

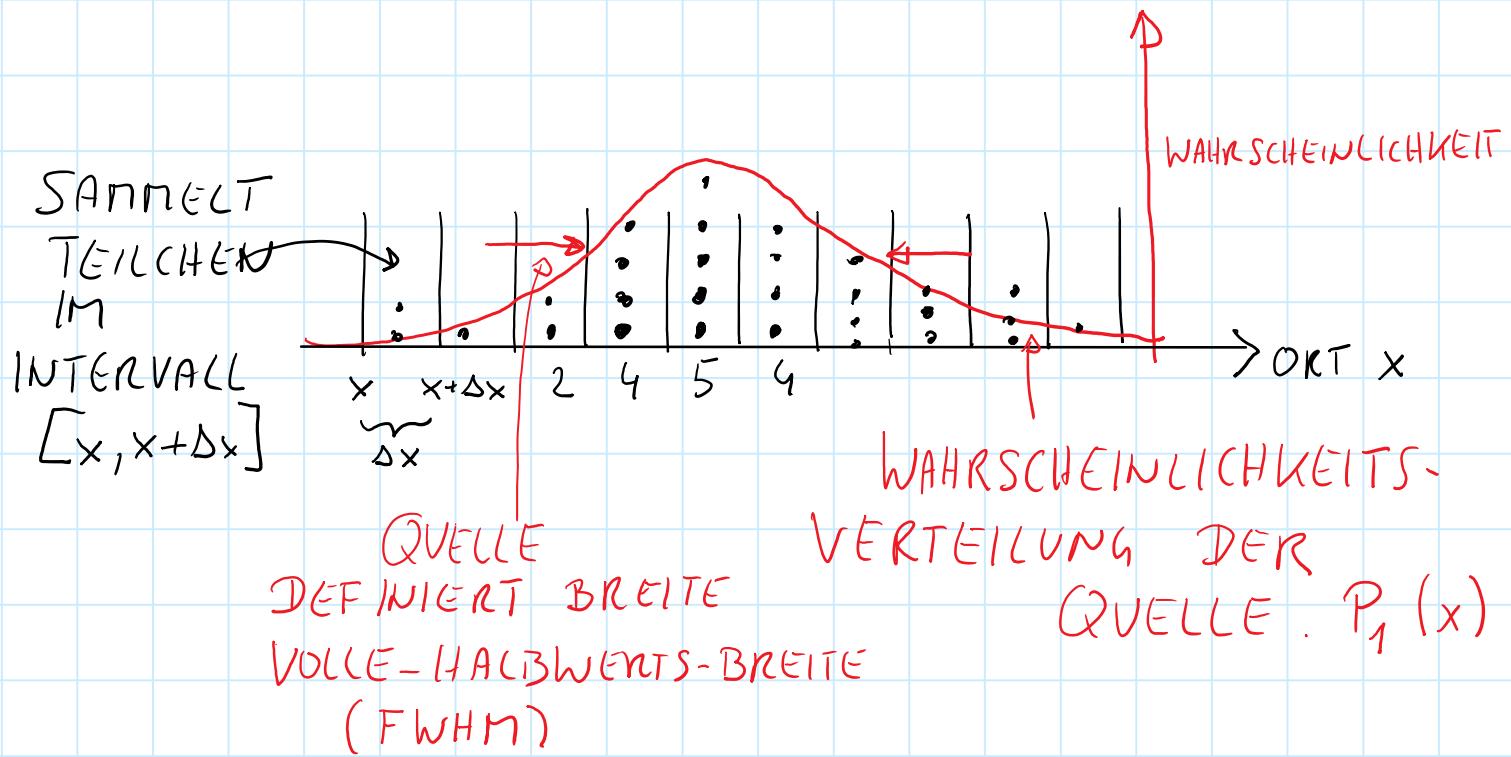
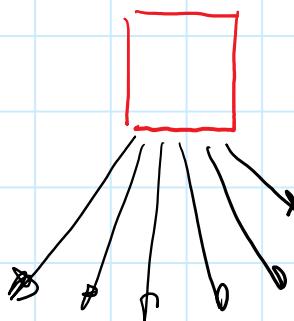
# ZIEL VON 1. VORSPANN

## GRUNDKONZEPT DER QM

- WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG
- WAHRSCHEINLICHKEITSAMPLITUDEN
- INTERFERENZ VON MÖGLICHKEITEN
- FÜR QM - BESCHREIBUNG WICHTIG:  
PRÄPARATION - ANFANGSBEDINGUNG  
ZEITLICHE EVOLUTION  
DETEKTION

## 1.1 Ein Experiment mit klassischen Teilchen

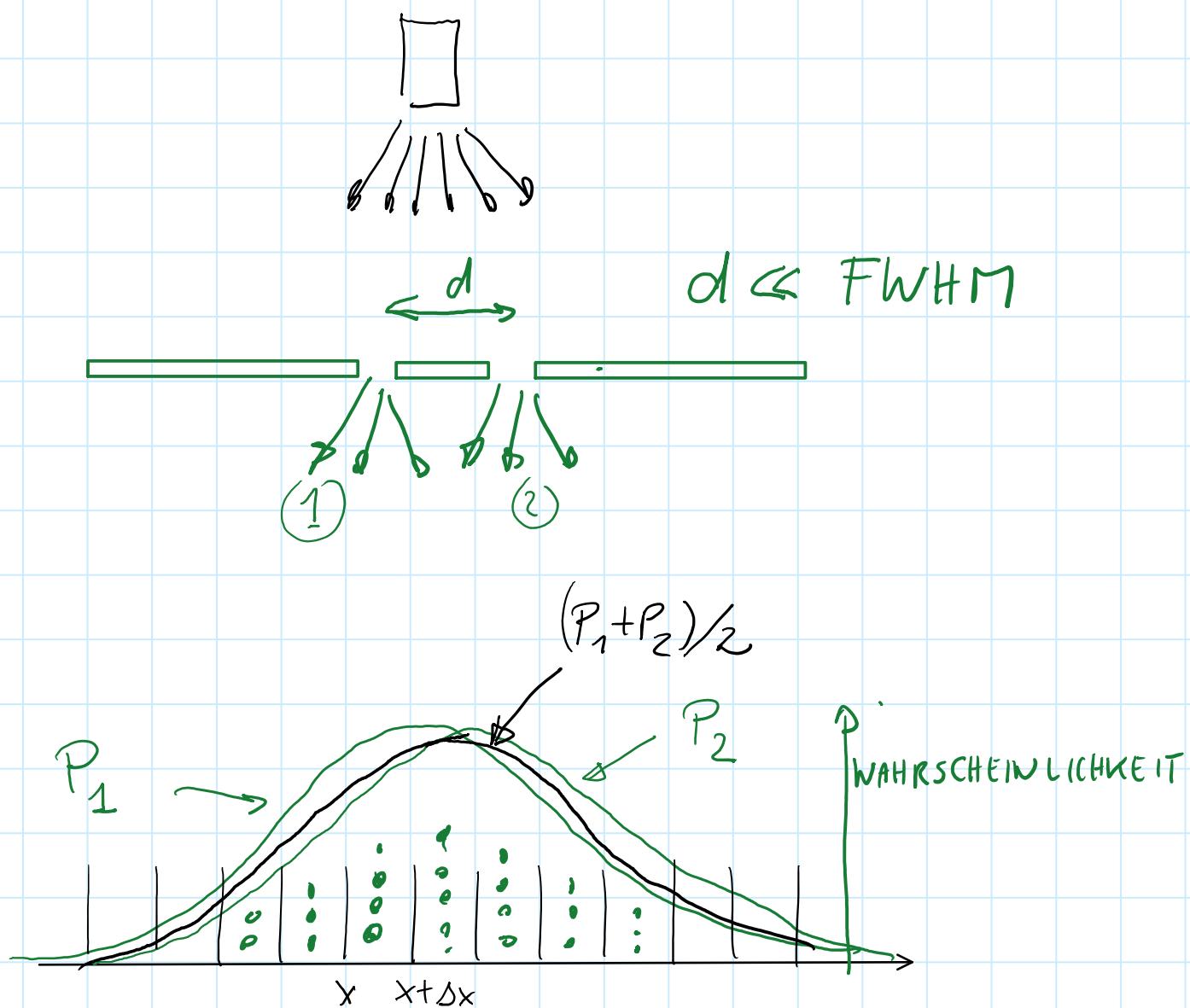
1. FALL : EINE QUELLE DIE TEILCHEN (NICHT WEITER ZERLEGBAR) IN ZUFÄLLIGER RICHTUNG AUSSENDEN



WICHTIG: DISKRETE ZAHLEN ; DIE THEORETISCHE W-VERTEILUNG KANN NUR ANNAHMERND GEMESSEN WERDEN ; ANZAHL DER TEILCHEN  $\rightarrow \infty$   $\Rightarrow P_1(x)$

## 1.1 Ein Experiment mit klassischen Teilchen

2. FALL : ZWEI QUELLEN WIE IM  
FALL 1

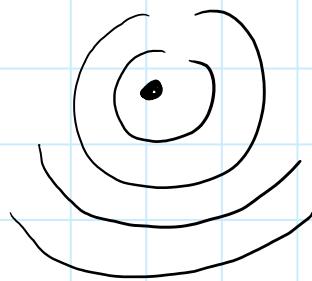


DIE WAHRSCHEINLICHKEIT IN  $[x, x + \Delta x]$

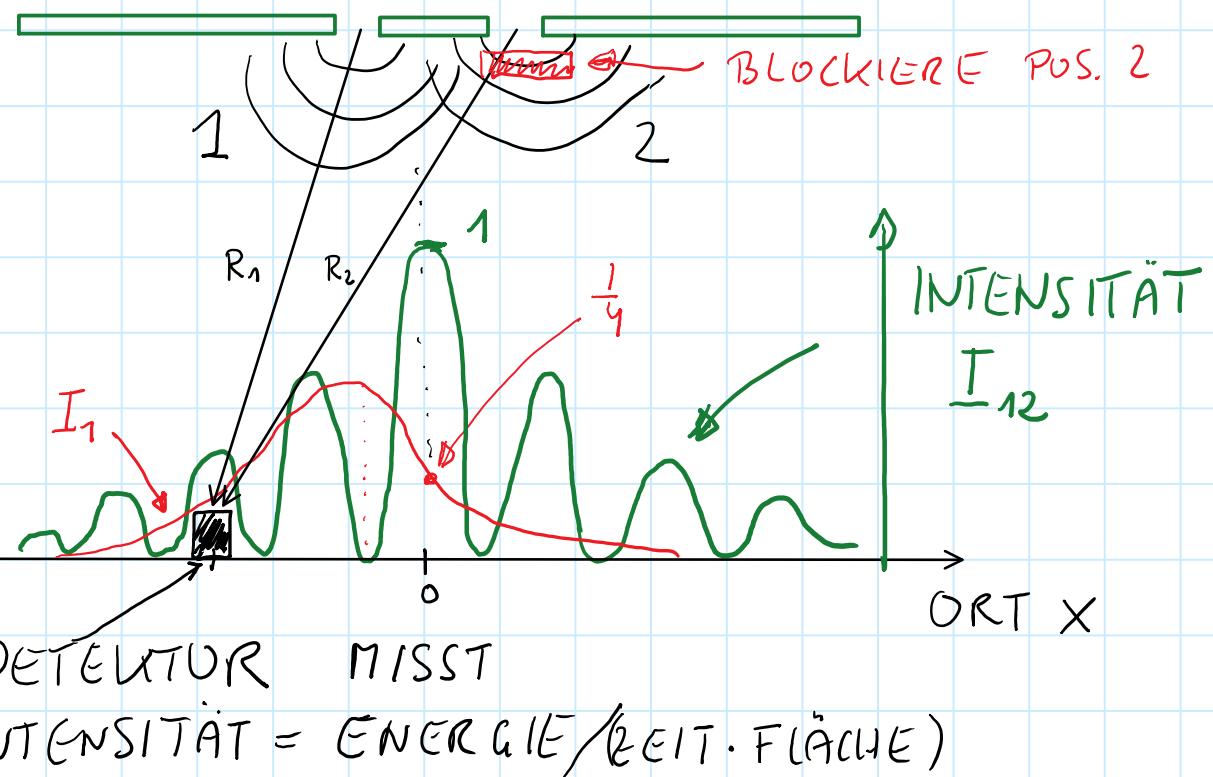
EIN TEILCHEN ZU FINDEN

$$P_{12} = (P_1 + P_2)/2$$

## 1.2 Ein Experiment mit klassischen Wellen



QUELLE SENDET  
KUGELWELLE MIT  
FIXER FREQUENZ  
UND AMPLITUDE AUS.  
z.B. EN-WELLEN



WICHTIG: INTENSITÄT IST KONTINUOERLICH,  
I<sub>12</sub> KANN GENAU GEMESSEN  
WERDEN.



## 1.2 Ein Experiment mit klassischen Wellen

WARUM HAT  $I_{12}$  DIE ANGEGBENE FORM?

$$I(x) = c \epsilon_0 \frac{1}{2T} \int_{-T}^T E(x, t)^2 dt$$

$$E(x, t) = E_1 \cos(\omega t + kR_1) + E_2 \cos(\omega t + kR_2)$$

MIT HILFE KOMPLEXER SCHREIBWEISE

$$\begin{aligned} E(x, t) &= \operatorname{Re} \left\{ E_1 e^{i(\omega t + kR_1)} + E_2 e^{i(\omega t + kR_2)} \right\} \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \underbrace{(E_1 e^{ikR_1} + E_2 e^{ikR_2})}_a e^{i\omega t} \right\} \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow I_{12}(x) \propto |\underbrace{a_1 + a_2}_\phi|^2$$

INTERESSIEREN UNS NUR  
FÜR X-ABHÄNGIGKEIT NICHT  
FÜR ABSOLUTE WERTE

## 1.2 Ein Experiment mit klassischen Wellen

$$I_{12} \propto |\alpha_1 + \alpha_2|^2 = (\alpha_1^* + \alpha_2^*) (\alpha_1 + \alpha_2)$$

↑  
FUNKTION  
VON X

$$= |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \alpha_1^* \alpha_2 + \alpha_2^* \alpha_1$$

$$|\alpha_1|^2 = E_1 e^{-ikR_1} E_1 e^{ikR_1} = E_1^2 \sim I_1$$

$$|\alpha_2|^2 \sim I_2$$

$$\alpha_1^* \alpha_2 + c.c. = 2 \operatorname{Re} \{ \alpha_1^* \alpha_2 \} = 2 \operatorname{Re} \{ E_1 E_2 e^{ik(R_2 - R_1)} \}$$

$$= 2 \sqrt{I_1 I_2} \underbrace{\cos(k(R_2 - R_1))}_{\phi}$$

$$\Rightarrow I_{12} = I_1 + I_2 + 2 \sqrt{I_1 I_2} \cos(\phi)$$

MAXIMALE INTENSITÄT:  $\phi = 0 \quad R_1 = R_2$

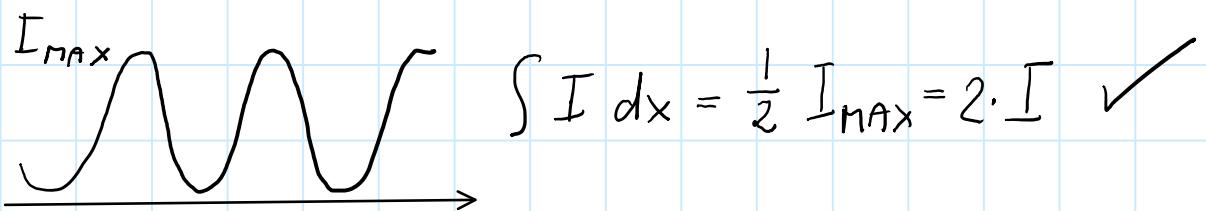
$$I_{\max} = I_1 + I_2 + 2 \sqrt{I_1 I_2} = 4 I_0$$

MIT  
 $I_1 = I_2 = I_0$

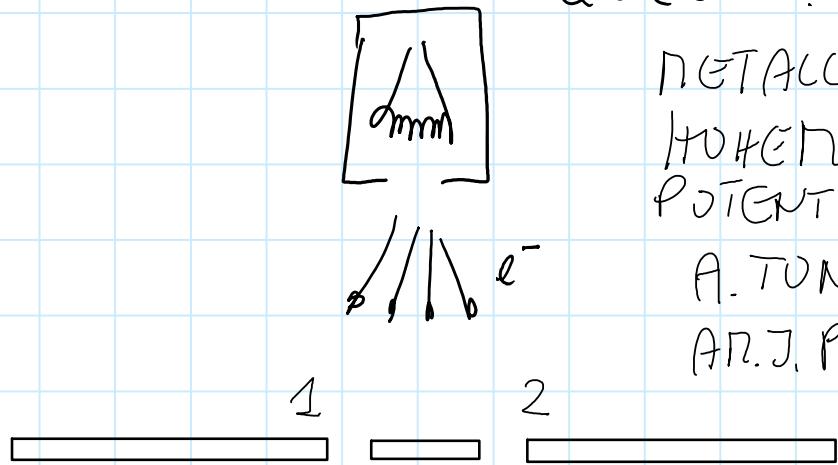
$$I_{\min} = I_1 + I_2 - 2 \sqrt{I_1 I_2} = 0$$

## 1.2 Ein Experiment mit klassischen Wellen

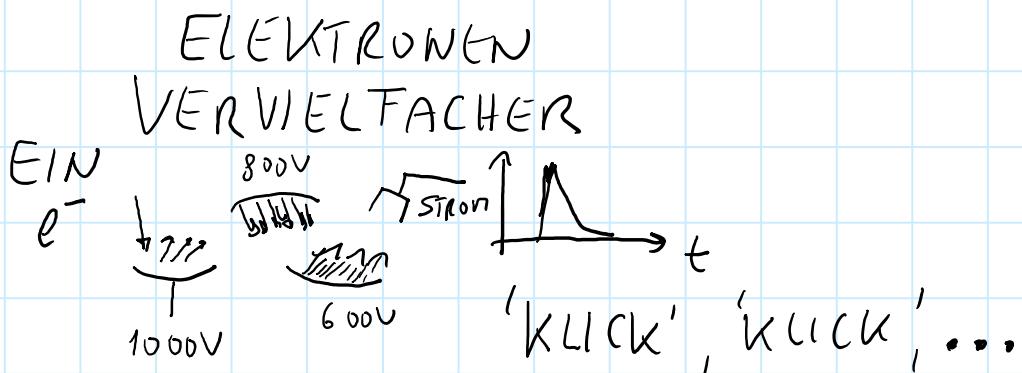
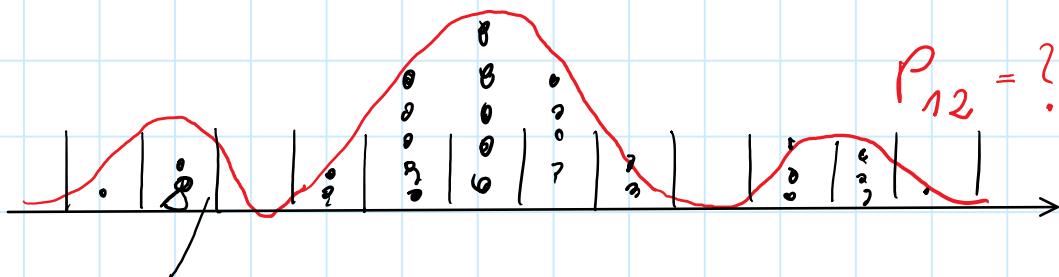
INTENSITÄT WIRD RÄUMLICH UNVERTEILT;  
GESANTE INTENSITÄT BLEIBT ERHALTEN  $I_1 + I_2$   
= ENERGIE ERHALTUNG!



### 1.3 Ein Experiment mit Elektronen



QUELLE: GLÜHDRAHT /  
METALLSPITZE AUF  
HOHEN NEGATIVEN  
POTENTIAL  
A. TUNNERKA  
AN.J. PHYS 57, 117 (1989)

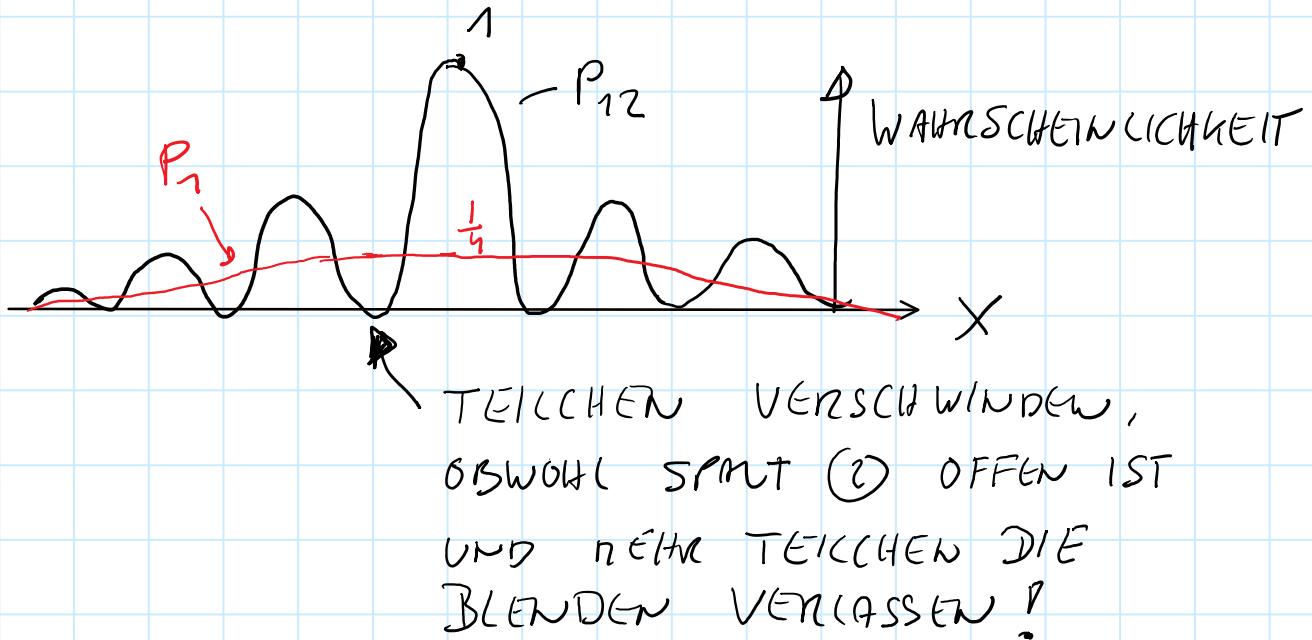
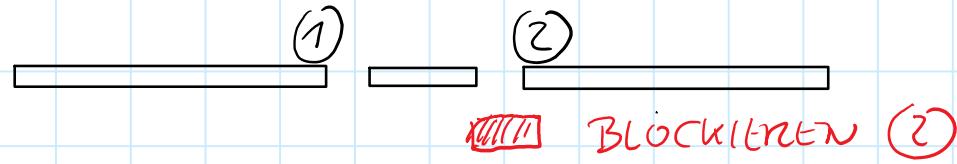


ANNAHMEN:

- ① DAS ELEKTRON GEHT ENTWEDER DURCH BLENDE 1 ODER BLENDE 2
- ② MIT KOMPLIZIERTER DYNAMIK

### 1.3 Ein Experiment mit Elektronen

EINFACHER TEST FÜR ANNAHME ②



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

ANNAHME  
FALSCH!

### 1.3 Ein Experiment mit Elektronen

MATHEMATISCH "EINFACH":

EINFÜHREN DER KOMPLEXEN W-AMPLITUDE  $\phi$

WAHRSCHEINLICHKEITEN:  $P_1 = |\phi_1|^2$   $P_2 = |\phi_2|^2$

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

WICHTIG:

~~~~~

ELEKTRONEN WERDEN  
EINZELN GEZÄHLT, ES GIBT  
KEINE HALBEN ELEKTRONEN

W-VERTEILUNG KANN NUR  
ANNÄHERND GENESSEN WERDEN

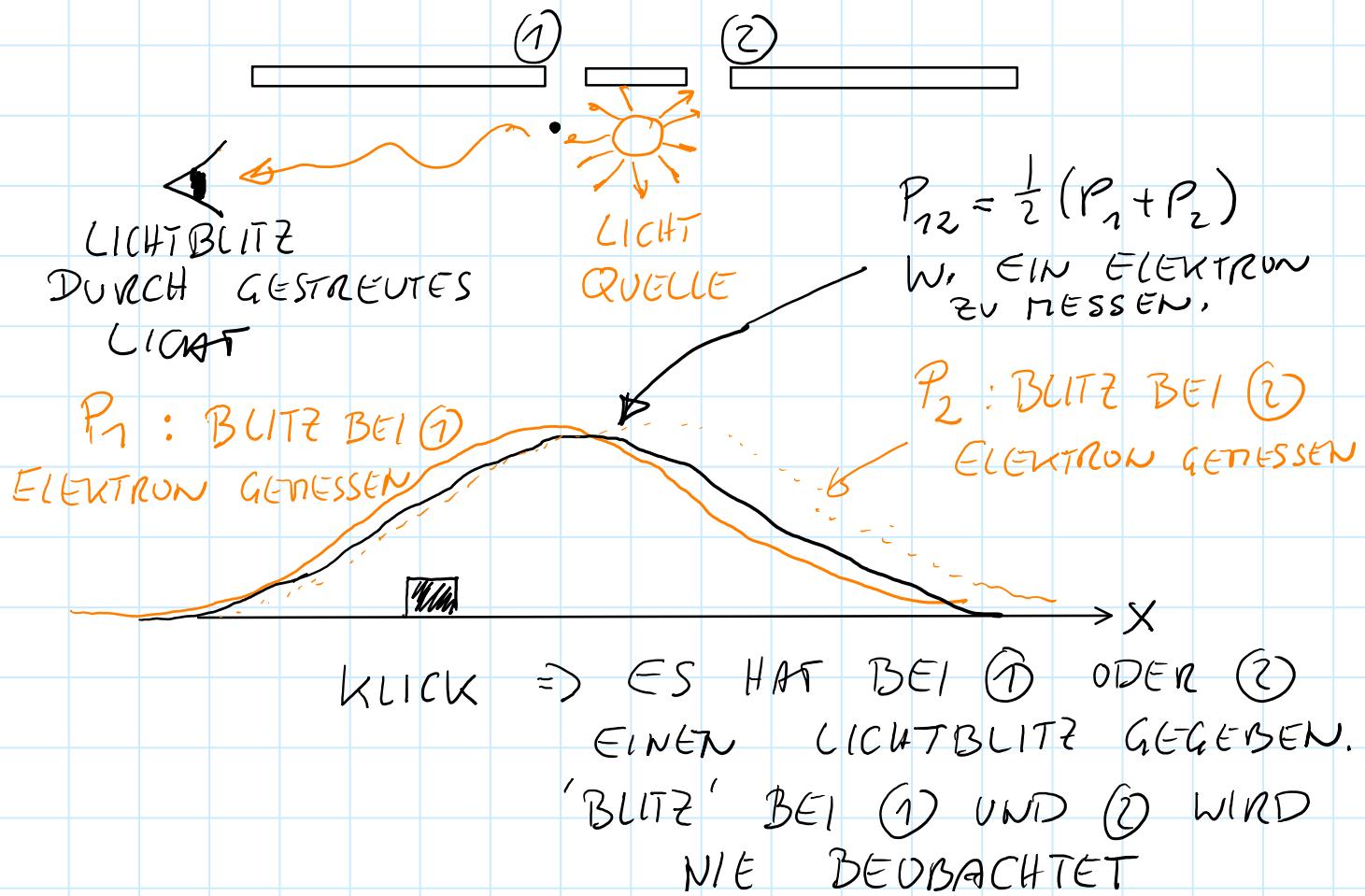
$P_{12}$  = UNENDLICH VIELEN EXPERIMENTEN

### 1.3 Ein Experiment mit Elektronen

WELLE - TEILCHEN DUALISMUS :

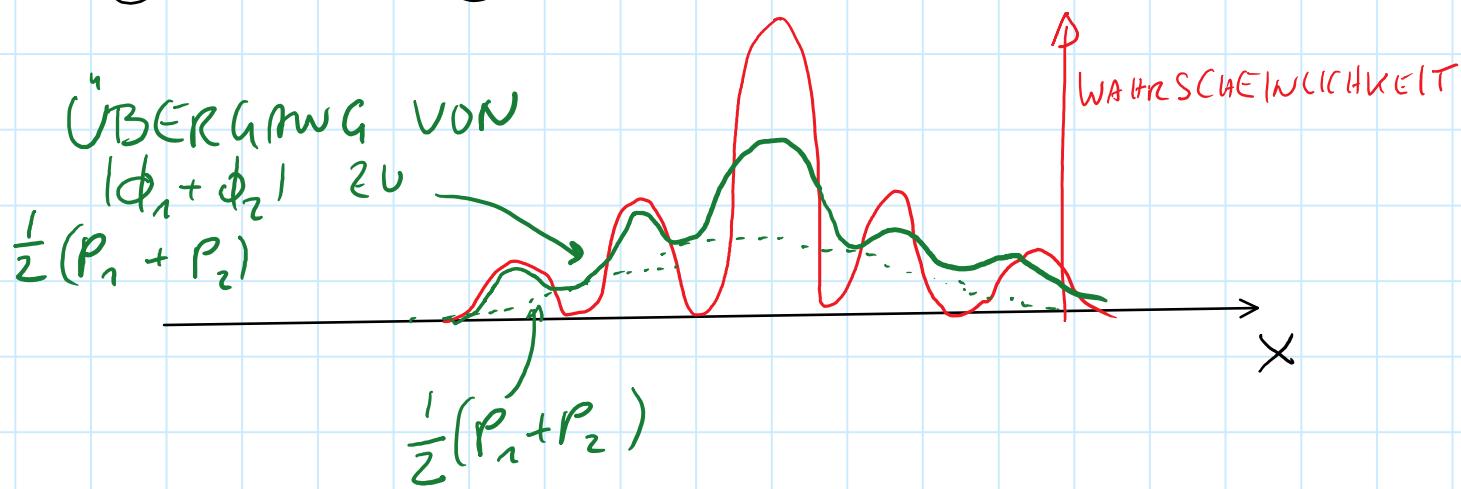
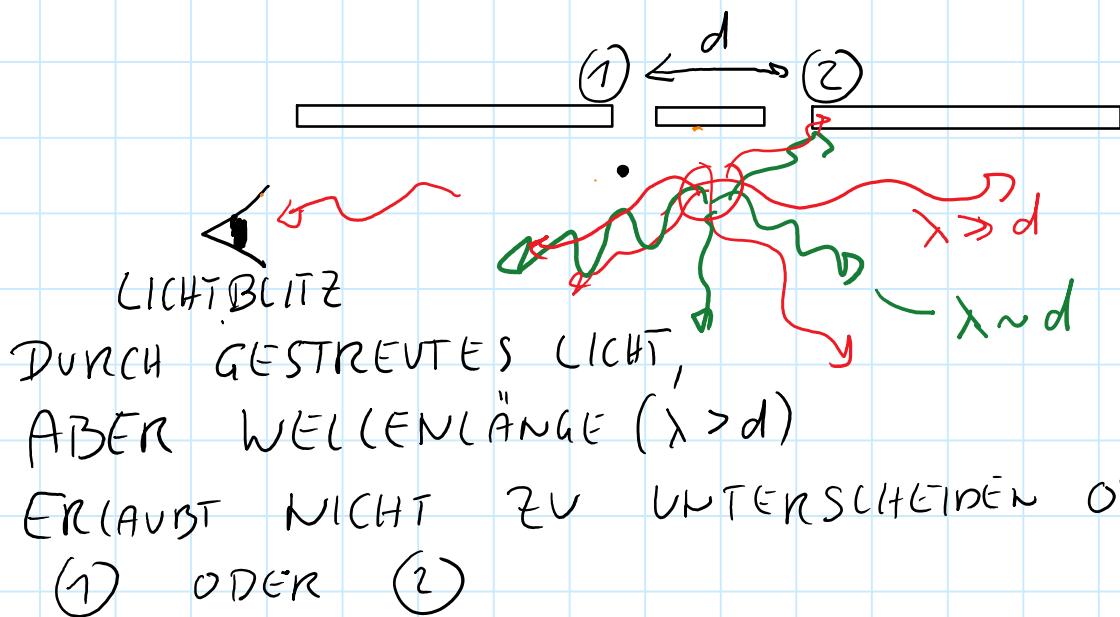
ELEKTRONEN WERDEN NUR ALS  
EINHEIT DETEKTIERT (TEILCHEN), DIE  
RÄUMLICHE VERTEILUNG KANN ABER  
ALS INTERFERENZ VON W-AMPLITUDEN  
(COMPLEXES  $\phi$ ) BESCHRIEBEN WERDEN

BEZOBLAHTUNG DER ELEKTRONEN AN  
JEDEM SPALT



ANNAHME ① BESTÄTIGT

### 1.3 Ein Experiment mit Elektronen



QUANTEN MECHANIK KANN DAS  
BESCHREIBEN, WEIL DAS  
PRINZIPIELL MÖGLICHE WISSEN  
EINER PHYSIKALISCHEN SITUATION  
BERÜCKSICHTIGT WIRD.

## 1.4 Zusammenfassung

FÜR FUNDIERTE DISKUSSION EINES  
QN EXPERIMENTS MUSS DEFINIERT  
WERDEN

- (1) PRÄPARATION DES ANFANGS-  
ZUSTANDES
- (2) WECHSELWIRKUNG / ZEITLICHE  
ENTWICKLUNG
- (3) DETEKTION - WAS WIRD  
BEZOBLACHTET

EIN EREIGNIS IST DEFINIERT ALS EIN  
SPEZIELLES SET VON (1)-(3).

Z.B. EIN  $e^-$  VERLASST DIE QUELLE,  
KANN NICHT ALLE ORTE IN RAUM  
ERREICHEN (BLENDEN),  $e^-$  WIRD  
IN EINEM ORTSINTERVALL  $[x, x+\Delta x]$   
DETEKTIERT.

## 1.4 Zusammenfassung

VORHERSAGEN NACH FOLGENDEN  
REGELN

① DIE WAHRSCHEINLICHKEIT EINES  
EREIGNISSES IN EINEM IDEALEN  
EXPERIMENT IST GEGEBEN ALS DAS  
QUADRAT DES ABSOLUTBETRAGES  
EINER IM ALLGEMEINEN KOMPLEXEN  
WAHRSCHEINLICHKEITSAMPLITUDE

$P \dots$  WAHRSCHEINLICHKEIT

$\phi \dots$  W - AMPLITUDE

$$P = |\phi|^2 = \phi^* \phi$$

② WENN EIN EREIGNIS IN  
VERSCHIEDENER ART UND WEISE  
STATTFINDEN KANN, DANN IST  
DIE W-AMPLITUDE GEGEBEN ALS  
SUMME DER INDIVIDUELLEN W-AMPLITUDEN  
DER MÖGLICHKEITEN

E.B.  $e^- \rightarrow$  DETEKTUR ÜBER BLENDE ①  
ÜBER BLENDE ②

## 1.4 Zusammenfassung

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \quad \text{SUPERPOSITION}$$

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

(3) KANN MAN DIE EINZELNEN MÖGLICHKEITEN PRINZIPIELL UNTERScheiden, ADDIEREN SICH DIE WAHRSCHEINLICHKEITEN.

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

## 2. Materiateilchen <-> Wellen

ZIEL VON 2. NATRIEWELLEN

DE BROGLIE WELLEN

- DISPERSIONSRELATION FÜR MASSIVE TEILCHEN
- SUPERPOSITIONEN VON UNPHYSIKALISCHEN WELLEN KÖNNEN NATUR BESCHREIBEN
- ZERLEGGUNG IN DE BROGLIE WELLEN ERLAUBT VORHERSAGEN DER DYNAMIK

## 2.1 Historische Herleitung von de Broglie

'A TENTATIVE THEORY OF LIGHT QUANTA'  
PHIL. MAG. 27, p 446 (1924)

### 3 GRUNDLEGENDE HYPOTHESEN (3x EINSTEIN)

(1)  $E = m_0 c^2$  MASSE = ENERGIE

$m_0$  ... RUHEMASSE

$c$  ... LICHTGESCHWINDIGKEIT

(2)  $E = h v_0$  PHOTO-EFFEKT

$h = 6,626069934 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ \*

PLANCK KONSTANTE

$v_0$  FREQUENZ

(3) GLEICHMÄßIG BEWEGTE  
BEZUGSSYSTEME SIND MIT  
LORENTZ TRANSFORMATION  
VERKNÜPFT

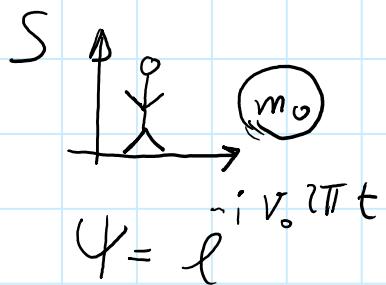
\* NEUESTES RESULTAT NIST/USA MIT  
WATT WAAGE JULI 2017

## 2.1 Historische Herleitung von de Broglie

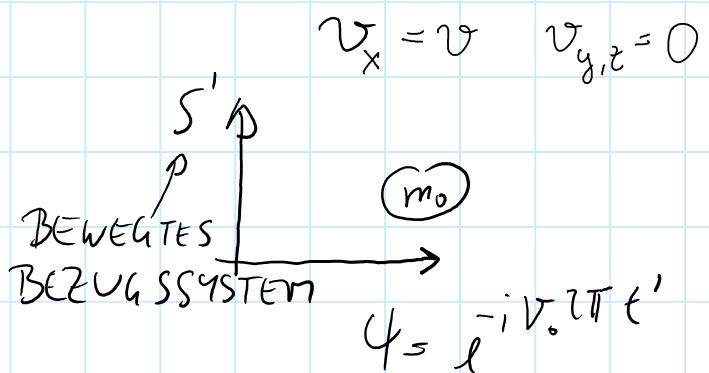
AUS ① & ② FOLGT, DASS MAN JEDEM TEILCHEN IM RUHESYSTEM EINE FREQUENZ ZUORDNEN KANN

$$\boxed{V_0 = \frac{m_0 c^2}{\hbar}}$$

TEILCHEN IN RUHE  
 $v=0$



PERIODISCHE SCHWINGUNG



BEOBACHTER RUHT IN



SICH NACH LORENZ

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

DIE ZEIT WIRD ORTS-  
ABHÄNGIG !

## 2.1 Historische Herleitung von de Broglie

$$\Rightarrow S' : \frac{-i 2\pi v_0 t'}{\ell}$$

$$S : \frac{-i 2\pi v_0}{\ell} \left( \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \right) = \frac{-i (w_{dB} t - k_{dB} x)}{\ell}$$

DIE DE BROGLIE  
WELLE

MIT

$$w_{dB} = \frac{2\pi v_0}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} = \frac{2\pi}{h} \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} = \frac{E_{kin}}{h}$$

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

MIT  
(1) & (2)

$$\vec{k}_{dB} = \frac{2\pi v_0 \vec{v}}{c^2 \sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} = \frac{2\pi}{h} \frac{m_0 c^2 \vec{v}}{c^2 \sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} = \frac{\vec{P}_{kin}}{h}$$

$\Rightarrow$  NICHT RELATIVISTISCHER LIMES  $v \ll c$

$$\left. \begin{aligned} w_{dB} &= \frac{1}{\hbar} \left\{ m_0 c^2 + \frac{m_0 \vec{v}^2}{2} + \dots \right\} \\ \vec{k}_{dB} &= \frac{1}{\hbar} m_0 \vec{v} \end{aligned} \right\}$$

$$\Psi(x, t) = e^{-i (w_{dB} t - \vec{k}_{dB} \vec{x})} = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} e^{i \underbrace{\frac{(m_0 \vec{v}^2)}{2 \hbar} t}_{\text{KONST}} - i \frac{m_0 \vec{v}}{\hbar} \cdot \vec{x}}$$

HÄNGT NUR  
VON DER  
MASSE AB

## 2.1 Historische Herleitung von de Broglie

### MATERIEWELLE

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

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

$$\hbar k = m\upsilon$$

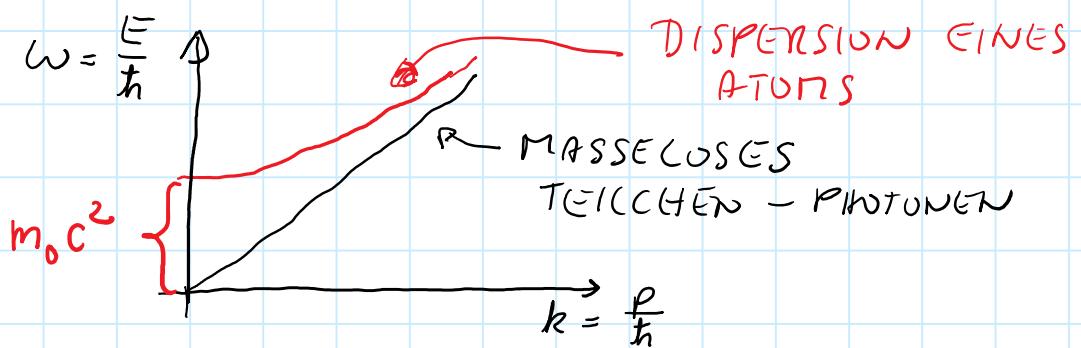
BESCHREIBT EIN MASSIVES TEILCHEN  
MIT MASSE  $m$ , DAS SICH MIT  
WUHLDEFINIERTER GE SCHWINDIGKEIT  
 $\upsilon \ll c$  BEWEGT (IMPULS EIGENS A ND)

DEN ZUSAMMENHANG  $\omega(k) = f(k)$   
NENNT MAN DISPERSIONSRELATION

WICHTIG: UNTERSCHIED ZU EM-WELLEN  
IN VAKUUM:

$$\lambda_v = c \Rightarrow \omega = c \cdot k$$

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



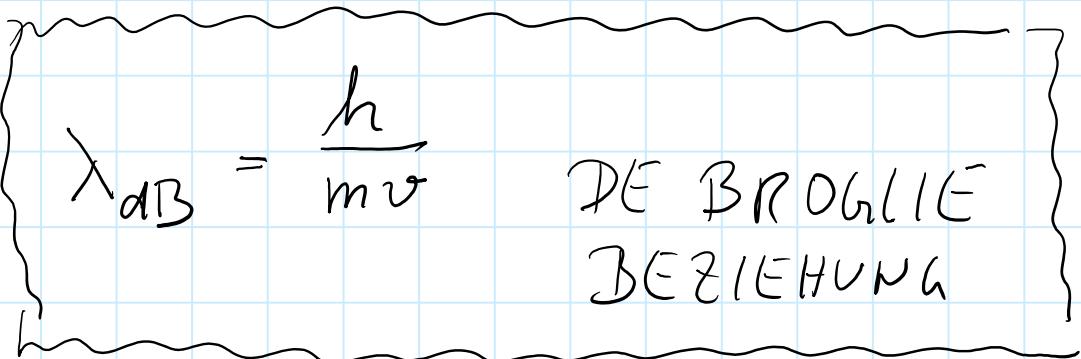
## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus?

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

$$= \cos(k_{dB}x) + i \sin(k_{dB}x)$$

$$k_{dB} = \frac{2\pi}{\lambda_{dB}}$$

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

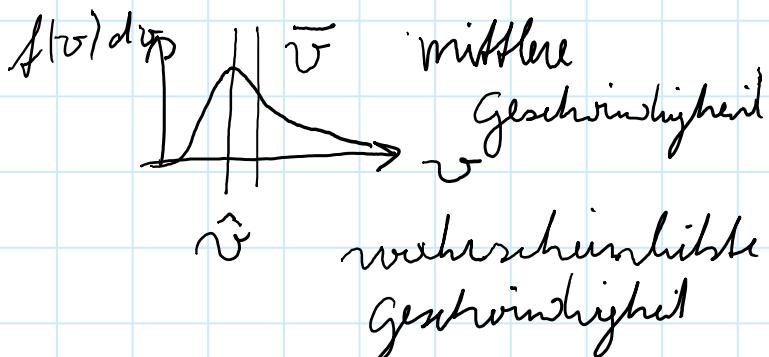
$\Rightarrow$  

$$\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{mv}$$

DE BROGLIE  
BEZIEHUNG

## GRÖßENORDNUNG

THERMISCHES GAS:



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

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

## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus?

$T$   
 $300 \text{ K}$   
 $10 \mu\text{K}$   
 $10 \text{ nK}$

$\hat{\psi}$   
 $\sim 240 \text{ m/s}$   
 $\sim 4 \text{ cm/s}$   
 $\sim 1,4 \text{ mm/s}$

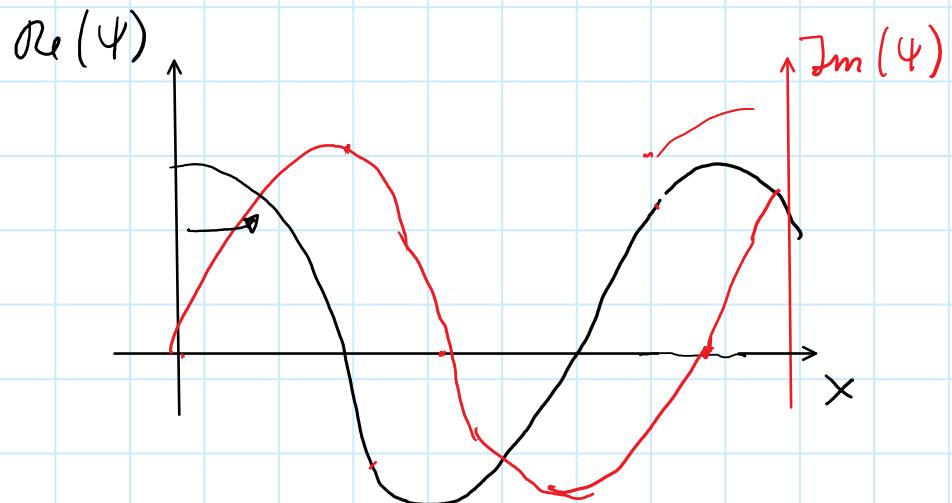
$\lambda_{dB}$   
 $19 \text{ pm}$   
 $0,1 \mu\text{m}$   
 $3,3 \mu\text{m}$

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

$\Psi(x, t)$  IST EIN KOMPLEXES FELD:

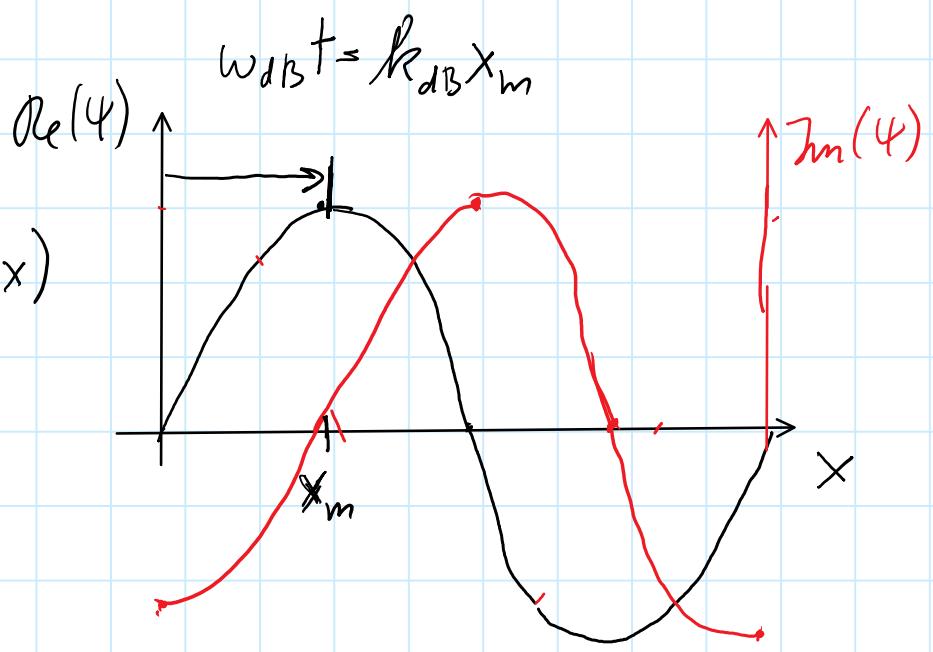
$t=0$

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



$t \in [T]$

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



## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus ?

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

$\omega_{dB}$  ... PHASEN  
 $v_{PH}$  ... GESCHWINDIGKEIT

$$v_{PH}^{dB} = \frac{mv^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{mv} = \frac{v}{2}$$

PHASENGESCHWINDIGKEIT IST  
 NICHT PHYSIKALISCH !

GEGEDENE EINE DE BROGLIE  
 WELLE MIT  $k_{dB} = k$ . WIE GRÖSSTIESTE  
 WAHRSCHEINLICHKEIT DAS TEILCHEN  
 IRGENDWO ZU FINDEN ?

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \ell^i k x - ikx dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

W-DICHTE

## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus ?

EINE DE BROGLIE WELLE IST  
NICHT NORMIERBAR !

ANALOGES PROBLEM: ENERGIEINHALT  
IN EINEN EBENEN EN-WELLE.

↳ LÖSUNG: SUPERPOSITION  
(ÜBERLAGERUNG) VON EBENEN  
(UNPHYSIKALISCHEN) WELLEN  
ENCÄUBT, PHYSIKALISCHE  
SITUATION ZU BESCHREIBEN

## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus ?

ZUSAMMENFASSUNG:

NEUE BESCHREIBUNG DER BEWEGUNG  
VON TEILCHEN  $\Rightarrow$  WELLENOPTIK

FÜR  $\Psi(x, t) \Rightarrow |\Psi(x, t)|^2 dx$  IST DIE  
WAHRSCHEINLICHKEIT, EIN TEILCHEN  
ZUR ZEIT  $t$  IM INTERVALL  $[x, x+dx]$   
ZU BEOBACHTEN.

KLASISCHE TEILCHEN MECHANIK  
ENTSPRICHT DEM GEOMETRISCHEN  
'OPTIK-LIMIT' DER WELLENMECHANIK

## 2.2 Wie sieht die Materiewelle aus ?

FERMAT'SCHE PRINZIP IN DEN  
WELLENOPTIK

LICHT BREITET SICH ENTLANG DES  
KÜRZESTEN OPTISCHEN WEGES AUS

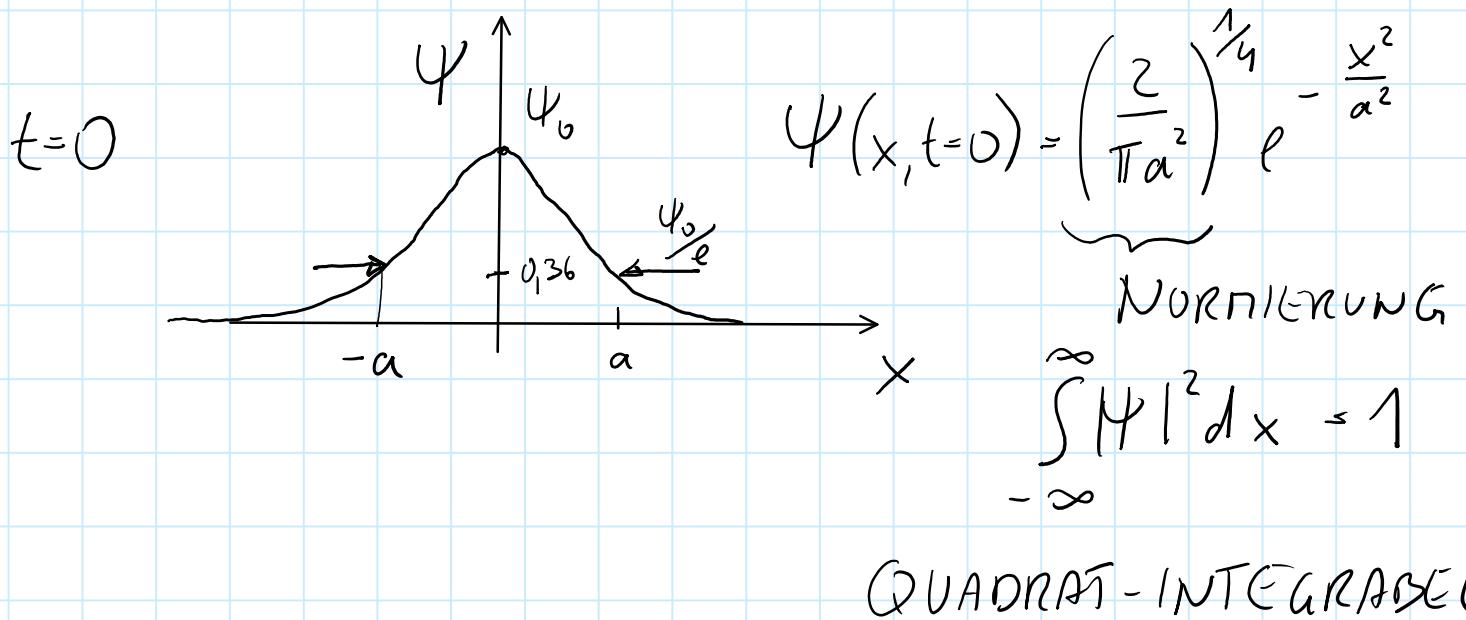
$$\delta \int \frac{ds}{\lambda} = 0 = \delta \int \frac{ds}{\frac{h}{mv}} = \frac{1}{h} \delta \int mv ds = 0$$

VARIATION

MAUPERTUIS PRINZIP  
DEN KLEINSTEN  
WIRKUNG

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

### DAS WELLENPAKET (RUHEND)



$t = T ?$  WIR WISSEN 'NUR' WIE SICH

DE BROGLIE WELLEN AUSBREITEN

$\hookrightarrow$  ZERLEGE  $\Psi(x, t=0)$  IN EBENE

WELLEN MIT WELLENVEKTOR  $k_{dB}$ .

JEDER WELLE WIRD SICH

ENTSPRECHEND

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

AUSBREITEN.

## 2.3 Das Wellenpaket

$$\Psi(x, t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{ikx} dk$$

SUNNE/SUPERPOSITION  
 VON  $\infty$  WELLEN  
 WELLEN

DE BROGLIE  
 WELLE  $t=0$   
 AMPLITUDE  
 DER WELLE

↓ TRIVIALE  
 ZEITENTWICKLUNG

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

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{-i\frac{\hbar^2}{2m} k^2 T} e^{ikx} dk$$

NUN DIE PHASE

DEN KOMPLEXEN W-AMPLITUDE  
 ÄNDERT SICH. DIE ZEITLICHE  
 ÄNDERUNG IST LINEAR IN  
 DEN ZEIT ABEN QUADRATISCH IN  $k$ .

## 2.3 Das Wellenpaket

DA  $\Psi \rightarrow \tilde{\Psi}(k) e^{i(kx - \omega t)}$  EINER

DE BROGLIE WELLE UND DANNIT  
EINEM TEILCHEN MIT SCHARF  
DEFINIERTEN INPUTULS  $p = mv = \hbar k$   
ENTSPRICHT, BEZEICHNET MAN  
 $\tilde{\Psi}(k)$  ALS INPUTSDARSTELLUNG /  
INPUTULS AMPLITUDE, ENTSPRECHEND  
 $\Psi(x)$  IST DIE ORTSFUNKTION /  
ORTSAMPLITUDE DES QM-ZUSTANDES,

DIE AUSBREITUNG IN INPUTSRÄUM  
IST TRIVIAL

$$\tilde{\Psi}(k) \rightarrow \tilde{\Psi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t}$$

$t > 0$        $t$  ↗  
ROTATION IN  
KOMPLEXEN ZAHLENRAUME

## 2.3 Das Wellenpaket

ABER WIE SIEHT DIE RÄUMLICHE  
WÄHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG AUS?

WIEDERHOLUNG: FOURIER-TRANSFORMATION

a) PERIODISCHE FUNKTIONEN  
(FOURIER 1822)

$$\left\{ \begin{array}{l} f(x+d) = f(x) \\ f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inx} \quad G_1 = \frac{2\pi}{d} \\ g_n = \frac{1}{d} \int_x^{x+d} f(x) e^{-inx} dx \end{array} \right.$$

•  $\int_0^d f(x) e^{-imG_1 x} dx = \int_0^d \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i(n-m)G_1 x} dx = g_m d$

## 2.3 Das Wellenpaket

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

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

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

Normierung

- $f(x) \text{ REELL} \rightarrow g_n = g_{-n}^*$

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

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

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

## 2.3 Das Wellenpaket

EINFÄCHE BEISPIELE:

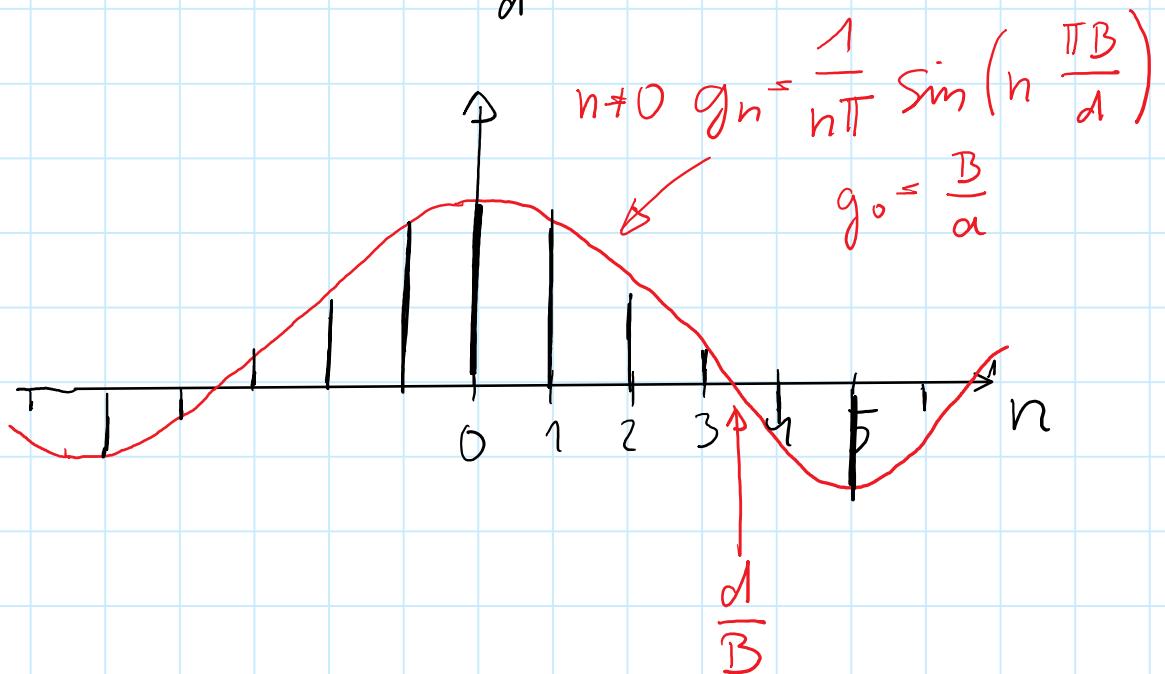
$$f(x) = \cos(Gx) = \frac{1}{2} e^{-ixG} + \frac{1}{2} e^{ixG}$$

FOURIER TRANSFORMIERTE

$$g_{-1} = \frac{1}{2}, \quad g_0 = 0, \quad g_1 = \frac{1}{2}$$

$$g_{|n|>1} = 0$$

$$f(x) = \dots \begin{cases} 1 & |x| < \frac{B}{2} \\ 0 & \text{else} \end{cases} \dots$$



JE KLEINER DIE STRUKTUR IM  
ORTSKRUM, UNSO BREITER WIRD DIE  
VERTEILUNG IN IMPULSKRUM.

## 2.3 Das Wellenpaket

D

### APERIODISCHE FUNKTIONEN

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

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

- NORMIERUNG

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

IN QM HABEN WIR

$$\Psi(x) \doteq f(x)$$

$$\tilde{\Psi}(k) \doteq g(k)$$

## 2.3 Das Wellenpaket

### DIRAC - DELTA - FUNKTION

$$f(x) = \delta(x) \stackrel{?}{=} \begin{array}{c} | \\ \hline 0 \\ \xrightarrow{x} \end{array}$$

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

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

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

DARSTELLUNG DER  
DIRAC  $\delta$ -FUNKTION

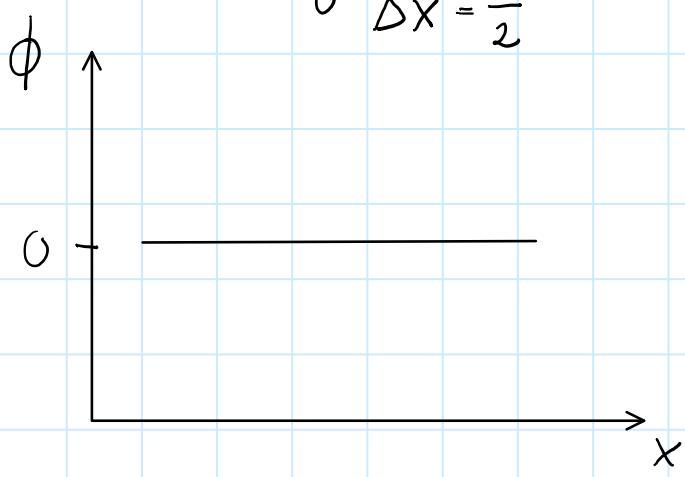
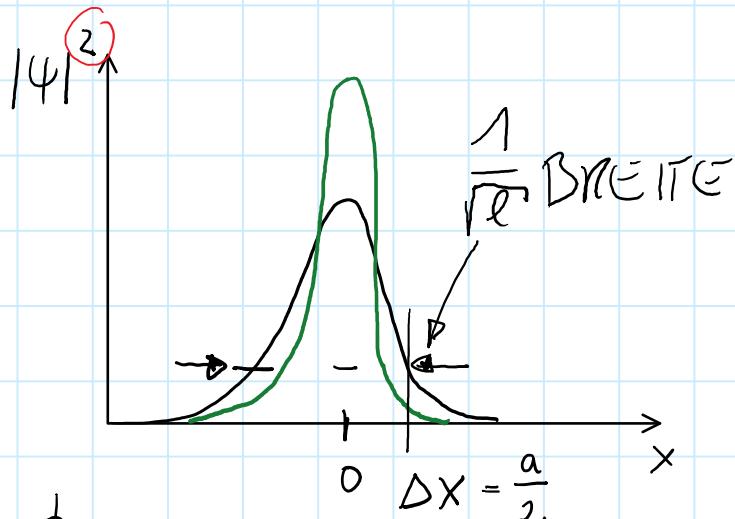
## 2.3 Das Wellenpaket

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

$$\Psi(x) = \int \tilde{\Psi}(k) e^{ikx} dk$$

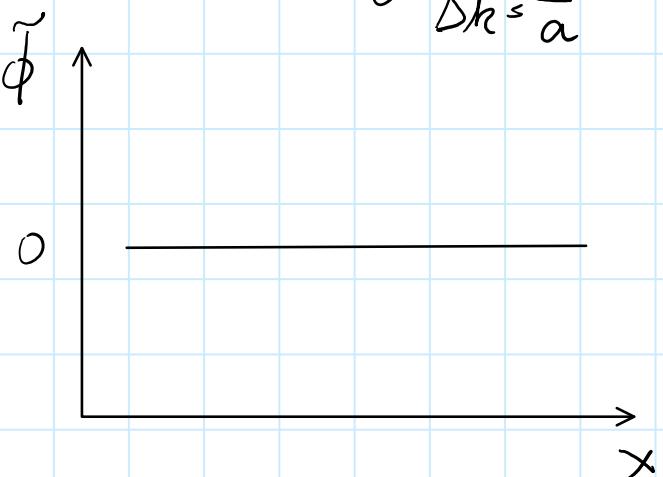
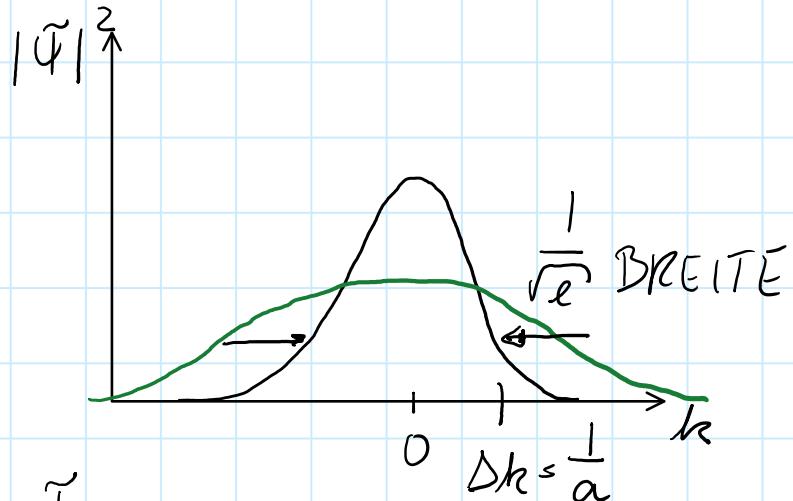
ORT

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



IMPULS

$$\tilde{\Psi}(k, t=0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-\frac{a^2 k^2}{4}}$$



## 2.3 Das Wellenpaket

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

$\frac{1}{\sqrt{2}}$  WERT DER W-VERTEILUNG

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

ROOT MEAN SQUARE

HEISENBERG UNSCHÄRFE

FOLGT AUS DER BESCHREIBUNG

EINES TEILCHENS MIT GESCHWINDIGKEIT

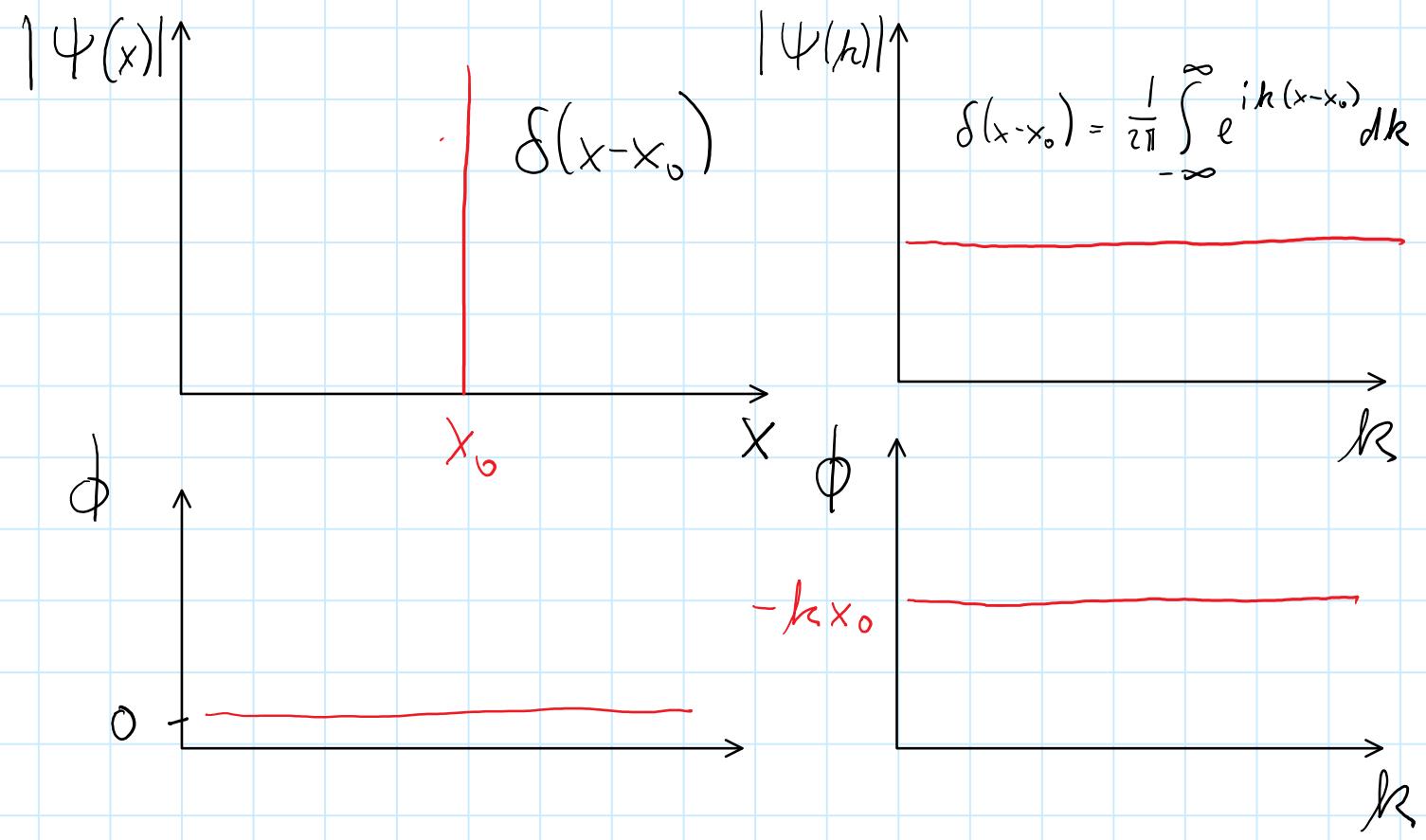
$\vec{v}$  / IMPULS  $m\vec{v}$  DURCH  $e^{i\hbar \vec{x}} \hat{=}$

DE BROGLIE WELLE, UND DEM

SUPERPOSITIONSPRINZIP.

## 2.3 Das Wellenpaket

EXTREMENFALL : TEILCHEN IST  
AN ORT  $x_0$

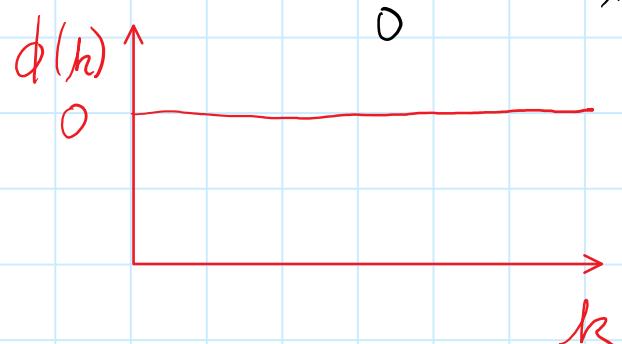
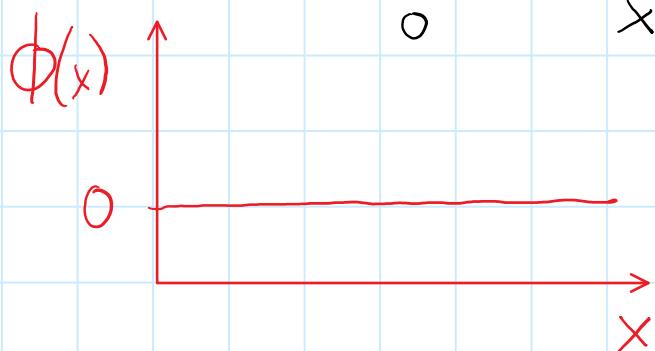
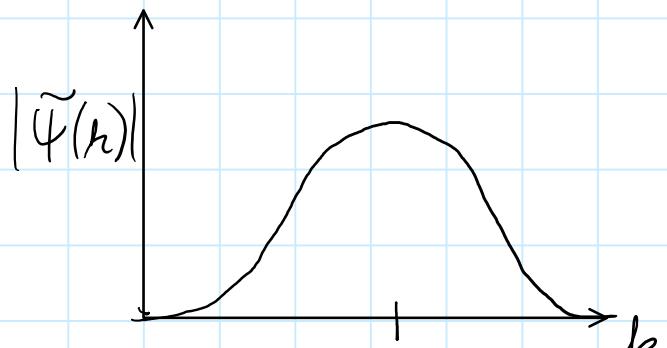
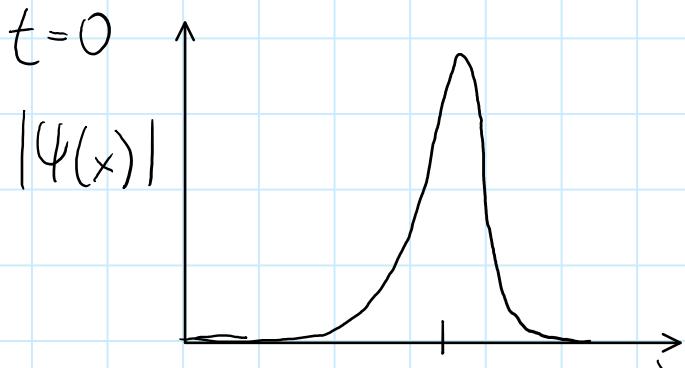


IMPULS IST MAXIMAL  
 $[-\infty, \infty]$  UNTERSCHÄRFT.

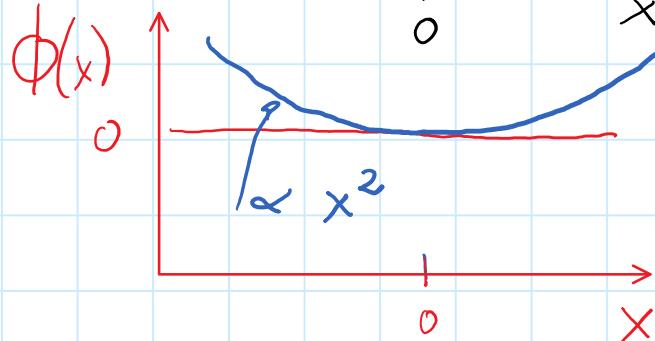
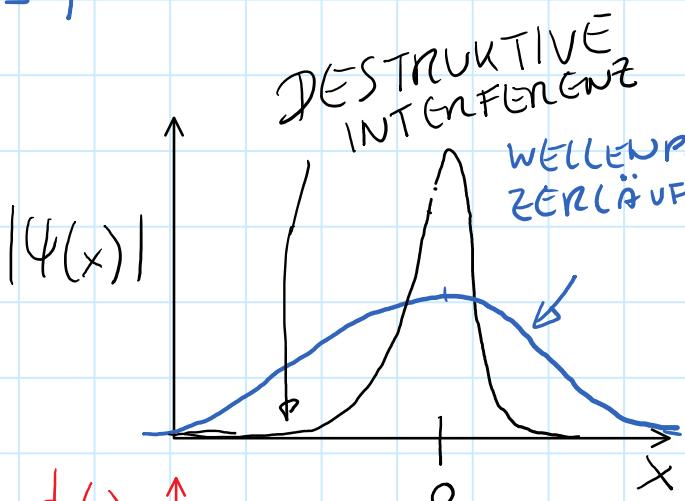
ANALOG : EIN TEILCHEN MIT  
WOHLDEFINIERTEN IMPULS IST  
VOLLSTÄNDIG DEKOKAUSIERT.

## 2.3 Das Wellenpaket

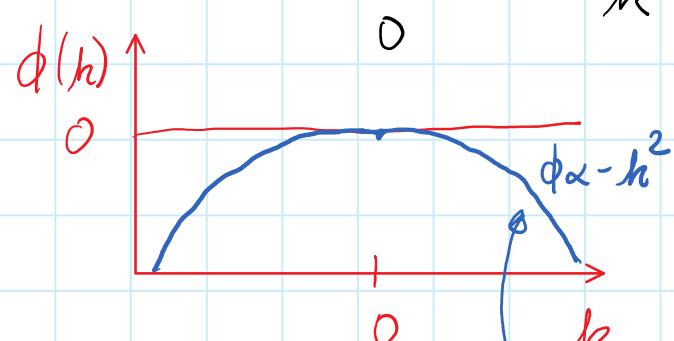
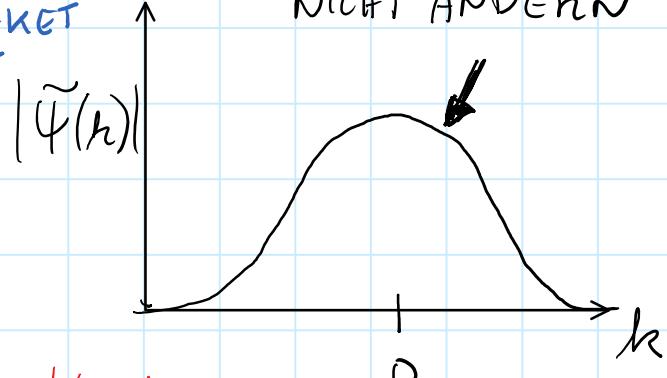
### AUSBREITUNG EINES WELLENPAKETS



$t=T$



KEINE KRAFT  
IMPULS KANN SICH  
NICHT ÄNDERN



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

## 2.3 Das Wellenpaket

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

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

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

MIT  $\varphi = -\Theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m}t$   $\tan 2\Theta = \frac{2\hbar t}{ma^2}$

AUS : QUANTUM MECHANICS

C. COHEN-TANNoudji

B. DIU

F. LALOË

JOHN WILEY & SONS

## 2.3 Das Wellenpaket

FÜR DIE BREITE  $\Delta x(t)$  ERGIBT SICH

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

FÜR KURZE ZEITEN:  $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2}$

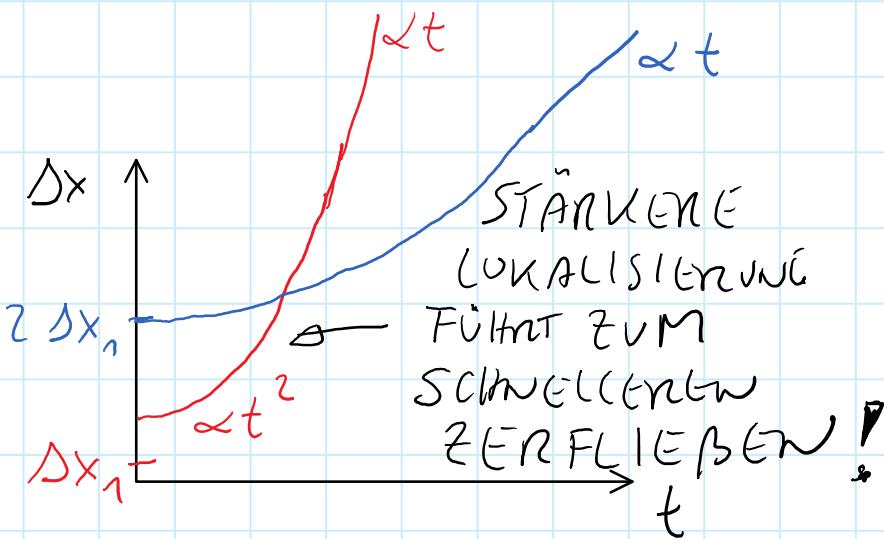
$$\Delta x(t) \sim \frac{a}{2} + \frac{\hbar^2}{m^2 a^3} t^2 + \dots$$

QUADRATISCH

FÜR LANGE ZEITEN  $\sqrt{1+x} \sim \sqrt{x}$

$$\Delta x(t) \sim \frac{\hbar}{ma} \cdot t$$

LINEAR



## 2.4 Allgemeine Ausbreitung eines Wellenpakets

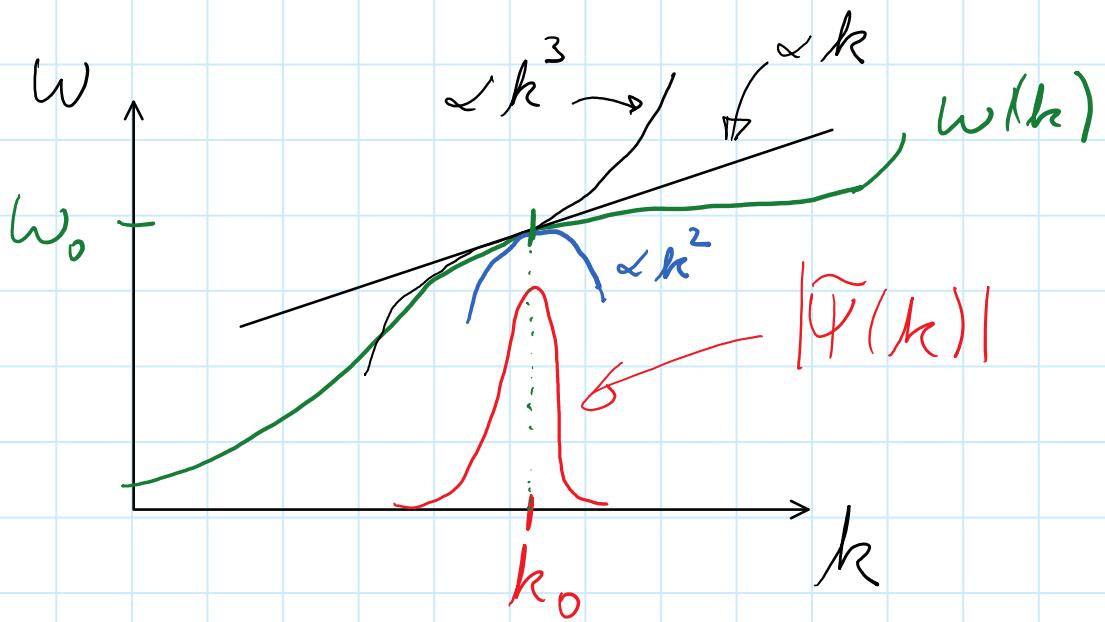
$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{ikx - \omega(k)t}$$

$\omega(k)$  ... DISPERSIONSRELATION

WENN  $\tilde{\Psi}(k)$  IM  $k$ -RAUM (IMPULSRAUM) UN  $k_0$  KONZENTRIERT

IST, KANN DIE DISPERSIONSRELATION  $\omega(k)$  DURCH EINE

TAYLOR REIHE GENÄHERT WERDEN.



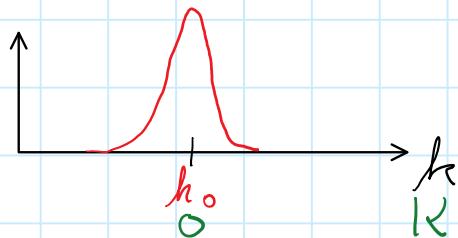
## 2.4 Allgemeine Ausbreitung eines Wellenpakets

TAYLOR REIHE:

$$\omega(k) \approx \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \underbrace{\frac{\partial \omega}{\partial k} \Big|_{k_0}}_{\omega'_0} (k - k_0) + \underbrace{\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \Big|_{k_0}}_{\omega''_0} \frac{(k - k_0)^2}{2} + \dots$$

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

$$\Psi(x, t) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{-i\left\{(\omega_0 + \omega'_0(k - k_0) + \omega''_0 \frac{(k - k_0)^2}{2})t - kx\right\}} dk$$



NEUE VARIABLE  
 $K = k - k_0$

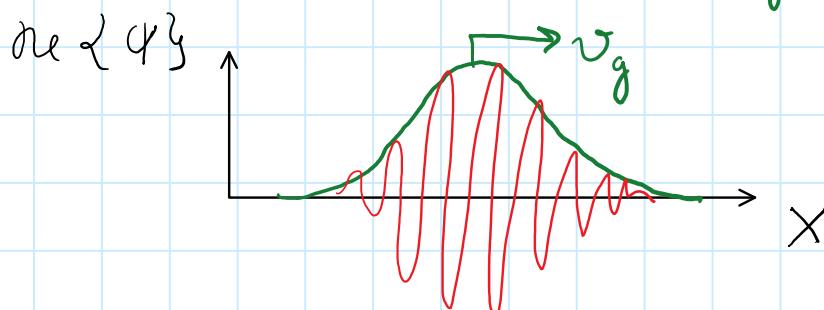
$$\Psi(x, t) \approx e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(K + k_0) e^{-i\left\{(\omega'_0 t - x)K + \frac{\omega''_0}{2} K^2 t\right\}} dK$$

$x' = v_g t - x$

DE BROGLIE WELLE

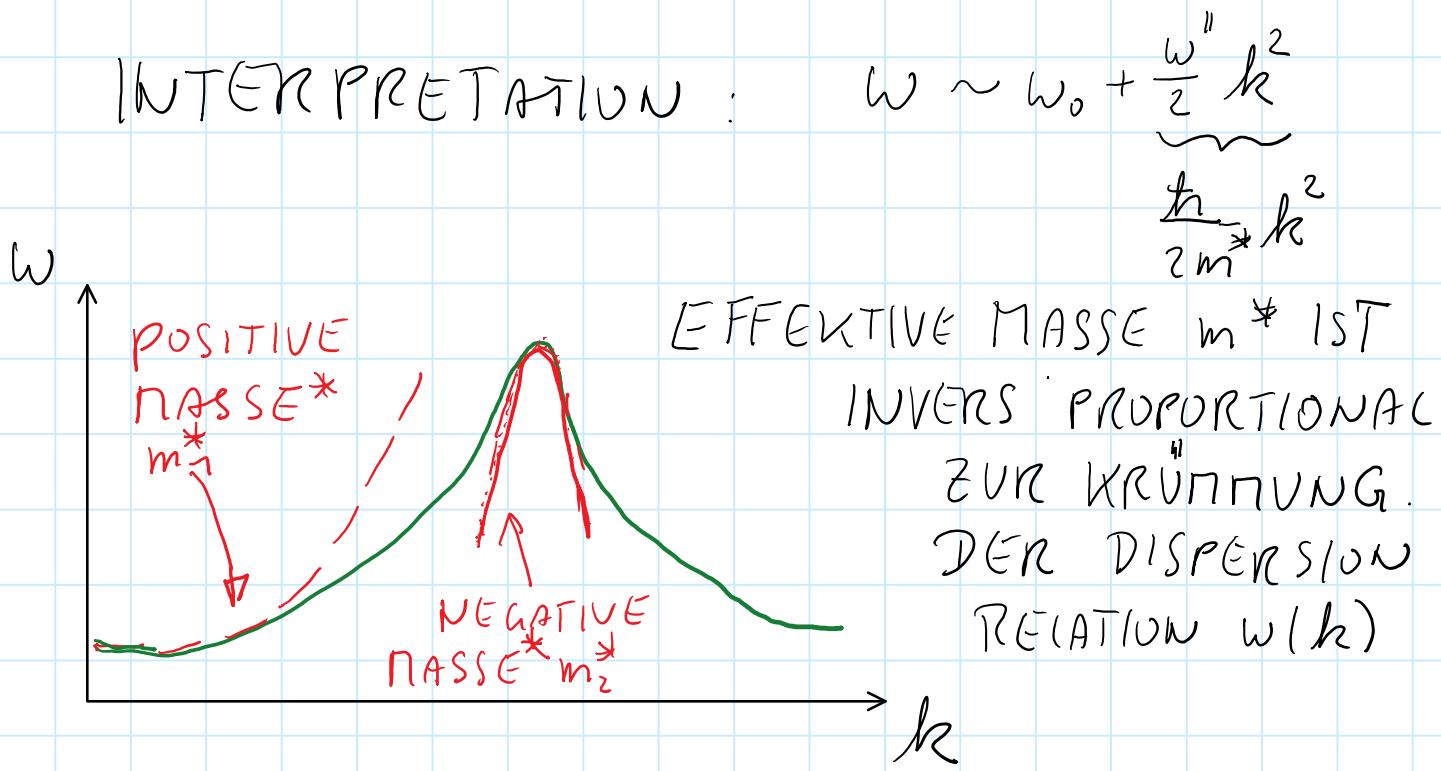
EINHÜLLENDE BEWEGT SICH

$$\omega''_0 = 0$$



$$\omega'_0 \neq 0 \Rightarrow \text{PHASE} \propto K^2 t \rightarrow \text{ZENFLIESEN}$$

## 2.4 Allgemeine Ausbreitung eines Wellenpakets



$$|m_1^*| > |m_2^*|$$

GAUSS'SCHES WELLENPAKET

$$\tilde{\Psi}(k) \sim e^{-\frac{\alpha^2}{4} k^2}$$

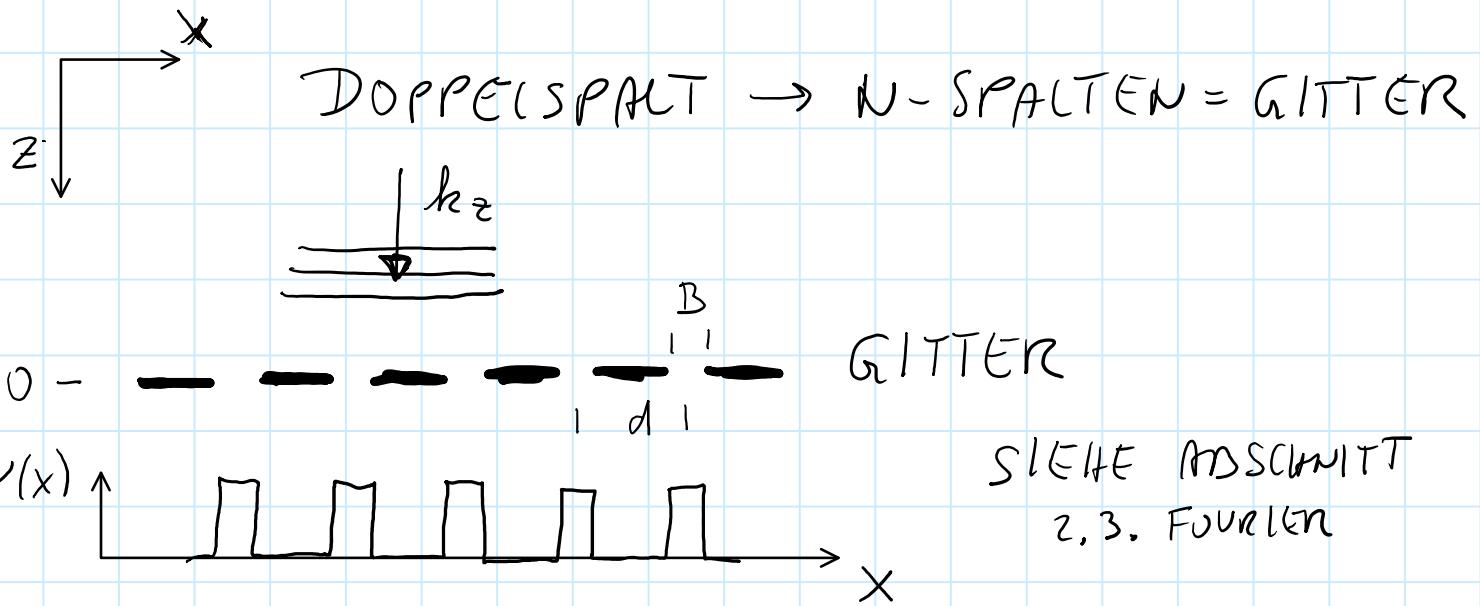
$\rightarrow \omega''$  TERM FÜHRT ZUM ZERFLIEßen DES PAKETS,  $\rightarrow$  GAUSS BLEIBT GAUSS.

HÖHERE ABLEITUNGENEN VON  $\omega(k)$

FÜHREN ZUR VERZERRUNG DES

GAUSS'SCHEN WELLENPAKETS

## 2.5 Beugung von Materiewellen (Streuung an periodischen Strukturen)



$\Psi(x)$  DIREKT NACH DEM GITTER

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

HIT  $g_n = \frac{1}{n\pi} \sin\left(n \frac{\pi B}{d}\right), \quad g_0 = \frac{B}{d}$

WIE BREITET SICH  $\Psi(x, z, t)$  AUS?

1. ENERGIEERHALTUNG  $\omega_{dB}$  ÄNDERT SICH NICHT.

2. IMPULS ÄNDERT DIE RICHTUNG

## 2.5 Beugung von Materiewellen (Streuung an periodischen Strukturen)

WEIL NACH DEM GITTER GILT:

$$\Psi(x, z, t) = N \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i n G_x + i k_z' z - i \omega t}$$

$$\vec{k}_n = \begin{pmatrix} n G_x \\ k_z' \end{pmatrix}$$

$$= N \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{i (\vec{k}_n \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

$k_z'$  FOLGT AUS ENERGIE-ERHALTUNG

$$n^2 G^2 + k_z'^2 = k_z^2$$

↑                      ↘  
NACH DEM          VOR DEM  
GITTER                GITTER

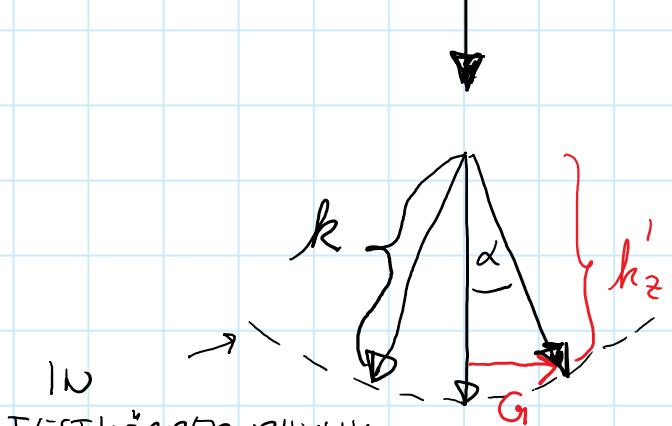
WAHRSCHEINLICHKEIT SICH IN RICHTUNG

$\vec{k}_n = \begin{pmatrix} G_x \\ k_z' \end{pmatrix}$  AUSZUVERTELEN/GEBEUGT  
ZU WERDEN.

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

## 2.5 Beugung von Materiewellen (Streuung an periodischen Strukturen)

EINFALLENDER  
WELLENVEKTUR  $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ k \end{pmatrix}$



IN  
FESTKÖRPER-PHYSIK  
EWALD KUGEL

$|k'|$  IST ERHALTEN,  
ABER DIE RICHTUNG  
ÄNDERT SICH DURCH  
GITTERVEKTOR  $\vec{G}$

NUR DISKRETE IMPULSE,  
WEIL PERIODISCHE STRUKTUR  
IN RAUM.

$$\text{FÜR } \frac{G}{k} \ll 1 \Rightarrow \omega = \frac{G}{k} = \frac{2\pi}{a} \frac{\lambda_{dB}}{2\pi} = \frac{\lambda_{dB}}{a}$$

ERGEBNIS WIE IN BEUGUNG VON  
EM- WELLEN AN PERIODISCHEN  
STRUKTUREN.

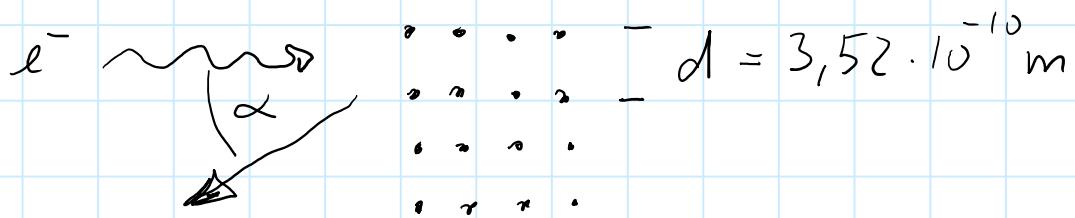
## 2.6 Beobachtung und Anwendung von Materiewellen Beugung

a) ELEKTRONEN:

BEOBACHTUNG: DAVISSON & GERMER (1927)

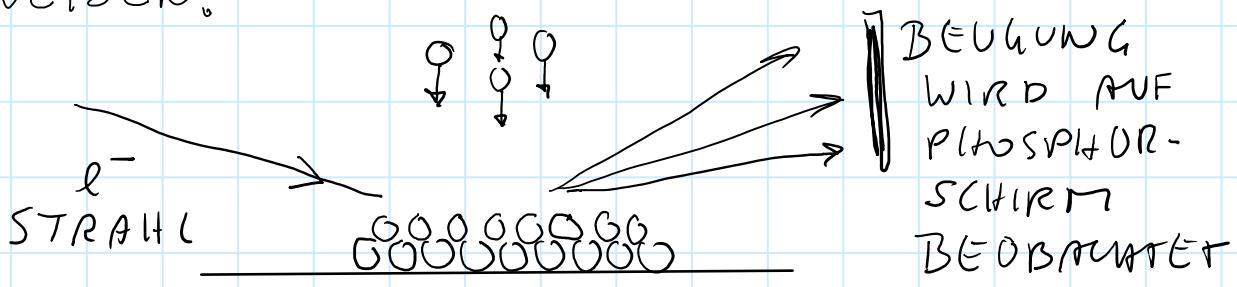
$e^-$  STRAHL MIT  $75\text{eV}$   $\lambda_{dB} = 1,4 \cdot 10^{-10}\text{m}$

FÄLLT AUF NI-KRISTALL



$$\Rightarrow \alpha = \frac{\lambda_{dB}}{d} \approx 0,4 \stackrel{!}{=} \frac{40\text{cm}}{1\text{m}} \approx 23^\circ !$$

DIE BEUGUNGSWINKEL SIND VERGLEICHBAR ZU RÖNTGEN STRAHLEN; ABER DIE EINDRINTIEFE FÜR  $e^-$  IST GERINGEN (COULOMB WW)  $\Rightarrow$  WERDEN HEUTE STANDARDNAHIG EINGESetzt, UM BEI MOLEKULARSTRahl EPITAXIE KRISTALLINES WACHSEN NACHzuWEISEN.



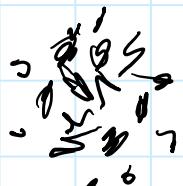
## 2.6 Beobachtung und Anwendung von Materiewellen Beugung

# KRISTALLINES WACHSTUM

# KLARE BEUGUNGSSTRUKTUR:

## ANORPHE STRUKTUREN

# DIFFUSE BEUGUNGSSTRUKTUR:



b) MOLEKÜLE AN EINEM TRANSMISSIONSGITTER z.B.  $\text{Na}_2$  PRITCHARD GROUP

# AM MIT - MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

Na OFEN →  
800 m/s | | | BEUGUNG  
| | |  
| | | NONONETEN  
| | | GITTER d = 160 nm

## 2.6 Beobachtung und Anwendung von Materiewellen Beugung

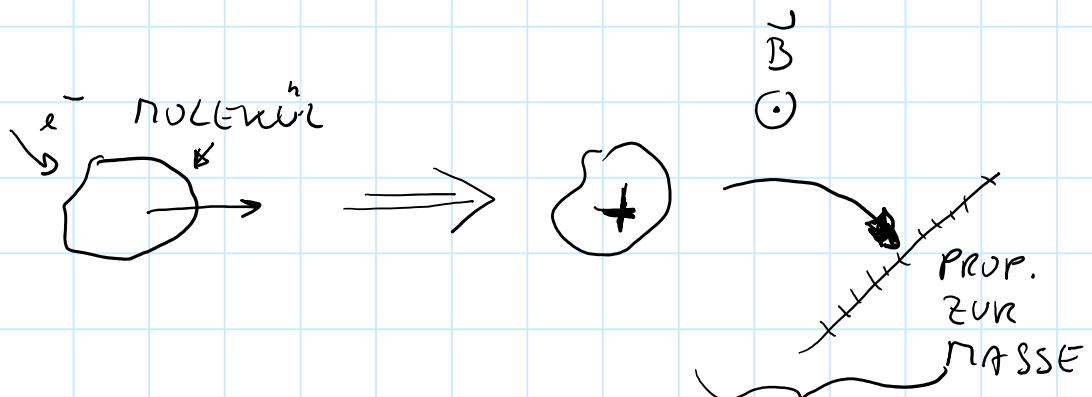
$$\text{Na} : \quad \lambda_{dB} = 20 \text{ pm} \quad \Rightarrow \Theta = \frac{\lambda_{dB}}{d} \sim 1,25 \cdot 10^{-4}$$

$$\approx 125 \mu\text{m/m}$$

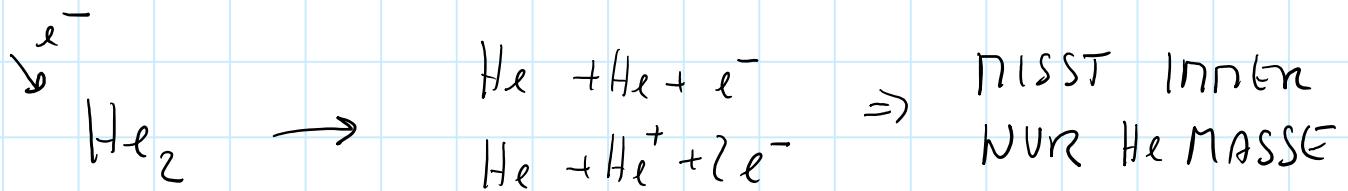
$$\text{Na}_2 : \quad \lambda_{dB} = 10 \text{ pm} \quad \Rightarrow \Theta = \frac{1}{2} \cdot 1,25 \cdot 10^{-4}$$

c) NACHWEIS VON SEHR 'FRAGILLEN'  
MOLEKÜLEN z.B.  $\text{He}_2$

"ÜBLICHE" METHODE:

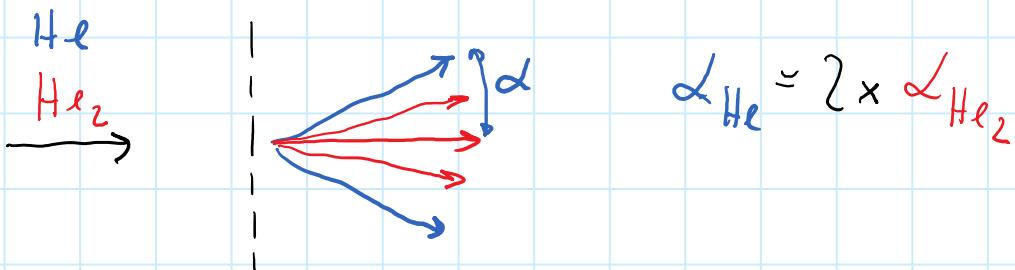


MASSEN  
SPEKTROMETER



## 2.6 Beobachtung und Anwendung von Materiewellen Beugung

VERWENDUNG VON NANOMETER  
TRANSMISSIONSGITTER → ANALYSE DER  
BEUGUNGSWINKEL



c) BEUGUNG VON MAKRO-MOLEKÜLEN  
z.B.  $C_{60}$ ,  $C_{60}F_{40}$

HOLLINZATION

|      |
|------|
| OPEN |
| SOOK |

 $m = 60 \cdot {}^{12}C$ 
 $\lambda_{dB} \sim 3 \text{ pm}$ 

$\alpha = \frac{\lambda_{dB}}{d} = 30 \cdot 10^{-6}$

BEUGUNGSGITTER

 $d \sim 10 \text{ nm}$

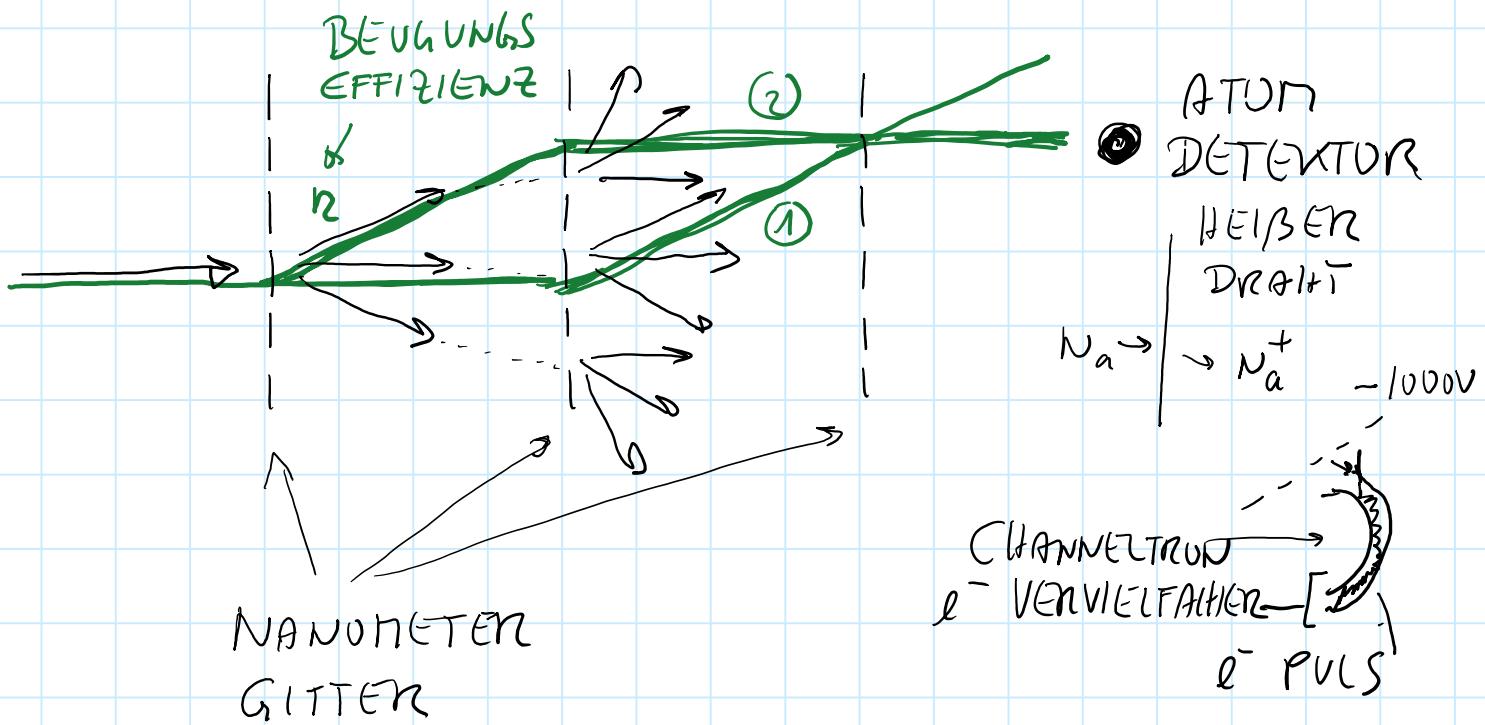
$$30 \cdot 10^{-6} \approx \frac{30 \mu\text{m}}{m} \sim \frac{3 \text{ cm}}{\text{km}}$$

FUNDAMENTALE FRAGE: GIBT ES  
EINE KRITISCHE GRÖSSE, AB DER  
QM KLASSTISCH WIRD.

## 2.7 Atom Interferometer

1. ATOM INTERFERENZEN - DOPPELSPALT AUS DÜNNEN GOLDFOLLEN  
GRUPPE MLYNEK : 1991 KONSTANZ

2. ATOM INTERFERENZEN - 3 GITTER AUFBAU  
GRUPPE RITCHARD : 1991 MIT / BOSTON



DIE WAHRSCHEINLICHKEIT DAS ATOM ZU DETEKTIEREN IST  $|\Psi|^2$  MIT

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi_{(1)} + \Psi_{(2)} = \eta^2 e^{ikl_1} + \eta^2 e^{ikl_2} \\ &= \eta^2 e^{ikl_1} \left( 1 + e^{ik(l_2 - l_1)} \right)\end{aligned}$$

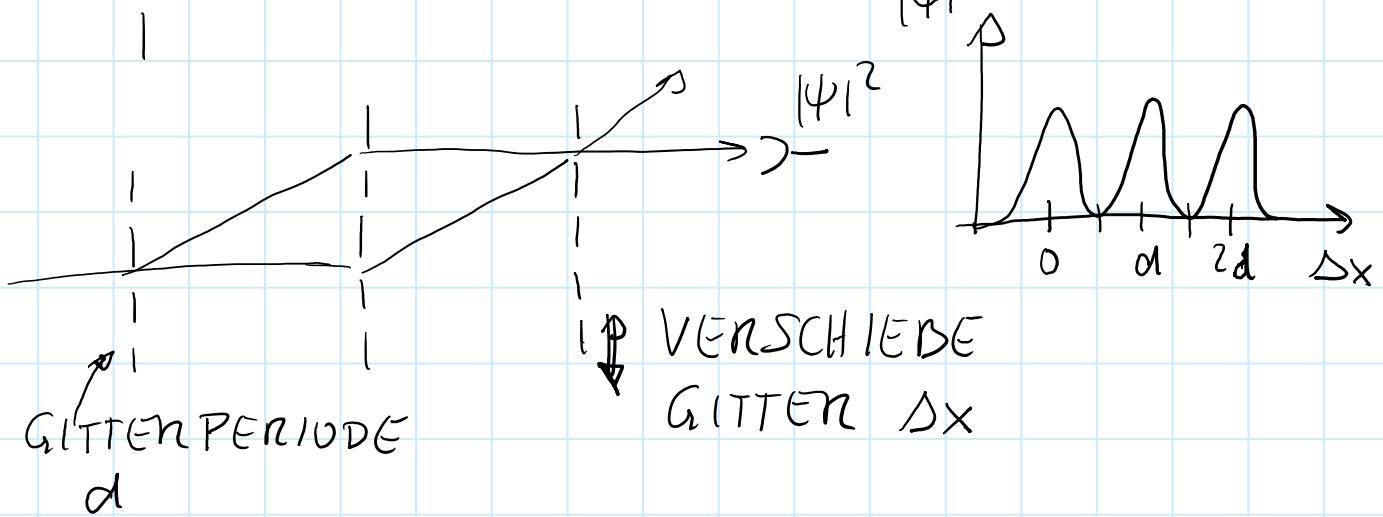
GLOBAL PHASE

## 2.7 Atom Interferometer

$$\Delta L = l_2 - l_1 = 0 \rightarrow |\psi|^2 = \frac{1}{4} \cdot n^4$$

BEOBACHTUNG DES INTERFERENZVUSTERS

$$|\psi|^2 = 0 ?$$



WARUM:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{inx} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{in(\Delta x + x)} e^{inx} \\ &= g_n e^{inx} e^{in \Delta x} e^{inx} \\ &\quad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{e^{i2\pi n \frac{\Delta x}{d}}} \end{aligned}$$

WENN  $\Delta x = d$   
 $e^{i2\pi n} = 1$

KEINE ÄNDERUNG

## 2.7 Atom Interferometer

LETZTES GITTER:

$$\begin{array}{c} \textcircled{2} \\ \textcircled{1} \end{array} \rightarrow \xrightarrow{\quad} g_0 + i \frac{2\pi \Delta x}{a}$$

$$g_1 e^{i k L_1} e^{i \frac{2\pi \Delta x}{a}}$$

$$\hookrightarrow \Psi = n^2 \ell^{i k L_1} e^{i \frac{2\pi \Delta x}{a}} + n^2 \ell^{i k L_2}$$

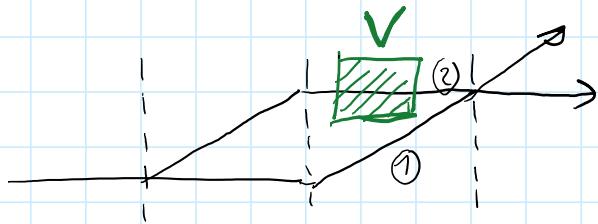
$$\text{MIT } L_1 = L_2 = L$$

$$\Psi = n^2 \ell^{i k L} \left\{ \ell^{i \frac{2\pi \Delta x}{a}} + 1 \right\}$$

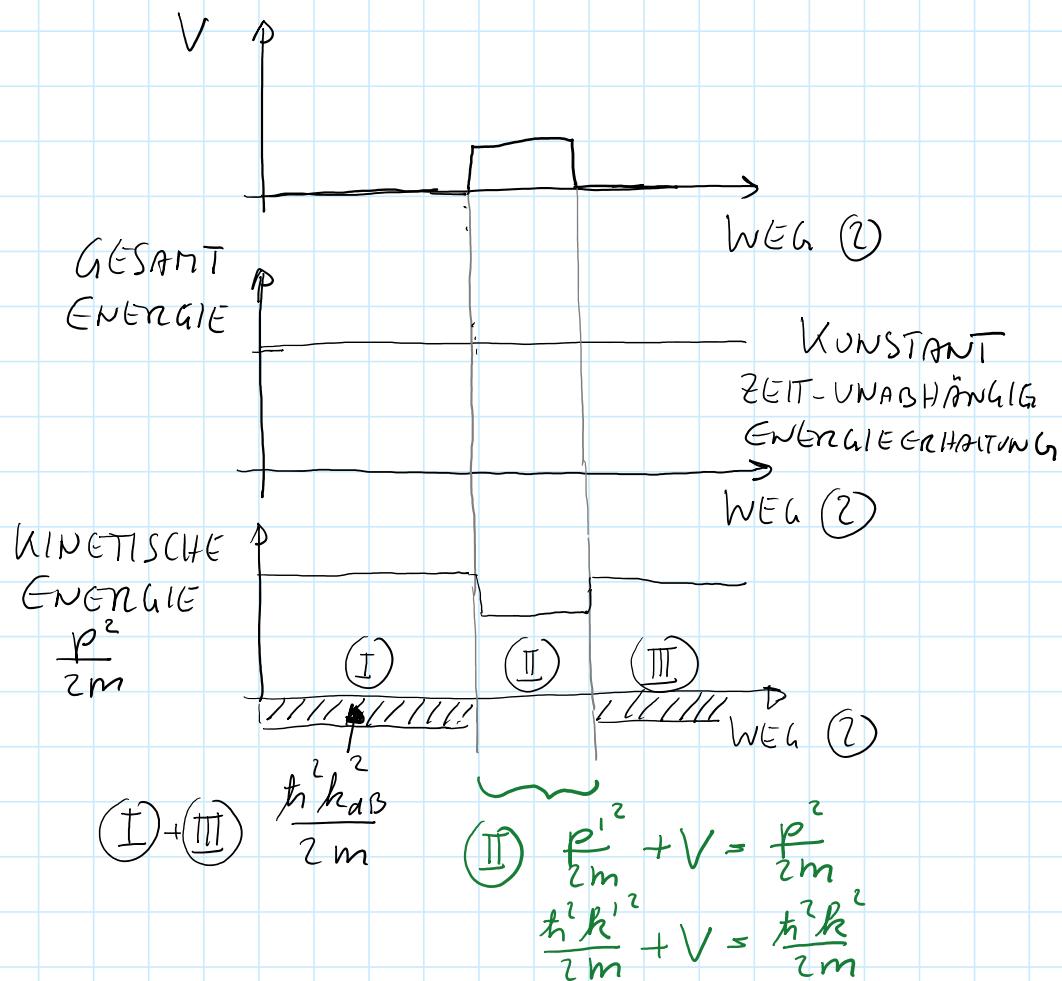
$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= n^4 \left\{ \left( \ell^{-i \frac{2\pi \Delta x}{a}} + 1 \right) \left( \ell^{i \frac{2\pi \Delta x}{a}} + 1 \right) \right\} \\ &\simeq n^4 \left\{ 2 + \underbrace{\ell^{-i \frac{2\pi \Delta x}{a}} + \ell^{i \frac{2\pi \Delta x}{a}}}_{2 \cdot \cos \frac{2\pi \Delta x}{a}} \right\} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\Psi|^2 \simeq 1 + \cos \left( \frac{2\pi}{a} \cdot \Delta x \right)$$

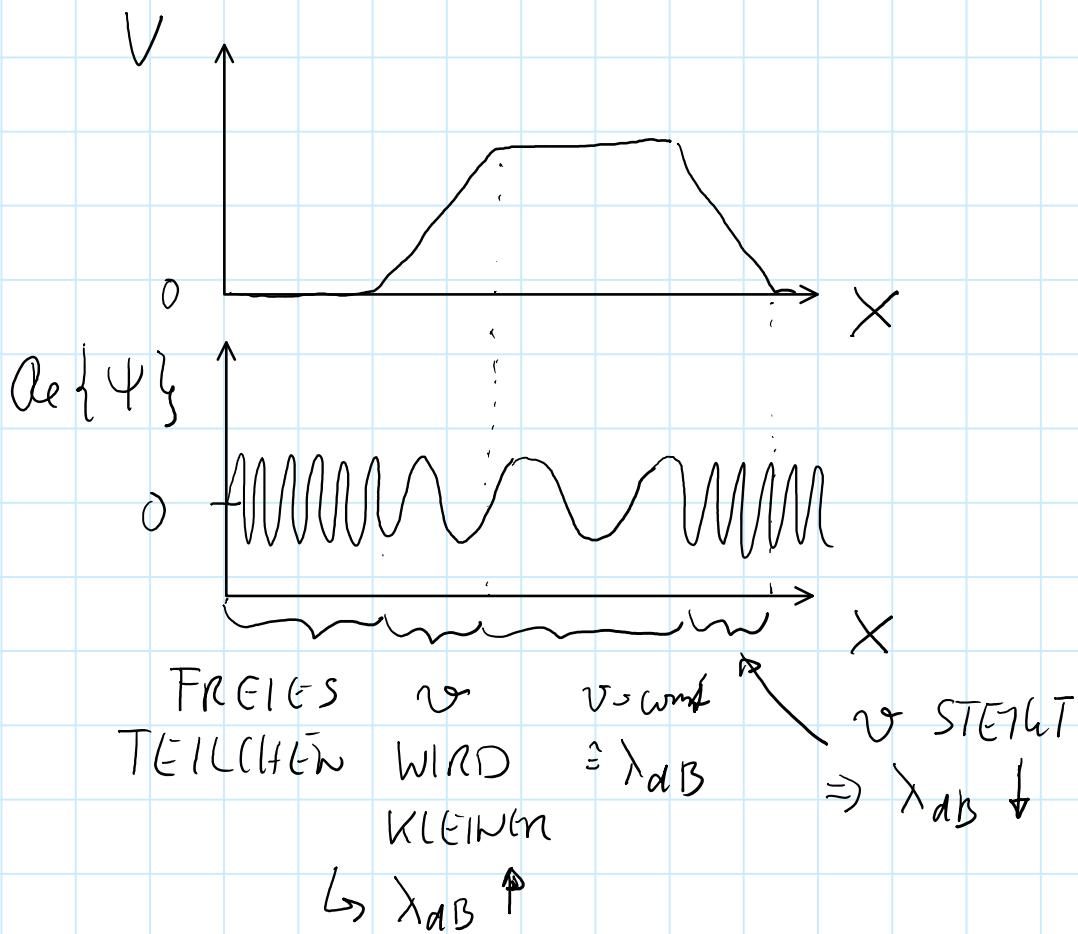
## MESSEN VON POTENTIALEN



POTENTIAL IN WEG 2:



## 2.7 Atom Interferometer



DIE KRAFT VERÄNDERT DIE  
 GE SCHWINDIGKEIT  $\Rightarrow$  DIE DÉ BRÜGLIE  
 WELLENLÄNGE ÄNDERT SICH  
 ENTSPRECHEND  $\Rightarrow \phi = k_{dB}^V \cdot x$  DIE  
 PHASENAKUMULATION ÄNDERT SICH  
 IN POTENTIAL  $\Rightarrow$  PHASEN SHIFT KANN  
 GENESSEN WERDEN

## 2.7 Atom Interferometer

DIE DE BROGLIE- WELLENLÄNGE ÄNDERT SICH → SIE WIRD IM BEREICH II LÄNGER, WEIL ATOM LANGSAMER WIRD.

EINFACHE BESCHREIBUNG DURCH EINFÜHRUNG EINES "BRECHUNGS INDEX". ANALOG ZUR WELLENOPTIK.

$$n = \frac{k_{\text{MEDIUM}}}{k_{\text{VAKUUM}}} = \frac{k'_{\text{POTENTIAL}}}{k'_{\text{FREI}}} = \frac{\lambda_{dB}^{\text{FREI}}}{\lambda_{dB}^{\text{POTENTIAL}}}$$

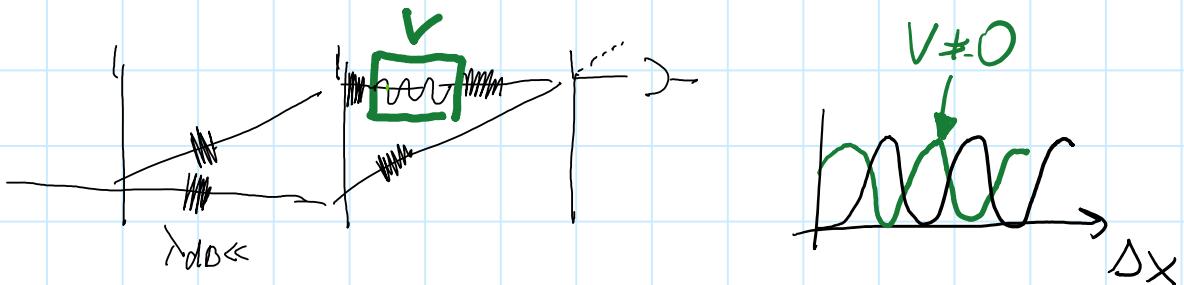
MIT (II)  $k'^2 = k^2 - \frac{2mV}{\hbar^2}$

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

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

## 2.7 Atom Interferometer

### IN ATOM INTERFEROMETER



EMPFINDLICHKEIT ADSCHÄTZEN  $\rightarrow$  WELCHE POTENTIALHÖHE FÜHRT ZU EINER

PHASENVERSCHIEBUNG VON  $\pi \approx$

MAXIMA DES INTERFERENZMUSTER S

VERSCHIEBEN SICH UN EINE HALBE PERIODE.

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

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

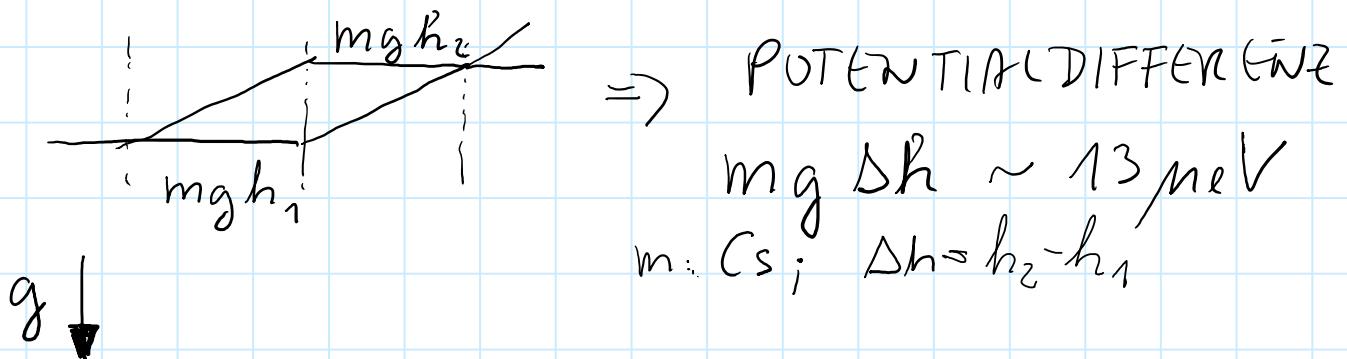
$$m = \text{Na} ; \lambda_{dB} \sim 20 \text{ pm} ; L = 1 \text{ cm}$$

$$V = 3 \cdot 10^{-29} \text{ J} \stackrel{!}{=} 0,18 \text{ neV} !$$

## 2.7 Atom Interferometer

### ANWENDUNGEN :

#### MESSUNG DER ERDBESCHLEUNIGUNG



GRAVITATIONSMESSUNG MIT ATOMAREN FOUNTAIN  $\Rightarrow g \pm 10^{-9} \text{ g}$

ERSTE MESSUNG MIT NEUTRONEN.

$$g \pm 10^{-2} \text{ g}$$

## ZIELE :

ABSTRAKTERE DISKUSSION

- $\hookrightarrow$  QM ZUSTAND / HILBERTRaUM
- OBSERVABLE
- WAS HEIST SCHRFER / WOD DEFINIERTEN MESSWERT?
- SCHRODINGER GLEICHUNG

### 3.1 QM-Zustand und dessen Darstellung

BISHER NUR DEN FALL DER  
AUSBREITUNG EINES MASSIVEN  
TEILCHENS → WELLENMECHANIK  
QM - IST ALLGEMEINER!

{ ① DAS SYSTEM (z.B. TEILCHEN) }  
WIRD BESCHRIEBEN DURCH EINEN  
QUANTENMECHANISCHEN ZUSTAND  
 $|\Psi\rangle$ . ER BEINHALTET ALLES  
WAS WIR VOM SYSTEM WISSEN  
KÖNNEN.

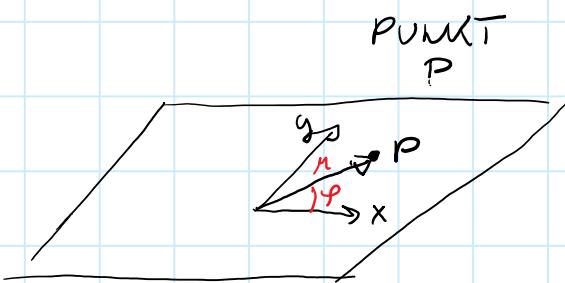
$|\Psi\rangle$  NENNT MAN 'KET' UND  
WURDE VON DIRAC EINGEFÜHRT.

### 3.1 QM-Zustand und dessen Darstellung

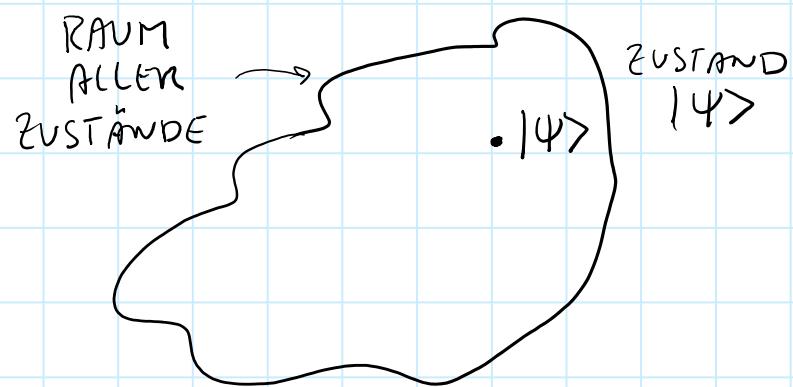
$$|\psi\rangle^* = \langle\psi| \quad \begin{array}{l} \text{KONJUGATEN KOMPLEX} \\ \text{NENNT MAN 'BRA'} \end{array}$$

SKALAR PRODUKT :  $\langle\psi|\psi\rangle$   
 BRA KET

2D - RAUM



QUANTENMECHANIK



DARSTELLUNG DES PUNKTES IN EINEM KOORDINATEN SYSTEM DURCH EINEN VEKTOR

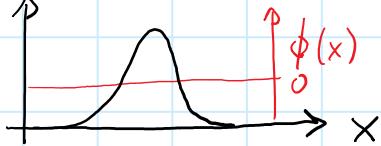
KOMPLEXISCH :  $(x, y)$

POLAR :  $(r, \phi)$ , ...

DARSTELLUNG DES ZUSTANDS  $|\psi\rangle$  IN EINER BASIS.

BISHER: |WELLENPAKET>

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

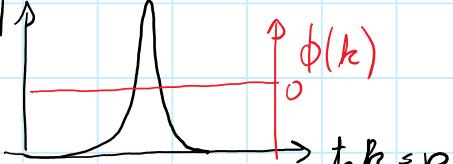


$\vec{P} = x \cdot \vec{e}_x + y \cdot \vec{e}_y$   
 KOORDINATEN / BASIS VEKTOREN

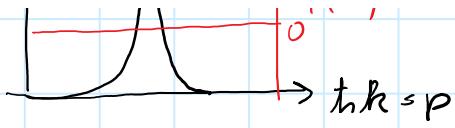
ODER:

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

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



$$\vec{P} = n \cdot \vec{e}_n + \varphi \cdot \vec{e}_y$$



### 3.1 QM-Zustand und dessen Darstellung

#### SKALAR PRODUKT

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

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

AUSSERDEM:

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

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

ORTS  
DARSTELLUNG

$$= \int_p^* \phi(\vec{k}) \psi(\vec{k}) d^3k$$

IMPULS  
DARSTELLUNG

"NÜTZLICH" UM KORDINATEN ZU  
BERECHNEN.

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

"NÜTZLICH" UM WAHRSCHENLICH-  
KEITS- AMPLITUDEN ZU

EXTRAHIEREN

BEISPIEL: 1D - WELLENPAKET

BASIS: ZUSTÄNDE MIT WOHDEFINIERTEN IMPULS  $\hbar k$   
(DE BROGLIE WELLEN), DIESE ZUSTÄNDE  
BESCHREIBEN WIR MIT  $|k\rangle$

WELLENPAKET IST EINE SUMME (SUPERPOSITION)  
VON DE BROGLIE - WELLEN:

$$|\text{WELLENPAKET}\rangle = |\Psi_{wp}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) |k\rangle dk$$

ZUSTAND: ALLES

WAS WIR VON TEILCHEN  
WISSEN KÖNNEN.

↑ KOORDINATE  
DARSTELLUNG  
IN DEN IMPULS  
BASIS

↓ UNENDLICHE  
SUMME

↑ ZUSTAND MIT  
EXAKT DEFINIERTEN  
IMPULS / BASIS  
(DE BROGLIE  
WELLE)

Sunhe

.....,

### 3.1 QM-Zustand und dessen Darstellung

KOORDINATE "VOR"  $|k'\rangle$  GIBT DIE W-AMPLITUDE DES IMPULSES  $k'$   
(DER DER DE BROUILLE WELLE  $e^{-ik'x}$ )

$\Rightarrow$  DAS ABSOLUT-BETRAGS-QUADRAT DER KOORDINATE GIBT DIE WAHRSCHEINLICHKEIT DEN IMPULS  $p \rightarrow k'$  ZU MESSEN.

SKALARPRODUKT ANWENDEN:

$$\langle k' | \psi_{wr} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) \underbrace{\langle k' | k \rangle}_{\text{BILINEAR}} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(k) \delta(k - k') dk = \tilde{\Psi}(k')$$

IN ORTSDARSTELLUNG  
VON  $|k\rangle$

$$\langle a | \{ |c\rangle + |d\rangle \} \rangle$$

$$\langle x | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

DANIT

$$\rightarrow \langle a | c \rangle + \langle a | d \rangle$$

BEN: BILINEAR

$$(n \vec{a}) \cdot \vec{b} = n (\vec{a} \cdot \vec{b}) - \vec{a} \cdot n \vec{b}$$

$$\vec{a} (\vec{b} + \vec{c}) = \vec{a} \vec{b} + \vec{a} \vec{c}$$

$$\langle k' | k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik'x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dx$$

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

### 3.1 QM-Zustand und dessen Darstellung

ORTSDARSTELLUNG VON  $|\Psi_{wp}\rangle$

'ORTSKOORDINATE':  $\langle x | \Psi_{wp} \rangle$

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

ORTSWELLENFUNKTION IST EINE  
DARSTELLUNG VON  $|\Psi_{wp}\rangle \hat{=} \text{ORTSDARST.}$

$\tilde{\Psi}(k)$  IST EINE ANDERE DARSTELLUNG  
VON ZUSTAND  $|\Psi_{wp}\rangle \hat{=} \text{IMPULSDARST.}$

DAS ERGEBNIS VON RECHNUNGEN HÄNGT  
NICHT VON DEN DARSTELLUNG/BASIS  
AB → DIE BERECHNUNG KANN IN  
EINER BESTIMMTEN BASIS SEHR EINFACH  
SEIN z.B. WELLENPAKET DYNAMIK  
IST IN DER IMPULSDARSTELLUNG EIN-  
FACH.

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

IMPULS-OPERATOR:  $\hat{p} \xleftarrow[\text{OPERATOR}]{} \text{SYMBOLISIERT } |k\rangle \mapsto ik\rangle$

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

$\uparrow$   
ZUSTAND ÄNDERT  
SICH NICHT

IST EINE ZAHL UND  
ENTSPRICHT DEM  
IMPULS  $\hbar k$   $\left[ \frac{\text{kg m}}{\text{s}} \right]$

$|k\rangle$  IST EIN SPEZIELLEN ZUSTAND, WEIL  
DEN IMPULSOPERATOR DEN ZUSTAND NICHT  
ÄNDERT, SONDERN 'NUR' MIT EINER ZAHL MULTI-  
PLIZIERT. DARAUS FOLGT, DASS DER ZUSTAND  $|k\rangle$   
EINEN WOHLDEFINIERTEN/SCHWARFEN IMPULS ENTSPRICHT.  
 $|k\rangle$  NENNT MAN IMPULSEIGENZUSTAND.

ERWARTUNGSWERT: WAS ERWANDET MAN FÜR DEN  
MITTELWERT DES IMPULSES?

MITTELWERT

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p \underbrace{P(p) dp}_{\substack{\uparrow \\ \text{WAHRSCHEINLICHKEIT} \\ \text{DES IMPULS IM} \\ \text{INTERVALL } [p, p+dp]}} = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} k \underbrace{|\tilde{\Psi}(k)|^2 dk}_{\substack{\uparrow \\ \text{WAHRSCHEINLICHKEITS} \\ \text{DICHT - FÜR DE BROGLIE} \\ \text{WELLE } \delta(k'-k)}} = \hbar k$$

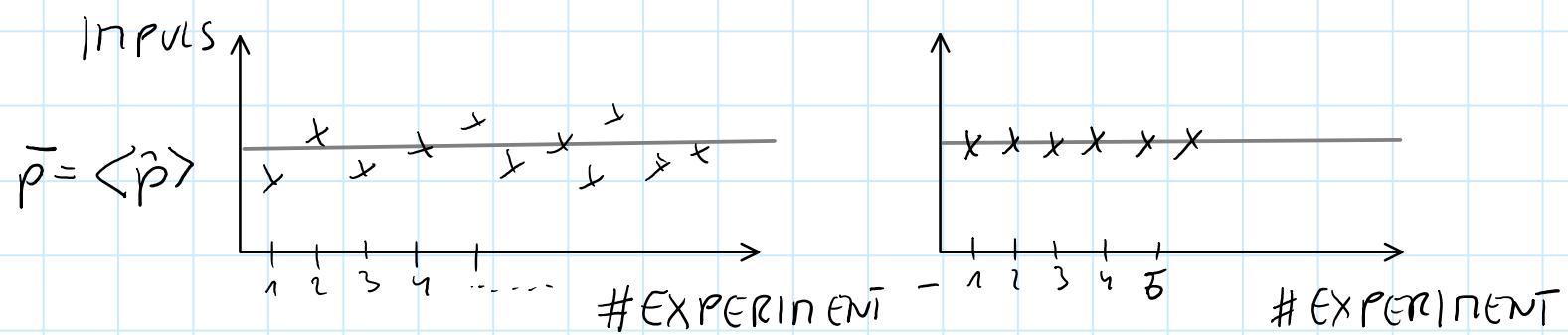
IN DIRAC-NOTATION

$$\langle k | \hat{p} | k \rangle = \langle k | \hbar k | k \rangle = \hbar k \underbrace{\langle k | k \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{BILINEAR}}} = \hbar k$$

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

ERWARTUNGSWERT / MITTELWERT IS

$\bar{p} = \hbar k \Rightarrow 2 \text{ NÖGLICHKEITEN}$



BERECHNE VARIANZ:

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

FÜR IMPULSEIGENZUSTAND  $|k\rangle$

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

$$= \underbrace{\hbar k}_{\substack{\text{BILDEMPM} \\ \text{ASSUMTV}}} \langle k | \hat{p} | k \rangle - \hbar k \hbar k \underbrace{\langle k | k \rangle}_{\mathbb{1}}$$

BILDEMPM  
ASSUMTV

$$= \hbar \hbar$$

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

$$\langle \hat{p} \rangle^2 = \langle k | \hat{p} | k \rangle^2 = \hbar k \underbrace{\langle k | k \rangle}_{1} \cdot \hbar k \underbrace{\langle k | k \rangle}_{1} = \hbar^2 k^2$$

$$\hookrightarrow \text{VAR}(p) = \hbar^2 k^2 - \hbar^2 k^2 = 0 !$$

ALLE MESSUNGEN ERGEBEN  
EXAKT DEN GLEICHEN WERT.  
ES GIBT KEINE STREUUNG DER  
MESSWERTE

$\hookrightarrow$  IMPULS IST SCHARF/  
WÜHLDEFINIENT

BEM: DIESER ZUSTAND EXISTIERT NUR  
IN BELEBIG GUTEN NÄHERUNG

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

## DARSTELLUNG VON OPERATOREN

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

↑

DARSTELLUNG DES  
IMPULSOPERATORS IN  
IMPULSDARSTELLUNG  $\hat{=}$  EINFACH  
WEIL NUR EINE ZAHL.

WIE SIEHT DAS IN ORTSDARSTELLUNG  
AUS?

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

$$\begin{aligned}\hat{p} |k\rangle &= \hbar k |k\rangle \mapsto \hbar k \{ e^{ikx} |x\rangle \} \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \{ e^{ikx} |x\rangle \}\end{aligned}$$

IMPULSOPERATOR IN ORTSDARSTELLUNG

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

BEN:

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | \hat{p} | \psi \rangle$$

or 1

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \hbar k \psi(k) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

IMPULS ERWARTUNGSWERT FÜR ALLEGEMEINE WELLENFKT.  $\Psi(x)$  FÜR EIN TEILCHEN.

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \langle \Psi | \hat{p}_x | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) dx$$

ORTS  
DARSTELLUNG

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{\Psi}^*(k') e^{-ik'x} dk' \right] \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(k'') e^{+ik''x} dk'' \right]}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(k'') \hbar k'' dk''} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk' \int_{-\infty}^{\infty} dk'' \tilde{\Psi}^*(k') \Psi(k'') \hbar k'' \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int e^{i(h''-h')x} dx}_{\delta(h''-h')}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk' \underbrace{\tilde{\Psi}^*(k') \Psi(k')}_{P(k')} \hbar k' = \langle \hbar k \rangle$$

WAHRSCHEINLICHKEIT  
 $\hbar k'$  ZU FINDEN

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

GLEICHZEITIGE MESSUNG VON  
2 OBSERVABLEN  $\hat{A}$  UND  $\hat{B}$

WENN ES EINEN EIGENZUSTAND ZU  
 $\hat{A}$  UND  $\hat{B}$  GIBT, DANN IST DAS  
MÖGLICH:

$$\hat{A} |a,b\rangle = a |a,b\rangle$$

$$\hat{B} |a,b\rangle = b |a,b\rangle$$

ABER AUCH:

ZAHLEN  
↓

$$\hat{A} \hat{B} |a,b\rangle = \hat{A} b |a,b\rangle = ab |a,b\rangle$$

$$\hat{B} \hat{A} |a,b\rangle = \hat{B} a |a,b\rangle = ba |a,b\rangle$$

$$\underbrace{\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}}_{\text{KOMMUTATOR}} |a,b\rangle = 0$$

KOMMUTATOR : KURZSCHREIBWEISE

$$[A, B] = 0$$

FÜR VERTAUSCHENDE OPERATOREN  
GIBT ES GENEINSAME SCHÄRFE OBSERV.

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

## HEISENBERG UNSCHÄRFE FÜR ORT UND IMPULS

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

ORTSDARSTELLUNG  $\Rightarrow \left[ x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x \right] f(x)$  WIRKT AUF Pkt.

$$= \left[ -i\hbar x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\hbar + i\hbar x\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] f(x)$$

$$= i\hbar$$

$\hookrightarrow$  OPERATOREN VERTAUSCHEN NICHT!

ES GIBT KEINEN EIGENZUSTAND

ZU  $\hat{x}$  UND  $\hat{p}$ !

THEO-QUANTEN:  $[A, B] = i \text{const}$

$$\hookrightarrow \text{Var}(A) \text{Var}(B) \geq \frac{\text{const}}{2}$$

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

ENERGIE OPERATOR FÜR EIN FREIES

TEILCHEN:

$$\text{KLASSISCH: } H = \frac{p^2}{2m} \xrightarrow{p \rightarrow \hat{p}} \text{QM: } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

IMPULSDARSTELLUNG

ERWARTUNGSWERT DER ENERGIE FÜR  
IMPULS EIGENSTAND.

$$\hat{H} |k\rangle = \frac{1}{im} \hat{p} \hat{p} |k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |k\rangle$$

ZUSTAND UNVERÄNDERT

ZAHL GIBT DIE ENERGIE [J] AN.

$\hat{H}$  (ENERGIE OPERATOR) IN ORTSFESTE

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

### 3.2 Observable (beobachtbare Größen) und Operatoren

ENERGIE EIGENZUSTAND:

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

Z.B. DE BROGLIE WELLE

$$\begin{aligned} & i(h_{dB}x - \omega_{dB}t) & i(h_{dB}x - \omega_{dB}t) \\ l & \xrightarrow{\quad} \hbar\omega_{dB} \quad l \\ & \hat{E} = \frac{i\hbar}{\partial t} \quad \text{ENERGIE} \\ & \text{ORTS} \\ & \text{DARSTELLUNG} \end{aligned}$$

ALLGEMEIN AUCH GÜLTIG P.H.  
 ENERGIE EIGENZUSTÄNDE HABEN DIE  
 EINFACHE ZEITENTWICKLUNG

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

DESHALB SIND DIESER ZUSTÄNDE  
 EINE GUTE BASIS, UM ZEITDYNAMIK  
 ZU BESCHREIBEN.

GENERELL: JEDER KLASSTRICHE GRÖSSE  
 $a = f(\vec{x}, \vec{p}) \Rightarrow \hat{a} = f(\vec{\hat{x}}, \vec{\hat{p}})$  z.B. DREHIMPULS  
 $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

ES GIBT ABER AUCH NICHT-KLASSTRICHE GRÖSSEN z.B. SPIN

### 3.3 Die Schrödinger Gleichung (nicht relativistische QM)

GESAMTENERGIE:  $E$

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

ALLGEMEINEN:  $H$  HAMILTONFUNKTION

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

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \right\}$$

OPERATOR GLEICHUNG

DARSTELLUNG IN ORTSRAUM:

$$\begin{aligned} \vec{x} &\mapsto \vec{x} \\ \hat{p} &\mapsto -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad \text{NABLA} \\ \hat{p}^2 &= -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 = -\hbar^2 \Delta \quad \text{LAPLACE} \end{aligned}$$

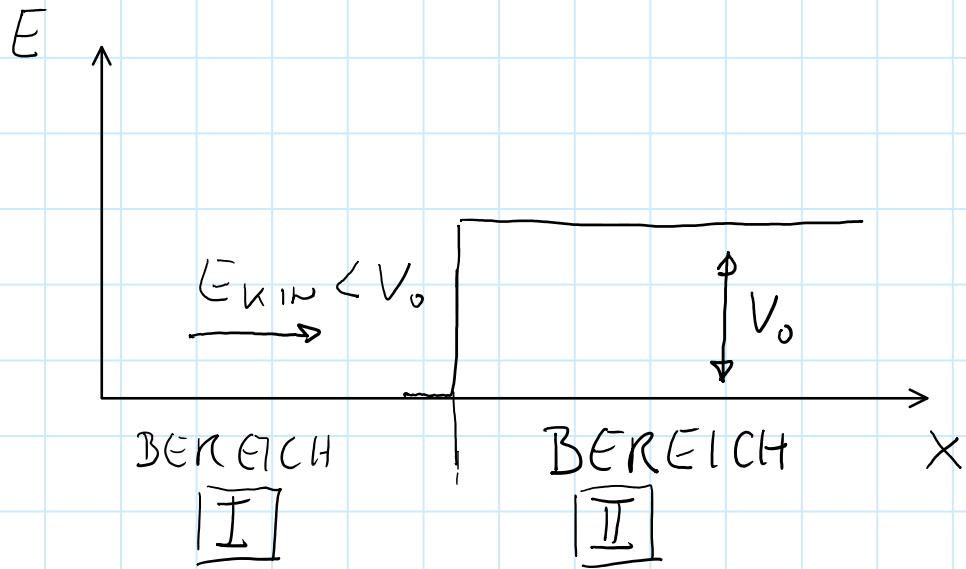
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t)$$

SCHRÖDINGER GLEICHUNG FÜR  
NICHT-RELATIVISTISCHE QM

### 3.3 Die Schrödinger Gleichung (nicht relativistische QM)

DANIT WIRD DIE DYNAMIK IN  
ALLGEMEINEN POTENTIALEN BE-  
SCHRIEBEN. DIE ZEITDYNAMIK  
KANN ALS INTERFERENZ VER-  
STÄNDEN WERDEN, WENN NUN  
DIE ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE  
 $\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$  ALS BASIS  
VERWENDET  $\rightarrow$  ZEITABHÄNGIGKEIT  
KÖNNT NUR DURCH DIE VERSCHIEDENE  
PHASENENTWICKLUNG DER ENERGIE-  
EIGENZUSTÄNDE ZUSTÄNDE

## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe



LÖSEN SCHRÖDINGER GLEICHUNG IN EINER DIMENSION. IN ORTSDARSTELLUNG:

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

SUCHEN LÖSUNGEN MIT SEPARATIONSANSATZ:

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

WANUM: DIE ZEITENTWICKLUNG IST 'NUR' EINE ROTATION IN DEN KOMPLEXEN ZAHLEN GRÄFEN; DIESER ZUSTAND IST EIN ENTGEGENLAUFTZUSTAND.

$$\hat{E} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \xrightarrow[\substack{\text{IN} \\ \text{ORTSDARSTELLUNG}}]{\quad} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = i\hbar \phi(x) \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) e^{-i \frac{E}{\hbar} \cdot t} = E e^{-i \frac{E}{\hbar} \cdot t} \phi(x) = E \Psi(x, t)$$

✓

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

## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe

GLEICHUNG FÜR  $\psi(x)$  FOLGT AUS EINSETZEN

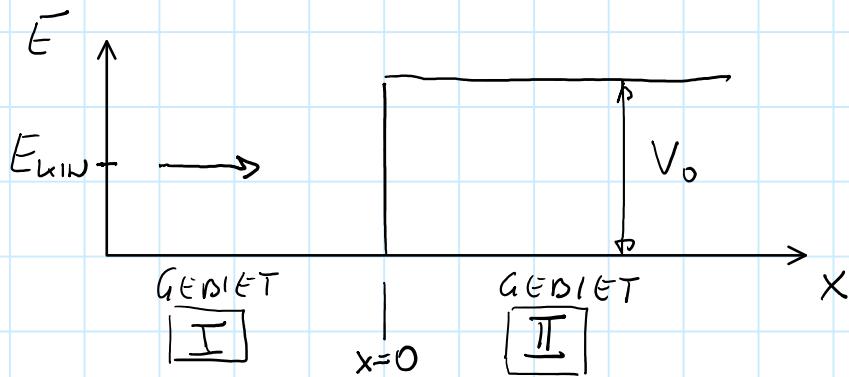
VON  $\psi(x, t)$  IN DIE SCHRODINGER GLG.

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

DIFFERENTIAL GLEICHUNG ZWEITER ORDNUNG

FALL ①:  $E_{\text{kin}} < V_0$

KLASSISCH WIRD DAS TEILCHEN "REFLEKTiert".



BEREICH I

$$E \psi_I(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_I(x) \quad \text{MIT } E = E_{\text{kin}}^{(I)}$$

KENNEN (SG):  $\psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

CHECK: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_I(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ A (-k^2) e^{ikx} + B (-k^2) e^{-ikx} \right\}$$

$$= +\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \underbrace{E}_{(I)} \psi_I(x) = \hbar \omega_{AB} \psi_I(x) = E \psi_I(x) \quad \checkmark$$

$\subseteq_{KIN}$

## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe

$$\Psi_{\underline{\text{II}}} (x, t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} \cdot t} \phi(x) = \underbrace{A_\ell e^{i(kx - \omega_{\text{dB}} t)}} + \underbrace{B_\ell e^{i(-kx - \omega_{\text{dB}} t)}}$$

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

DE BROGLIE WELLE, DIE SICH IN x-RICHTUNG AUSBREITET

BREITET SICH IN (-x)-RICHTUNG AUS.

BEREICH  $\underline{\text{II}}$ :

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

ALGEMEINE LSG:  $\phi_{\underline{\text{II}}}(x) = C e^{-\lambda x} + D e^{\lambda x}$

$$\text{MIT } \lambda^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

FÜR DEN FALL  $V_0 > E$  IST  $\lambda$  REELL, UND KOEFFIZIENT  $D=0$  MACHT  $\int_{\underline{\text{II}}} |\phi|^2 dx = 1$ .

BEM: FÜR  $V_0 > 0 \rightarrow \lambda$  IMAGINÄR, WIE IN BEREICH  $\underline{\text{I}}$  BESPROCHEN

## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe

DIE SPEZIELLE LÖSUNG DES PROBLEMS FOLGT AUS  
RANDBEDINGUNG BEI  $x=0$ :

$$\Psi_I(x=0, t) = \Psi_{II}(x=0, t)$$

- 1) DIE ZEITLICHE ENTWICKLUNG IST FÜR BEIDE BEREICHE GLEICH, WEIL ENERGIE-EIGENZUSTAND ZUR GLEICHEN ENERGIE, ROTIEREN GLEICH SCHNELL IN DER KOMPLEXEN ZAHLENBENE.
- 2) FÜR DIE RÄUMLICHE WELLENFUNKTION MUSS GELTEN:

a)  $\phi_I(x=0) = \phi_{II}(x=0)$   $\hat{=}$  WAHRSCHEINLICHKEIT MUSS EINDEUTIG SEIN

b)  $\frac{d\phi_I}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\phi_{II}}{dx} \Big|_{x=0}$   $\hat{=}$  IMPULS  $(-ih\frac{\partial}{\partial x})$  MUSS EINDEUTIG SEIN

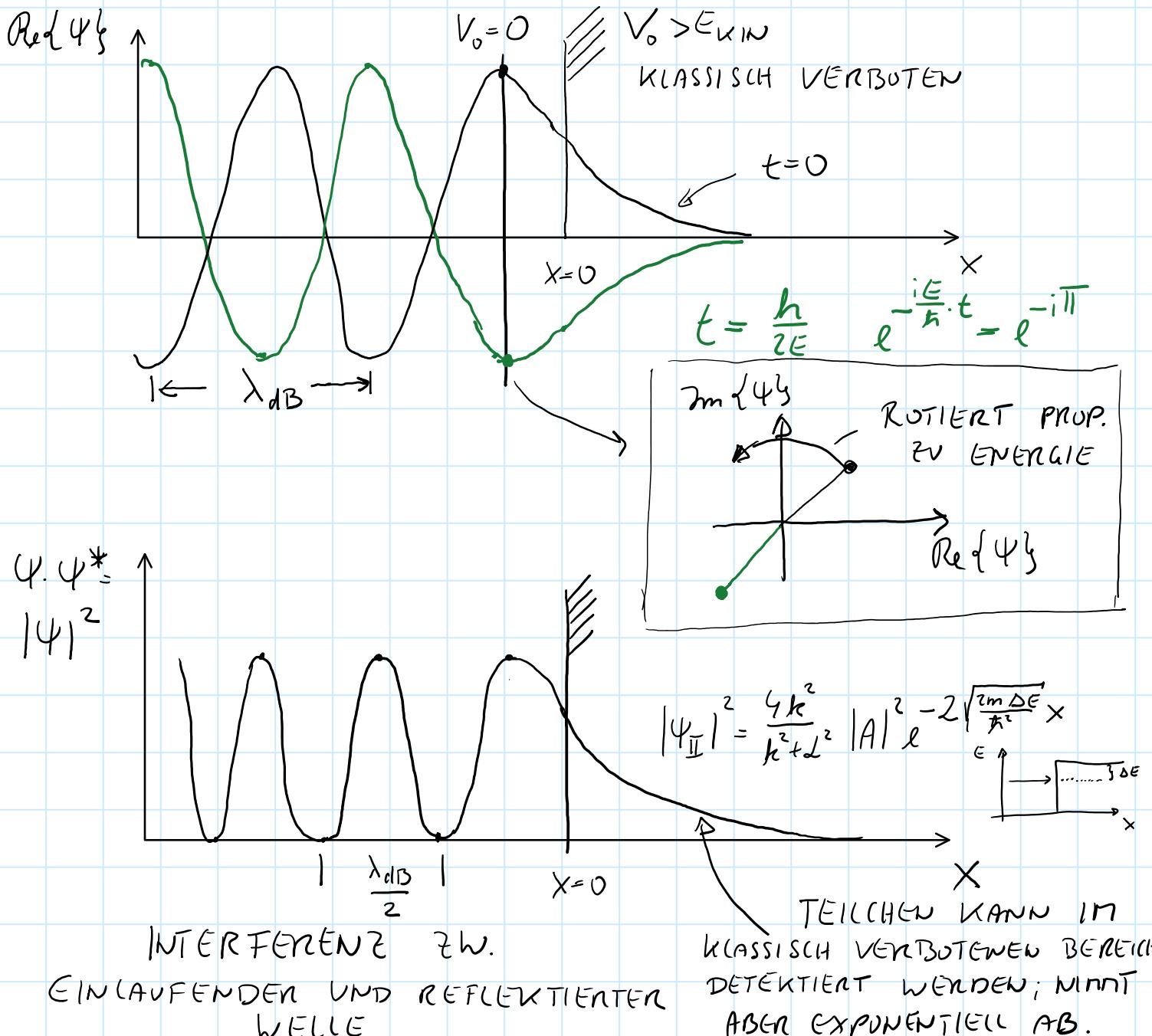
AUS: a)  $\Rightarrow A + B = C$       b)  $\Rightarrow Aik - Bik = -C\alpha$       }  $\left. \begin{array}{l} B = A \frac{ih + \alpha}{ik - \alpha} \\ C = A \frac{2ik}{ik - \alpha} \end{array} \right\}$

## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe

$$\Rightarrow \Psi_I(x, t) = e^{-i \frac{E_{KIN}^{(I)}}{\hbar} t} \frac{2i\hbar}{ik - \omega} A (\cos(kx) - \frac{\omega}{k} \sin(kx))$$

$$\Psi_{II}(x, t) = e^{-i \frac{E_{KIN}^{(II)}}{\hbar} t} \frac{2i\hbar}{ik - \omega} A e^{-\omega x}$$

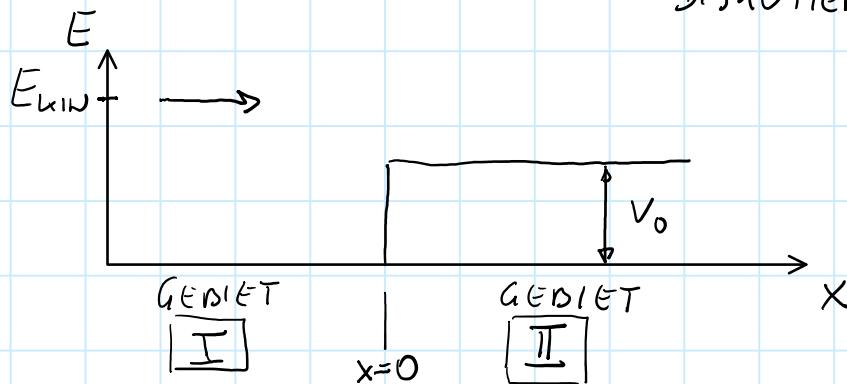
Mit  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m E_{KIN}^{(I)}}$     $\omega = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_{KIN}^{(I)})}$



## 4.1 Streuung von freien Teilchen an einer Potentialstufe

FALL 2 :  $E_{\text{KIN}} > V_0$

FALL  $E_{\text{KIN}} \gg V$  WURDE IN  
ABSCHNITT 2.7. INTERFEROMETER  
DISKUTIERT



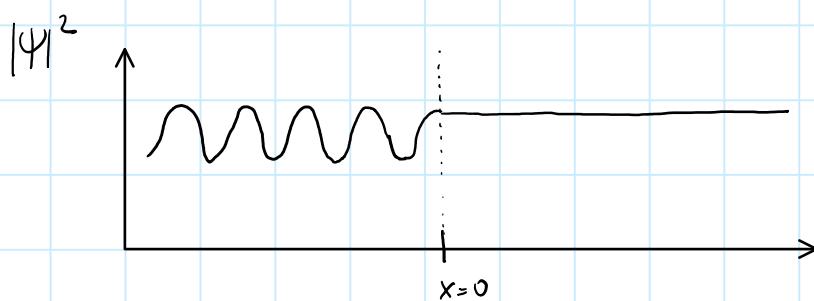
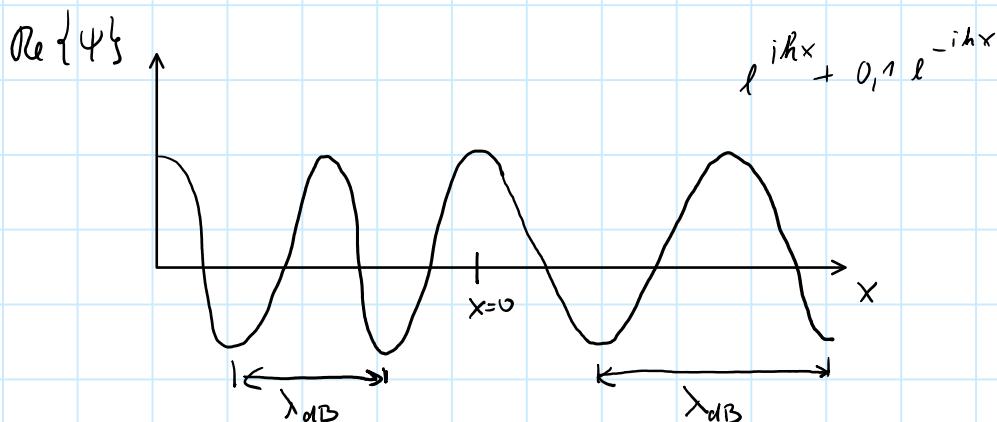
ANALOGE VORGEHENSWEISE ; IM BEREICH |II| FINDET  
MAN PROPAGIERENDE LÖSUNGEN  $\hat{=}$  DE BROGLIE  
WELLEN :

$$\phi_{\text{II}}(x) = C e^{i k_2 x} \quad \text{MIT} \quad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V_0$$

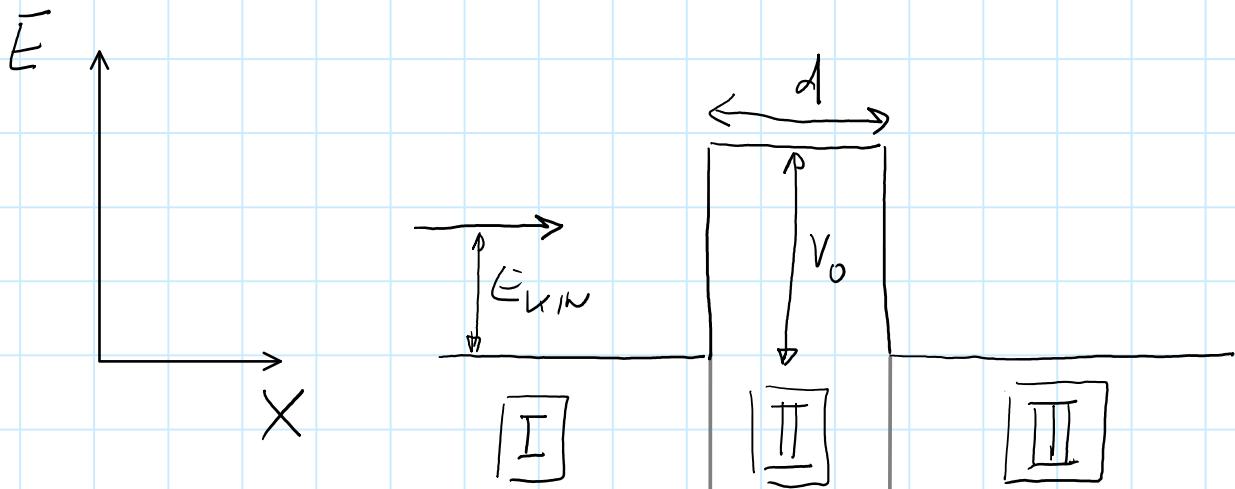
$k_2$  REEL

RANDBEDINGUNG BEI  $x=0$  :

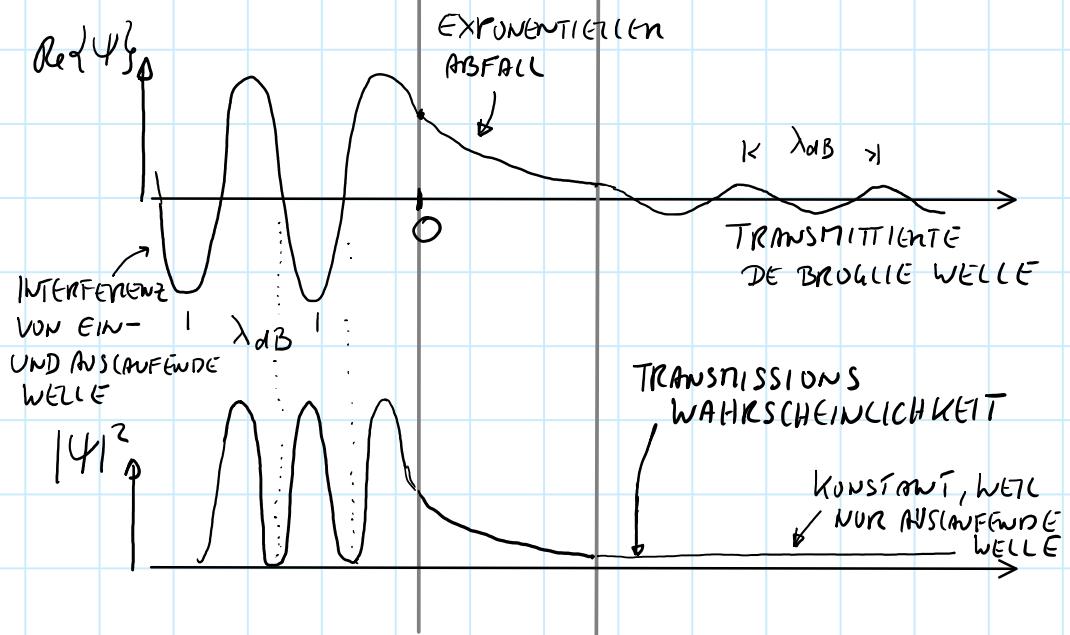
$$B = \frac{k - k_2}{k + k_2} \quad C = \frac{2k}{k + k_2} \cdot A$$



## 4.2 Tunneleffekt durch eine Potentialbarriere



- LÖSUNG:
- ANSATZEN WIE VORHER
  - 4 RANDBEDINGUNGEN



II

$$|\Psi_{\text{II}}|^2 = \frac{4k^2}{h^2 + \omega^2} |\Psi_{\text{II}}(0)|^2 e^{-2\omega x} \quad \hbar\omega = \sqrt{2m(V_0 - E_{\text{kin}})}$$

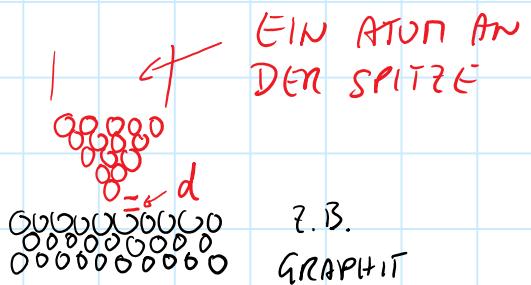
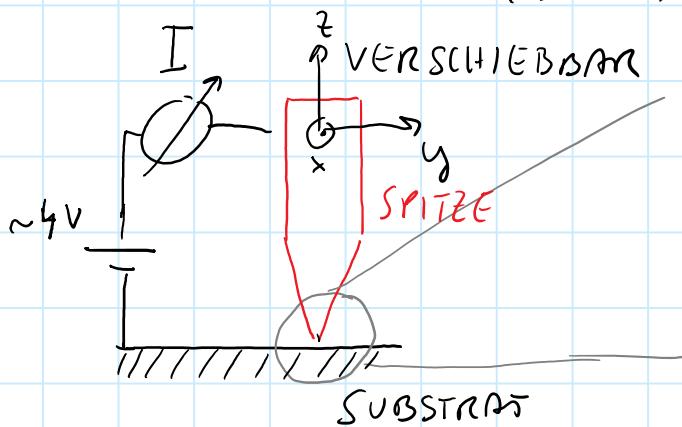
TRANSMISSIONSWAHRSCHENLICHKEIT:

$$T = \frac{|\Psi_{\text{II}}(d)|^2}{|\Psi_{\text{II}}(0)|^2} \propto e^{-2\omega d}$$

EXponentiell  
Empfindlich auf  
Änderungen von  
BARRIERENBREITE d

## 4.2 Tunneleffekt durch eine Potentialbarriere

ANWENDUNG : SCANNING TUNNELING MICROSCOPE (STM) - RASTERTUNNELMIKROSKOP



ELEKTRONEN KÖNNEN ZUR SPITZE TUNNELN  $\Rightarrow$  STROM  $\sim 1 \text{nA}$

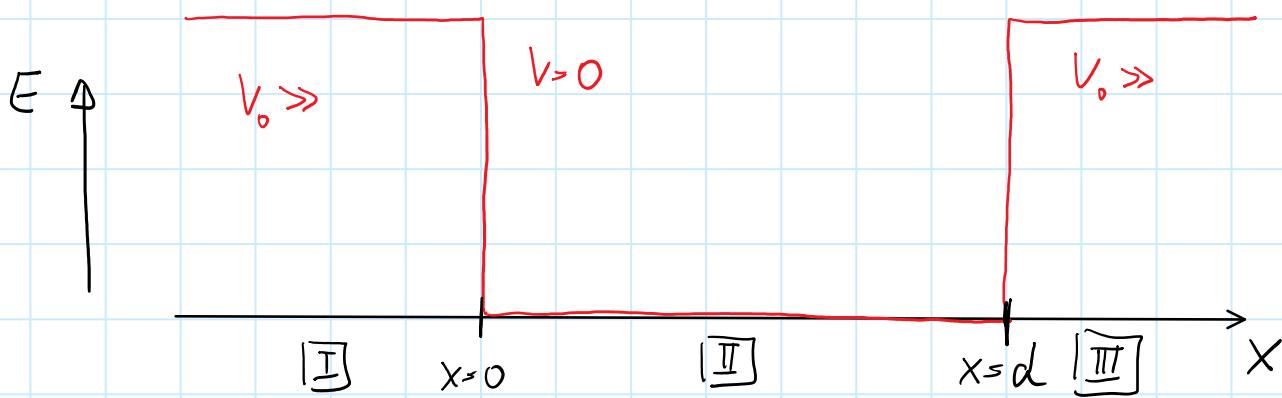
$$I \propto T \propto e^{-\frac{2\omega d}{kT}} \quad \omega \sim 10^{10} \frac{1}{\text{m}}$$

$$\begin{aligned} d &= 0,1 \text{ nm} \\ d &\leq 1 \text{ nm} \end{aligned}$$

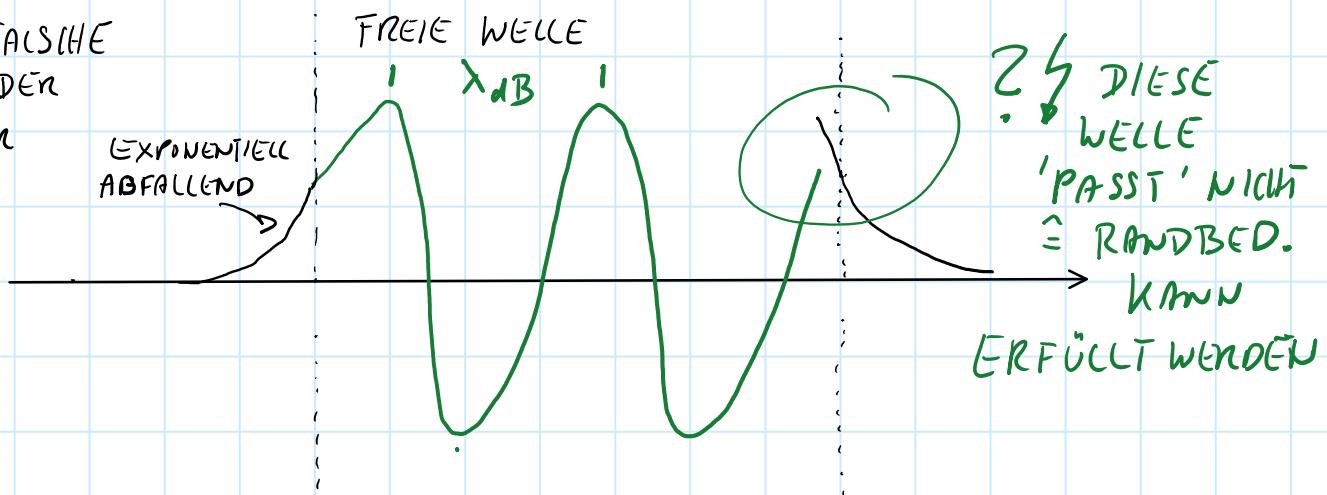
$$\begin{aligned} T &\sim 0,13 \\ T &\sim 2 \cdot 10^{-9} \end{aligned} \quad \left. \right\}$$

EXTREM ENPFINDLICH AUF  
 $d \Rightarrow$  ATOMARE AUFLÖSUNG

## 4.3 Kasten-Potential



RATEN FÄLSCHL  
LÖSUNG DER  
SCHRÖDINGER  
GLEICHUNG



EINE  
MÖGLICHE LÖSUNG  
DER SCHRÖDINGER GLEICHUNG



LIMES  $V_0 \rightarrow \infty \Rightarrow$  LÖSUNG IN  $\text{I} + \text{III}$   $e^{-\alpha x} \rightarrow 0$

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

SUCHEN ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE

$$\psi_E(x, t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \phi(x) \quad \text{MIT} \quad \phi(0) = \phi(d) = 0 \quad \text{UND} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = E \phi(x)$$

## 4.3 Kasten-Potential

$$\text{Lsg: } \phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{mit a) } \phi(0) = A + B = 0 \rightarrow A = -B$$

$$\text{b) } \phi(a) = A e^{ikad} + B e^{-ikad} = 0$$

$$\xrightarrow{\text{mit a)}} A(e^{ikad} - e^{-ikad}) = 2Ai \sin(kad) = 0$$

$k$  KANN NUR GANZ  
BESTINNTE/DISKRETE  
WERTE ANNEHmen  
 $kd = n\pi$   $n = \underbrace{1, 2, 3, \dots}_{\text{QUANTENZAHLEN}}$

LÖSUNG FÜR ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE IN  
ORTSDARSTELLUNG

$$\left\{ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) \quad \text{MIT ENERGIE} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \cdot n^2 \right\}$$

IN DIRAC SCHREIBWEISE:

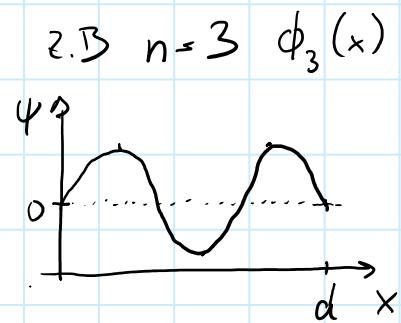
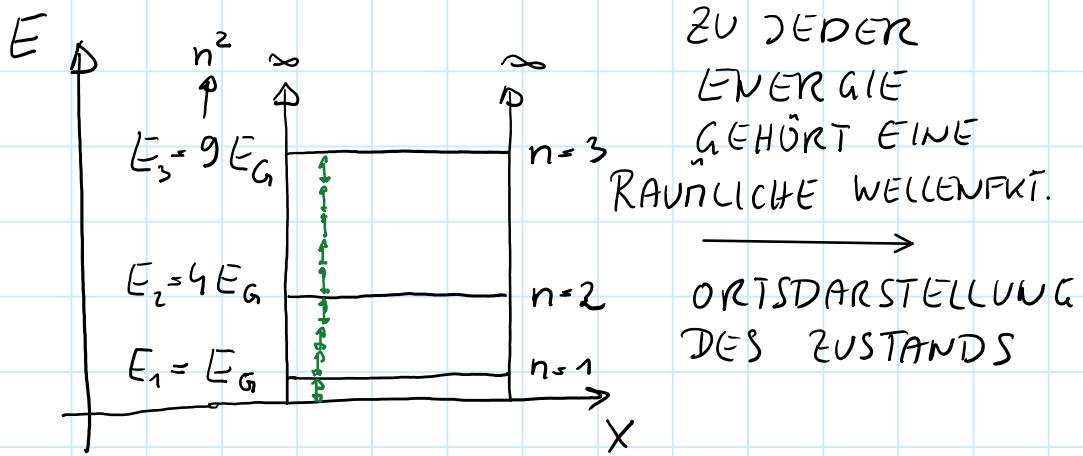
$$\hat{H} |\Psi_E\rangle = E |\Psi_E\rangle \rightarrow |\Psi_E\rangle = |n\rangle \quad E_n = \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2}}_{\substack{n=1,2,3,\dots \\ \text{ZAHL FÜR} \\ \text{SYSTEM GEZOGEN}}} \cdot n^2$$

$E_G$

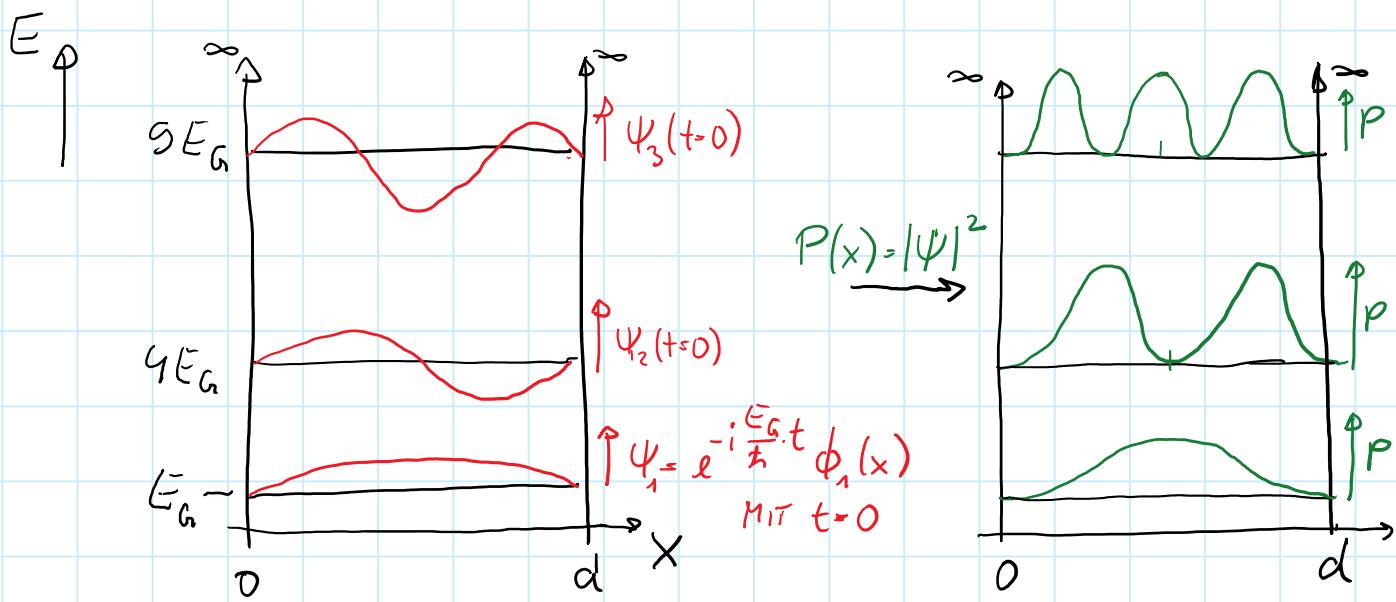
$$\hat{H} |n\rangle = E_G \cdot n^2 |n\rangle$$

FÜR ENERGETISCH NIEDRIGSTEN ZUSTAND =  
GRUNDZUSTAND ERHÄLT MAN  $E = E_g$

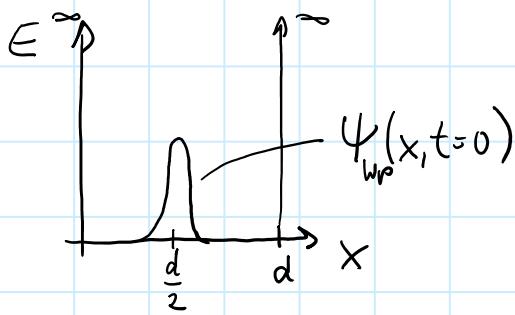
## 4.3 Kasten-Potential



TYPISCHE DARSTELLUNG:



VORHERSAGE FÜR EIN TEILCHEN ANFÄNGLICH LOKALISIERT:



$$\text{SPÄTER? } |\Psi_{wp}\rangle_t = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

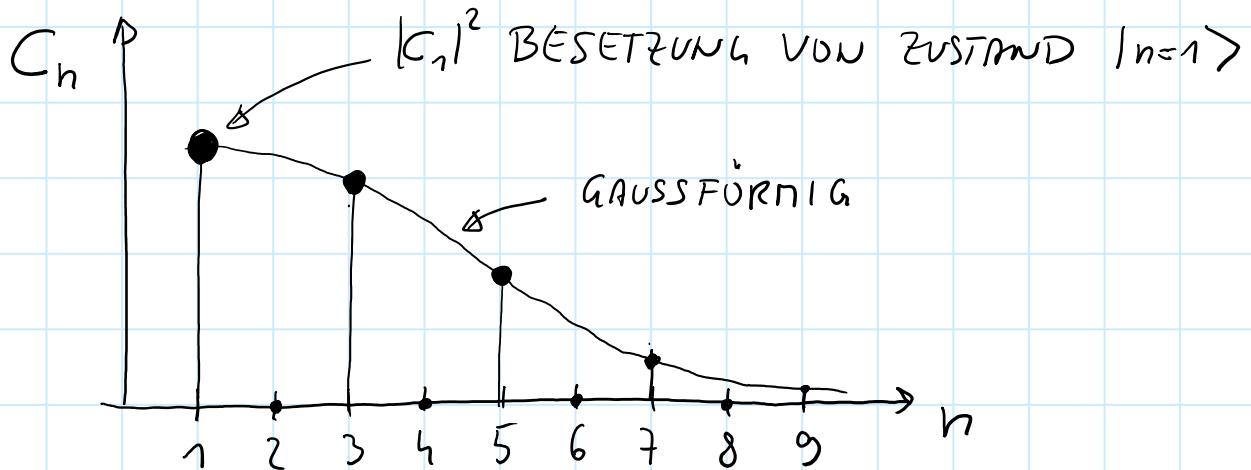
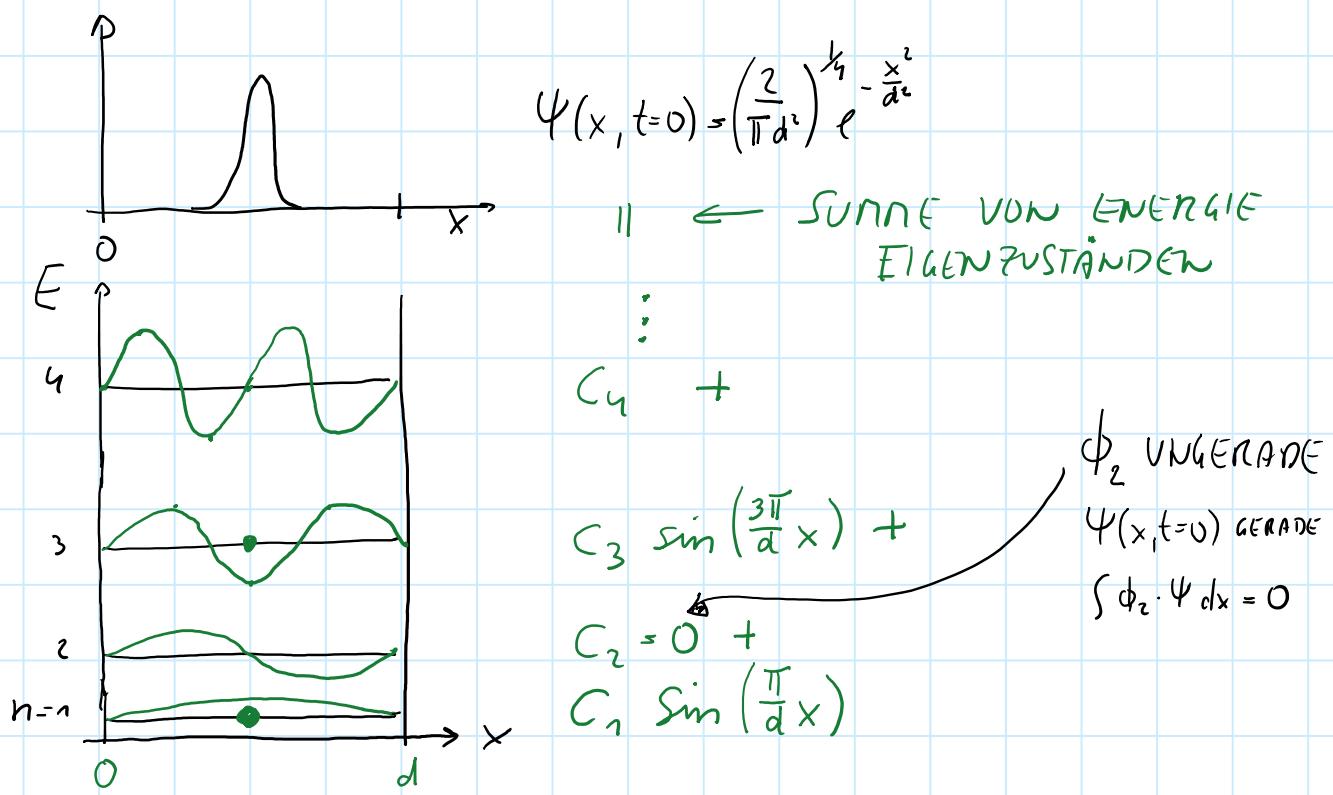
→

FINDEN  $c_n$ :  $\langle n | \Psi_{wp} \rangle = c_n$

ORTSDARSTELLUNG

$\sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right)$

## 4.3 Kasten-Potential



⇒ ANFANGSDYNAMIK WIE FREIES WELLENPAKET  $\Rightarrow$  REFLEXIONEN AN RAND  $\Rightarrow$  LANGE ZEITEN "REVIVAL" = DER ANFANGSZUSTAND WIRD WIEDER ERREICHT ;

## 4.4 Revival in der Quantenmechanik

DIE QUANTENDYNAMIK IN SYSTEMEN MIT DISKREten ENERGIEN ZEIGT DAS PHÄNOMEN DES "REPHASIEREN" D.H. DIE PHASEN-UNTERSCHIEDE ZWISCHEN ALLEN ENERGIE-EIGENZUSTÄNDEN SIND  $n \cdot 2\pi$  MIT  $n \in \mathbb{Z}$ .

IM FALL DES WELLENPAKETS IN KASTEN-POTENTIAL:

$$\text{mit } n \dots \text{UNGENADE}, \text{ REVIVAL WENN } \frac{(E_n - E_m) \cdot t}{\hbar} = m \cdot 2\pi \quad \text{GRUNDE ZAHL}$$

$$\Rightarrow 1. \text{ REVIVAL: } \frac{E_3 - E_1}{\hbar} \cdot T_{\text{REVIVAL}} = 2\pi \rightarrow \frac{E_G}{\hbar} (3^2 - 1^2) T_{\text{REV.}} = 2\pi$$

$$\hookrightarrow T_{\text{REVIVAL}} = \frac{\hbar}{E_G} \frac{1}{(3-1)} = \frac{\hbar}{E_G} \cdot \frac{1}{8}$$

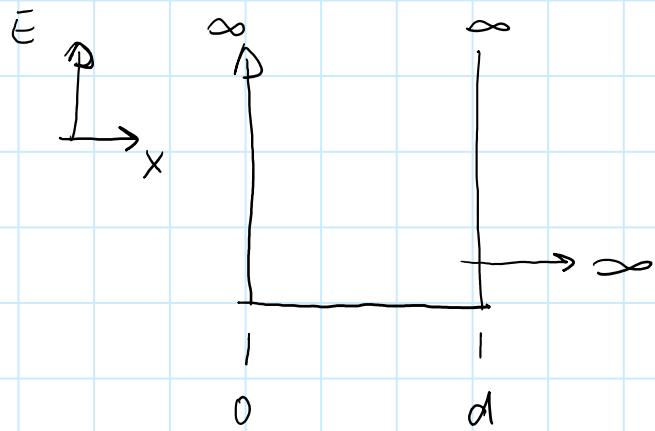
ALLGENEINE ENERGIE DIFFERENZ:

$$\Delta E = E_G (n^2 - n'^2) = E_G \underbrace{(n-n')}_{\text{GENADE}} \underbrace{(n+n')}_{\text{GENADE}}$$

$\hookrightarrow \Delta E_{\min} = E_G (3^2 - 1)$  WENN PHASENDIFFERENZ FÜR GRUND- UND 2. ANGENEGTEN ZUSTAND  $2\pi$  IST, SIND ALLE ANDEREN PHASENDIFFERENZ

EIN GERADES VIELFACHES DAVON

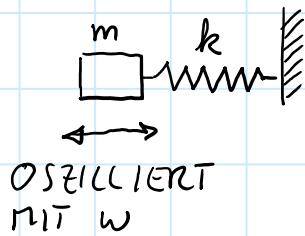
## 4.4 Revival in der Quantenmechanik



MIT  $d \rightarrow \infty$  GEHT DIE GRUNDZUSTANDSENERGIE  
 $E_G = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} \rightarrow 0$ ; DAMIT WIRD DIE 'REVIVAL' ZEIT  
 $T_{\text{Rev.}} \rightarrow \infty$  UNENDLICH LANG; DESHALB ZERFLIEßT  
 EIN WELLENPAKET IN FREIEN RAUN ( $v \rightarrow \infty$ ) FÜR  
 INNERE.

## 4.5 Harmonischer Oszillator

KLASSISCH :

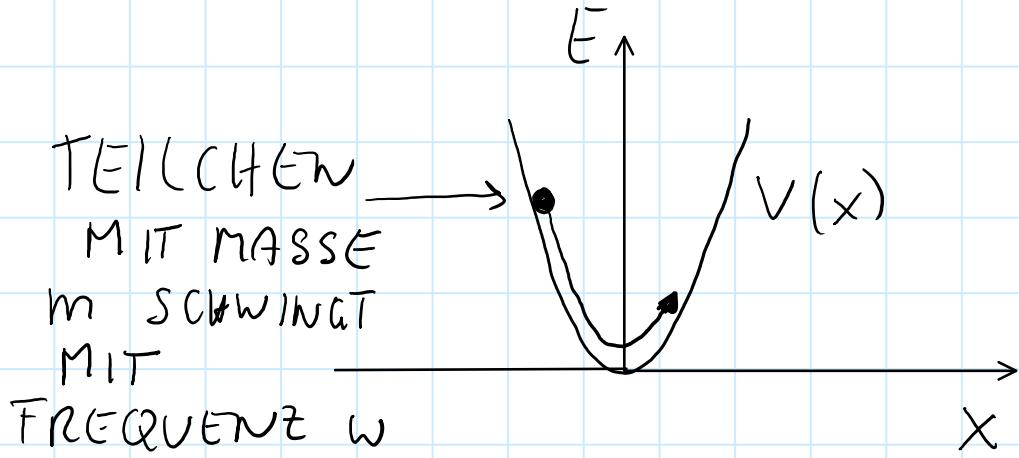


$$\left. \begin{array}{l} F = -kx \\ V = \frac{k}{2} x^2 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} x = x_0 \sin(\omega_0 t) \\ \omega_0^2 = \frac{k}{m} \end{array}$$

$\hookrightarrow$  SCHREIBEN HARMONISCHES POTENTIAL SO, DASS MAN DIE FREQUENZ ABLESEN KANN

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

HARMONISCHER OSZILLATOR



FRÖHLICHE WEIHNACHT!

QUANTENMECHANISCHE BESCHREIBUNG:  $\Psi(x, t)$

$\hookrightarrow$  SUCHEN ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE:  $\Psi_\epsilon(x, t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \phi(x)$

SCHRÖDINGER GLEICHUNG:

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

## 4.5 Harmonischer Oszillator

SUCHE LÖSUNG DER FORM:

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

POLYNOME HABEN DIE FORM:

$$\tilde{H}_0(x) = 1$$

$$\tilde{H}_1(x) = 2\sqrt{b}x$$

$$\tilde{H}_{n+1}(x) = 2\sqrt{b}x \tilde{H}_n(x) - 2n \tilde{H}_{n-1}(x)$$

WAS SIND DIE EIGENERGIEN  $\rightarrow$  EINSETZEN IN  
SCHRÖDINGER GLEICHUNG:

$$\phi_0 = N e^{-\frac{b}{2}x^2}; \quad \phi_0'' = N \{ b^2 x^2 - b \} e^{-\frac{b}{2}x^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \{ b^2 x^2 - b \} e^{-\frac{b}{2}x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 e^{-\frac{b}{2}x^2} = E_0 e^{-\frac{b}{2}x^2}$$

X-ABHÄNGIGKEIT MUSS VERSCHWINDEN,  
WEIL EINE KONSTANTE IST (HÄNGT NICHT  
VON X AB)

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} b^2 = \frac{m\omega^2}{2} \rightarrow b = \frac{m\omega}{\hbar} \left[ \frac{1}{m^2} \right]$$

$$\phi_0 = N e^{-\frac{b}{2}x^2} = N e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x}{a_{h_0}} \right)^2}$$

CHARAKTERISTISCHE

$$a_{h_0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} [m]$$

LÄNGE ; HARMONIC OSCILLATOR LENGTH

## 4.5 Harmonischer Oszillator

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} b = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

WEITERES BEISPIEL:

$$\phi_1 = N \sqrt[2]{b} x e^{-\frac{b}{2}x^2}$$

$$\phi_1'' = 2N\sqrt{b} (-3bx + b^2x^3) e^{-\frac{b}{2}x^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} 2N\sqrt{b} \left\{ -3bx + b^2x^3 \right\} + 2N\sqrt{b} \frac{m\omega^2}{2} x^3 = E_1 2N\sqrt{b} x$$

$$x^3: \text{ Koeffizient ist Null, weil } b = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$x: + \frac{\hbar^2}{2m} 3b = E_1 = \hbar\omega \frac{3}{2} = \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\right)$$

:

N: FOLGT AUS NORNIERUNGSBEDINGUNG.

ALLGEMEINE LÖSUNG:

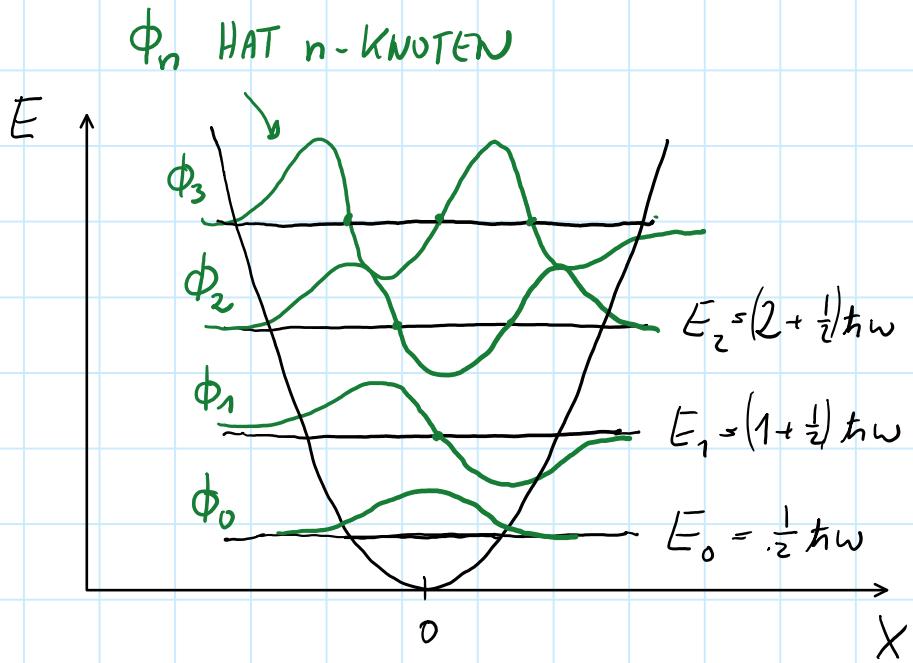
$$\phi_n = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} a_{n0}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\frac{x}{a_{n0}}\right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{a_{n0}}\right)^2}$$

$$\text{MIT } E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad a_{n0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

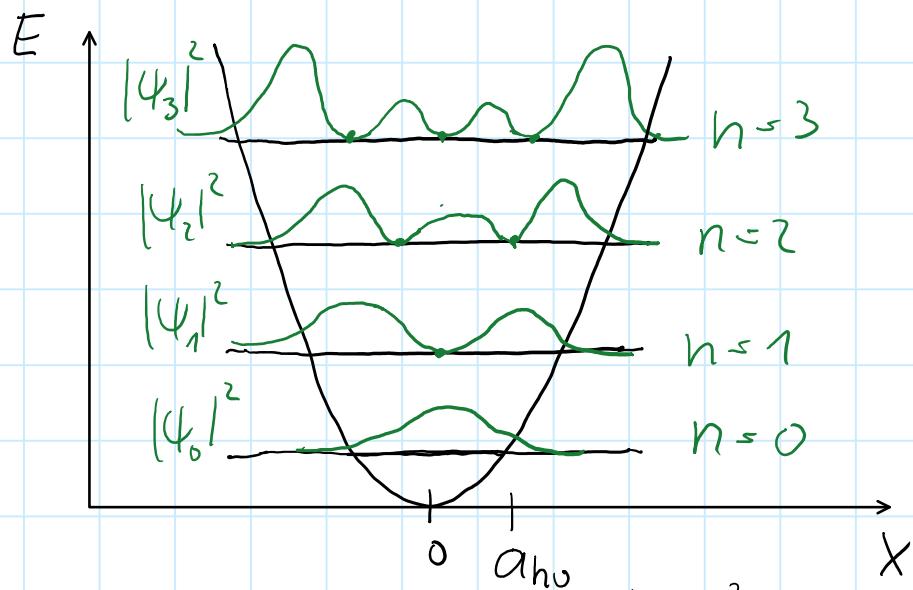
$$\text{MIT } H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = 2x \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

HERMITESCHE POLYNOME.

## 4.5 Harmonischer Oszillator



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



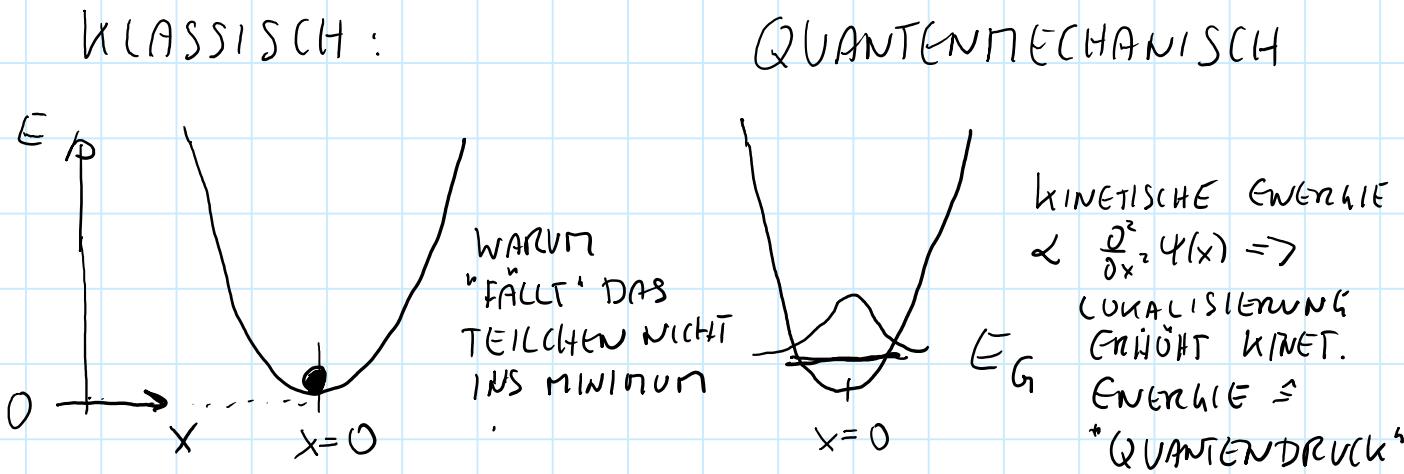
$n \hat{=} \text{QUANTENZAHL}$

$$\hat{H}_{\text{Harzn. osz}} |n\rangle - \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) |n\rangle$$

$$|\Psi_0|^2 = e^{-\left(\frac{x}{a_{h\nu}}\right)^2}$$

## 4.5 Harmonischer Oszillator

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



GRUNDZUSTAND:

QM ZUSTAND KANN NICHT BELIEBIG RÄUMLICH LOKALISIERT SEIN. HEISENBERG UNSCHÄRFE GIBT  $\text{VAR}(x) \cdot \text{VAR}(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}$ , KINETISCHE ENERGIE STEIGT MIT LOKALISIERUNG.

ALLGEMEINER GRUNDZUSTAND ERGIBT SICH AUS DEM 'GLEICHTGEWICHT' ZWISCHEN POTENTIELLEN ENERGIE UND KINETISCHER ENERGIE (NENNT MAN AUCH QUANTENDRUCK)

DER GRUNDZUSTAND DES HARMONISCHEN OSZILLATORS ERFÜLLT MINIMALE HEISENBERG UNSCHÄRFE.

## 4.5 Harmonischer Oszillator

$$\text{HARM. OSZILLATOR: } \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

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

$$\text{VAR}(x) = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \underbrace{\langle \hat{x}^2 \rangle}_{\substack{\text{HARM.} \\ \text{OSZILL.} \\ \text{SYMM. IN } x, p}} ; \text{ VAR}(p) = \langle \hat{p}^2 \rangle$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \text{VAR}(p) + \frac{m\omega^2}{2} \text{VAR}(x) = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{\text{Var}(x)} + \frac{m\omega^2}{2} \text{Var}(x)$$

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

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

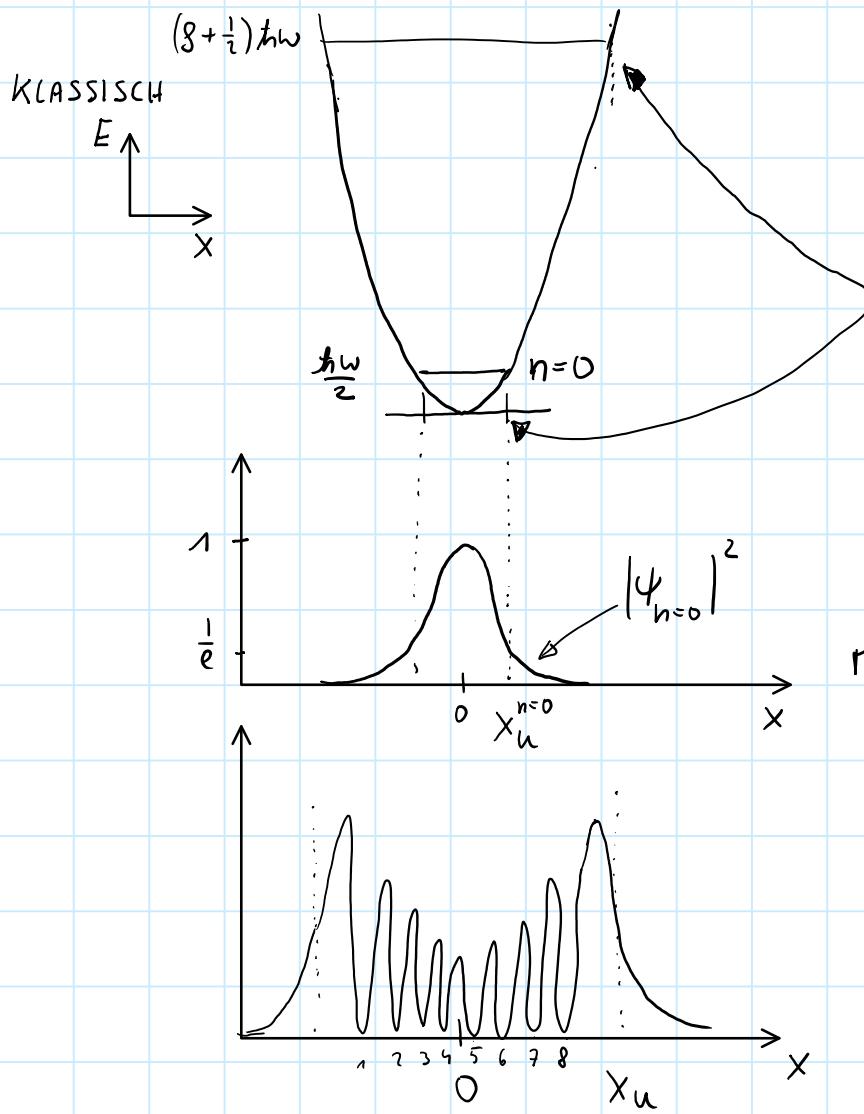
$$\text{SUCHEN MINIMUM} \quad \frac{d \langle \hat{H} \rangle}{d V_x} = - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{V_x^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0$$

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

$$\Rightarrow \langle \hat{H} \rangle_{\text{min}} = \hbar\omega \left( \frac{1}{q} + \frac{1}{q} \right) = \frac{1}{2} \cdot \hbar\omega \checkmark$$

GRUNDZUSTAND IST EIN ZUSTAND MINIMALER HEISENBERG UNTERSCHÄRFE;

## 4.6 Klassische Korrespondenz



KLASSISCHER UNKEHRPUNKT  $x_u$

$$E = \frac{m\omega^2}{2} x_u^2 \rightarrow x_u = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{1}{\omega}$$

$$\text{FÜR } n=0 \quad E = \frac{\hbar\omega}{2} \quad x_u = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = a_{ho}$$

$$\text{MIT } \Psi_{n=0} = e^{-\frac{i\omega}{2}t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a_{ho}}\right)^2}$$

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

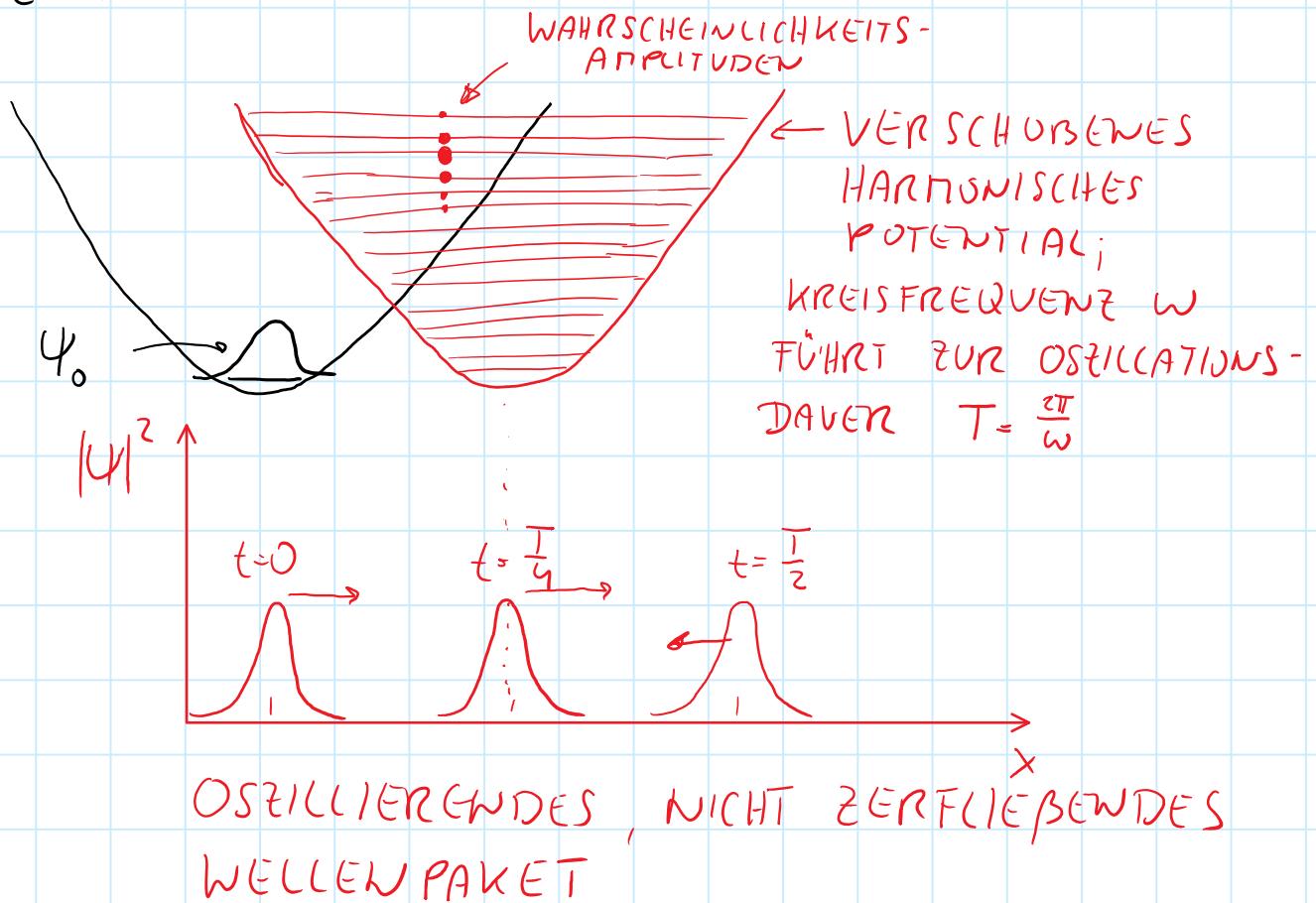
SIEHE MATLAB SCRIPT

DIE QM WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTE NÄHERT SICH DER KLASSISCHEN W-DICHTE FÜR  $n \gg 1$ . BESKREIBT ABEN NICHT EIN OSZILLIERENDES TEILCHEN. ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE SIND STATIONÄR d.h. ZEITENTWICKLUNG  $\Psi_n e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t}$  ABEN WAHRSCHEINLICHKEIT  $|\Psi|^2$  IST NICHT ZEITABHÄNGIG

DYNAKIK IN QM IMPLIZIERT SUPERPOSITION VON ENERGIE-EIGENZUSTÄNDEN.

## 4.6 Klassische Korrespondenz

WAS ENTSPRICHT EINEM KLASSTISCH OSZILLIERENDEN TEILCHEN?



QUADRATISCHES POTENTIAL IN  $x$  KOMPENSIERT QUADRATISCHE PHASENENTWICKLUNG IN  $x$  DES EXPANDIERENDEN WELLENPAKETS  $\Rightarrow$  PAKET ZERFLIEßT NICHT UND OSZILLIERT MIT DEN KREISFREQUENZ  $\omega$ .

DIESES WELLENPAKET NENNT MAN AUCH 'VERSCHOBENES VAKUUM ( $n=0$ )' BEZU KÖHÄRENTEN ZUSTAND.  $\lambda$

WAHRSCHEINLICHKEIT

$$P(n) = |\langle n | \lambda \rangle|^2 = \frac{|\lambda|^2}{n!} \frac{\lambda^{2n}}{l^l} - \underbrace{|\lambda|^2}_{\text{HARMONISCHEN OSZILLATOR ZUSTAND}} \quad \lambda^2 = \frac{x_{\text{VERSCHIEBUNG}}^2}{\omega}$$

$\uparrow$

HARMONISCHEN OSZILLATOR ZUSTAND;

## 5.1 Ausgestrahltes Licht einer Wasserstoffgasentladung

SIEHE PPT-FILE.

DISKUSSION DES GITTERSPEKTRUMS

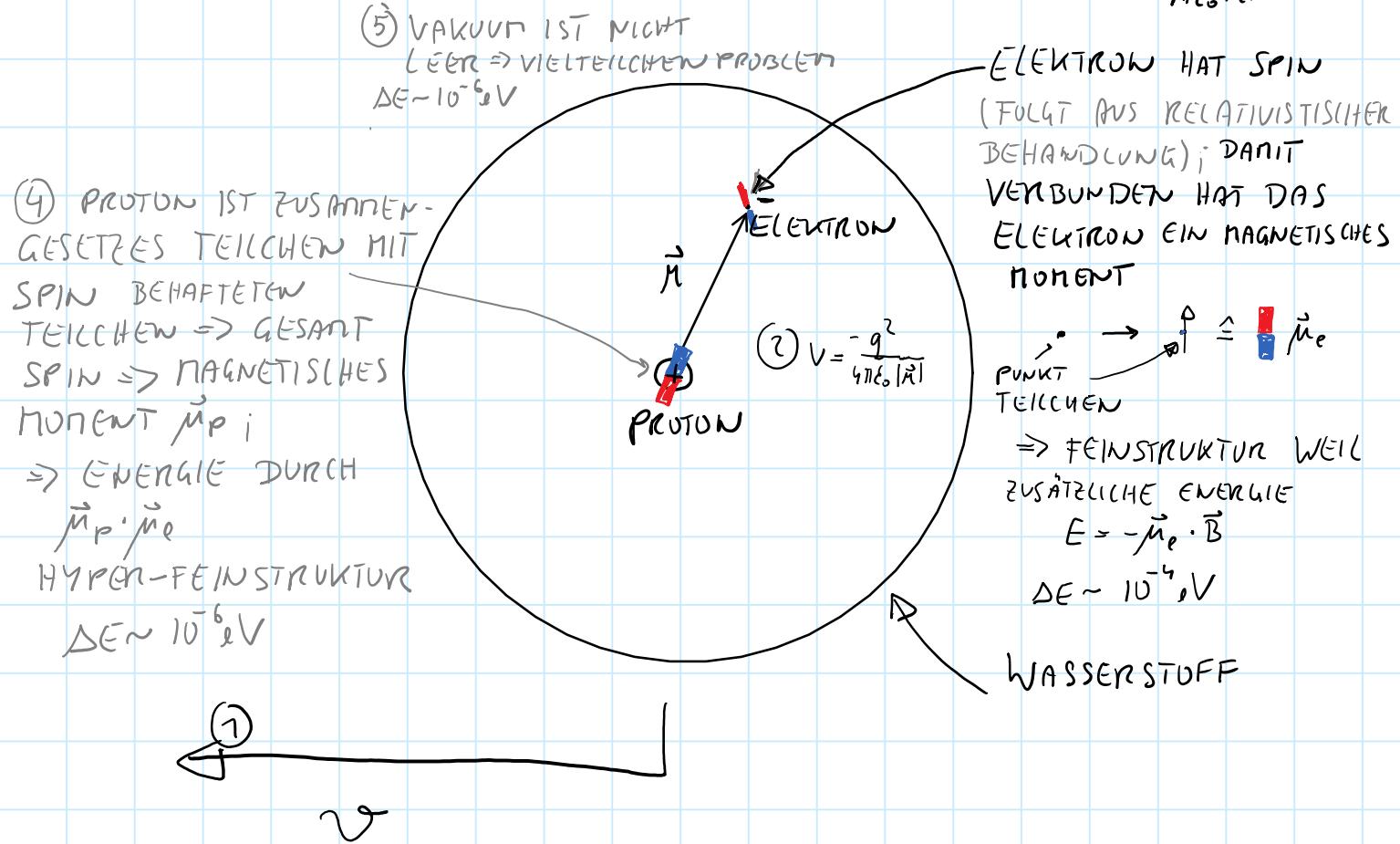
DISKUSSION DER DISKREten "LINIEN"

ZEIGEN DEN FEINSTRUktUR

ZEIGEN DEN HYPERFEINSTRUktUR

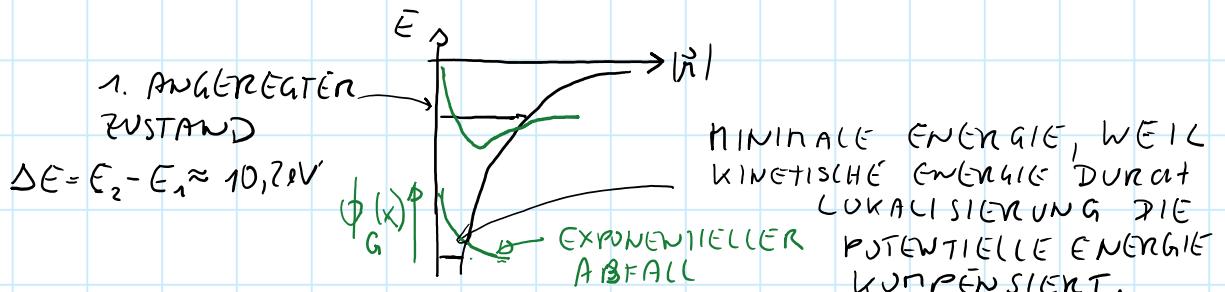
## 5.2 Das Wasserstoff Atom ist mehr als ein positiv + negativ geladenes Teilchen

MAN KÜNNE MEINEN EIN EINFACHES ZWEI - KÖRPER PROBLEM MIT COULOMBS - ANZEIHLUNG  $\hat{=} V(\vec{x}) \sim \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$

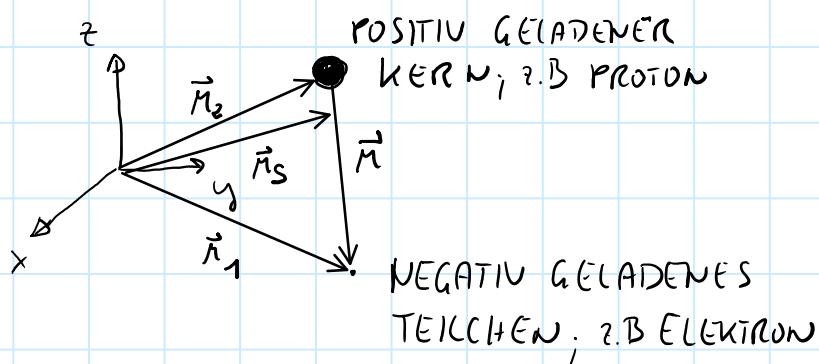


ABER (1) ATOM BEWEGT SICH; LSG: EINFÜHREN VON SCHWERPUNKTSBEWEGUNG ( $\lambda_{\text{dB}}$  WIE BISITEN) UND RELATIVBEWEGUNG (ANALOG WIE IN MECHANIK)  $\Rightarrow m \rightarrow m_{\text{RED}} =$

(2) SCHRÖDINGER GLEICHUNG; 3D UND  $\frac{1}{n}$  POTENTIAL



## 5.3 Wasserstoff - einfaches Modell



WASSERSTOFF: KERN  $\hat{=} \text{PROTON}$   
 $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$   
 $= 938 \text{ MeV}$   
 $= 1 \text{ AMU} \left( \begin{array}{l} \text{ATOMIC} \\ \text{MASS} \\ \text{UNIT} \end{array} \right)$

$\vec{r}_2$ : ORT DES POSITIVEN KERNS  
 $\vec{r}_1$ : ORT DES NEGATIVEN TEILCHENS  
 $\vec{r}_S$ : ORT DES SCHWERPUNKTS

NEGATIV GELADENES TEILCHEN  $\hat{=} \text{ELEKTRON}$   
 $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$   
 $= 510 \text{ keV}$   
 $= \frac{1}{1835} \text{ AMU}$

SUCHEN ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE

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

$$\hat{H} = \hat{E}_{\text{KIN}} + \hat{E}_{\text{ROT}} = \underbrace{\frac{\vec{p}_2^2}{2m_K}}_{\text{KERN}} + \underbrace{\frac{\vec{p}_1^2}{2m_e}}_{\text{ELEKTRON}} - \underbrace{\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|}}_{\text{WECHSELWIRKUNG}}$$

IN ORTSDARSTELLUNG

$$-\frac{\hbar^2}{2m_K} \Delta_2 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_1 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_{\text{GES}} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

## 5.3 Wasserstoff - einfaches Modell

ZU FRAGE ①

VEREINFACHUNG DURCH TRENNUNG VON SCHWERPUNKTS ( $\vec{r}_s$ ) UND RELATIVBEWEGUNG ( $\vec{r}$ )

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

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) \quad \text{MIT} \quad \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_s, x) = \frac{\partial \Psi}{\partial x_s} \frac{\partial x_s}{\partial x_1} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1}$$

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

ANALOG:  $y_1, z_1$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_s \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) + \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \right\} \Psi(\vec{r}_s, \vec{r}) = E_{\text{ges}} \Psi(\vec{r}_s, \vec{r})$$

$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\text{GESAMT- MASSE}}$        $\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\text{SCHWERPUNKT- KOORDINÄTEN}}$        $\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\text{REDUZIERTE MASSE}}$

$$\mu = \frac{m_K \cdot m_e}{m_K + m_e}$$

KINETISCHE ENERGIE  
DES SCHWERPUNKTS

$\hookrightarrow$  ATOM ALS GANZES

VERhält SICH WIE  
EINE DE-BROGLIE-WELLE

z.B. DOPPELSPALT, ATOM-,  
MOLEKÜLINTERFEROMETER

$\hat{=}$  EXTERNE DYNAMIK

KINETISCHE UND  
POTENTIELLE ENERGIE  
DER RELATIVBEWEGUNG

$\hat{=}$  INTERNE DYNAMIK

## 5.3 Wasserstoff - einfaches Modell

LÖSE MIT SEPARATIONSANSATZ

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

$\hookrightarrow$  EXTERNE DYNAMIK  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_s \Psi_s(\vec{r}_s) = E_s \Psi_s(\vec{r}_s)$

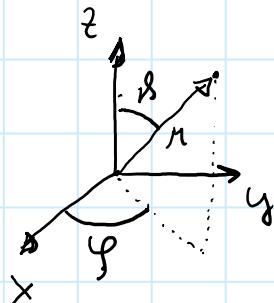
LÖSUNG: DE-BROGLIE WELLE FÜR DAS ATOM

$$\text{MIT } \lambda_s = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_s}}$$

$\hookrightarrow$  INTERNE DYNAMIK: LÖSUNG ETWAS LANGWIERIGER

ZENTRAL POTENTIAL

$\Rightarrow$  SINNVOLL KUGELKOORDINÄTEN



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{HÄNGT NUR VON } n \text{ AB}} - \frac{\hbar^2}{2\mu n^2} \underbrace{\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\}}$$

HÄNGT NUR VON  
 $\theta$  - POLARWINKEL  
 $\phi$  - AZIMUTWINKEL

$\hookrightarrow$  SEPARATIONSANSATZ:  $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) P(\theta) Q(\phi)$

3 GEWÖHNLICHE DIFF.-GLG 2. GRADES FÜR  
 $R(r), P(\theta), Q(\phi)$

### 5.3 Wasserstoff - einfaches Modell

ZUSÄTZLICHE BEDINGUNG  $\int |\Psi|^2 dV = 1$  GRENZT

DIE LÖSUNGEN DER DIFF. GLG. STARK EIN.

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

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

REDUZIERTE RYDBERG  
KONSTANTE  $\approx 13,6 \text{ eV}$

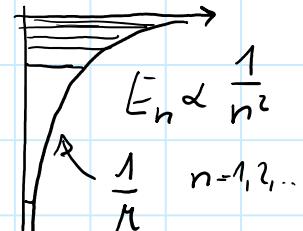
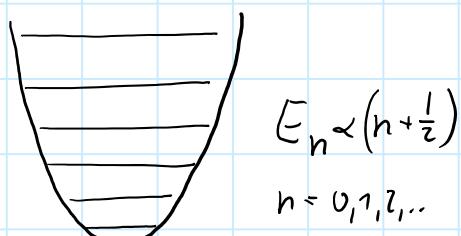
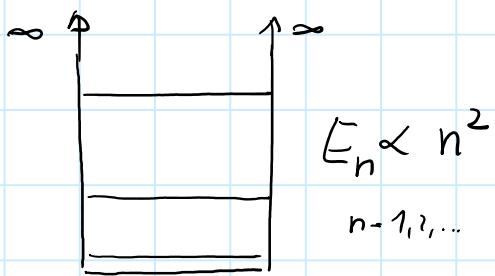
$n = 1, 2, 3, \dots$  HAUPTQUANTENZAHL

FÜR GEGEBENES  $n$  IST  $l=0, 1, 2, \dots (n-1)$

FÜR GEGEBENES  $l$  IST  $m=-l, -l+1, \dots, l-1, l$

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

WICHTIG: ENERGIE =  $-13,6 \text{ eV} - \frac{1}{n^2}$



## 5.4 Wasserstoff - radiale Wellenfunktion

### RADIALE WELLENFUNKTION:

$R_{ne}$ : SKALIGEREN RADIUS  $\beta = 2Z \frac{n}{na_B'}$

BOHR RADIUS  $a_B$   
IST MIT ELEKTRON  
MASSE DEFINIERT

$$a_B' = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{\mu e^2}$$

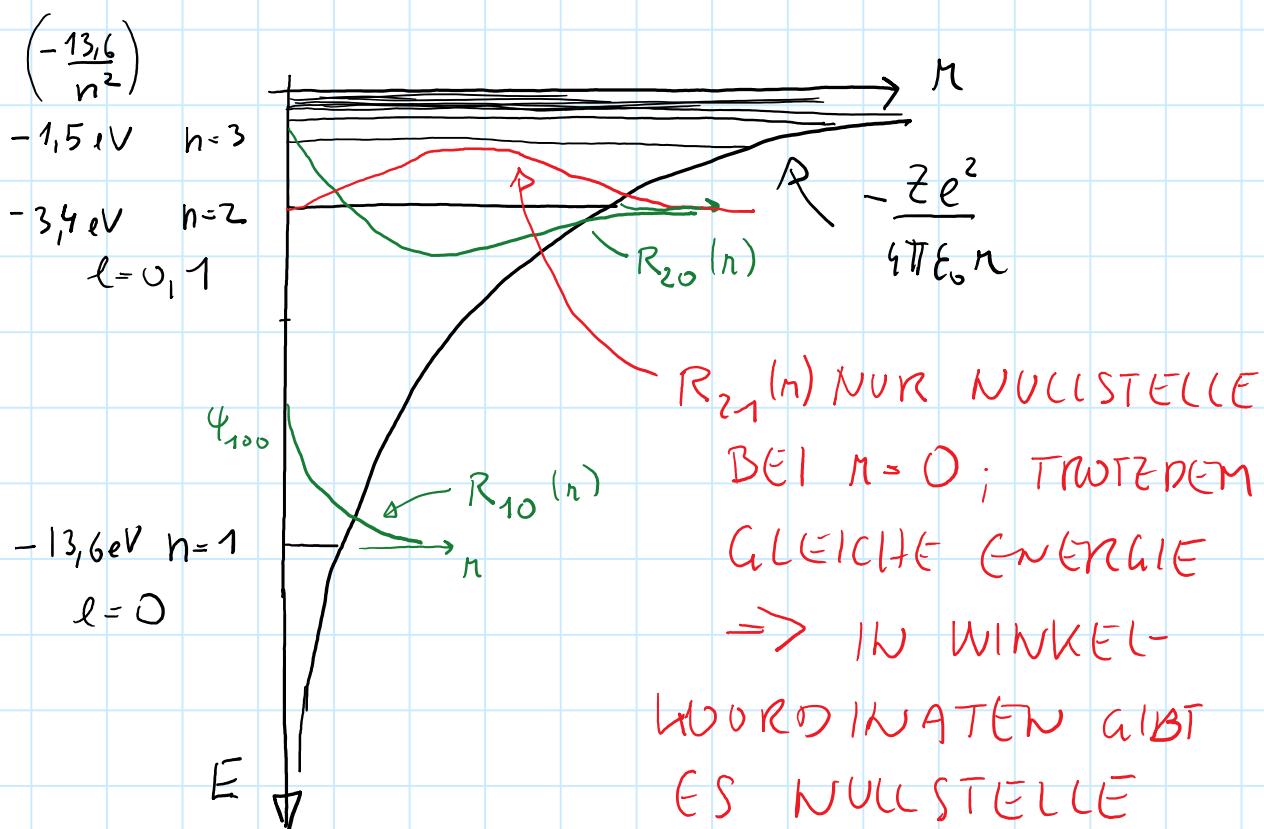
BOHR'SCHER RADIUS

$L_m^n(\beta)$  ZUORDNETE LAGRANGE POLYNOME

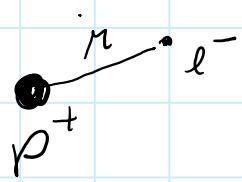
$$R_{ne}(n) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_B'}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \beta^{-\frac{3}{2}} \beta^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\beta)$$

POLYNOM

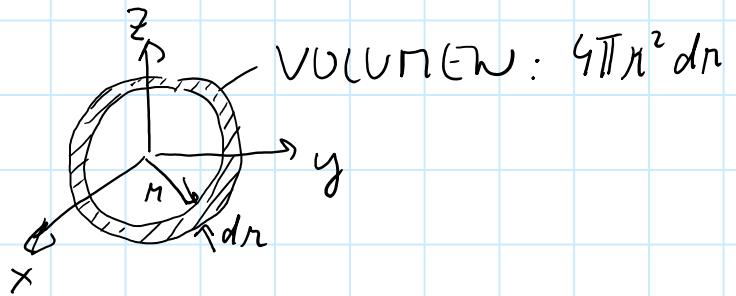
$n-l-1$  GRADES  
= ANZAHL DER  
NULLSTELLEN



## 5.4 Wasserstoff - radiale Wellenfunktion

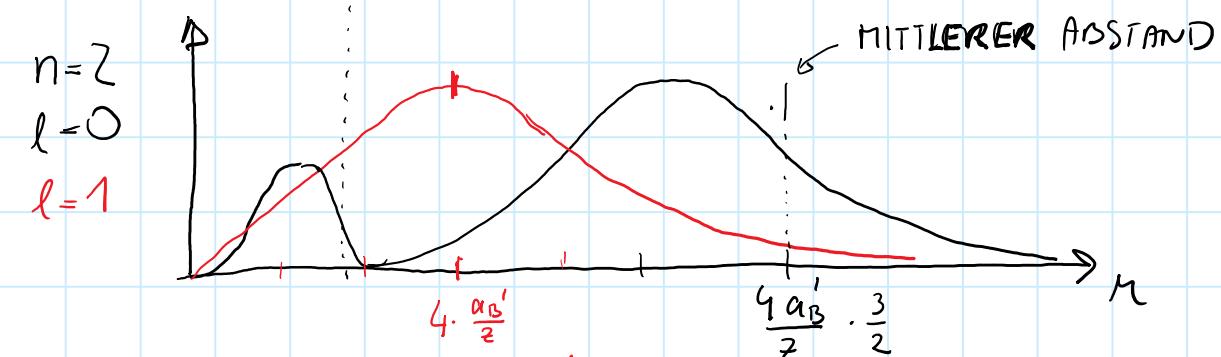
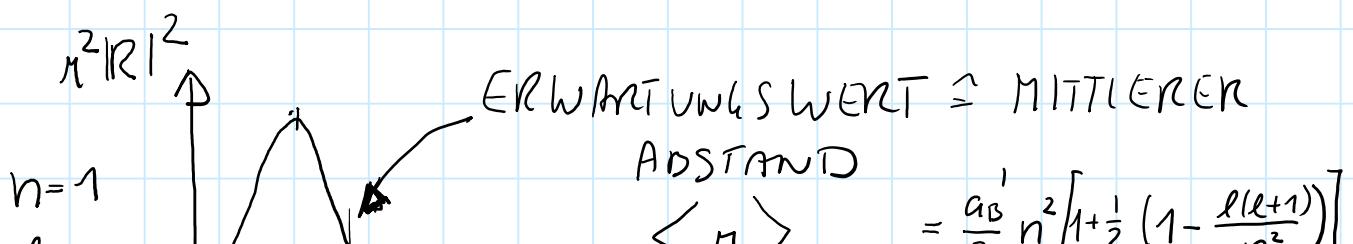


WIE GRÖSST DIE WAHRSCHEINLICHKEIT DAS ELEKTRON IM ABSTAND  $[n, n+dr]$  ZU FINDEN?



$$dP = \underbrace{|R_{n,l}(r)|^2}_{\text{SINNVOLLE GRÖSSE UM}} n^2 dr$$

SINNVOLLE GRÖSSE UM  
AUFENTHALTSWAHRSCHEINLICHKEIT  
DARZUSTELLEN



$$r_{\max} = n^2 \frac{a_B}{2}$$

(ERGIBST AUCH BOHR MODELL)

## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM Drehimpuls)

### WINKELANTEIL DER WELLENFUNKTION

$$P_e^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

$P_e^m(x)$  ... LEGENDRE-POLYNOME

KLASSISCHER DREHIMPULS :

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ z p_x - x p_z \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

QUANTENMECHANISCHE BESCHREIBUNG

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

IN ORTSDARSTELLUNG :  $\hat{x} \mapsto x \quad \hat{p}_x \mapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Z.B.  $\hat{L}_z \mapsto -i\hbar \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$   
KUGELKOORD.

$\hat{L}_z |n, l, m\rangle$  : ORTSDARSTELLUNG

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \left\{ R_{n,e}(r) P_e^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi} \right\} = \underbrace{-i\hbar(im)}_{\hbar m} R_{n,e}(r) P_e^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

$\hookrightarrow \hat{L}_z |n, l, m\rangle = m\hbar |n, l, m\rangle$  D.H. EIGENZUSTAND  
ZU  $\hat{L}_z$  OPERATOR!

## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM Drehimpuls)

DANIT IST DIE  $z$ -KOMPONENTE DES DREHIMPULSES DES ELEKTRONS SCHARF DEFINIERT.  $\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = 0$

TEILCHEN IN ZUSTAND  $|5,3,2\rangle_{n,l,m}$  MESSEN WIR MIT WAHRSCHEINLICHKEIT 1 FÜR DIE DREHIMPULSKOMPONENTE IN  $z$ -RICHTUNG  $2\hbar$ ;

DAS GILT NICHT FÜR  $x, y$ -RICHTUNG:

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

$$\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

QUADRAT DES BETRAGES DES DREHIMPULSES

$$\hat{L}^2 |n, l, m\rangle = ?$$

ORTSDARST.  $\hat{L}^2$  IN KUGELKOORD.

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left( \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \underbrace{R_{n,e}(r) P_e^m(\cos\vartheta)}_{\Psi_{n,e,m}} e^{im\varphi} = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{n,e,m}$$

MIT  $P_e^m(x)$  LEGENDRE-POLYNOME

d.h.

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

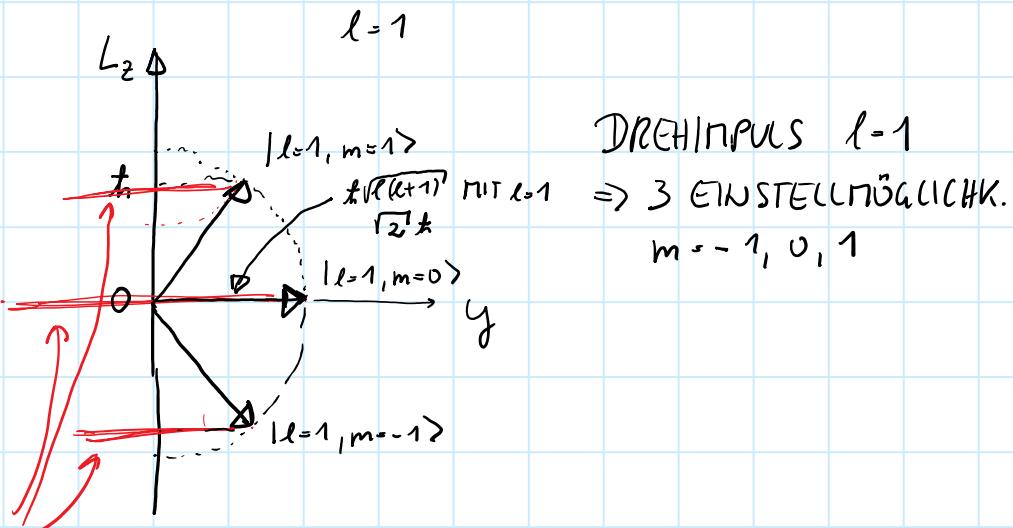
## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM Drehimpuls)

ALLGEMEINE DREHIMPULS-EIGENZUSTÄNDE:

DREHIMPULS IST GEQUANTELT:  $|L|$  KANN NUR DISKRETE  $\sqrt{\ell(\ell+1)}$  WERTE ANNEHMEN.

FÜR GEGEBENEN BETRAG DES DREHIMPULSES GIBT ES  $2\ell+1$  EINSTELLMÖGLICHKEITEN IN Z-RICHTUNG  
 $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$ ; DER WERT IN X- UND IN Y-RICHTUNG IST UNBESTIMMT.

TYPISCHE DARSTELLUNG



QUANTENMECHANISCHE IST X- UND Y-RICHTUNG NICHT FESTGELEGT D.H. UNSCHARF

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i \hat{L}_z; \quad \text{IN 3D-DARSTELLUNG \triangleq KEGEL}$$

## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM Drehimpuls)

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

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

$|\ell, m\rangle$  SIND DREHIMPULSEIGENZUSTÄNDE

IN ORTSDARSTELLUNG (KUGELKOORD.)

$$|\ell, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_\ell^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi} = N_{\ell, m} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

↑  
NORMIERUNG  
↑  
KUGELFLÄCHEN  
FUNKTION

NOMENKLATUR:

$\ell=0$  S-ZUSTAND

$\ell=1$  P-ZUSTAND

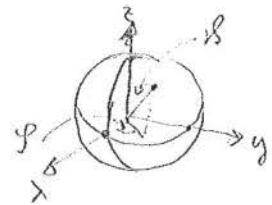
$\ell=2$  D-ZUSTAND

$\ell=3$  F-ZUSTAND

## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM Drehimpuls)

- ORTSDARSTELLUNG: EIGENZUSTÄNDE SIND NUR FUNKTION VON POLARWINKEL  $\theta$  UND AZIMUTWINKEL  $\phi$

$$\Psi_e^{me}(\theta, \phi) = N_{e,me} Y_e^{me}(\theta, \phi)$$



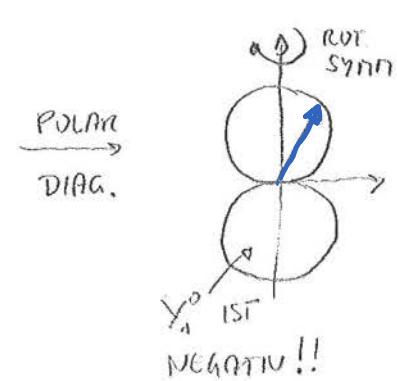
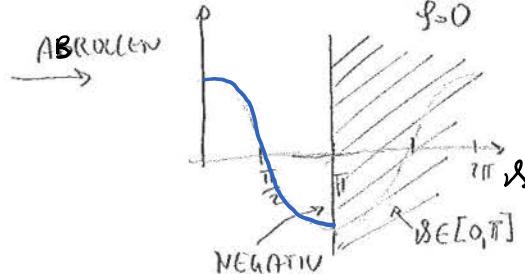
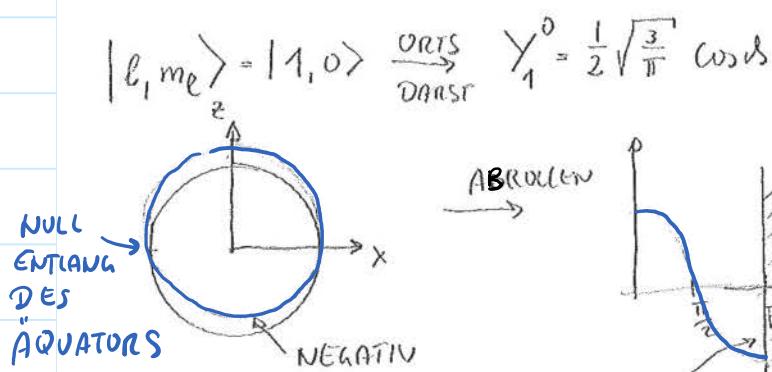
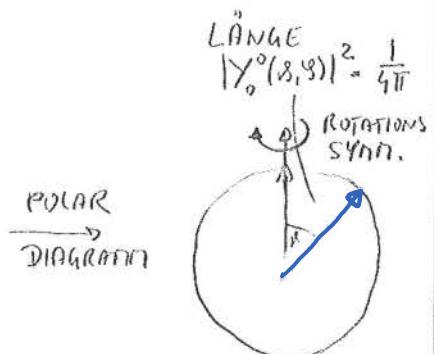
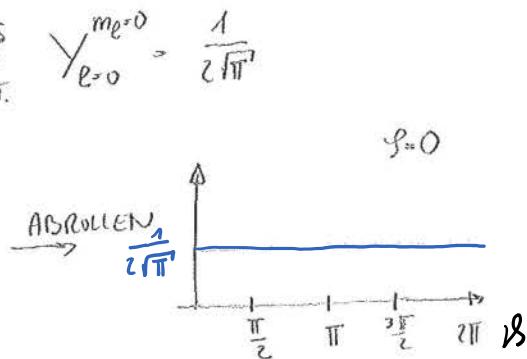
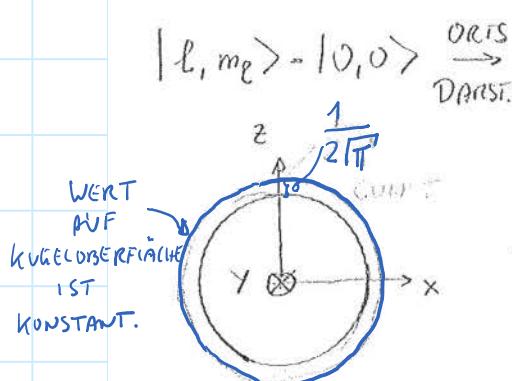
$\Rightarrow$  FUNKTION DEFINIERT AUF EINER KUGLOBERFLÄCHE  $\rightarrow$  JEDO PHYSIKALISCH SINNVOLLE FUNKTION DEFINIERT AUF EINER KUGLOBERFLÄCHE KANN IN  $Y_e^{me}$  ZERLEGT WERDEN  
"FOURIER ZERLEGUNG AUF EINER KUGEL"

$Y_e^{me}$  SIND NORMIERT

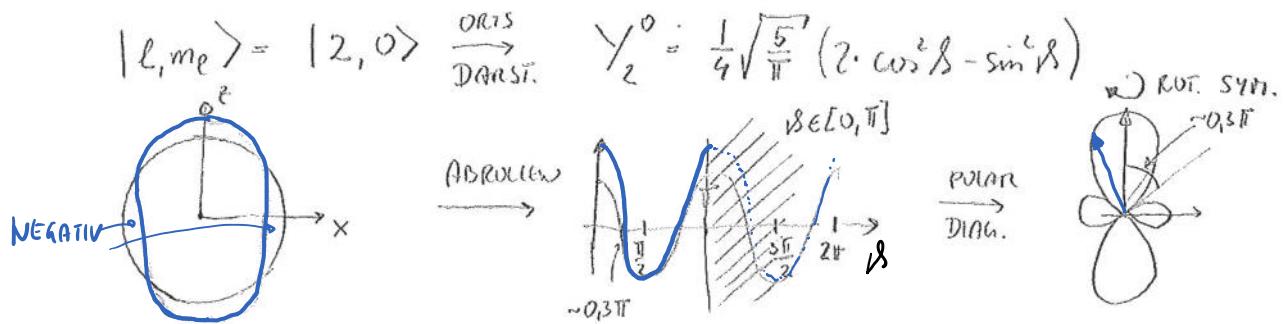
$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta |Y_e^{me}|^2 = 1$$

ORTHOGONAL

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta Y_e^{m*} Y_{e'}^{m'} = \delta_{mm'}$$

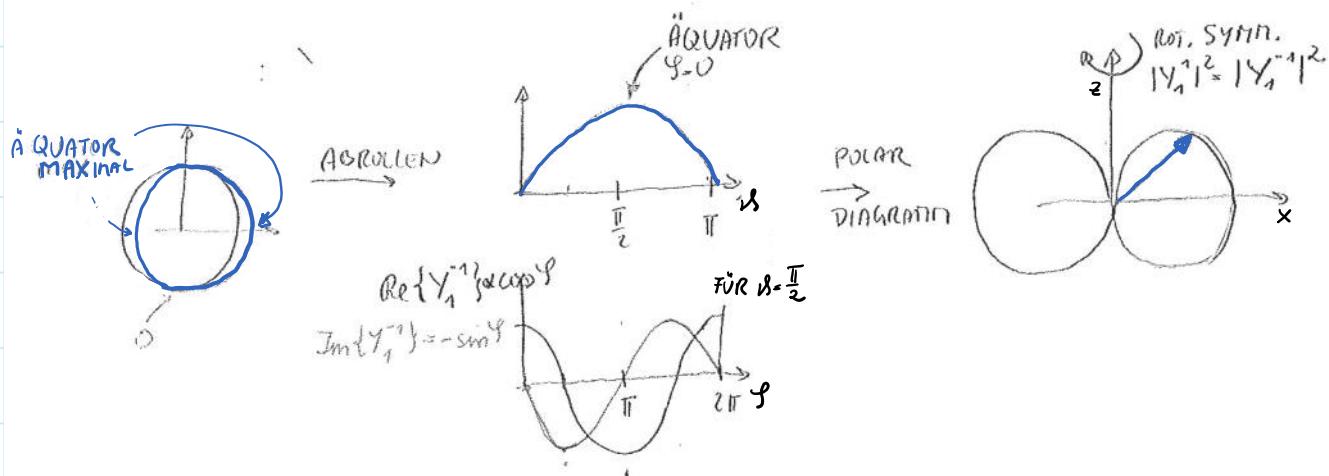


## 5.5 Wasserstoff - Winkelanteil der Wellenfunktion (QM) Drehimpuls)



↳  $Y_e^0$  ERLAUBT POLARWINKEL-ABHÄNGIGKEITEN ZU  
BESCHREIBEN;  $Y_e^{m_e} \quad m_e \neq 0 \Rightarrow$  ALINIE-ABHÄNGIGKEITEN  
z.B.:  $|l, m_l\rangle = |1, \pm 1\rangle \xrightarrow{\text{ORBSI.}} Y_1^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$

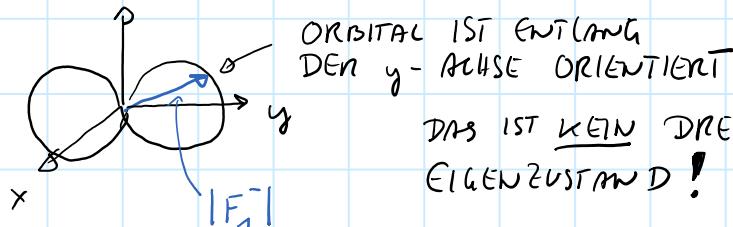
|BEN: KEINE HANDEL-STRUKTUR



FÜR DISKUSSION VON CHEMISCHE BINDUNGEN, WENDEN OFT  
SUPERPOSITIONEN VON DREHIMPULS-EIGENZUSTÄNDEN VERWENDET  
WEIL DIE ELEKTRONDICHTE ZU BINDUNG FÜHRT. z.B.

$$F_1^{-1}(r, \varphi) = \tilde{N} \{ Y_1^{-1} - Y_1^1 \} = \tilde{N} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \theta \left( e^{-i\varphi} - e^{+i\varphi} \right) = \tilde{N} \sin \theta \sin \varphi$$

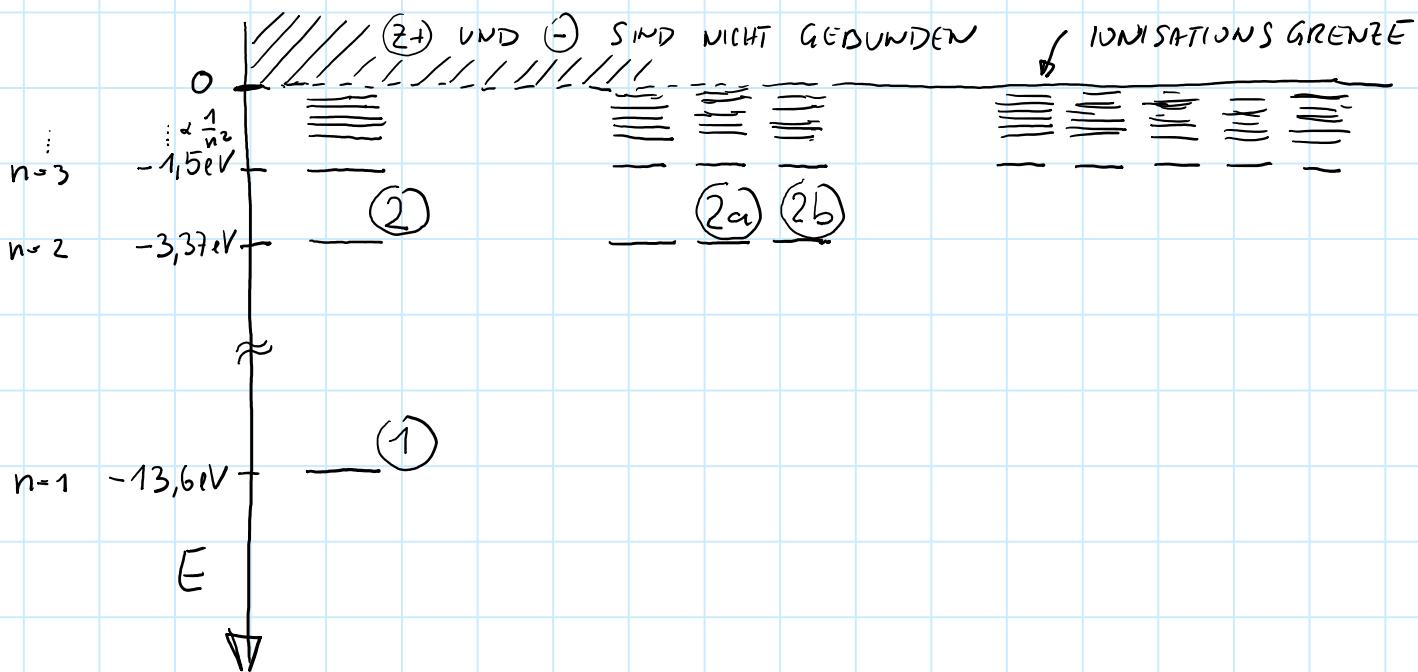
↳



## 5.6 Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff

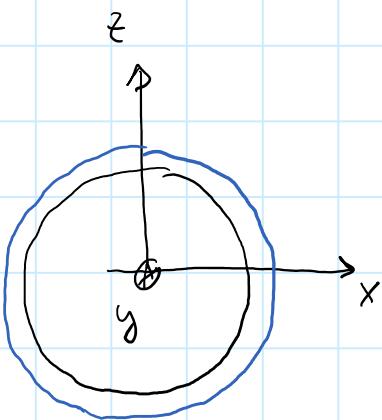
DREHIMPULS

| $\ell=0$   | $\ell=1$         | $\ell=2$              | ... |
|------------|------------------|-----------------------|-----|
| S-ZUSTÄNDE | P-ZUSTÄNDE       | d-ZUSTÄNDE            |     |
|            | $m = -1 \ 0 \ 1$ | $-2 \ -1 \ 0 \ 1 \ 2$ |     |



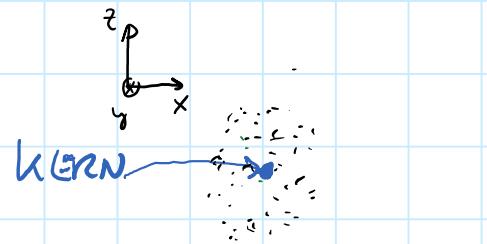
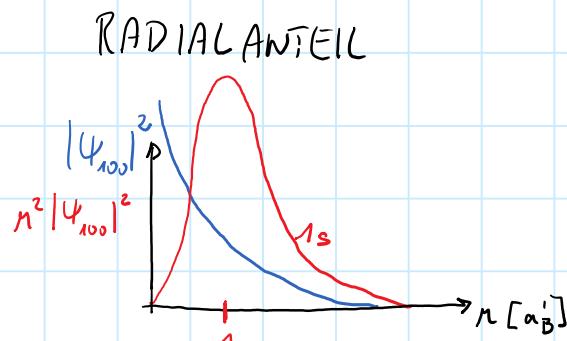
ZUSTÄNDE MIT  $\ell=0 \Leftrightarrow$  KEIN DREHIMPULS  
HABEN IN ORTSDARSTELLUNG KEINE WINKELABHÄNGIGKEIT; ES GIBT NUR EINE RADIALE STRUKTUR, DIE ROTATIONSSYMMETRISCH IST.

FÜR  $\ell=0 \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$



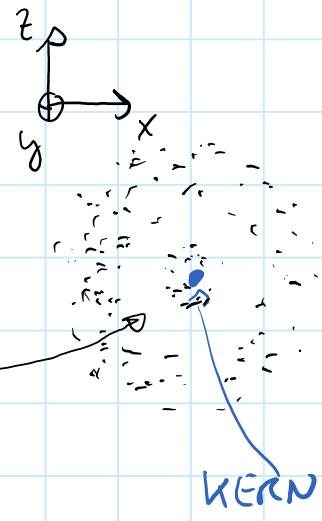
## 5.6 Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff

①  $\Psi_{100}(n, \ell, m)$  HAT KEINE  $\vartheta, \varphi$  ABHÄNGIGKEIT, WIE ALLE HAUPTQUANTENZAHLEN  $n$  MIT 'KLICK' DARSTELLUNG



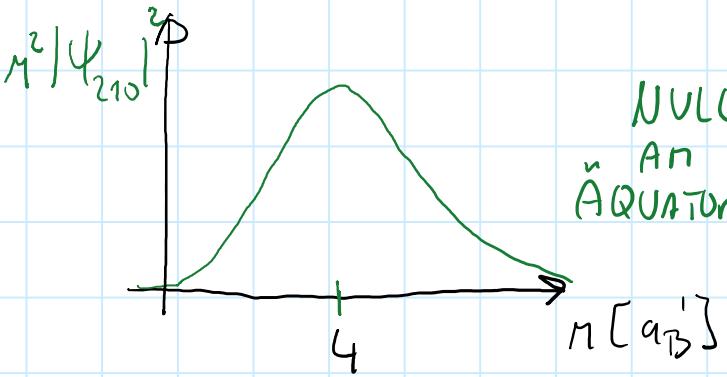
②  $\Psi_{200}(n, \ell, m)$

NU TELLE BEI  $z\alpha_B$

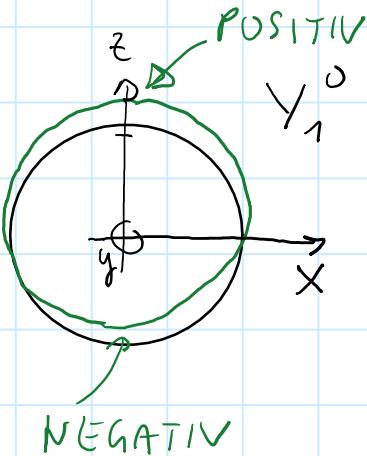


## 5.6 Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff

(2a)  $\ell = 1 \quad m = 0 \quad \Psi_{210} \propto R_{21}(r) Y_1^0(\vartheta, \varphi)$



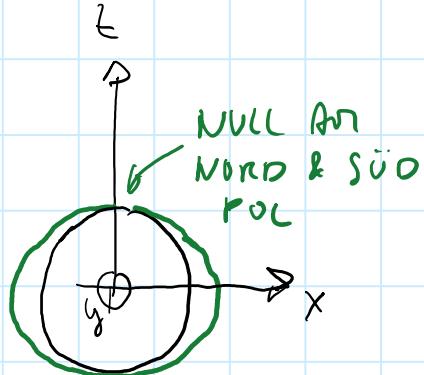
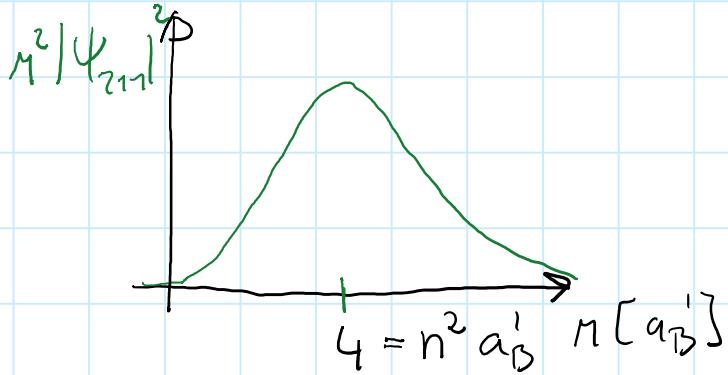
NULL  
AN  
ÄQUATOR



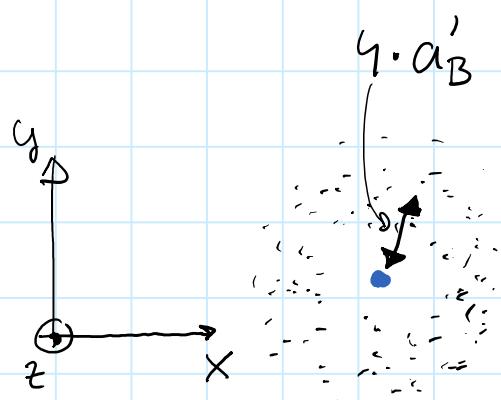
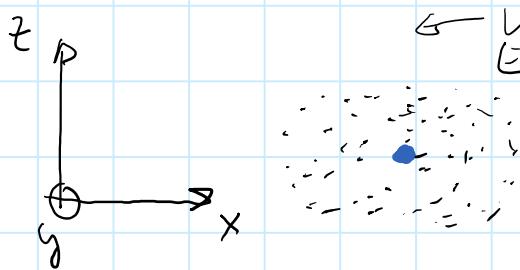
'KLICK'  
DARSTELL.



(2b)  $\ell = 1 \quad m = 1 \quad \Psi_{211} \propto R_{21}(r) Y_1^1(\vartheta, \varphi)$



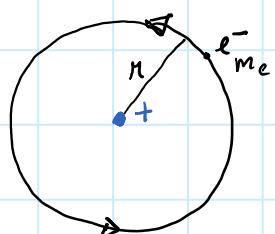
'KLICK' DARSTELLUNG



## 5.6 Zusammenfassung des Modells für Wasserstoff

### BOHR MODELL KORRESPONDENZ

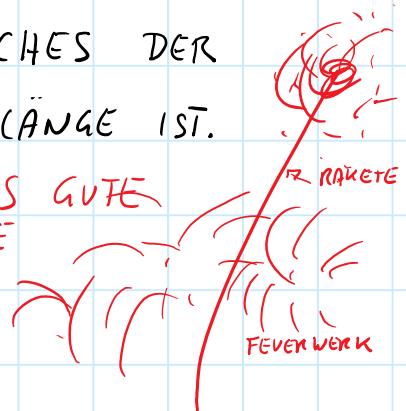
$e^-$  BEWEGT SICH AUF KREISBAHN  $\rightarrow$  STATIONÄR WENN UMFANG DER KREISBAHN EIN VIELFACHES DER ENTSPRECHENDEN DE BROGLIE WELLENLÄNGE IST.



#### ① KLASISCHE MECHANIK

$$\frac{m_e v^2}{r} = \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z \cdot e^2}{r^2}}_{\text{ZENTRI-PETALKRAFT}} \Rightarrow r = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \cdot \frac{1}{v^2}$$

ALLES GUTE  
FÜRS NEUE  
JAHR



#### ② QUANTENMECHANIK (BOHR)

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda_{dB} = \underbrace{\frac{n\hbar}{m_e}}_{n=1,2,3,\dots} \cdot \underbrace{\frac{1}{v}}_{\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{m_e v}}$$

$$\frac{4\pi^2 n^2 m_e v}{n^2 \hbar^2} \cdot \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e}$$

$$\frac{\pi \cdot 2e^2 m_e}{\epsilon_0 \hbar^2} n^2 = n$$

① + ② : NUR DISKRETE RADII ERFÜLLEN BEIDE BEDINGUNGEN

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi e^2 m_e z} \cdot n^2 = \frac{a_B}{z} \cdot n^2$$

$r_n$  ENTSPRICHT DEM WAHRSCHEINLICHSTEN ABSTAND FÜR DEN ZUSTAND  $|n, n-1, n-1\rangle_{l,m}$

ZUSTÄNDE MIT MAXIMALEN DREHIMPULS KÖNNEN AN NÄCHSTEN AN "BOHR'SCHE BAHNEN"

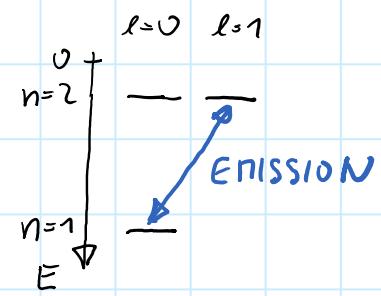
GRUNDZUSTAND: BOHR  $l=1$ , SCHRODINGER  $l=0$  !

## 5.7 Optische Übergänge

LICHT AUS EINER GASENTLADUNG MIT H<sub>2</sub> GAS ZEIGT CHARAKTERISTISCHE FREQUENZEN, DIE BESTIMMEN ENERGIE-DIFFERENZEN IM EIGENENERGIE-SPEKTRUM ENTSPRECHEN.

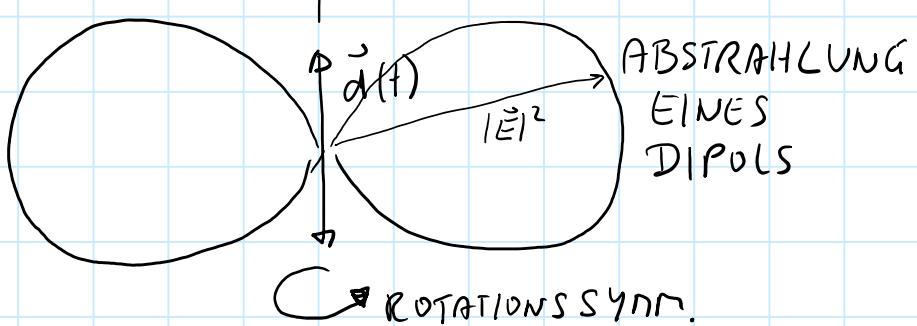
BEHAUPTUNG: DIE EMISSION VON LICHT FOLGT AUS DER SUPERPOSITION VON VERSCHIEDENEN ENERGIE-EIGENZUSTÄNDEN n UND n', MIT DER ZUSÄTZLICHEN BEDINGUNG  $|l - l'| = \Delta l = 1$ . (DIPOL-AUSWAHL REGEL)

PLAUSIBILISIERUNG:



KLASISCHE ELEKTRODYNAMIK:  
OSZILLIERENDEN DIPOL STRAHLT AB

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



$\hookrightarrow$  QUANTENMECHANIK:  $\vec{d} \rightarrow \hat{\vec{d}}$

ERWARTUNGSWERT:  $\langle \hat{\vec{d}} \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{d}} | \psi \rangle$

## 5.7 Optische Übergänge

IM FOLGENDEN  $1D \rightarrow \vec{d} = d_z = e \cdot z$

GRUNDEUSTAND :

$$\langle 100 | e \cdot \hat{z} | 100 \rangle = \int \underbrace{\psi_{100}^*(n, l, m)}_{\substack{\text{ORTS} \\ \text{DARSTELLUNG}}} e \cdot \hat{z} \underbrace{\psi_{100}(n, l, m)}_{\substack{\text{GERADE} \\ \text{Fkt.}}} dV = 0$$

*n. aus*

GERADE FKT  
UNGERADE-FKT

$\Rightarrow$  ZUSTAND HAT KEIN ELEKTRISCHES DIPOLMOMENT

$$\langle \Psi_{nem} | e \cdot \hat{x} | \Psi_{nem} \rangle = 0 \quad \text{FÜR ALLE } n, l, m, \text{ & ZEITEN}$$

(GLEICHES ARGUMENT WIE OBEN)

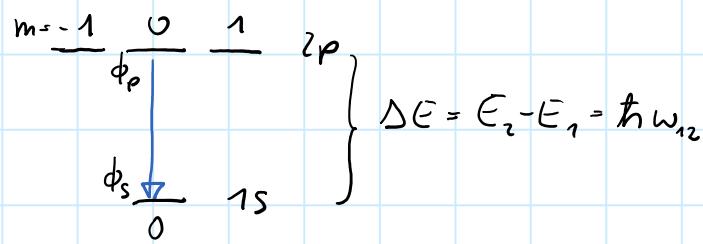
DAS ELEKTRON IST IN EINER SUPERPOSITION VON ZWEI ZUSTÄNDEN  $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |n, l, m\rangle + |n', l', m'\rangle \}$

$$\langle \hat{d} \rangle = \frac{e}{2} \left\{ [ |\phi| + \langle \phi' | ] \hat{d} [ |\phi\rangle + |\phi'\rangle ] \right\}$$

$$= \frac{e}{2} \left\{ \underbrace{\langle \phi | \hat{d} | \phi \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle \phi' | \hat{d} | \phi \rangle}_{\text{+0 WENN } \phi' \text{ UNGERADE UND } \phi \text{ GERADE}} + \underbrace{\langle \phi | \hat{d} | \phi' \rangle}_{\langle \phi' | \hat{d} | \phi \rangle^* = 0} + \underbrace{\langle \phi' | \hat{d} | \phi' \rangle}_{\text{REELLE ZAHL}} \right\}$$

## 5.7 Optische Übergänge

BSP:



$$|\Psi\rangle_t = e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\psi_s\rangle + e^{-i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t} |\psi_p\rangle \right\}$$

$$\langle \hat{d} \rangle_\psi = \text{Re} \left\{ \langle \psi_s | e \cdot \vec{x} e^{-i\omega_{12} \cdot t} | \psi_p \rangle \right\} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{pmatrix}$$

$$= e \cdot \text{Re} \left\{ e^{-i\omega_{12} \cdot t} \underbrace{\langle \psi_s | \hat{z} | \psi_p \rangle}_{\neq 0} \right\}$$

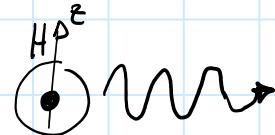
DIPOLMATRIX ELEMENT:  $D_z$

$$= e D_z \cdot \cos(\omega_{12} t)$$

DIPOL IN  
Z-RICHTUNG

OSZILLIERT MIT  
FREQUENZ, DIE  
DEN ENERGIEDIFFERENT  
ENTSPRicht

$\Rightarrow$



LINARE  
POLARISATION IN  
Z-RICHTUNG;  
EMISSION IN  
X-Y EBENE;

KEINE EMISSION  
IN Z-RICHTUNG

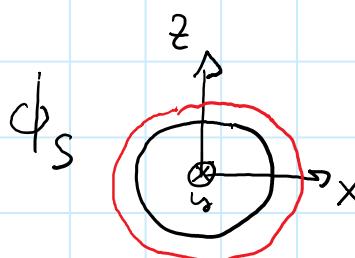
EM-STRAHLUNG IST  
TRANSVERSAL  
 $\vec{D} \cdot \vec{E} = 0$

## 5.7 Optische Übergänge

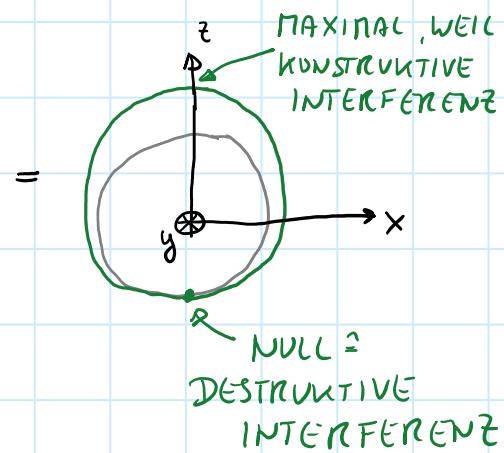
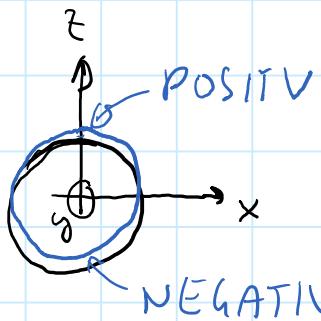
'HAND WAVING ARGUMENT':

$t=0$

SUPERPOSITION  
= KOHARENTE SUNNE



$\phi_s + \phi_p$



$$e^{-i \frac{E_1}{\hbar} \cdot t}$$

↓

SPÄTER

$$e^{-i \frac{E_2}{\hbar} \cdot t}$$

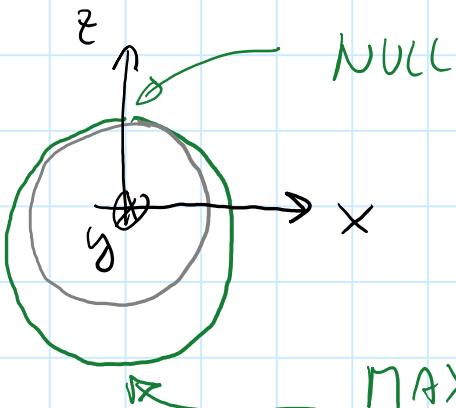
WICHTIG PHASENDIFFERENZ

$$\Delta \phi = (E_2 - E_1) / \hbar \cdot t_{\frac{1}{2}} = \pi$$

$\Rightarrow$  DESTRUKTIVE INTERFERENZ

$\Leftarrow$  KONSTRUKTIVE INTERFERENZ

$\Rightarrow$



$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\pi \cdot \hbar}{\hbar \omega_{12}} = \frac{\pi}{\omega_{12}}$$

MAXIMAL, WEIL KONSTRUKTIVE INTERFERENZ

## 5.7 Optische Übergänge

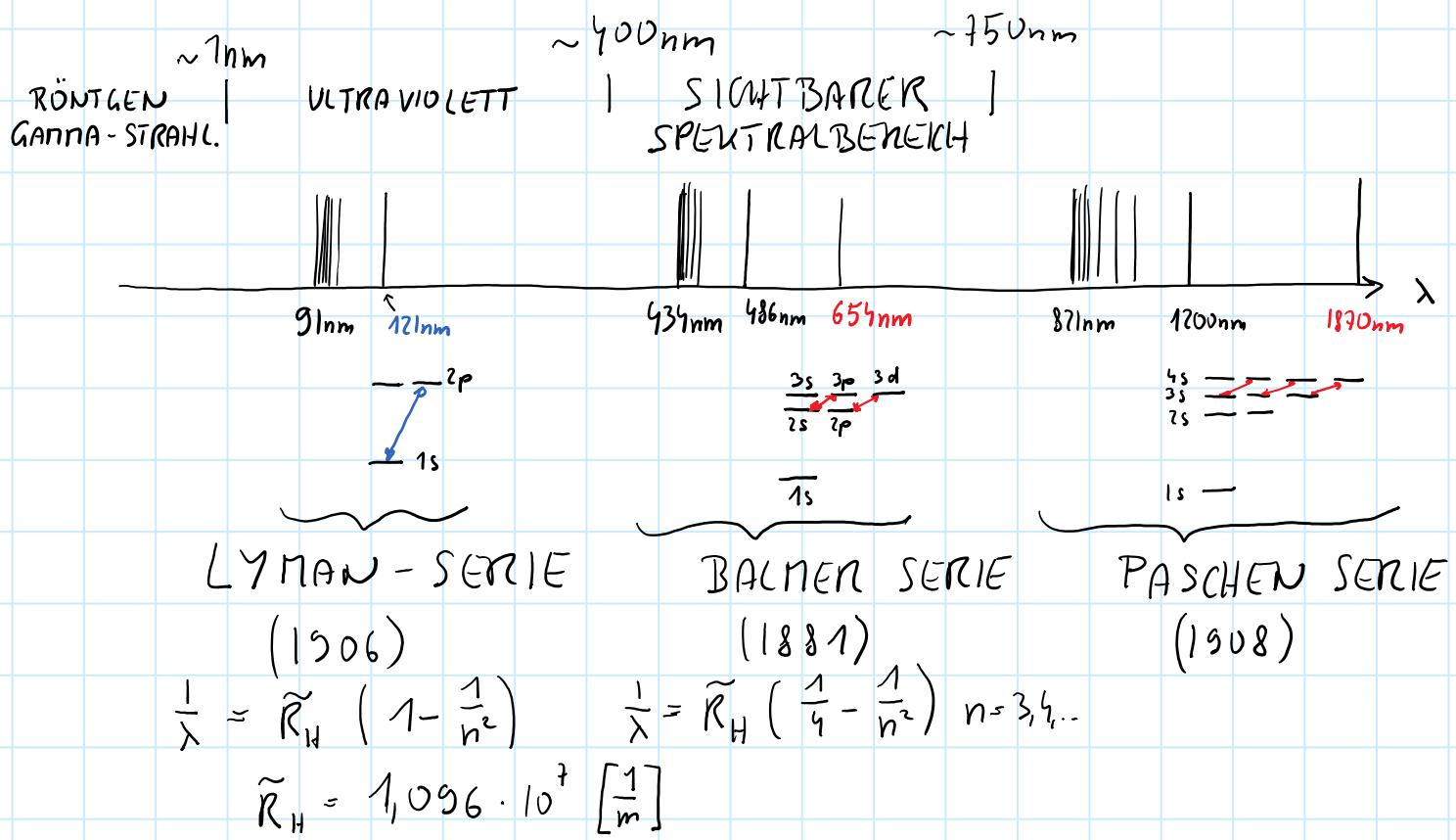
ZUR ZEIT  $2t_{\frac{1}{2}}$  IST  $\Delta\phi = 2\pi \Rightarrow$

"REVIVAL"  $\hat{=} |\Psi\rangle_t = |\Psi\rangle_{t=0} \Rightarrow$

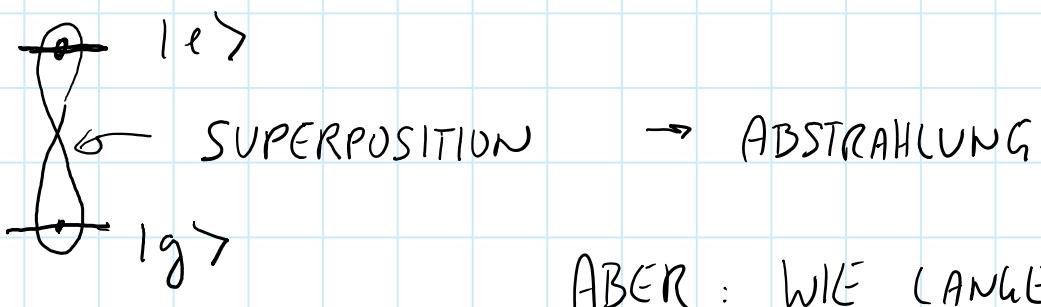
DYNAMIK WIEDERHOLT SICH MIT  
DER OSZILLATIONSDAUER

$$T = 2t_{\frac{1}{2}} = \frac{2\pi}{\omega_{12}}$$

BZW: "ELEKTRON" DICHTE OSZILLIERT  
MIT FREQUENZ  $\omega_{12} \hat{=} ENERGIE -$   
DIFFERENZ

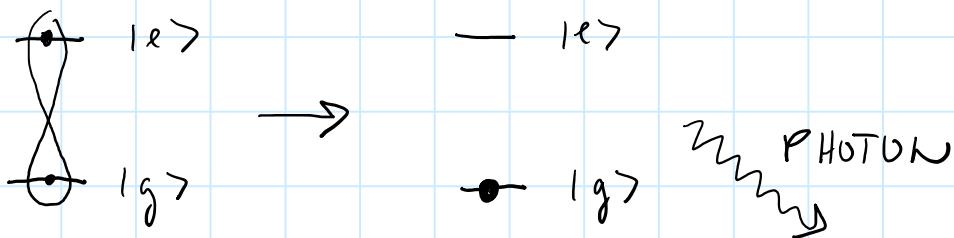


## 5.7 Optische Übergänge



ABER: WIE LANGE GIBT  
ES DIE SUPERPOSITION?

FÜR QUANTITATIVES VERSTANDNIS MUSS AUCH  
DAS ELEKTRON-MAGNETISCHE FELD QUANTISIERT  
WERDEN  $\hat{s}$  PHOTON KONZEPT; DIES WIRD  
IM RAHMEN VON QUANTEN-ELEKTRODYNAMIK  
QED BESCHRIEBEN; ALS ERGEBNIS FINDET  
MAN, DASS DIE SUPERPOSITION EXPONENTIELL  
ZERFÄLLT  $\rightarrow$  NATÜRLICHE LEbensDAUER



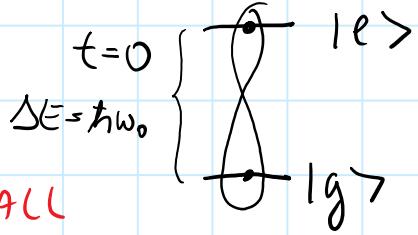
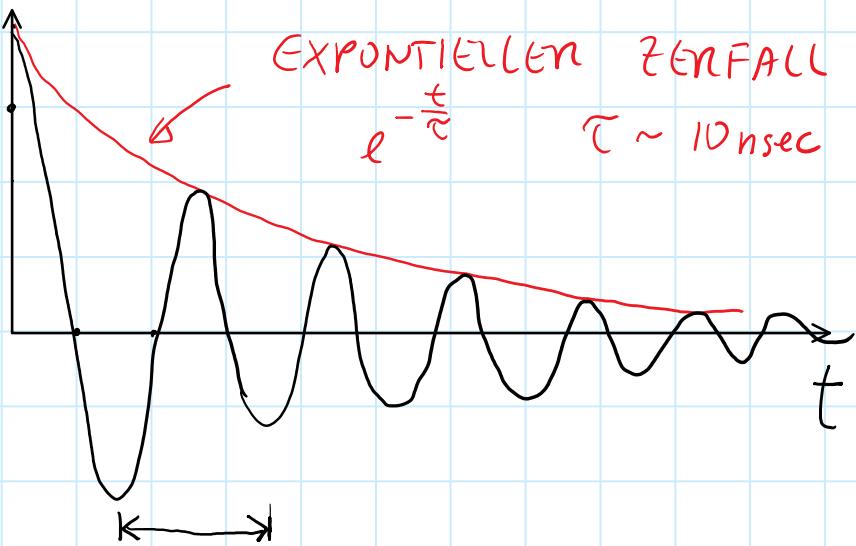
SPONTANE  
EMISSION

WELCHE ENERGIE HAT DAS PHOTON?

DER ERWARTUNGSWERT DES DIPULS  $\vec{D} \propto \langle \hat{e} | \hat{d} | g \rangle$   
ZERFÄLLT AUCH EXPONENTIELL

## 5.7 Optische Übergänge

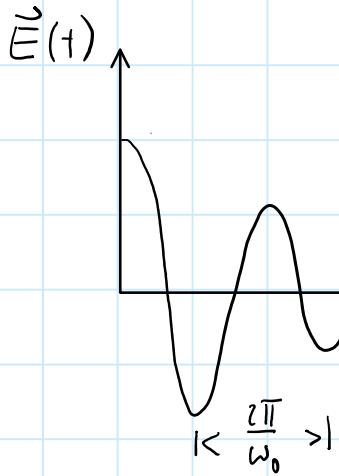
$\vec{D}$



$$T = \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{2\pi}{\omega_0}$$

$\hookrightarrow$

ABGESTRAHLTES LICHT:



$$E(t) = E e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_0 t)$$

$$= \operatorname{Re} \left\{ E e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i \omega_0 t} \right\}$$

WELCHE FREQUENZ HAT DAS LICHT?

AQUIVALENT: WAS MISST MAN IM SPEKTROMETER?

LÖSUNG: ZERLEGE EM-FELD IN  $e^{i\omega t}$  d.h.

$$E(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$\hookrightarrow E(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt$$

- -

## 5.7 Optische Übergänge

$$E(\omega) = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{1}{2} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) e^{-i\omega t} dt$$

ELEKT. FELD  
BEGINNT BEI  
 $t=0$

$$= \frac{E_0}{2\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{\frac{1}{\tau} - i(\omega_0 - \omega)} + \frac{1}{\frac{1}{\tau} + i(\omega_0 + \omega)} \right)$$

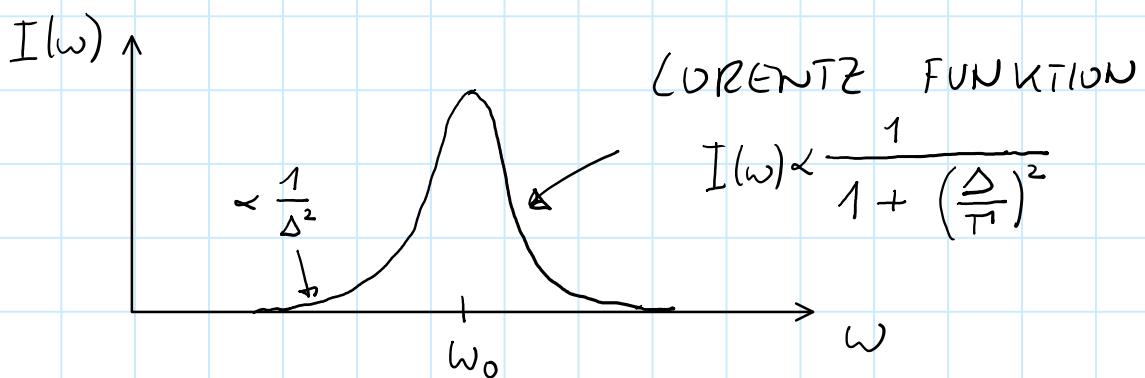
IST EINE  
KOMPLEXE  
GRÖSSE

IN SPEKTROMETERN MISST MAN INTENSITÄT

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

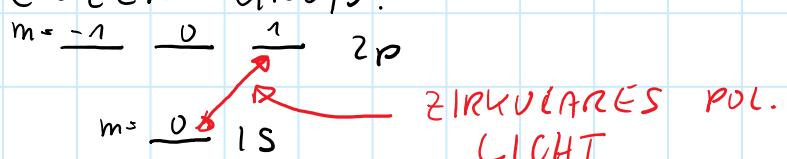
WIR BETRACHTEN POSITIVE  $\omega$ :

$$\tau = \frac{1}{\tau} \quad \Delta = \omega_0 - \omega$$



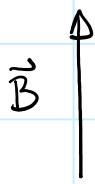
GRUNDPRINZIP: JEDER SENDER IST  
AUCH EIN EMPFÄNGER

ABSORPTION VON LICHT IST AUCH NUR FÜR  
BESTIMMTE FREQUENZEN GRÖS.



## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt (1896)

MODELL :



IN  $V(\vec{x})$  z.B. COULOMB POTENTIAL DES KERNNS

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

MIT  $\vec{A}$  ... VEKTORPOTENTIAL

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

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

IN ORTSDARSTELLUNG MIT:

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \doteq \vec{A} = \frac{B_z}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\vec{p}} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$

$$\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{B_z}{2} \left\{ \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \right\}$$

$$= \frac{B_z}{2} \left\{ -\underbrace{\partial_x y}_{\text{BISHIERLICHT}} + \underbrace{\partial_y x}_{\text{VERTAUSCHEN}} - y \partial_x + x \partial_y \right\} = B_z \left\{ x \partial_y - y \partial_x \right\} \doteq B_z \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$$

DISKUSSION  
VON WASSERSTOFF  $\doteq H_0$

ORTSDARST. VON

$$\hat{L}_z \doteq \hat{x} \times \hat{\vec{p}}$$

$$\hookrightarrow \hat{H} = \boxed{\frac{1}{2m_e} \Delta} + \frac{e}{2m_e} B_z \frac{i}{\hbar} (x \partial_y - y \partial_x) + \frac{e^2}{2m_e} \frac{B_z^2}{4} (x^2 + y^2) + \boxed{V(\vec{x})}$$

FELD IST  
NUR IN  
Z-RICHTUNG!!  
DAS LEGT DAS  
KOORDINATEN-SYSTEM  
FEST

$10^{-6}$  TESLA KLEINER  
ALS  $\langle B_z \cdot \hat{L}_z \rangle$  TERM.  
IM 'STANDARD' LABOR  $B \sim 10^7$   
 $\Rightarrow$  VERNACHLÄSSIGBAR

## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{B}_z \cdot \vec{L}_z$$

SIEHE ABSCHNITT  
5.5 & 5.6.

ZEEMAN ENERGIE

ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE VON  $H_0$  SIND  
AUCH DREHIMPULS-EIGENZUSTÄNDE ( $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ )

$$\hat{H}_0 |n, \ell, m\rangle = E_n |n, \ell, m\rangle$$

$\Rightarrow$  SIND AUCH ENERGIE-EIGENZUSTÄNDE  
IM MAGNETFELD MIT ENERGIE

$$E_{n,m} = E_0 + \frac{e\hbar}{2m_e} m \vec{B}_z$$

$- R_y * \frac{1}{n^2}$

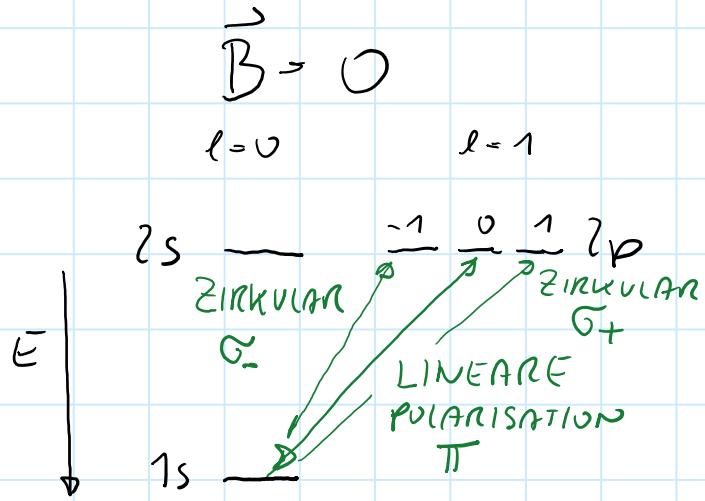
z-KOMPONENTE DES  
DREHIMPULSES;

MAN NENNT DIESE Q-ZAHL  
DESHALB AUCH MAGNET-  
QUANTENZahl

$\mu_B$   
BOHR'SCHES  
MAGNETON

## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt

### WASSERSTOFF MODELL:

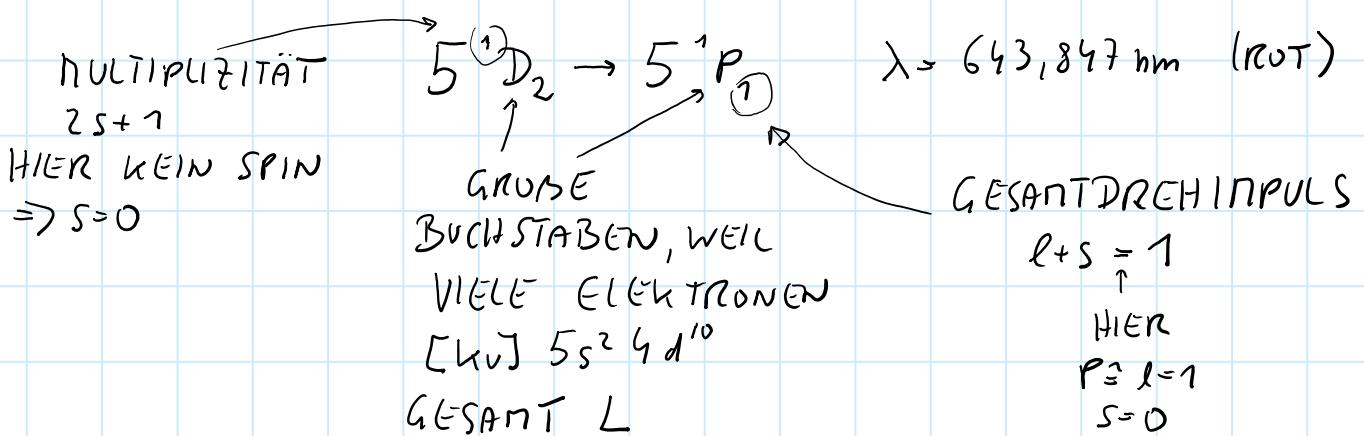


$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix}$$

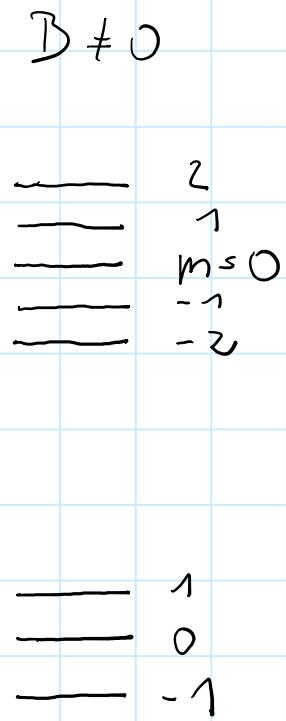
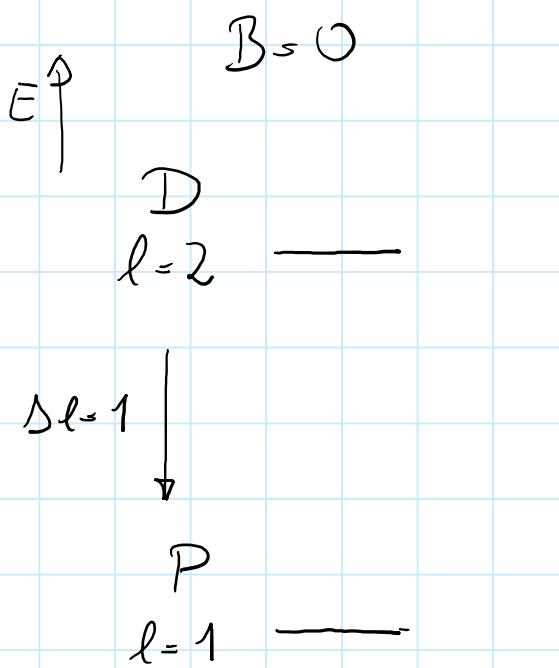
Energy level diagram for hydrogen in a magnetic field ( $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ ). The vertical axis is labeled  $E$ . The ground state  $1s$  is at the bottom. An excited state  $2s$  is shown above it. The  $\sigma_-$  transition from  $2s$  to  $1s$  splits into two hyperfine levels, labeled  $\sigma_-^1$  and  $\sigma_-^0$ . The  $\sigma_+$  transition also splits into two hyperfine levels, labeled  $\sigma_+^0$  and  $\sigma_+^1$ . The  $\pi$  transition remains a single line. The energy difference between the  $\sigma_-^0$  and  $\sigma_+^0$  levels is labeled  $M_B \cdot B_z$ , and the difference between  $\sigma_-^1$  and  $\sigma_+^1$  is labeled  $M_S \cdot B_z$ .

DIE FREQUENZ LINEARER POLARISATION IST MAGNETFELD UNABHÄNGIG;  
 $\sigma_-$  ÜBERGÄNGE ZEIGEN KLEINERE FREQUENZ  
 $\sigma_+$  HÖHERE FREQUENZ

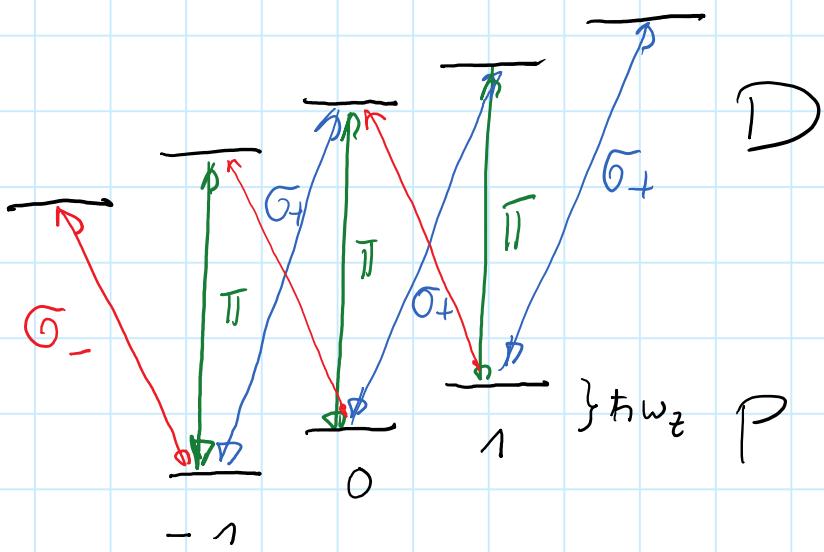
EXPERIMENT MIT CADMIUM:  $^{112}_{48}\text{Cd}$  KERNSPUNKTE ELEKTRONEN  
 SPEZIELLER OPTISCHE DIPOLÜBERGANG



## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt

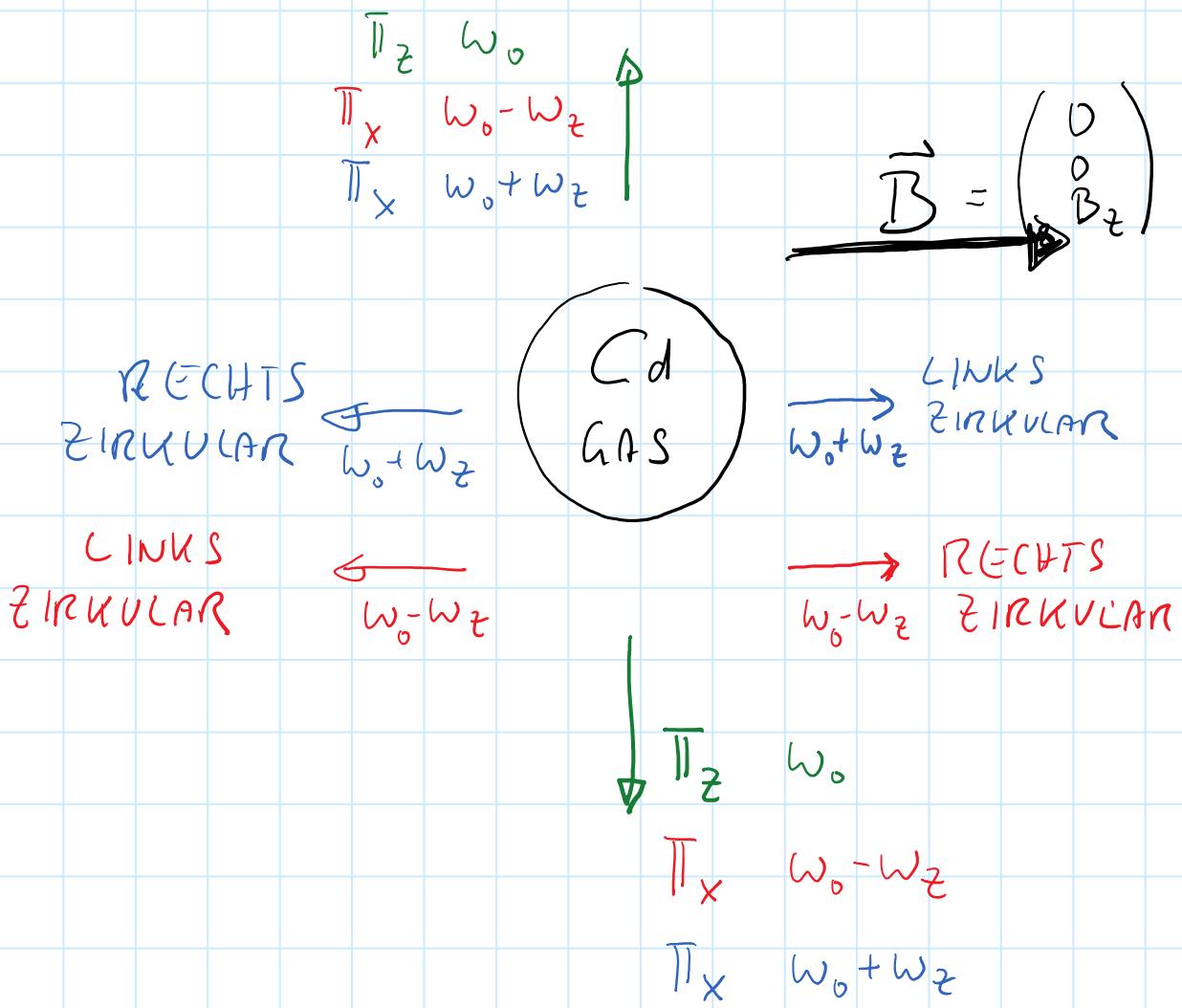


ETWAS ANDERS DARGESTELLT:



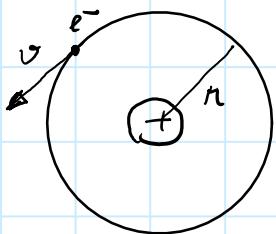
## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt

VORHERSAGE: POLARISATION UND FREQUENZ  
DES AUSGESTRAHLTEN LICHTS SIND  
RICHTUNGSABHÄNGIG



## 5.8 Externe Felder - Zeeman Effekt

BEMERKUNG: SEMI-KLASSISCHES BILD



$e^-$  BEWEGT SICH AUF KREISBAHN MIT DREHIMPULS  $\vec{L}$

$$\Rightarrow \text{KREISSTROM} : I = -e \frac{v}{2\pi n}$$

$\xrightarrow[\text{ZEIT}]{\text{COULOMB}}$   $\xrightarrow{\text{FREQUENZ}}$

LEITERSCHLEIFE MIT KREISSTROM  $I$  UND FLÄCHE  $A = n^2 \cdot \pi$  BESITZT EIN MAGNETISCHES MOMENT

$$\vec{P}_m = I \cdot A \hat{e}_\perp = -e \frac{v}{2\pi n} \cdot n^2 \cdot \pi \hat{e}_\perp = -\frac{e}{2m_e} \cdot \underbrace{n \cdot m_e v}_{\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}} \cdot \hat{e}_\perp$$

EINHEITSVEKTOR  
SENKRECHT  
ZUR FLÄCHE

$$= -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L}$$

EIN MAGNETISCHES MOMENT IN EINEM MAGNETFELD  $\vec{B}$  HAT POTENTIELLE ENERGIE

$$E_{\text{POT}} = -\vec{P}_m \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L} \cdot \vec{B} = \frac{e \hbar}{2m_e} \cdot m \cdot B$$

$\xrightarrow{\text{e-KREISBAHN}}$  QUANTENMECHANISCHE NICHT BESTIMMT,  
ABER  $L_z \Rightarrow$  WÄHLE  $\vec{B}$  IN Z-RICHTUNG

$$\Rightarrow \text{BOHR'SCHES MAGNETON: } \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_e}$$