FORMELZETTEL PEP3

1. Vorspann

Detektionswahrscheinlichkeit:

klassische Teilchen $P_{12} = \frac{1}{2}(P_1 + P_2)$

klassische Wellen $I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} cos(\vec{k}\vec{r}_{12})$

Materiewellen $P = |\Phi|^2 = \Phi^* \Phi$

2. Materiewellen vs. Teilchen

Grundlegende Hypothesen:

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

$E = h\nu_0 \qquad \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p}$

Dispersionsrelation:

fuer Materiewellen $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m_0}$

fuer Licht $\omega(k) = ck$

Phasen- und Gruppengeschw. $v_{ph} = \frac{\omega}{k},\ v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k}$

Das Wellenpaket:

$\Psi(x,t) = \int_{\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k)\ exp(-i(\vec{k}\vec{x} - \omega t))\ dk$

Heisenberg'sche Unschaerferelation

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

Teilchen scharf lokalisiert → Impuls maximal unscharf

→ schnelleres Zerfliessen

Ausbreitung und Zerfliessen des Wellenpakets:

Taylor-Reihe der Dispersionsrelation:

$\omega(k) = \omega_0 + \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}|_{k_0} \cdot (k - k_0) + \frac{\partial^2 \omega(k)}{\partial k^2}|_{k_0} \cdot (k - k_0)^2$

$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk,\ \kappa := k - k_0$

$\Rightarrow \qquad = e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(\kappa + k_0) e^{-i((w_0' t - x)\kappa + \frac{\omega_0''}{2}\kappa^2)} d\kappa$

De Broglie-Welle — einhuellende bewegt sich mit $v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k_0}$

Fuer $\omega_0'' \neq 0$: Phase $\propto \kappa^2 t \Rightarrow$ Wellenpaket zerfliesst

Effektive Masse: $\frac{\omega''}{2} k^2 =: \frac{\hbar k^2}{2m^*} \quad \Rightarrow m^* \propto \omega''$

Streuung an periodischen Strukturen: (N-Spalten-Gitter)

$\Psi_{nach\ Gitter}(x) = N \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_n e^{inGx},\ G = \frac{2\pi}{d}$

mit $g_n = \frac{1}{n\pi} sin(n\frac{\pi B}{d}),\ g_0 = \frac{B}{d}$

Impuls aendert Richtung, ω_{DB} konstant (Energieerhaltung)

$\Psi(x,z,t) = N \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(nGx + k_z' z - \omega t)},\ \vec{k}_n := (nG, k_z')^T$

$= N \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(\vec{k}_n \vec{x} - \omega t)}, \qquad k_z^2 = n^2 G^2 + k_z'^2$

Wahrsch., in Richtung $\vec{k}_1 = (G, k_z')^T$ gebeugt zu werden:

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

Fuer $\frac{G}{k} \ll 1$: $\alpha = \frac{G}{k} = \frac{2\pi}{d}\frac{\lambda_{DB}}{2\pi} = \frac{\lambda_{DB}}{d}$ (wie EM-Wellen)

Atom-Interferometer:

Wahrsch., Teilchen zu detektieren ist $|\Psi|^2$ mit:

$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = \eta^2 e^{ikL_1} + \eta^2 e^{ikL_2} = \eta^2 e^{ikL_1}(1 + e^{ik(L_2 - L_1)})$

fuer $\Delta L = L_2 - L_1 = 0 \Rightarrow |\Psi|^2 = |(2\eta^2)|^2 = 4\eta^4$

letztes Gitter: $\Psi = \eta^2 e^{ikL_1} e^{i\frac{2\pi\Delta x}{d}} + \eta^2 e^{ikL_2} \Rightarrow |\Psi|^2 = 2\eta^4(1 + cos(\frac{2\pi \Delta x}{d}))$

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V \Rightarrow k' = k\sqrt{1 - \frac{V}{E}} \approx k(1 - \frac{V}{2E}) =: k \cdot n_{DB}$

$n_{DB} = \frac{k_{Medium}}{k_{Vakuum}} = \frac{k_{Potential}}{k_{frei}} = \frac{\lambda_{DB}^{frei}}{\lambda_{DB}^{Potential}}$

3.1. Allgemeine QM

Skalarprodukt von bra und ket:

in Ortsdarst. $\langle \Phi, \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(\vec{x})\Psi(\vec{x}) d^3x$

in Impulsdarst. $\langle \Phi, \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(\vec{k})\Psi(\vec{k}) d^3k$

Wellenpaket als Superposition de Broglie-Wellen:

$|\Psi_{WP}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k)\ |k\rangle$ dk

Wahrscheinlichkeitsamplitude, $p' = \hbar k$ zu messen:

$\langle k'|\Psi_{WP}\rangle = \langle k'| \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k)\ |k\rangle\ dk\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k)\ \langle k'|k\rangle\ dk$

$= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k)\ \delta_D(k - k')\ dk = \tilde{\Psi}(k')$

Operatoren: in Ortsdarstellung — in Impulsdarstellung

$\hat{x}|\Psi_x\rangle = x|\Psi_x\rangle \qquad \hat{x}|\Psi_x\rangle = i\frac{d}{dk_x}|\Psi_x\rangle$

$\hat{p}|\Psi_p\rangle = -i\hbar\partial_x|\Psi_p\rangle \qquad \hat{p}|\Psi_p\rangle = \hbar k|\Psi_p\rangle$

$\hat{H}|\Psi_E\rangle = -i\hbar\Delta|\Psi_E\rangle \qquad \hat{H}|\Psi_E\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}|\Psi_E\rangle$

Erwartungswert eines Operators:

$\bar{x} = \langle\tilde{\Psi}|\hat{x}|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(\vec{x})\ x\ \Psi(\vec{x})\ d^3x$

Varianz eines Operators:

$Var(p) = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2$ (= 0 fuer Eigenzustaende)

Kommutator zweier Operatoren:

$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Leftrightarrow$ Operatoren besitzen selbe Eigenzustaende

Heisenberg-Unschaerfe mit Operatoren:

$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x(-i\hbar\partial_x) - (-i\hbar\partial_x)x = i\hbar$

$[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{p}, \hat{p}^2] = 0$ (fuer freies Teilchen)

Zeitentwicklung von Energieeigenzustaenden:

$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t=0)\rangle \cdot exp(-i\frac{E_n}{\hbar}t)$

QM-Gesamtenergie:

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

Operator-Gleichung (axiomatisch fuer QM):

$i\hbar\partial_t\ |\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$

Schroedinger-Gleichung fuer nicht-relativistische QM

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

mit $1 = \int_V d^3r|\Psi|^2$

4. Beispiele fuer 1-Teilchen-QM

Streuung freier Teilchen an einer Potentialstufe:

Fall 1: $E_{kin} < V_0$ (klassische Reflektion)

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

$\Phi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{+\alpha x},\ D = 0,\ \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)$

wegen $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V \Rightarrow k'^2 = \frac{2m}{\hbar}(E - V)$

zeitliche Entwicklung ist komplexe Rotation ($e^{-i\omega t} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$)

Randbedingungen:

Stetigkeit: $\Phi_I(x=0) = \Phi_{II}(x=0)$

Differenzierbarkeit: $\partial_x\Phi_I(x=0) = \partial_x\Phi_{II}(x=0)$

$\Rightarrow A + B = C \qquad \Rightarrow B = A\frac{ik+\alpha}{ik-\alpha}$

$\Rightarrow Aik - Bik = -C\alpha \qquad \Rightarrow C = A\frac{2ik}{ik-\alpha}$

$\Rightarrow \Psi_I(x,t) = A\frac{2ik}{ik-\alpha} exp(-i\frac{E}{\hbar}t)(coskx - \frac{\alpha}{k}sinkx)$

$\Rightarrow \Psi_{II}(x,t) = A\frac{2ik}{ik-\alpha} exp(-i\frac{E}{\hbar}t)(coskx - \frac{\alpha}{k}sinkx)$

Fall 2: $E_{kin} > V_0$ (klassische Transmission)

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

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

Transmission durch Potentialbarriere: (Tunneleffekt)

Transmissionswahrsch. $T = \frac{|\Psi_{II}(d)|^2}{|\Psi_{II}(0)|^2} \sim e^{-2\alpha d}$

Kastenpotential: (Limes $V_0 \to \infty$)

$\Rightarrow \Psi_{II}(0) =^{(1)} 0 =^{(2)} \Psi_{II}(d)$

Ansatz fuer Schroedinger: $\Phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

(1)$\Rightarrow A = -B$, (2)$\Rightarrow kx = n\pi$

$\Rightarrow \Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} sin(\frac{n\pi}{d}x)$ mit $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}n^2$

Revival in der QM:

Bedingung: $2\pi m = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n'})t$

Harmonischer Oszillator in der QM:

Allg. Loesung: $\Phi_n = \cdot\frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! \cdot a_{n_0}}} H_n(\frac{x}{a_{n_0}}) exp(-\frac{1}{2}(\frac{x}{a_{n_0}})^2)$

mit $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ und charakt. Laenge $a_{n_0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

Grundzustands erfuellt minimale Heisenberg-Unschaerfe

Bohr'sches Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

Pauli-Matrizen (Zeilen in Vektor gepackt)

$\sigma_1 = \sigma_x = ((0,1),(1,0))$

$\sigma_2 = \sigma_y = ((0,-i),(i,0))$

$\sigma_3 = \sigma_z = ((1,0),(0,-1))$

5. Wasserstoff

Hamiltonian im Laborsystem:

$\hat{H} = \hat{E}_{pot} + \hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}_e|}$

Hamiltonian im System des Kerns:

$\hat{H} = -\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}|}$ mit $\mu = \frac{m_e m_k}{m_e + m_k}$

Externe Dynamik: De Broglie-Welle mit $\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2ME_s}}$

Interne Dynamik: Separation $\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)P(\theta)R(\varphi)$

$\hat{H}|\Psi\rangle = E_n|\Psi\rangle$ mit $E_n = -R_y^* \frac{z^2}{n^2}$, $\quad R_y^* \approx 13.6eV$

$\langle x|\Psi\rangle = \Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) \quad = R_{nl}(r)P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$

Radiale Wellenfunktion: $(n \in \mathbb{N},\ l \in \{0,\ ...,\ n-1\})$

$R_{nl}(r) = \sqrt{(\frac{2z}{na'_B})^3 \cdot \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

zugeordnete Laguerre-Polynome

$a'_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = (1 + \frac{m_e}{m_k})$

$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.52917721067(12)10^{-10}m$

Wahrscheinlichkeit, Elektron im Abstand $[r, r+dr]$

$dP = 4\pi \cdot |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$

sinnvolle Groesse fuer Aufenthaltswahrsch.

Winkelanteil der Wellenfunktion: $(m \in \{-l,\ ...,\ l\})$

$P_{lm}(cos(\theta))e^{im\varphi}$

Legendre-Polynome

Drehimpuls-Operator in Ortsdarstellung:

$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \Rightarrow \hat{L}_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) = -i\hbar\partial_\varphi$

Eigenwerte des Impulsoperators:

$\hat{\vec{L}}^2|n,l,m\rangle = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)|n,l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\ |n,l,m\rangle$

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

$\Rightarrow |\hat{\vec{L}}|$ kann nur diskrete Werte $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ annehmen

Nomenklatur fuer Eigenwerte: $l = 0,1,2,3 \Rightarrow s,p,d,f$

Optische Uebergaenge:

Licht-Emission folgt aus Superposition von EEZ.

Dipol-Auswahlregel: $\Delta l = l - l' = \pm 1$

fuer Energieeigenzustand:

$\langle\hat{\vec{d}}\rangle = 0$ mit $\hat{\vec{d}} = e \cdot (\hat{x},\hat{y},\hat{z})^T$

fuer Superposition $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi\rangle + |\Phi'\rangle)$:

$\langle\hat{\vec{d}}\rangle = \frac{1}{2}(\langle\Phi|\hat{\vec{d}}|\Phi'\rangle + \langle\Phi'|\hat{\vec{d}}|\Phi\rangle) \neq 0$ i.A.

Abgestrahltes Licht hat Freq. $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$

Superposition/Dipolmoment zerfaellt exp. mit der Zeit

Jeder Sender ist auch Empfaenger, mit geringerer Wahrsch.

koennen auch Werte $\neq$ Abs.freq. absorbiert werden

Zeeman-Effekt:

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

$\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}}\hat{\vec{p}} = -i\hbar B_z\hat{L}_z \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e}B_z\hat{L}_z$

$E_{nm} = E_0 + \frac{e\hbar}{2m_e}mB_z =: E_0 + \mu_B m B_z$, $\vec{p}_m = -\frac{e}{2m}\vec{L}$

linear polarisiertes Licht aendert m nicht, zirkular schon

6. Elektronen-Spin

Stern-Gerlach-Experiment:

$E_{pot} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \Rightarrow \vec{F}_z = -\nabla E_{pot} = |\vec{\mu}_s| \cdot \partial_z\vec{B}$

mit $\vec{\mu}_s = -g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}$, $\quad |\vec{S}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, $\quad S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$, $\quad g \approx 2$

QM-Unschaerfe: S_x, S_y ist nicht definiert!

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

Elektron ist Zweizustands-System:

Basiszustaende in Spinor-Darstellung

$|\uparrow\rangle = |s=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}\rangle \quad = (1,0)^T \quad [\hat{s}_z, \hat{s}^2] = 0$

$|\downarrow\rangle = |s=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}\rangle = (0,1)^T$

Spin-Operatoren

$\hat{s}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\sigma_z(1,0)^T = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$

$\hat{s}_z|\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\sigma_z(0,1)^T = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$

$\hat{s}^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle$

Superpositionen von $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ sind keine $\hat{s}_z$-Eig.zust.

Spin $\uparrow$ + Spin $\downarrow$ in z-Richtung = Spin in x/y-Richtung

Dirac-Gleichung:

$\hat{H} = \hat{H}_{nichtrel.} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} + \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\delta_D(r)$

Spin-Bahn-Kopplung (bewege ins System des Elektrons):

$\vec{B}_{Kern} = -\frac{\mu_0 ze}{4\pi r^3 m}\vec{L}$

$E_{pot} = \frac{1}{2}\frac{zeg\mu_B}{4\pi\epsilon_0 r^3 mc}\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$

Suchen Eigenzustaende fuer $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2)$

mit $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$

Wichtig: $\hat{\vec{L}}_z, \hat{\vec{S}}_z$ nicht mehr scharf messbar!

Aber: $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z] = [\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{S}}^2] = 0$, $\quad [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$

Eigenzustaende $|\Psi_{nlm}\rangle = |J, m_J\rangle$

$J \in \{|l-s|,\ ...,\ l+s\}$, $\ m_J \in \{-J,\ ...,\ +J\}$

Eigenwerte

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

$\hat{\vec{S}}^2|\Psi_{nlm}\rangle = \hbar^2 s(s+1)\Psi_{nlm}\rangle$,

$\hat{\vec{J}}^2|\Psi_{nlm}\rangle = \hbar^2 j(j+1)\Psi_{nlm}\rangle$, $\hat{J}_z|\Psi_{nlm}\rangle = \hbar m_J|\Psi_{nlm}\rangle$

Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$

7. Zwei-Elektronensystem am Beispiel Helium (z=2)

jetzt zusaetzliche, abstossende WW zwischen Elektronen

Hamiltonian:

$\hat{H} = \underset{E_{kin}}{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1 - \Delta_2)} - \underset{e^- Kern\ WW}{\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1|} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_2|}} + \underset{e^-e^-\ WW}{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}}$

Grundzustandsenergie ohne e^- WW: $E_{n=1} = 2z^2R_y^* \approx -108.8eV$

Ionisationsenergie mit e^- WW: $\approx 79eV$ (geringer wegen Abstossung)

Wellenfkt. fuer Grundzustand: $\Psi(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \frac{z^3}{\pi a_B^3}exp(-\frac{z}{a_B}|\vec{r}_1 + \vec{r}_2|)$

EEW fuer Grundzustand: $E = (-z^2 + \frac{5}{8z})(2 \cdot 13.6eV) =^{z=2} -74.8eV$

Gesamtspin $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$

$S = 0, m_s = 0$ (Singulett) oder $S = 1, m_s = -1, 0, 1$ (Triplett)

$\hat{\vec{S}}^2|\Psi\rangle = (\hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2(\hat{S}_1^x\hat{S}_2^x + \hat{S}_1^y\hat{S}_2^y + \hat{S}_1^z\hat{S}_2^z))|\Psi\rangle = s(s+1)\hbar|\Psi\rangle$

$\hat{S}^x|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$, $\hat{S}^y|\uparrow\rangle = i\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$, $\hat{S}^z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$ (fuer $|\downarrow\rangle$ mit minus)

- Eigenzustaende Singulett: $|s{=}0, m_s{=}0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s{=}0, m_s{=}0\rangle)$
- Triplett: $|s{=}0, m_s{=}0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$

$|s{=}0, m_s{=}1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\uparrow\rangle$, $|s{=}0, m_s{=}-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\downarrow\rangle$

Pauli: 2 Fermionen niemals im selben Zustand

$\Rightarrow$ Gesamtwellenfkt. von He antisymmetrisch bzgl. Austausch

9. Relevante mathematische Zusammenhaenge

Fourier-Transformation fuer periodische Fkt. $f(x) = f(x+d)$

$f(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} g_n\ e^{inGx}$, $\ G = \frac{2\pi}{d}$ mit $g_n \quad = \frac{1}{d}\int_x^{x+d} f(x')\ e^{-inGx'}dx'$

Fourier-Transformation fuer aperiodische Fkt.

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

in QM: $f(x) = \Psi(x)$, $\ \tilde{\Psi}(k) = g(k)$

Delta-Funktion:

$\delta_D(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dk$ und $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_D(ax)dx = \frac{1}{|a|}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_D(x)dx$

Kugelflaechenfunktionen:

Normiert: $\quad \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} sin\theta d\theta\ |Y_{lm}(\varphi,\theta)|^2 = 1$

Orthogonal: $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} sin\theta d\theta\ Y_{lm}^*(\varphi,\theta)Y_{lm}(\varphi',\theta') = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$

Hermite-Polynome: H_0=1, $H_1(x)$=2x, $H_{n+1}(x)$=2$xH_n(x)$-2$nH_{n-1}(x)$

$\nabla(\nabla \times \vec{v}) = \nabla \times (\nabla U) = 0$

$\nabla \times (\nabla \times \vec{v}) = \nabla(\nabla\vec{v}) - \Delta\vec{v}$

10. Sonstiges:

Thermische Energie: $\frac{3}{2}k_BT = \frac{1}{2}mv^2$

De Broglie-Wellen sind nicht normierbar

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$\vec{\jmath} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi]$ bzw. $\vec{\jmath} = -\frac{i\hbar}{m}Re\{\psi^*\vec{\nabla}\psi\}$

$\vec{\jmath}_{einlaufend} = \vec{\jmath}_{reflektiert} + \vec{\jmath}_{transmittiert}$

V. Mader u. J. Boecker