

Berechne Zahl der im Stahl verbliebenden Atome, d.h. diejenige Zahl der Atome die nicht gestört wurden (1)

Änderung der Zahl der Atome im Stahl

$$\Delta N = -W N = - \frac{m A \Delta x \sigma}{A} N$$

Wahrscheinlichkeit

$$\frac{\Delta N}{N} = -m \sigma \Delta x$$

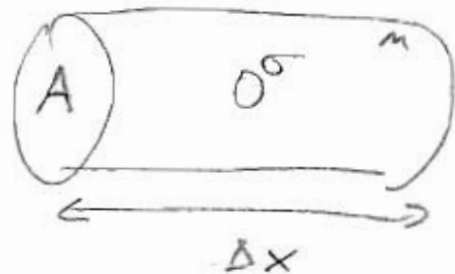
$$\int_{N_0}^{N_L} \frac{dN}{N} = \int_0^L -m \sigma dx$$

$$\log N_L - \log N_0 = -m \sigma L$$

$$\Rightarrow \boxed{N_L = N_0 e^{-m \sigma L}}$$

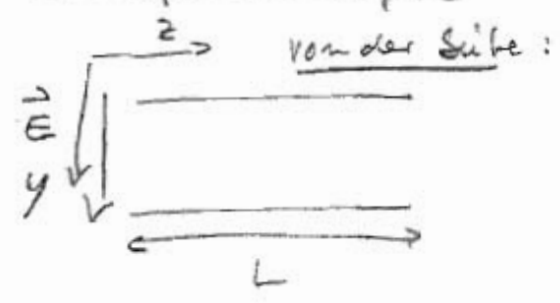
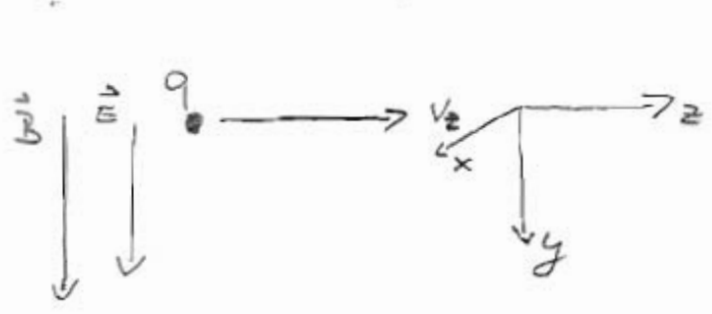
verbliebende Atome im Stahl nach Schichtdicke

$$N_0 - N_L = N_0 (1 - e^{-m \sigma L})$$



Die Parabelmethode in der Massenspektroskopie

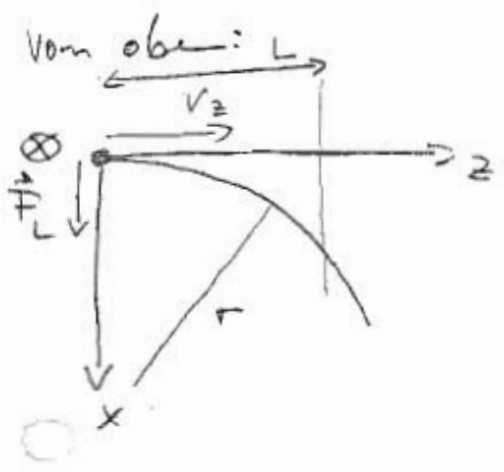
(2)



z: $v_z = \text{const} \Rightarrow z = v_z t$
 $L = v_z t_L \Rightarrow t_L = \frac{L}{v_z}$

y: $m \ddot{y} = q \vec{E}$

$\ddot{y} = \frac{q}{m} E \Rightarrow y = \frac{1}{2} \frac{q}{m} E t_L^2 = \frac{1}{2} \frac{q}{m} E \left(\frac{L}{v_z} \right)^2$



$F_L = q \vec{v} \times \vec{B}$
 $F_L = q v_z B \stackrel{!}{=} \frac{m v^2}{r}$

\Rightarrow Zyklotronradius

$r = \frac{m v}{q B}$

$r \gg L$

$m \ddot{x} = q v B$

$\Rightarrow x = \frac{1}{2} \frac{q}{m} v B t_L^2 = \frac{1}{2} \frac{q}{m} v B \left(\frac{L}{v} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{q B L}{m} \frac{L}{v}$

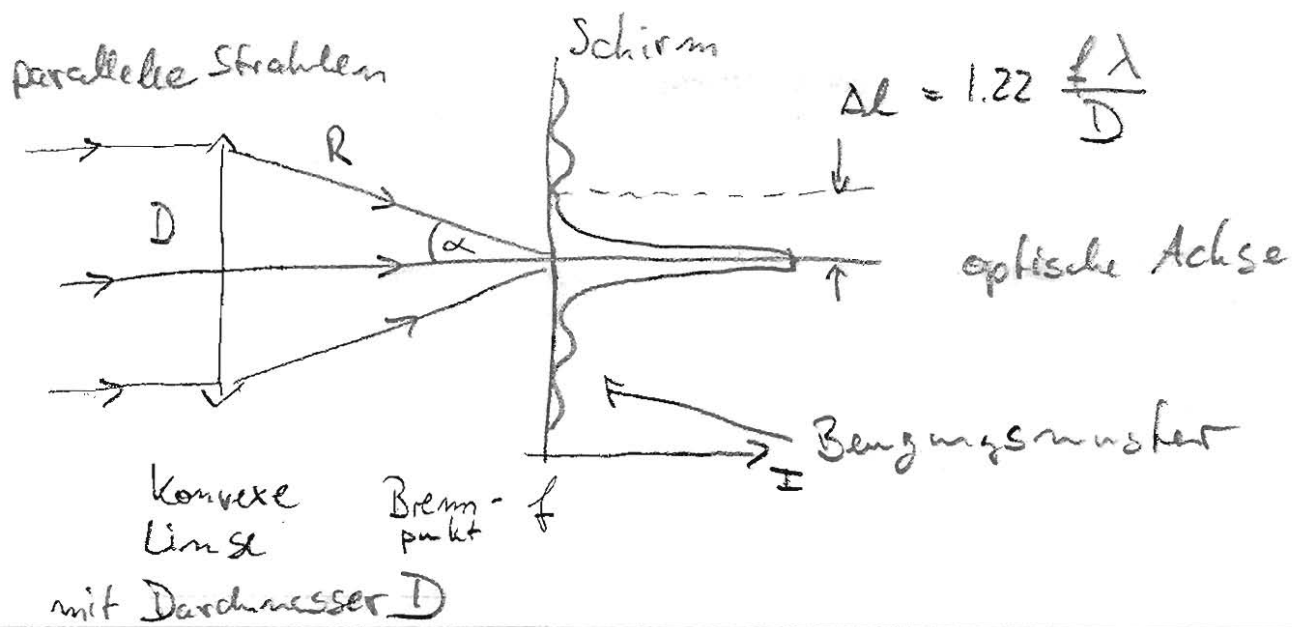
$\Rightarrow y = \frac{1}{2} \frac{q}{m} E \left(\frac{2 x m}{q B L} \right)^2 = 2 \frac{m}{q} \frac{E}{B^2 L^2} x^2$

Parabel

\Downarrow bekannte Parameter
 Masse zu Ladung

\rightarrow unabhängig von Teilchengesch.

Abbildung an einer Linse

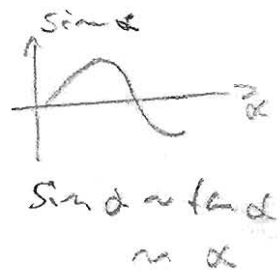


① Beugung am Rand der Linse

$$\Delta l = 1.22 \frac{f \lambda}{D}$$

mit $\sin \alpha = \frac{D/2}{R}$

$$\sim \frac{1.22}{2} \frac{R}{D/2} \lambda = 0.61 \frac{\lambda}{\sin \alpha}$$



Lage des ersten Beugungsminimums

② Optimal:

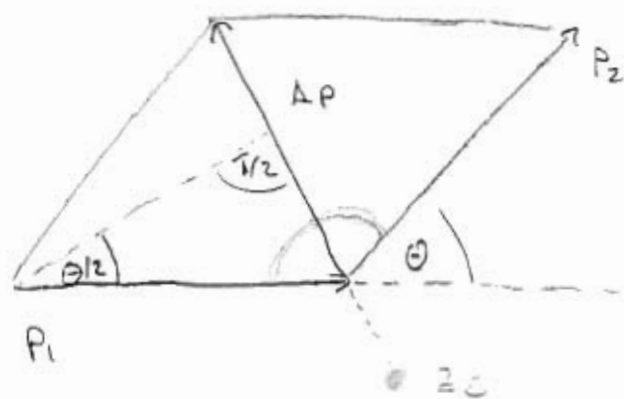
- möglichst kleine Wellenlänge λ
- möglichst großer Abbildungswinkel

$$\alpha \rightarrow 90^\circ$$

$$\Rightarrow \sin \alpha = 1$$

Rutherford Streuwinkel:

(3)



① Betrag des α -Teilchen Impuls ist erhalten

$$|p_1| = |p_2| = mv$$

② Impulsänderung

$$\Delta p = 2 \sin \frac{\theta}{2} mv$$

$$\Delta p = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{F} \cos \phi dt$$

- ϕ ist Winkel zw. der auf das α -Teilchen wirkenden

Kraft \vec{F} und den Vektor der Impulsänderung $\Delta \vec{p}$

- Komponente von \vec{F} senkrecht zu $\Delta \vec{p}$ trägt nicht zur Änderung der Richtung bei

③ Wechsel der Integrationsvariablen

$$\Delta p = \int_{-\frac{1}{2}(\pi-\theta)}^{+\frac{1}{2}(\pi-\theta)} \vec{F} \cos \phi \frac{dt}{d\phi} d\phi$$

④ Erhaltung des Drehimpuls im Zentralpotential

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = \underbrace{\sin \phi}_{b} F \cdot mrv = \underline{m v b} = m r \omega = m r^2 \frac{d\phi}{dt}$$

Trägheitsmoment

Winkelgeschwindigkeit

$$\rightarrow \frac{dt}{d\phi} = \frac{r^2}{vb}$$

$$\Delta p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zeze}{vb} \int_{-\frac{1}{2}(\pi-\theta)}^{+\frac{1}{2}(\pi-\theta)} \cos \phi d\phi = \cos \frac{\theta}{2}$$

$$mv^2 b \frac{4\pi\epsilon_0}{2e^2 z} = \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{\theta}{2}} = \cot \frac{\theta}{2}$$

Streuwinkel im Abhängigkeit von KE, z, und Stoßparameter

Rutherford Streuformel:

(4)

① Betrachte Grenzfall dünner Folie

→ nur ein Streuprozess pro einfallendes α -Teilchen

→ kein Überlapp zwischen benachbarten Wirkungsquerschnitten

② Streuwahrscheinlichkeit für Winkel größer als Θ

$$f = \underbrace{m d A}_{\substack{\text{Zahl der Streuzahlen} \\ \text{Zahl der Streuzahlen}}} \sigma = m d \pi b^2$$

$$\begin{array}{c} A \\ \uparrow \\ \text{wirksame} \\ \text{Stoßfläche} \end{array} = m d \pi \left(\frac{z e^2}{4 \pi \epsilon_0 E_{kin}} \right)^2 \cot^2 \frac{\Theta}{2}$$

③ Streuwahrscheinlichkeit im den Winkelbereich $d\Theta$ um Θ

$$df = \frac{\partial f}{\partial \Theta} d\Theta = m d \pi \left(\frac{z e^2}{4 \pi \epsilon_0 E_{kin}} \right)^2 (-2) \cot \frac{\Theta}{2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\Theta}{2}} d\Theta$$

④ Zahl der gestreuten Teilchen

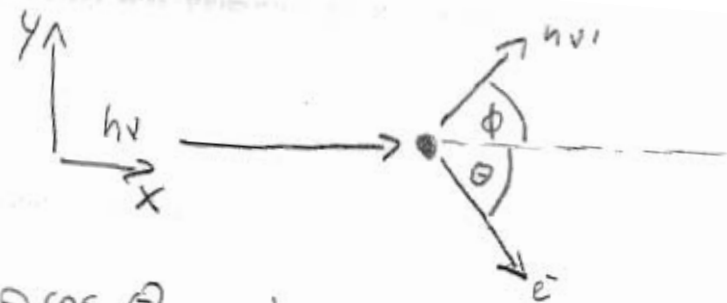
$$N(\Theta) = N_i \frac{df}{dS}$$

$$= N_i \frac{m d z^2 e^4}{(8 \pi \epsilon_0)^2 r^2 E_{kin}^2 \sin^4 \frac{\Theta}{2}}$$

↑
Detektorfläche

$$dS = \underbrace{2\pi \sin \Theta r}_{\text{Detektor-Ring}} \underbrace{r d\Theta}_{\text{Ring-Breite}} = 4\pi r^2 \sin \frac{\Theta}{2} \cos \frac{\Theta}{2} d\Theta$$

Der Compton Effekt



① Impulserhaltung

$$x: \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \phi + p \cos \theta$$

$$y: 0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \phi + p \sin \theta$$

quadriere und addiere

② Bestimme den e^- Impuls

$$p^2 \cos^2 \theta + p^2 \sin^2 \theta = \left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c} \cos \phi \right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c} \sin \phi \right)^2$$

$$\Leftrightarrow p^2 c^2 = h^2 \nu^2 + h^2 \nu'^2 - 2h\nu h\nu' \cos \phi \quad (**)$$

③ Energieerhaltung

$$E_k = h\nu - h\nu'$$

④ Gesamtenergie des Elektrons

$$E = E_{kin} + m_0 c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

$$\Rightarrow E_{kin}^2 + 2E_{kin} m_0 c^2 + m_0^2 c^4 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

löse nach diesen Termen

$$\Rightarrow p^2 c^2 = h^2 \nu^2 + h^2 \nu'^2 - 2h\nu h\nu' + 2(h\nu - h\nu') m_0 c^2 \quad (*)$$

$$(*) = (**)$$

$$-2h\nu h\nu' \cos \phi = -2h\nu h\nu' + 2(h\nu - h\nu') m_0 c^2$$

$$\Rightarrow 2h\nu h\nu' (1 - \cos \phi) = 2 m_0 c^2 (h\nu - h\nu') \quad \text{mit } \boxed{v = \frac{c}{\lambda}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \phi)}$$

ID Schwarzer Strahler

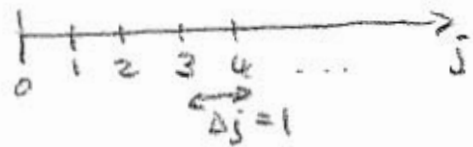
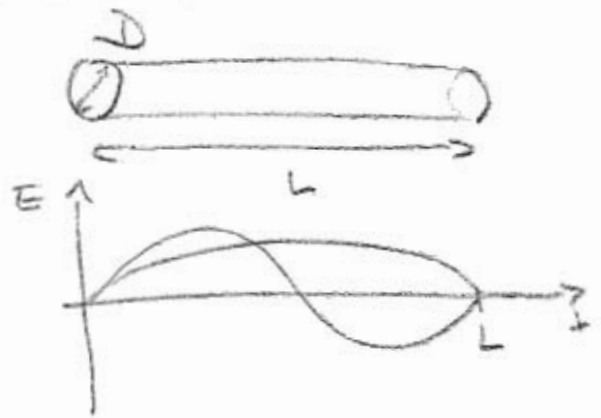
① Resonanzbedingung

$$j \frac{\lambda_j}{2} = L$$

mit Modenindex $j = 1, 2, 3, \dots$

$$\Delta j = 1$$

$$j = \frac{2L}{\lambda_j} = \frac{2L}{c} \nu_j$$



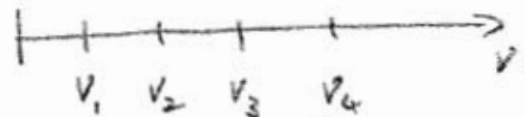
② Frequenz der Moden in Abhängigkeit vom j

$$\nu_j = \frac{c}{2L} j$$

Frequenzabstand der Moden

$$\Delta \nu = \nu_1 = \frac{c}{2L}$$

↑
Frequenz der niedrigsten Mode



← Δν = Frequenzabstand der Moden

↑
Modenspektrum

③ Zahl der Moden bis zur Frequenz ν

$$j = \frac{\nu}{\Delta \nu} = \frac{2L}{c} \nu$$

④ Spektrale Modendichte

$$g(\nu) = \frac{\partial j}{\partial \nu} = \frac{2L}{c} = \text{const.}$$



↑ Die Modendichte $g(\nu)$ ist bei allen Frequenzen ν gleich!

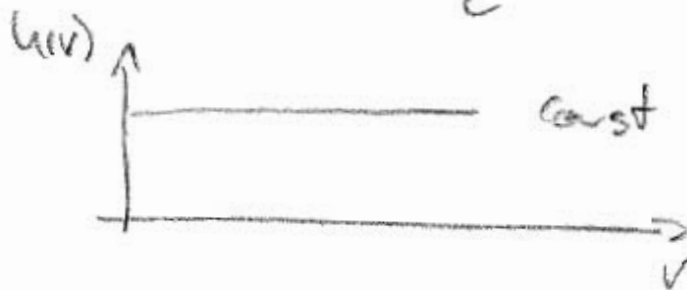
$\int_0^{\nu_{\text{max}}} g(\nu) d\nu = \text{Gesamtzahl der Moden!}$

⑤ Energie U im Frequenzbereich $d\nu$ (klassisch)

$$U(\nu) d\nu = g(\nu) kT d\nu$$

$$= \frac{2L}{c} kT d\nu$$

Energie pro Freiheitsgrad (Mode) im therm. Ggw. (Gleichverteilungssatz)



⑥ Energie U im Frequenzbereich $d\nu$ (quantenmechanisch, nach Planck)

$$U(\nu) d\nu = h\nu \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \frac{2L}{c} d\nu$$

↑ Energie pro Mode
↑ Besetzung der Mode

Rayleigh-Jeans in 1D
← Modendichte

⑦ Grenzfälle:

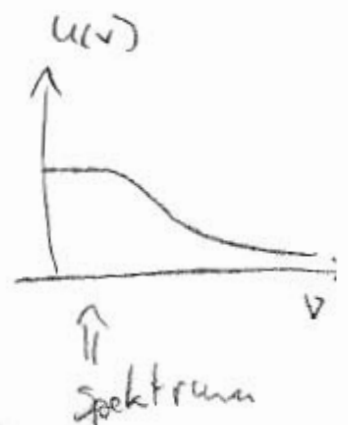
- $h\nu < k_B T \Rightarrow e^{h\nu/k_B T} \sim 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$

$$U(\nu) d\nu = h\nu \frac{k_B T}{h\nu} \frac{2L}{c} d\nu$$

wie kl. Grenzfall

- $h\nu > k_B T \Rightarrow e^{h\nu/k_B T} \gg 1$

$$j = h\nu e^{-h\nu/k_B T} \frac{2L}{c} d\nu$$



Plancksches Strahlungsgesetz in 1D

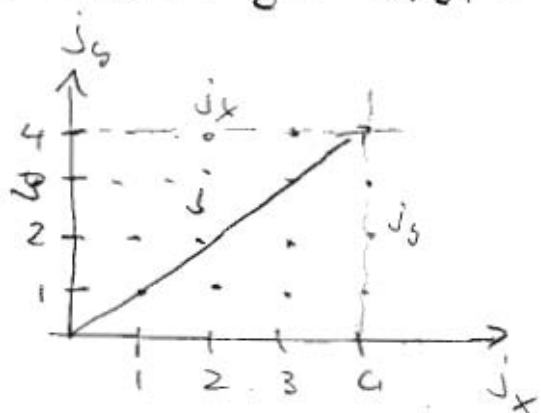
3D Schwarzer Strahler \Rightarrow einziger Unterschied zu 1D ist die Modendichte!

① Resonanzbedingung für alle 3 Raumrichtungen x, y, z

$$j_i \frac{\lambda}{2} = L; \quad i = x, y, z$$

$$\Rightarrow j_i = \frac{2L i}{\lambda} \quad i_1 = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Delta j = 1$$



② Resonanzbedingung entlang beliebiger Richtung

$$j^2 = j_x^2 + j_y^2$$

$$j^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = \left(\frac{2L}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{2L}{c} \nu\right)^2$$

③ Zahl der Mode J bis zur Frequenz ν

$$J = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} j^3 = \frac{\pi}{3} \left(\frac{2L}{c}\right)^3 \nu^3$$

positive \uparrow $\frac{1}{8}$ \uparrow $\frac{4\pi}{3} j^3$
 - dizes \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow
 Volumen einer Kugel mit Radius j

Polarisationsfreiheitsgrade

④ spektrale Modendichte

$$g(\nu) = \frac{\partial J}{\partial \nu} = 8\pi \frac{L^3}{c^3} \nu^2$$

pro Volumen

$$\frac{g(\nu)}{L^3} = G(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2$$

\Rightarrow Analog zum 1D Fall!

Bohr-Modell des Wasserstoff-Atoms

①

① Elektron bewegt sich auf kreisförmiger Bahn um den Atomkern

- Kräftegleichgewicht für stabile Bahn

$$F_c = F_z$$

Coulomb-Kraft
Zentripetalkraft

$$\Leftrightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$\Rightarrow \boxed{v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r}} \Rightarrow v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}}$$

v : nötige Bahngeschwindigkeit die bei Bahnradius r für stabile Bahn sorgt

② Totale Energie des Elektrons im Potential des Kerns

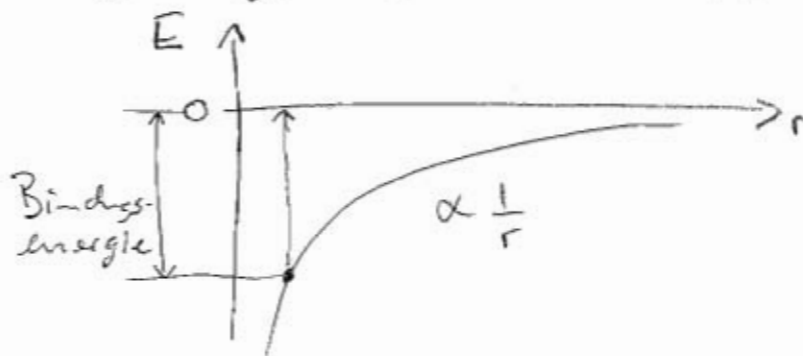
$$\boxed{E = E_{kin} + E_{pot}}$$

$$= \frac{1}{2}mv^2 + \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$= \frac{1}{2}m \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} < 0$$

- totale Energie ist negativ $\Rightarrow \bar{e}$ ist an das Atom gebunden

- Bindungsenergie ist abhängig von Bahnradius r



③ Bestimmung des Bahnradius aus gemessener Ionisationsenergie $E_i = -13.6 \text{ eV}$

$$E = E_i \Leftrightarrow -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = E_i$$

$$\Rightarrow r = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 E_i}$$

$$\approx 0.5 \text{ \AA} = 0.05 \text{ nm}$$

→ Bahnradius des Elektrons im Wasserstoff-Atom

→ ähnlich zu im Röntgenbeugung bestimmten Gitterabständen

④ Abschätzung der Materiewellenlänge λ eines Elektrons bei Bewegung auf einer Bahn um den Kern des Wasserstoffatoms

de Broglie Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{mv}$

$$= \frac{h}{m} \frac{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}}{e}$$

mit r aus der Ionisationsenergie $\sim 3.3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Wellenlänge ist auf atomarer Größenskala

→ Betrachte Elektron als um den Atomkern laufende Welle. Bedingung für konstruktive Interferenz liefert Quantisierungsbedingung für Bahnradius des Elektrons im Wasserstoff-Atom

⑤ Bedingung für konstruktive Interferenz
 \Rightarrow Quantisierungsbedingung

$$n \lambda = 2\pi r_n$$

$$\Rightarrow n \frac{h}{m v_n} = 2\pi r_n \quad \text{mit } v_n = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r_n}}$$

$$\Rightarrow r_n = n^2 \underbrace{\frac{h^2}{e^2} \frac{\epsilon_0}{m\pi}}_{\equiv a_0} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$r_1 = \frac{h^2}{e^2} \frac{\epsilon_0}{m\pi} \equiv a_0 \quad \text{Bohr-Radius der niedrigsten erlaubten Elektronbahn}$$

$$\boxed{r_n = n^2 a_0}$$

- erlaubte Elektron Bahnradien
- nur diskrete Werte der Bahnradien sind möglich

\Rightarrow Quantisierung der möglichen Elektronenergien.

\Rightarrow Erklärung des Wasserstoffspektrums

⑥ Konsequenz: Quantisierung des Bahndrehimpuls

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\boxed{L} = m v_n r_n = \frac{m e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r_n}} r_n$$

$$= \frac{m e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m}} \sqrt{\frac{h^2}{e^2} \frac{\epsilon_0}{m\pi}}$$

$$\boxed{= n \hbar}$$

⑦ Energie des Wasserstoffatoms mit quantisierter Bahnradius

$$E_m = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_m} = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{h^2} \frac{4\pi^2}{\epsilon_0} \frac{1}{n^2}$$

$$= - \frac{1}{n^2} \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

Rydberg-Konstante

$$R_0 = \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2} \approx 13.6 \text{ eV}$$

Teilchen im Potentialtopf

- ① Beschreibung des Teilchens durch eine Materiewelle
- ② Freies Teilchen beschrieben als Materiewelle hat Wellenfunktion:

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

- ③ zugehörige Energie und Impuls des freien Teilchens

$$E = \hbar \omega = \hbar \nu$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{de Broglie})$$

- ④ klassische kinetische Energie eines Teilchens mit Impuls p

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

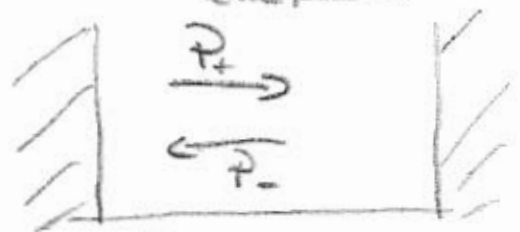
- ⑤ zwei Möglichkeiten für den Impuls p oder Wellenvektor k

$$p = \pm \sqrt{2mE}$$

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

+ : Materiewelle in positive Richtung laufend

- : Materiewelle in negative Richtung laufend



⑥ Finde stehende Welle, die die Randbedingungen erfüllt

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= C_1 e^{i(kx - \omega t)} + C_2 e^{i(-kx - \omega t)} \\ &= \underbrace{(C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx})}_{\tilde{\Psi}(x)} e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

linker Rand:

A $\tilde{\Psi}(0) = 0$: $\tilde{\Psi}(0) = C_1 + C_2 \stackrel{!}{=} 0$

$\Rightarrow C_2 = -C_1$

$\Rightarrow \tilde{\Psi}(x) = C_1 (e^{ikx} - e^{-ikx})$

rechter Rand:

$= C_1 2i \sin kx$

B: $\tilde{\Psi}(a) = 0$: $\tilde{\Psi}(a) = C_1 2i \sin ka \stackrel{!}{=} 0$

$\Rightarrow \boxed{k = \frac{n\pi}{a}}$

⑦ Resultierende erlaubte Gesamtenergien

$$E_m = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \propto \underline{\underline{n^2}}$$

\Rightarrow diskrete erlaubte Energien zur Quantenzahl n!

② Wellenfunktion

$$\tilde{\psi} = C_1 2i \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$= C_1 \left(\underbrace{e^{i \frac{n\pi}{a} x}}_{\text{rechts-laufende}} - \underbrace{e^{-i \frac{n\pi}{a} x}}_{\text{links-laufende}} \right)$$

rechts-laufende links-laufende Welle

⑨ Normierungsbedingung

$$\int_0^a \tilde{\psi}^* \tilde{\psi} dx = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^a C_1 C_1^* 4 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = C_1 C_1^* 4 \frac{1}{2} a \stackrel{!}{=} 1$$

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

$$\tilde{\psi} = \frac{1}{\sqrt{2a}} 2i \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right)$$

normierte
Wellenfunktion!

Intuitive Herleitung der Schrödinger-Gleichung

- ① Gesamtenergie eines nicht-relativistischen Teilchens

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

- ② betrachte der Einfachheit halber ein freies Teilchen

$$U = 0$$

dieses kann durch die Wellenfunktion beschrieben werden

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= A e^{i(kx - \omega t)} && \text{mit } E = \hbar\omega = \hbar\nu \\ & && p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \\ &= A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \end{aligned}$$

- ③ Betrachte Ableitungen dieser Wellenfunktion

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi = \frac{i}{\hbar} p \psi \quad \Rightarrow \quad p \psi = \underbrace{-i\hbar}_{\hat{p}} \frac{\partial}{\partial x} \psi$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \psi \quad \Rightarrow \quad p^2 \psi = \underbrace{-\hbar^2}_{\hat{p}^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{i}{\hbar} E \psi \quad \Rightarrow \quad E \psi = \underbrace{i\hbar}_{\hat{E}} \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

⑧

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U\psi$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U\psi$$

Schrödinger-Gleichung

C

C

Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U \psi$$

für $U(x,t) = U(x)$

① Vereinfachung \hat{U} a hat des Beispiels eines freien Teilchens

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}_{\substack{\text{zeitabhängiger} \\ \text{Anteil der} \\ \text{Schrödinger} \\ \text{Gleichung}}} \underbrace{\tilde{\psi}(x)}_{\substack{\text{zeitunabhängiger} \\ \text{Anteil}}}$$

zeitabhängiger
Anteil der
Schrödinger
Gleichung

zeitunabhängiger
Anteil

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tilde{\psi}(x) &= E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tilde{\psi}(x) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\psi}(x) + U(x) \tilde{\psi}(x) \right) \end{aligned}$$

② zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

\Rightarrow

$$E \tilde{\psi}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\psi}(x) + U(x) \tilde{\psi}(x)$$

Erwartungswerte

①

① Wellenfunktion beschreibt alle quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens

② Betragsquadrat der Wellenfunktion gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort x an

↑
Die Quantenmechanik macht keine Aussage über den bestimmten Aufenthaltsort eines Teilchens zur Zeit t , nur über die Wahrscheinlichkeit es dort anzutreffen

③ Eine einzelne Messung einer physikalischen Eigenschaft eines q.m. Teilchens liefert nur ein einzelnes Resultat.
Das Resultat kann von Messung zu Messung variieren.

④ klassisches Beispiel: Würfeln

• 6 Seitenflächen mit 6 Zahlen (Augen)

• mögliche Resultate

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

• Wahrscheinlichkeit P_n eines einzelnen Resultats

$$P_1 = P_2 = \dots = P_6 = \frac{1}{6}$$

• Normierung:
Summe aller Wahrscheinlichkeiten = 1

$$\sum_n P_n = \sum_{n=1}^6 \frac{1}{6} = 1$$

• mittlere Augenzahl

$$\bar{n} = \frac{\sum_n P_n n}{\sum_n P_n}$$

$$= \frac{1}{6} (1 + 2 + \dots + 6)$$

$$= \frac{1}{6} (1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6) = \frac{21}{6}$$

⑤ QM: Bestimmung des Mittelwerts einer Messgröße = 3.5
z.B. Ort, Impuls, Energie
→ Erwartungswert

Erwartungswert des Impulses

$$\overline{p} = \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} c(p)^* e^{-\frac{ix}{\hbar} p} \frac{1}{\sqrt{\hbar}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{1}{\sqrt{\hbar}} c(p') e^{\frac{ix}{\hbar} p'}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' p' c^*(p) c(p') \underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ix}{\hbar} p} e^{\frac{ix}{\hbar} p'} dx}_{\delta(p-p')}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp - p c^*(p) c(p)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp p |c(p)|^2$$

Selbes Resultat
wie intuitive
Herleitung

↳ Allgemeine Regel zur Berechnung von Erwartungswerten

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{O} \psi dx$$

Messung in der Quantenmechanik

(1)

- ① Ψ_m sei Eigenfunktion eines Operators \hat{A} mit Eigenwert a_m

$$\hat{A} \Psi_m = a_m \Psi_m$$

- ② Bestimmung des Erwartungswertes eines solchen Operators

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi_m^* \hat{A} \Psi_m dx = \int \Psi_m^* a_m \Psi_m dx$$

$$= a_m \int \Psi_m^* \Psi_m dx = a_m$$

⇒ Der Erwartungswert von \hat{A} entspricht gerade dem Eigenwert a_m

- ③ Betrachte zweiten Operator \hat{B} zu einer weiteren Messgrösse. Wann lassen sich beide durch \hat{A} und \hat{B} repräsentierten physikalischen Grösse gleichzeitig messen?

Es muss gleichzeitig gelten

$$(1) \quad \hat{A} \Psi_m = a_m \Psi_m$$

$$(2) \quad \hat{B} \Psi_m = b_m \Psi_m$$

für alle Ψ_m

- ④ Berechne Differenz zwischen Anwendung der beiden Operatoren mit vertauschter Reihenfolge

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}\psi_m - \hat{B}\hat{A}\psi_m &= \hat{A}b_m\psi_m - \hat{B}a_m\psi_m \\ &= b_m a_m \psi_m - a_m b_m \psi_m \\ &= (b_m a_m - a_m b_m) \psi_m = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_m = \boxed{[\hat{A}, \hat{B}] = 0}$$

↑
Dies gilt, wenn \hat{A} und \hat{B}
gemeinsame Eigenfunktionen
haben

⇒ Umkehrung gilt ebenfalls:

Wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dann haben \hat{A}, \hat{B} gemeinsame
Eigenfunktionen und die Observablen \hat{A} und \hat{B} lassen
sich gleichzeitig bestimmen.

Beispiel: I.

$$\hat{A} = \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{Impuls}$$

$$\hat{B} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{kinetische Energie}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

II.

$$\hat{A} = \hat{x} = x$$

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

$$[x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}]\psi = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} \psi$$

$$= i\hbar \psi \neq 0$$

⇒ Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und
Impuls

Superpositions-Prinzip:

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

Ψ_1, Ψ_2 sind Lösungen
der Schrödingergleichung

Normierung:

$$\int \Psi^* \Psi dx = \int (a_1^* \Psi_1^* + a_2^* \Psi_2^*) (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) dx$$

$$= a_1^* a_1 \int \underbrace{\Psi_1^* \Psi_1}_{1} dx + a_2^* a_2 \int \underbrace{\Psi_2^* \Psi_2}_{1} dx$$

$$+ a_1^* a_2 \int \underbrace{\Psi_1^* \Psi_2}_{0} dx + a_2^* a_1 \int \underbrace{\Psi_2^* \Psi_1}_{0} dx$$

$$\int \Psi_i^* \Psi_j dx = \delta_{ij}$$

$$= |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

Bedingung für
Koeffizienten
 a_1, a_2

Energie-Erwartungswert:

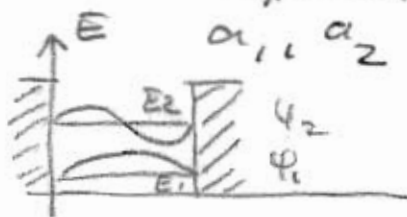
- betrachte quantenmechanisches
System mit

$$H \Psi_1 = E_1 \Psi_1$$

$$H \Psi_2 = E_2 \Psi_2$$

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

z.B.



- mittlere Energie

$$\langle H \rangle = \int \Psi^* H \Psi dx = \int (a_1^* \Psi_1^* + a_2^* \Psi_2^*) (a_1 H \Psi_1 + a_2 H \Psi_2) dx$$

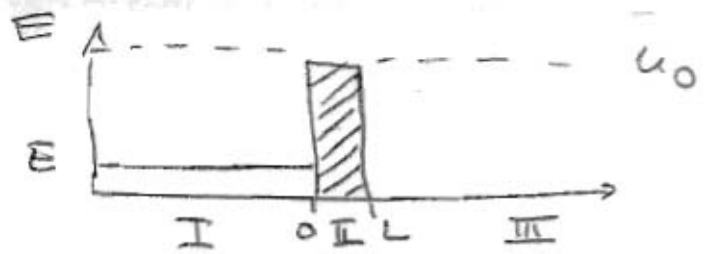
$$= a_1^* a_1 E_1 + a_2^* a_2 E_2 = |a_1|^2 E_1 + |a_2|^2 E_2$$

$$= \sum |a_i|^2 E_i$$

$$= \sum p_i E_i$$

Der Tunneleffekt

① Das Potential



② Die Schrödinger-Gleichung

$$\text{I: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{\text{I}} = E \psi_{\text{I}}$$

$$\text{II: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{\text{II}} + U_0 \psi_{\text{II}} = E \psi_{\text{II}}$$

$$\text{III: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{\text{III}} = E \psi_{\text{III}}$$

③ Die Lösungen

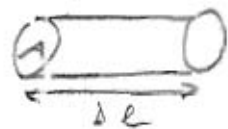
$$\text{I: } \psi_{\text{I}} = A e^{ik_{\text{I}}x} + B e^{-ik_{\text{I}}x} \quad k_{\text{I}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{II: } \psi_{\text{II}} = C e^{k_{\text{II}}x} + D e^{-k_{\text{II}}x} \quad k_{\text{II}} = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\text{III: } \psi_{\text{III}} = \underbrace{F e^{ik_{\text{III}}x}}_{\text{rechtslaufende Welle}} + \underbrace{G e^{ik_{\text{III}}x}}_{\text{linkslaufende Welle}} \quad k_{\text{III}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k_{\text{I}}$$

④ Teilchenfluss

$$S = |\psi|^2 v$$



⑤ Transmissionswahrscheinlichkeit oder Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{|\psi_{\text{III}}|^2 v_{\text{III}}}{|\psi_{\text{I}}|^2 v_{\text{I}}} = \frac{FF^*}{AA^*} \frac{v_{\text{III}}}{v_{\text{I}}}$$

⑥ Randbedingungen

stetige Wellenfunktionswert $\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \quad \text{und} \quad \psi_{\text{II}}(L) = \psi_{\text{III}}(L)$

stetiger Fluss $\frac{\partial \psi_{\text{I}}}{\partial x}(0) = \frac{\partial \psi_{\text{II}}}{\partial x}(0) \quad \text{und} \quad \frac{\partial \psi_{\text{II}}}{\partial x}(L) = \frac{\partial \psi_{\text{III}}}{\partial x}(L)$

⑦ Lösung der Gleichung für die Randbedingungen nach

$$\frac{A}{F} = \left[\frac{1}{2} + \frac{i}{4} \left(\frac{k_{II}}{k_I} - \frac{k_I}{k_{II}} \right) \right] e^{(ik_I + k_{II})L} + \left[\frac{1}{2} - \frac{i}{4} \left(\frac{k_{II}}{k_I} - \frac{k_I}{k_{II}} \right) \right] e^{(ik_I - k_{II})L}$$

⑧ Vereinfachung:

A: $k_{II} > k_I$ da $U_0 - E > E$ Teilchenenergie ist kleiner als Barrierehöhe

C: $\Rightarrow D \frac{k_{II}}{k_I} - \frac{k_I}{k_{II}} \sim \frac{k_{II}}{k_I}$

B: $e^{k_{II}L} \gg e^{-k_{II}L} \rightarrow$ Barriere ist lag

$\Rightarrow \frac{A}{F} = \left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4} \frac{k_{II}}{k_I} \right) e^{(k_I + k_{II})L}$ mit komplex konjugierter Größe multiplizieren

C: $\frac{AA^*}{FF^*} = \left(\frac{1}{4} + \frac{(k_{II}/k_I)^2}{16} \right) e^{2k_{II}L}$

⑨ mit $v_{III} = v_I$

$$T = \frac{FF^*}{AA^*} = e^{-2k_{II}L} \left(\frac{16}{4 + (k_{II}/k_I)^2} \right)$$

$$\sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar}}$$

Starke Energieabhängigkeit

$$\frac{U-E}{E} = \frac{U}{E} - 1$$

Schwache Energieabhängigkeit

Der quantenmechanische harmonische Oszillator

①

① Die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + \underbrace{\frac{1}{2} k x^2}_{\frac{1}{2} m \omega^2 x^2} \psi = E \psi \quad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

② ausgedrückt in dimensionslos losen Einheiten \tilde{x}, \tilde{E}

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tilde{x} \quad \text{normierte Koordinate}$$

$$E = \hbar\omega \tilde{E} \quad \text{normierte Energie}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial \psi}{\partial \tilde{x}} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \psi \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \psi$$

③ Substitution:

$$-\frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + x^2 \psi = \frac{2E}{m\omega^2} \psi$$

A: Division durch $\frac{1}{2} m \omega^2$

B: Substitution

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \psi + \frac{\hbar}{m\omega} \tilde{x}^2 \psi = 2 \frac{\hbar}{m\omega} \tilde{E} \psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \psi + \tilde{x}^2 \psi \right) = \tilde{E} \psi$$

④ Umschreiben in Produkt von Operatoren b^+ und b

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right)}_{b^+} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right)}_b = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{x}^2 - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \tilde{x}}_{-1} + \tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \right)$$

$$-\tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} - 1$$

Produktregel

Schrödinger-Gleichung in neuen Operatoren ausgedrückt

(2)

$$\underbrace{b^+ b}_{\text{Operator}} \Psi = \underbrace{\left(\tilde{H} - \frac{1}{2} \right)}_{\text{Eigenwert}} \Psi = \underbrace{\left(\tilde{E} - \frac{1}{2} \right)}_{\text{Eigenwert}} \Psi$$

Schrödinger-Gl.
ausgedrückt in
 $b^+ b$

$$b^+ b \Psi_\lambda = n_\lambda \Psi_\lambda$$

$$n_\lambda = \tilde{E} - \frac{1}{2}$$

Energie des
harmonisch
Oszillators

Quante Zahl

⑥ betrachte Kommutator $[b^+, b]$

$$[b^+, b] = b^+ b - b b^+ = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow E = n_\lambda + \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow E = \hbar \omega \left(n_\lambda + \frac{1}{2} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left[\left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right) \left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right) \right]$$

$$= \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{x}^2 - \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \tilde{x} + \tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \right]$$

$$+ \left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \tilde{x}^2 - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \tilde{x}}_{\tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + 1} + \tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \right]$$

$$= -1 = b^+ b - b b^+$$

$$[b, b^+] = +1 = b b^+ - b^+ b$$

(7) Betrachte Eigenschaften der Eigenfunktionen

- Wende Operator b auf Schrödingergleichung an

$$\underbrace{b b^\dagger b}_{b^\dagger b + 1} \psi_\lambda = m_\lambda b \psi_\lambda$$



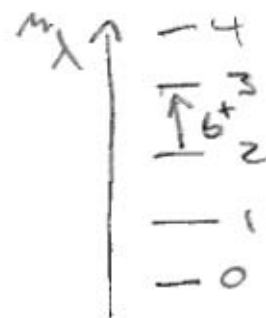
$$\Rightarrow \underbrace{(b^\dagger b)}_{\text{neue}} \underbrace{b \psi_\lambda}_{\text{Eigenfunktion}} = \underbrace{(m_\lambda - 1)}_{\text{neuer}} \underbrace{b \psi_\lambda}_{\text{Eigenfunktion}}$$

\Rightarrow der Operator b erniedrigt die Quantenzahl um 1.

- $b \psi_\lambda$ ist neue Lösung der Schrödingergl.
- durch Anwendung von b wird der Energieeigenwert um 1 erniedrigt
- b wird als Vernichtungsoperator genannt

Analogs: Wende Operator b^\dagger auf Schrödingergleichung an

$$b^\dagger b^\dagger b \psi_\lambda = m_\lambda b^\dagger \psi_\lambda$$



$$b^\dagger (b b^\dagger - 1) \psi_\lambda = m_\lambda b^\dagger \psi_\lambda$$

$$b^\dagger b b^\dagger \psi_\lambda = (m_\lambda + 1) b^\dagger \psi_\lambda$$

- $b^\dagger \psi_\lambda$ ist neue Lösung
- durch Anwendung von b^\dagger wird der Energieeigenwert um 1 erhöht
- b^\dagger wird der Erzeugnisoperator genannt

⑧ Bestimmung der Eigenfunktionen

- Annahme:
- die Schrödinger-Gleichung hat nur positive Energieeigenwerte $E > 0$
 - es gibt eine Wellenfunktion ψ_0 , die zur niedrigsten Energie $\tilde{E}_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega = 0$ gehört

$$b \psi_0 = 0$$

$$m_\lambda = 0 \Rightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \psi_0 + \tilde{x} \psi_0 = 0$$

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$$\Leftrightarrow \int \frac{1}{\psi_0} d\psi_0 = - \int \tilde{x} dx$$

$$\Leftrightarrow \ln \psi_0 = - \frac{1}{2} \tilde{x}^2 + C'$$

$$\Leftrightarrow \psi_0 = C e^{-\frac{1}{2} \tilde{x}^2} \quad \text{niedrigste Eigenfunktion}$$

$$\psi_\lambda = (b^\dagger)^\lambda \psi_0$$

$$\psi_1 = \left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x} \right) C e^{-\frac{1}{2} \tilde{x}^2}$$

$$\sim \tilde{x} e^{-\frac{1}{2} \tilde{x}^2}$$

us.w.

allgemeine Lösung:

$$m_\lambda = 1 \Rightarrow E = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

$$\psi_m = e^{-\frac{1}{2} \tilde{x}^2} H_m(\tilde{x}) \quad \text{mit} \quad H_m(\tilde{x}) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2^m}} e^{\tilde{x}^2} \frac{d^m}{d\tilde{x}^m} e^{-\tilde{x}^2} \frac{1}{\sqrt{m! \sqrt{\pi}}}$$

Zusammenfassung:

5

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{4}{\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^2 \frac{m\omega}{\hbar}\right) \cdot H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

Kommutatoren und gleichzeitige Eigenfunktionen

(1)

① Wenn für zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} gilt

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

dann haben sie gleichzeitige Eigenfunktionen $\Psi_{m,m}$

$$\hat{A}\Psi_{m,m} = a_m \Psi_{m,m}$$

$$\hat{B}\Psi_{m,m} = b_m \Psi_{m,m}$$

mit Eigenwerte a_m zur Quantenzahl m und b_m zur Quantenzahl m

② Für das Wasserstoff-Atom gilt

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

Daher gibt es gemeinsame Eigenfunktionen Ψ von $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \leftarrow \text{Eigenfunktion}$$

⊗ Schrödinger-Gleichung

$$\hat{L}^2\Psi = C_L\Psi$$

⊗ Eigenwertgl. für Drehimpuls

$$\hat{L}_z\Psi = C_{mL}\Psi$$

⊗ Eigenwertgl. für z-Komponente

Drehimpuls Eigenfunktionen und Eigenwerte

(2)

① Erwartungswerte des Drehimpuls für Elektron im Wellenfunktion ψ mit Winkelanteil Y_{lm_e}

$$\langle \hat{l}^2 \rangle = \int Y_{lm_e}^* \hat{l}^2 Y_{lm_e} d\Omega$$

$$= \int Y_{lm_e}^* \hbar^2 l(l+1) Y_{lm_e} d\Omega$$

$$= \hbar^2 l(l+1) \underbrace{\int Y_{lm_e}^* Y_{lm_e} d\Omega}_{=1}$$

= 1 wg. Normierung

$$\langle \hat{l}_z \rangle = \int Y_{lm_e}^* \hat{l}_z Y_{lm_e} d\Omega$$

$$= \hbar m_e \underbrace{\int Y_{lm_e}^* Y_{lm_e} d\Omega}_{=1} = \hbar m_e$$

② Dirac - Notation

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

Wellenfunktion

$$\hat{l}_z |l, m_e\rangle = \hbar m_e |l, m_e\rangle$$

Eigenwertgl.

Erwartungswerte:

$$\langle \hat{l}^2 \rangle = \langle l, m_e | \hat{l}^2 | l, m_e \rangle = \int Y_{lm_e}^* \hat{l}^2 Y_{lm_e} d\Omega$$

Drehimpuls:

(3)

Klassisch: $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$|\vec{l}| = r m v$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{|\vec{l}|^2}{2I}$$

Trägheitsmoment

$$I = m r^2$$

$$= \frac{r^2 m^2 v^2}{2 m r^2} = \frac{1}{2} m v^2$$

Quantenmechanisch:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{\langle \hat{l}^2 \rangle}{2 m r^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2 m r^2}$$

$$= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

$$\langle \hat{l}^2 \rangle = \left(\hbar \sqrt{l(l+1)} \right)^2 \quad l = 0, \dots, n-1$$

$$\frac{h}{2\pi} = 1.0 \cdot 10^{-34}$$

Js

Einheit des Drehimpuls

$$\langle \hat{l}_z \rangle = \hbar m_l$$

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$$

Separation der Variablen in der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoff-Atoms in Polarkoordinaten

① Die SGL in Polarkoordinaten

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \Psi$$

② multipliziere mit $-\frac{2m}{\hbar^2}$ und $r^2 \sin^2 \theta$

$$\left(\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi + r^2 \sin^2 \theta \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \Psi = 0$$

③ Separation der Variablen

mit Lösungsansatz $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$

$$\frac{1}{R} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{1}{\Theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi + r^2 \sin^2 \theta \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = 0$$

$\Rightarrow \dots = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi$

- bringe vom Φ abhängige Terme auf eine Seite
- DGL kann nur erfüllt sein, wenn beide Seiten identisch einer Konstanten sind

$= m_l^2 \hbar^2$ wähle Konstante

④ Benutze Ergebnis der Separation für Φ und separiere wiederum

= dividiert durch $\sin^2 \theta$

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta \quad (H)$$

$$- \frac{m_e^2}{\sin^2 \theta} + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + r^2 \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) =$$

$$- \frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta + \frac{m_e^2}{\sin^2 \theta}$$

- ist nur lösbar wenn beide Seite identisch einer konstanten sind

↳ wähle konstante $l(l+1)$

⑤ resultierende Gleichung

Gesamtenergie

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right) R = 0$$

↑ Radial-Teil

↑ Potential

↑ kinetische Energie aus Drehimpuls

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta + (\sin^2 \theta l(l+1) - m_e^2) \Theta = 0$$

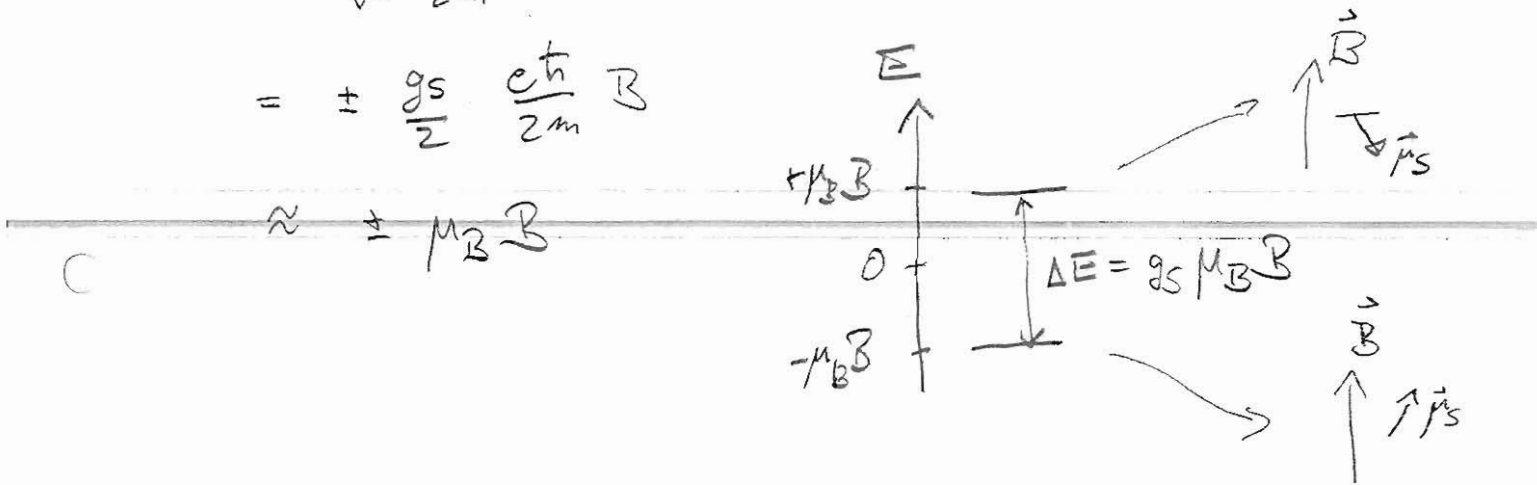
↑ Winkel-Teil

→ 3 Differential-Gleichungen für R, Θ, Φ

Energie eines Elektrons in einem homogenen Magnetfeld

$$\begin{aligned}
 U_m &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \\
 &= + \left(g_s \frac{e}{2m} \right) \vec{S} \cdot \vec{B} \\
 &= g_s \frac{e}{2m} S_z B \\
 &= \pm \frac{g_s}{2} \frac{e\hbar}{2m} B
 \end{aligned}$$

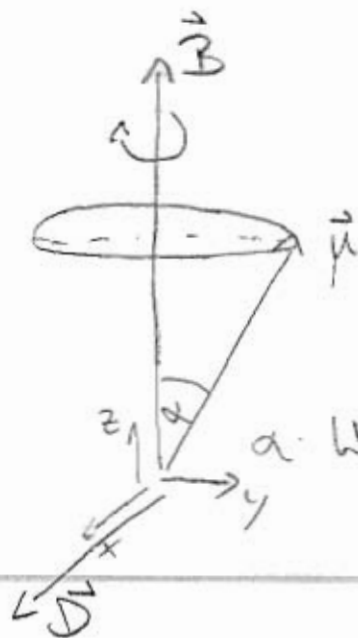
$$\langle S_z \rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar = m_s \hbar$$



Präzession von magnetischem Moment $\vec{\mu}$ im externen Magnetfeld \vec{B}

①

①



Drehmoment \vec{D} auf das magnetische Moment $\vec{\mu}$

$$\vec{D} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

$$\Rightarrow |\vec{D}| = |\vec{\mu}| |\vec{B}| \sin \alpha$$

α : Winkel zwischen $\vec{\mu}$ und \vec{B}

$\rightarrow \vec{D}$ ist immer senkrecht zu der aus $\vec{\mu}$ und \vec{B} aufgespannte Fläche

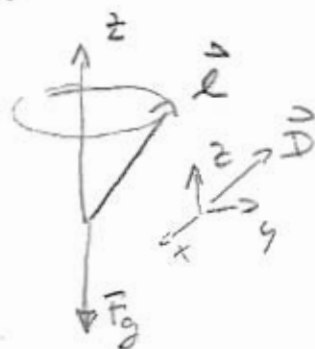
\rightarrow führt zu Rotationsbewegung des magnetischen Moments in die Feld-Richtung

\Rightarrow Präzession

② Präzessions-Frequenz

Analogie zum mechanischen Kreisel

$$\omega_p = \frac{|\vec{D}|}{|\vec{L}| \sin \alpha}$$



③ Präzession eines durch den Bahndrehimpuls \vec{L} induzierten magnetischen Moments $\vec{\mu}$

$$\omega_p = \frac{|\vec{D}|}{|\vec{L}| \sin \alpha}$$

$$|\vec{D}| = |\vec{\mu} \times \vec{B}| = |\mu| |\vec{B}| \sin \alpha$$

$$= \frac{|\mu| \sin \alpha}{|\vec{L}| \sin \alpha} |\vec{B}| = \gamma B$$

gyromagnetisches Verhältnis

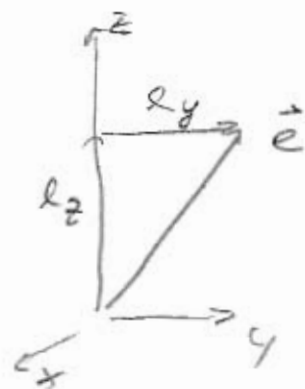
$$= \frac{e}{2m} \frac{|\vec{L}|}{|\vec{L}|} |\vec{B}| = \frac{1}{\hbar} \mu_B B = \omega_L$$

Larmor-Frequenz

- ω_L ist unabhängig vom Winkel $\sin \alpha$

- Erklärung für quantenmechanisch verschwindenden Mittelwert von $\langle l_x \rangle$ und $\langle l_y \rangle$

- zeitabhängige Messung würde Bestimmung von l_x , l_y und l_z miteinander ermöglichen



- q.m. ist die Richtung von \vec{L} festgehalten

$$l_z = m_l \hbar \quad \text{mit } m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$$

- trotzdem bleibt die Larmor-Frequenz konstant da sie nur von $|\vec{L}|$ abhängt

④ Analog: Präzession des Spins

$$\omega_p = \frac{|\vec{D}|}{|\vec{S}| \sin \alpha}$$

$$\vec{D} = \vec{\mu}_s \times \vec{B}$$

$$= \frac{|\vec{\mu}_s| \sin \alpha}{|\vec{S}| \sin \alpha} |\vec{B}| = \gamma B$$

↑ gyromagnetisches Verhältnis

$$= \frac{e}{m} \frac{|\vec{S}| \sin \alpha}{|\vec{S}| \sin \alpha} B$$

$$= 2 \mu_B B \frac{1}{\hbar}$$

Larmorfrequenz des Spins

- nur zwei Richtungen für \vec{S} erlaubt

$$S_z = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

- trotzdem nur eine Larmor-Frequenz

Zum Spektrum des Wasserstoff-Atoms:

①

① $n=2$; $l=0,1$; $s=\frac{1}{2}$

$j = |l \pm s| \Rightarrow$ zwei verschiedene Möglichkeiten für $s = \frac{1}{2}$

$l =$	0	1
$j =$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$2^2 S_{1/2}$	$2^2 P_{1/2}$ $2^2 P_{3/2}$	} Spin-Bahn-Kopplung
---------------	--------------------------------	----------------------

② $n=3$; $l=0,1,2$; $s=\frac{1}{2}$

$l =$	0	1	2
-------	---	---	---

$j =$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
-------	---------------	----------------------------	----------------------------

$3^2 S_{1/2}$	$3^2 P_{1/2}$ $3^2 P_{3/2}$	$3^2 D_{3/2}$ $3^2 D_{5/2}$	} Spin-Bahn-Kopplung
---------------	--------------------------------	--------------------------------	----------------------

Die Schrödinger-Gleichung für den Elektron-Spin ①

① Hamiltonian eines magnetischen Moments in einem externen Magnetfeld

$$H = - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = - (\mu_x B_x + \mu_y B_y + \mu_z B_z) \quad \left| \begin{array}{l} \uparrow \vec{B} \\ \nearrow \vec{\mu} \end{array} \right.$$
$$= - \mu_z B_z \quad \text{für } \vec{B} = (0, 0, B_z)$$

② für das magnetische Moment eines Elektrons

$$\vec{H} = - \vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \vec{\mu} = -g_s \frac{e}{2m} \vec{S}$$
$$= g_s \frac{e}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B} = g_s \frac{e}{2m} (S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z)$$
$$= g_s \frac{e}{2m} S_z B_z \quad \text{für } \vec{B} = (0, 0, B_z)$$

③ der quantenmechanische Hamilton Operator

$$\hat{H} = g_s \frac{e}{2m} B_z \hat{S}_z \quad \text{mit } \langle \hat{S}_z \rangle = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

- $\hat{H} \psi = E \psi$ mit \hat{H} wie zuvor

- finde Operator \hat{S}_z für Eigendrehimpuls

Die Spin-Operatoren

(2)

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \hat{Z}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x = \frac{\hbar}{2} \hat{X}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \hat{Y}$$

Pauli-Matrizen

- Eigenvektoren und Eigenwerte von \hat{S}_z

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

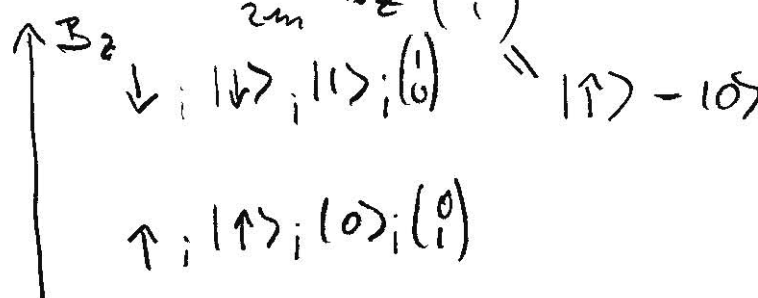
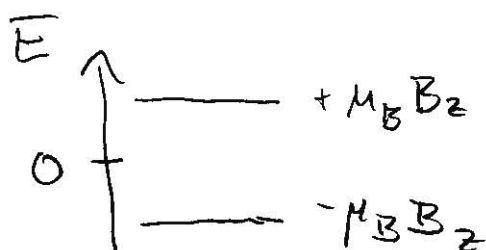
$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \underbrace{-\frac{\hbar}{2}}_{\text{Eigenwert}} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\text{Eigenvektor}}$$

$$m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

- zugehörige Energien im Magnetfeld

$$\hat{H} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = g_s \frac{e}{2m} B_z \hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = g_s \frac{e}{2m} B_z \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \approx \frac{e\hbar}{2m} B_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad | \downarrow \rangle = |1\rangle$$

$$\hat{H} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = g_s \frac{e}{2m} B_z \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -g_s \frac{e}{2m} B_z \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \approx -\frac{e\hbar}{2m} B_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad | \uparrow \rangle = |0\rangle$$



Notation für Eigenvektoren: von \hat{S}_z

(3)

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle = |1\rangle = |+1\rangle$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle = |0\rangle = |-1\rangle$$

Die Leiteroperatoren

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

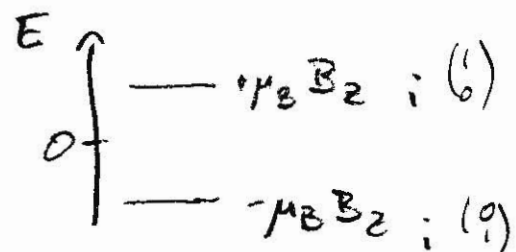
$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

Erzenger



Orthogonalität der Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = (0, 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 = \langle \downarrow | \uparrow \rangle$$

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 = \langle \downarrow | \downarrow \rangle$$

$$\langle \uparrow | = | \downarrow \rangle^\dagger = (| \downarrow \rangle^\dagger)^*$$

Weitere Eigenschaften der Eigendrehimpulsoperatoren

(4)

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Betragquadrat des
Eigendrehimpuls

mit $\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \hat{I}$
 $= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Eigenvektoren und Eigenwerte

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar \sqrt{3}}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar \sqrt{3}}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hbar^2 s(s+1) \text{ mit } s = \frac{1}{2}$$

Kommutationsrelationen des Eigendrehimpuls

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = -i\hbar \hat{S}_z \text{ und zyklisch}$$

keine gleichzeitigen Eigenvektoren

↳ nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmbar

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

gleichzeitige
Eigenvektoren

Erwartungswerte

$$\langle \uparrow | \hat{S}_z | \uparrow \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^\dagger \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (0, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} = -\frac{\hbar}{2}$$

Beispiel für die Kopplung von Drehimpulsen

①

- betrachte zwei Elektronen mit folgenden Bahndrehimpulsen

$$\left. \begin{array}{l} l_1 = 1 \\ l_2 = 1 \end{array} \right\} \text{Ein Elektron - Bahndrehimpuls - Quantenzahl}$$

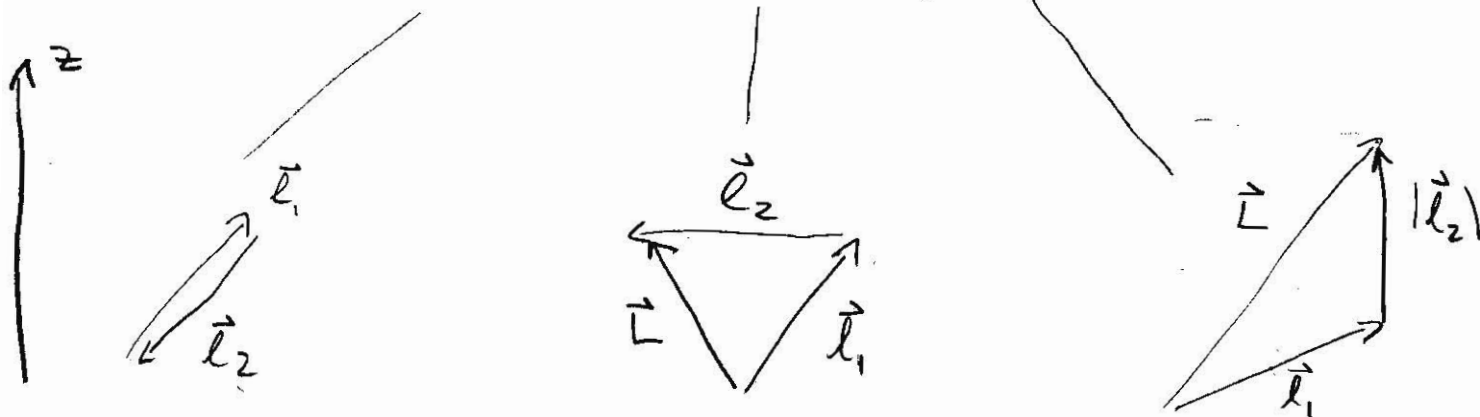
- Quantenzahlen des Gesamt-Bahndrehimpulses

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, |l_1 + l_2|$$

- 0

1

2



$$|\vec{l}_1| = \hbar \sqrt{l_1(l_1+1)}$$

$$|\vec{l}_2| = \hbar \sqrt{l_2(l_2+1)}$$

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{L(L+1)}$$

$$= \sqrt{2} \hbar$$

$$= \sqrt{2} \hbar$$

Berechnung der Winkel zwischen Drehimpulsvektoren aus Längen der Komponenten

$$z = 0, \sqrt{2} \hbar, \sqrt{6} \hbar$$

$$L = 0$$

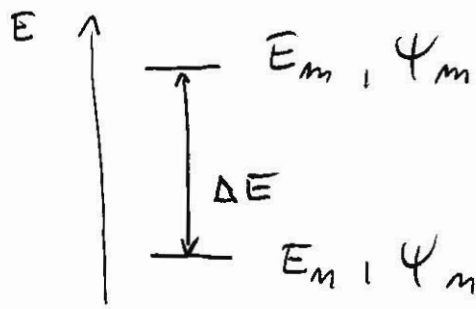
$$L = 1$$

$$L = 2$$

- Quantisierungs-Regeln gleichzeitig für \vec{l}_1 , \vec{l}_2 und \vec{L} erfüllt

- Analoges Vorgehen für $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$, $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$
 $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Übergänge zwischen quantenmechanischen Zuständen (1)



Energie des Übergangs
$$\Delta E = E_m - E_n$$
$$= h \nu_{mn}$$

- zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H \Psi_m = E_m \Psi_m$$

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n$$

mit Eigenenergien E_m, E_n
und Eigenzuständen Ψ_m, Ψ_n

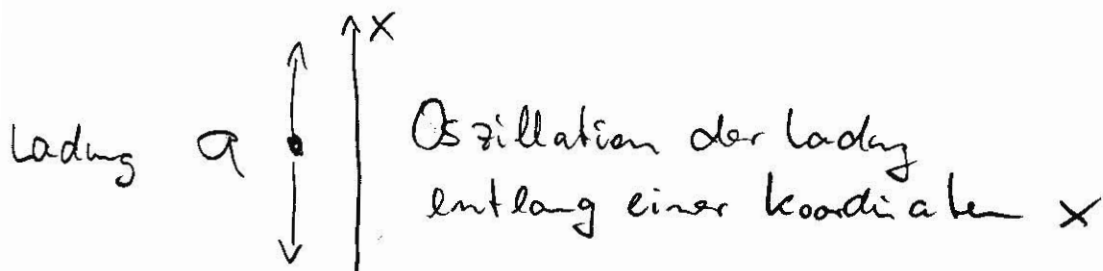
- zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_m = H \Psi_m = E_m \Psi_m$$

$$\Rightarrow \Psi_m(t) = e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} \Psi_m(0)$$

zeitliche Änderung der Wellenfunktion
eines Eigenzustands

Erzeugung von elektromagnetischer Strahlung



Dipolmoment
$$\vec{p} = q \vec{x} = \underbrace{-e}_{\text{für Elektron}} \vec{x}$$

Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes des Dipolmoments in einem Eigenzustand

(2)

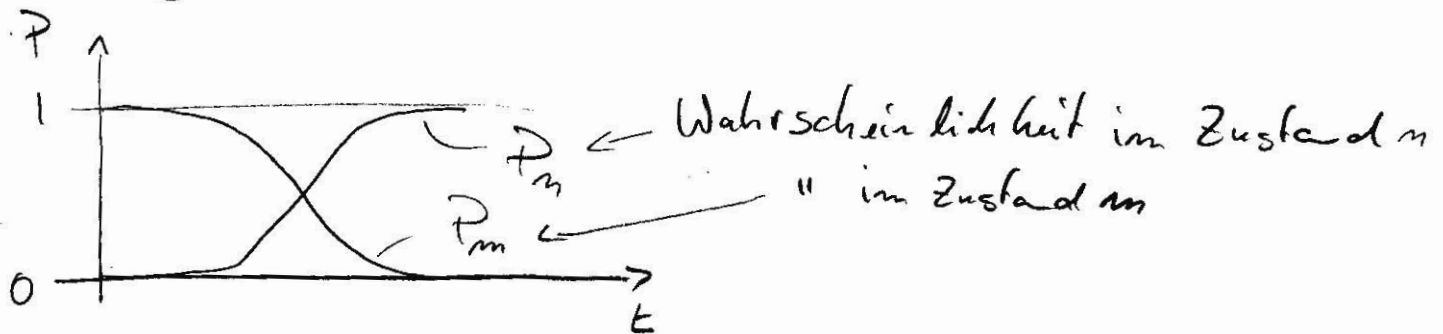
$$\langle P \rangle = -e \langle x \rangle$$

berechne Erwartungswert im Zustand Ψ_m

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \Psi_m^* x \Psi_m dx = \int \tilde{\Psi}_m^*(x) x \tilde{\Psi}_m(x) e^{i \frac{E_m}{\hbar} t} e^{-i \frac{E_m}{\hbar} t} dx \\ &= \int \underbrace{\tilde{\Psi}_m^*(x) x \tilde{\Psi}_m(x)}_{\langle x \rangle_{m,m}} dx = \text{const.} \end{aligned}$$

\Downarrow
 zeitunabhängig
 \Rightarrow keine Strahlung

Übergang zwischen zwei Zuständen des Atoms



$$P_m + P_n = 1 \quad = \text{Normierung}$$

$$\Psi = a \Psi_m + b \Psi_n$$

Superpositionszustand
mit variablen Koeffizienten

$$P_m = a^* a$$

$$P_n = b^* b$$

Anfangszustand: $a(0) = 0$
 $b(0) = 1$

Endzustand $a(\infty) = 1$
 $b(\infty) = 0$

✓ Erwartungswert $\langle x \rangle$ während des Übergangs

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int \Psi^* x \Psi dx = \int (a^* \psi_m^* + b^* \psi_m^*) x (a \psi_m + b \psi_m) dt \\ &= a^* a \underbrace{\int \psi_m^* x \psi_m dx}_{\text{zeitunabhängig}} + b^* b \underbrace{\int \psi_m^* x \psi_m dx}_{\text{zeitunabhängig}} \\ &\quad + a^* b \underbrace{\int \psi_m^* x \psi_m dx}_{\text{zeitabhängig}} + b^* a \underbrace{\int \psi_m^* x \psi_m dx}_{\text{zeitabhängig}} \end{aligned}$$

$$\int \psi_m^* x \psi_m dx = \underbrace{\int \tilde{\psi}_m^*(x) x \tilde{\psi}_m(x) dx}_{\langle x \rangle_{m,m}} e^{-i \frac{E_m - \bar{E}_m}{\hbar} t}$$

$e^{-i \nu_{mm} t}$
 Oszillation bei der Übergangsfrequenz

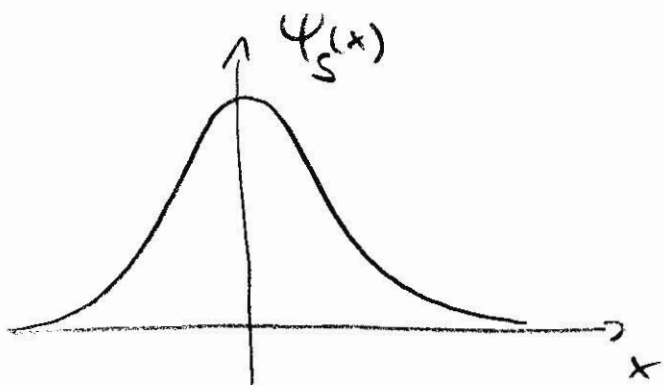
↑
 Matrixelement des Übergangs

⇒ zeitliche Änderung des Dipolmoments

⇒ Erzeugung von elektromagnetischer Strahlung

Symmetrie von Wellenfunktionen und Matrixelemente

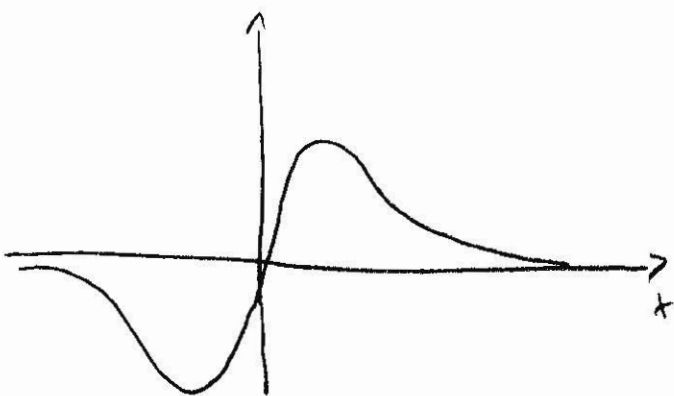
①



$$\Psi_s(-x) = \Psi_s(x)$$

symmetrische Wellenfunktion

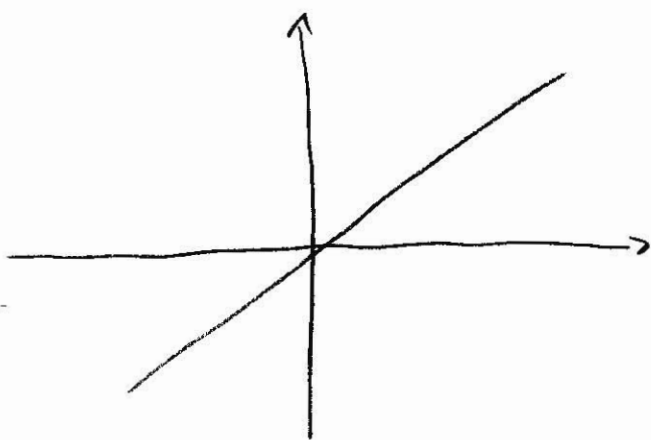
⇒ gerade Parität



$$\Psi_A(-x) = -\Psi_A(x)$$

antisymmetrische Wellenfunktion

⇒ ungerade Parität



$$\hat{O}(-x) = -\hat{O}(x)$$

antisymmetrischer Operator

$$\langle x \rangle_{m,n} = \int \Psi_m^* \times \Psi_n \, dx \quad \begin{cases} = 0 & \Psi_m^* \times \Psi_n \text{ a.sym.} \\ \neq 0 & \Psi_m^* \times \Psi_n \text{ sym.} \end{cases}$$

↗
Symmetrie - Eigenschaft legt
Auswahlregel fest

Berechnung der Energie der K_{α} -Linie

(1)

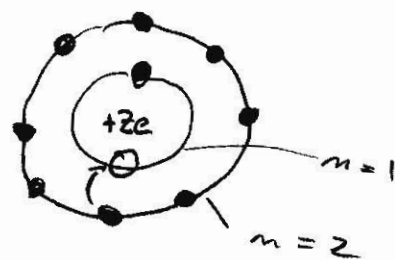
K: $n=1$ Endzustand

α : $\Delta n = 1 \Rightarrow n = n + \Delta n = 2$
Anfangszustand

Energie eines Eielektronenzustands im Wasserstoff-Atom

$$E = - \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Röntgenübergang



$$E_n = - \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} (z-1)^2 \frac{1}{n^2}$$

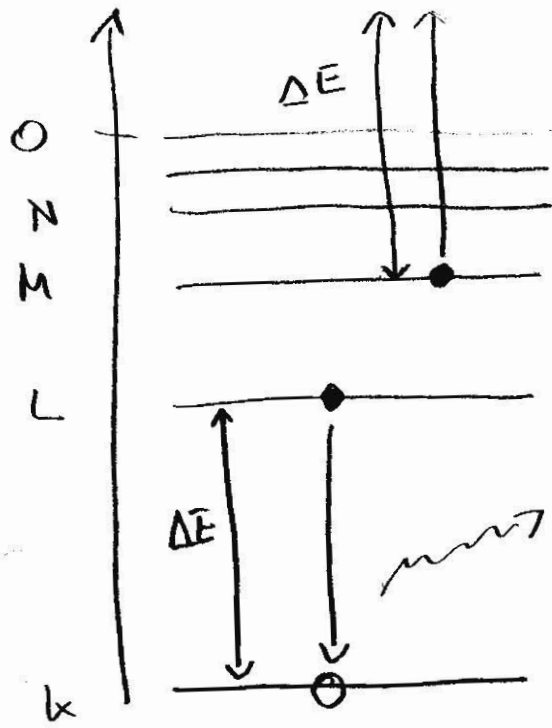
$$E_m = - \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} (z-1)^2 \frac{1}{m^2}$$

$$\Delta E = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} (z-1)^2 \left(1 - \frac{1}{4} \right)$$

\swarrow $\frac{3}{4}$

- starke Abhängigkeit von Kernladungszahl
- kaum abhängig von Konfiguration der äusseren Elektronen oder der chemischen Bindung

Auger-Effekt:



emittiertes Auger-Elektron

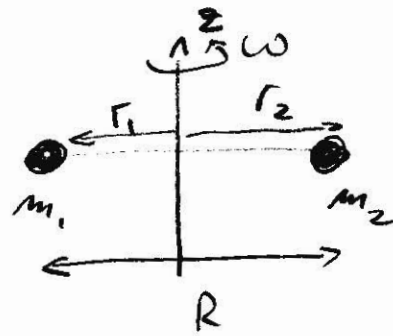
$$E_{kin} = \Delta E - E_M$$

↑
Bindungs-
energie des
M-Elektrons

$$h\nu = \Delta E \quad \text{Röntgen-Photon}$$

Rotation zweiatomiger Moleküle

①



klassisch:

Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{1}{2} I \omega^2$$

mit Drehimpuls $L = I \omega$

- und Trägheitsmoment $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$

$$= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (r_1 + r_2)^2$$

$$= m' R^2 \quad \leftarrow \text{Atom-Abstand}$$

↑
effektive Masse

quantenmechanisch

Drehimpuls

$$L = \hbar \sqrt{j(j+1)}$$

Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)$$

Rotationsquantenzahl

$$j = 0, 1, 2, 3, \dots$$

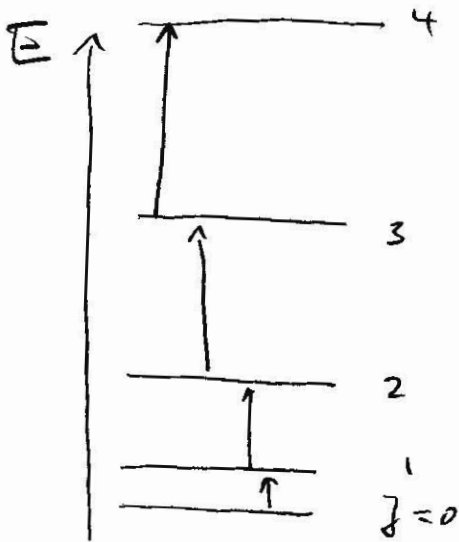
Auswahlregeln

$$\Delta j = \pm 1$$

wie bei elektronischen
Übergängen

Spektrum der Rotation

2

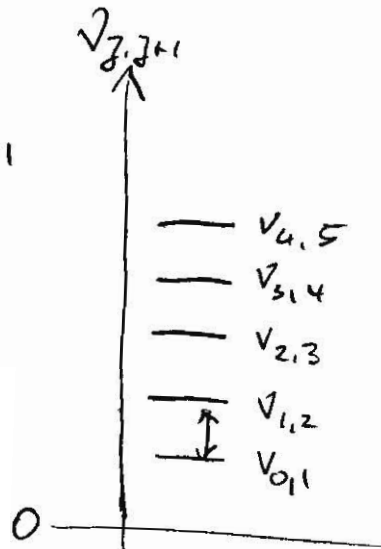


Energieniveaus sind nicht
"equidistant"

Abstand der Energieniveaus

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{j+1} - E_j = \frac{\hbar^2}{2I} \left[(j+1)(j+2) - (j+1)j \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2I} (2j+2) = \frac{\hbar^2}{I} (j+1)\end{aligned}$$

$$\frac{\Delta E}{h} = \nu_{j,j+1}$$



"equidistante
Linien im Spektrum"

Berechnung der Bindungsenergie in Molekülen

①

Aufgabe: Finde Wellenfunktion, die n Atomkerne mit m Elektronen beschreibt.

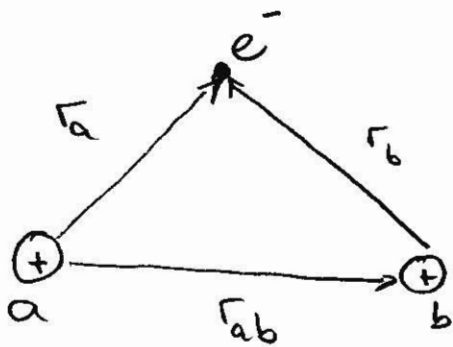
→ kompliziert!

→ Näherungen nötig

Das einfachste Molekül: H_2^+ = ionisierter Wasserstoff

- Erzeugung in Gasentladung

- gemessene Bindungs/
Dissociationsenergie 2,65 eV



← relative Position der 3 Teilchen zueinander

- Näherung: Beide Atomkerne befinden sich in Ruhe im Abstand r_{ab} voneinander.

$$m_p \gg m_e$$

- Schrödinger-Gleichung für das Elektron

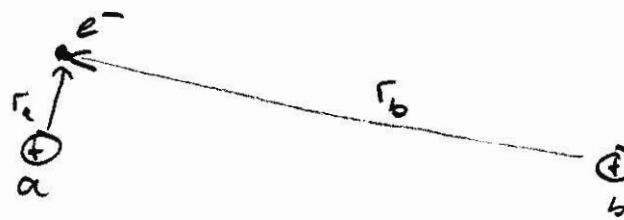
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) \psi = E \psi$$

⇒ Gesamtenergie hat zusätzlichen Term der Abstossung zwischen den beiden Kernen beschreibt.

$$U(r_{ab}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ab}}$$

• Betrachte weit voneinander entfernte Atomkerne

→ SGL für Elektron bei einem Atomkern



a:
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) \tilde{\Psi}_a = E_a^0 \tilde{\Psi}_a$$

oder

b:
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) \tilde{\Psi}_b = E_b^0 \tilde{\Psi}_b$$

$$E_a^0 = E_b^0 = E^0$$

Lösungsansatz: Superposition von $\tilde{\Psi}_a$ und $\tilde{\Psi}_b$

$$\tilde{\Psi} = a \tilde{\Psi}_a + b \tilde{\Psi}_b$$

↑ $a^2 a$: Wahrscheinlichkeit Elektron bei Atomkern a
 ↑ $b^* b$: e^- bei Kern b

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) a \tilde{\Psi}_a}_{E_a^0 a \tilde{\Psi}_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} a \tilde{\Psi}_a + \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) b \tilde{\Psi}_b}_{E_b^0 b \tilde{\Psi}_b} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} b \tilde{\Psi}_b = E (a \tilde{\Psi}_a + b \tilde{\Psi}_b)$$

$$\Leftrightarrow \left(E_a^0 - E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) a \tilde{\Psi}_a + \left(E_b^0 - E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) b \tilde{\Psi}_b = 0$$

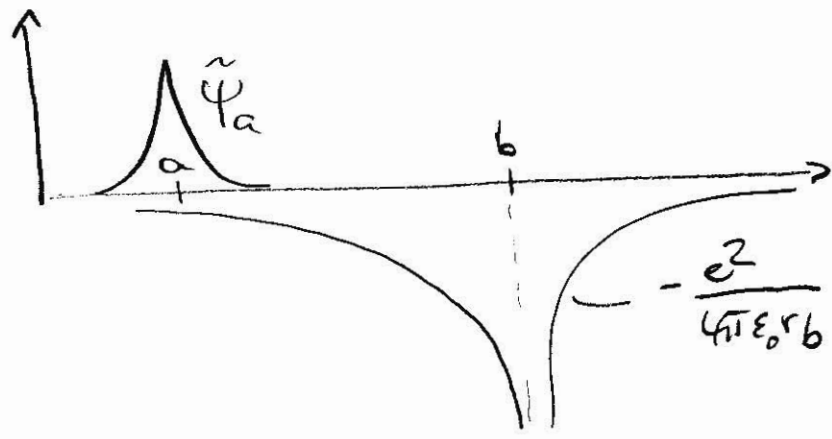
Lösung durch Multiplikation mit $\tilde{\Psi}_a$ oder $\tilde{\Psi}_b$ und Integration \rightarrow Störungstheorie (QM1)

$$\int \tilde{\Psi}_b^* \left(\Delta E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) a \tilde{\Psi}_a dV + \int \tilde{\Psi}_a^* \left(\Delta E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) b \tilde{\Psi}_b dV = 0$$

Bedeutung der verschiedenen Terme

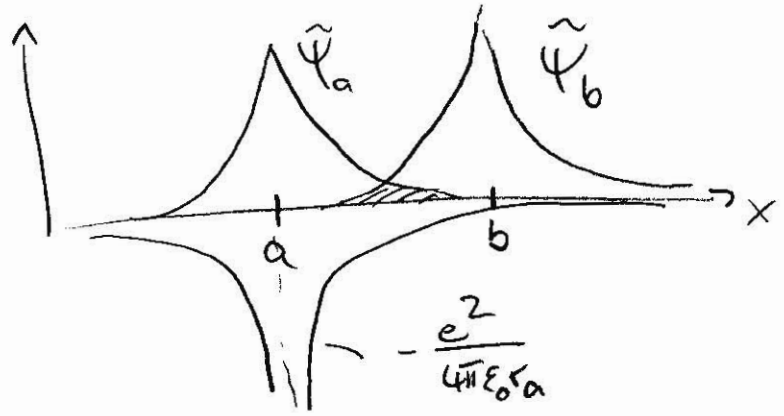
$$\int \tilde{\Psi}_a \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) \tilde{\Psi}_a dV = C$$

Wechselwirkung des Elektrons bei a mit Kern b



$$\int \tilde{\Psi}_a \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} \right) \tilde{\Psi}_b dV = D$$

Austausch-Integral

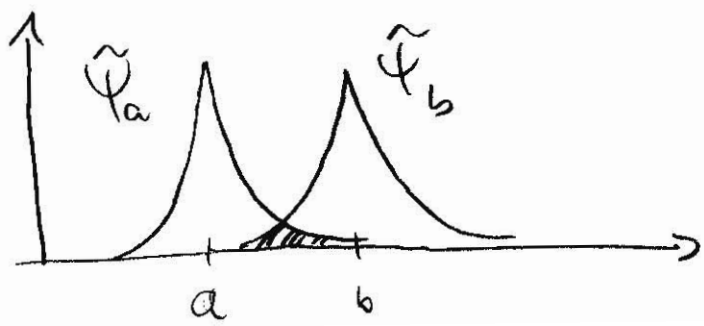


Überlapp der beiden Wellenfunktionen und dessen WW mit Kern a

→ QM Interferenzterm

$$\int \tilde{\Psi}_a \tilde{\Psi}_b dV = S$$

Überlapp



Resultierende Gleichungen für die Koeffizienten a, b (4)

$$(\Delta E + C)a + (\Delta E \cdot S + D)b = 0$$

$$(\Delta E \cdot S + D)a + (\Delta E + C)b = 0$$

nicht-triviale Lösungen für

$$(\Delta E + C)^2 - (\Delta E \cdot S + D)^2 = 0 \quad (\text{Det. der Koeff.})$$

$$\rightarrow E = E^0 + \frac{1}{1 \pm S} (C \pm D)$$

mögliche zum Zustand $\tilde{\Psi} = a\tilde{\Psi}_a + b\tilde{\Psi}_b$
gehörende Energien

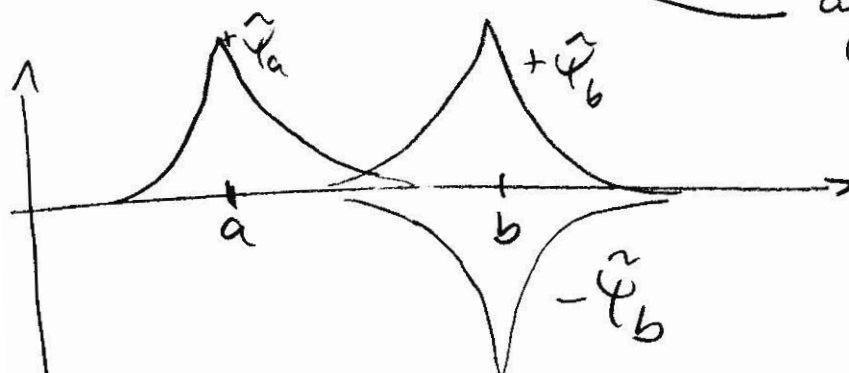
Einsetzen von $\Delta E = E - E^0$ in Bestimmungsgleichung
für Koeffizienten liefert

$$a = -b$$

oder $a = b$

Mögliche Wellenfunktionen

$$\Psi = \tilde{\Psi}_a \pm \tilde{\Psi}_b$$



symmetrische Wellenfunktion

antisymmetrische
Wellenfunktion

Gesamtenergie:

(5)

$$E_{\text{ges}} = E^0 + \frac{1}{1 \pm S} (C \pm D) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ab}} = E^{\pm}$$

