\right)$

Spin Halbzahliger Drehimpuls, Operator $\hat{\vec{S}}$ mit Darstellung (Pauli-Matrizen)
$\hat{S}_x \to \hbar/2\sigma_x = \hbar/2\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$
$\hat{S}_y \to \hbar/2\sigma_y = \hbar/2\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$
$\hat{S}_z \to \hbar/2\sigma_z = \hbar/2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$
Basiszustände $|\uparrow\rangle = |s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle$, $|\downarrow\rangle = |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle$
Spin-Operatoren: $\hat{s}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$, $\hat{s}_x|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$, $\hat{s}^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{\hbar^2}4|\uparrow\rangle$
Kommutatoren: $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$, $[\hat{S}_k, \hat{S}_l] = i\hbar\epsilon_{klm}\hat{S}_m$
Dirac-Gl. $\hat{H} = \hat{H}_{\text{nichtrel.}} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} + \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\delta_D(r)$
Spin-Bahn-Kopplung: $\vec{B}_{\text{Kern}} = -\frac{\mu_0 ze}{4\pi r^3 m}\vec{L}$, $E_{\text{pot}} = \frac{zeg\mu_B}{8\pi\epsilon_0 r^3 mc}\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$
Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$
Eigenzustände $|\psi_{nlm}\rangle = |J, m_J\rangle$, $J \in \{|l-s|, ..., l+s\}$, $m_J \in \{-J, ..., +J\}$
Eigenwerte
$\hat{\vec{L}}^2|\psi_{nlm}\rangle = \hbar^2 l(l+1)|\psi_{nlm}\rangle$
$\hat{\vec{S}}^2|\psi_{nlm}\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\psi_{nlm}\rangle$
$\hat{\vec{J}}^2|\psi_{nlm}\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\psi_{nlm}\rangle$

11 Helium

$$\text{Ortsdst. } H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2p}(\Delta_1 + \Delta_2)}_{E_{\text{kin}}} \underbrace{- \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r_1}|} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r_2}|}}_{\text{e-K-WW}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_{12}|}}_{\text{e-e-WW}}$$

Grundzustandsenergie ohne e^--WW: $E_{n=1} = 2z^2R_y^* \gtrsim 108.8$eV, Ionisationsenergie mit e^--WW: ≈ 79eV (geringer wegen Abstoßung)
Wellenfkt. für Grundzustand $\psi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \frac{z^3}{a_B}\exp(-\frac{z}{a_B}|\vec{r}_1 + \vec{r}_2|)$
EEW f. Grundzustand $E = (-z^2 + \frac{5}{8}z)(2 \cdot 13.6\text{eV}) = -74.8$eV wegen $z = 2$
Gesamtspin $\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2$
$\hat{S}^x|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$, $\hat{S}^y|\uparrow\rangle = i\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$, $\hat{S}^z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$ Spins $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = -\frac{1}{2}$.
Dann Singulett für $s = 0, m_s = 0$, Triplett für $s = 1, m_2 = -1, 0, 1$
Basis $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle$
EW-Gleichung $\hat{\vec{S}}^2|\psi\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\psi\rangle$
Singulett: $|S = 0, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\}$
Triplett:
$|S = 1, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\}$
$|S = 1, M_S = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$
$|S = 1, M_S = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$
Permutator $\hat{P}_{12}|\psi,\phi\rangle = |\phi,\psi\rangle$

Helium-Wellenfunktionen Konstruktion Bahnanteile $|\psi_s\rangle$ (sym.), $|\psi_a\rangle$ (anti-sym.). Wir haben:
$|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle_1|200\rangle_2 + |200\rangle_1|100\rangle_2)$
$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle_1|200\rangle_2 - |200\rangle_1|100\rangle_2)$
mit $|^1S_0\rangle = |\psi_s\rangle|0,0\rangle$, $|^3S_1\rangle = |\psi_s\rangle|1,x\rangle$
Nachweis Pauli-Prinzip mit Permutator
Energetische Zustände $\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{100}(\vec{r}_1)\Psi_{200}(\vec{r}_2) - \Psi_{100}(\vec{r}_2)\Psi_{200}(\vec{r}_1))$