

Vorlesung PC 2 - 7. 11. 13

Wbg zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$\boxed{\hat{H} \psi = E \psi}$$

Hamiltonop. Eigenf. Energieeigenwert

Postulat II: Zu jeder beobachtbaren Eigenschaft ~~eines~~ ("Observable") existiert ein linearer, hermitescher Operator.

Observable	Operator
t	t
q (z.B. x)	q
p_x	$-i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Übersetzungsvorschrift:

Im klass. Ausdruck ersetzt man Observable durch den entsprechenden Operator

1. Bsp. Operator für die gesamte E
Hamilton-Fkt.

$$\begin{aligned} H(p, q) &= T(p) + V(q) \\ &= \frac{1}{2m} \cdot (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) \end{aligned}$$

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left\{ \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right\} + V(x, y, z)$$

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)}$$

↳ abgekürzt:

$$H(p, q) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \quad \vec{p} \rightarrow i \hbar \text{grad} = -i \hbar \nabla$$

$$\nabla = \text{Nabla-Operator} = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \Delta \equiv \text{Laplace-Operator} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

2. Bsp. Hamilton-Op. für 2 Teilchen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$$

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$$

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$$

3. Bsp. Hamilton-Op. für 1dim. harm. Schwingung

$$H(p_x, x) = T(p_x) + V(x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

	Observable	Operator	
Ort	x	\hat{x}	$\cdot x$
	\vec{r}	\hat{r}	$\cdot \vec{r}$
Impuls	p_x	\hat{p}_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
	\vec{p}	\hat{p}	$-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$
Kin. Energie	T_x	\hat{T}_x	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
	T	\hat{T}	$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$
Potenz. Energie	$V(x)$	$V(\hat{x})$	$V(x)$
	$V(x, y, z)$	$V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$	$V(x, y, z)$

	Observable		Operator
Bes. Energie	E	\hat{H}	$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\nabla^2} + V(x, y, z)$ $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)$
Drehimpuls	$L_x = y p_z - z p_y$	\hat{L}_x	$-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$
	$L_y = z p_x - x p_z$	\hat{L}_y	$-i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$

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

Postulat III: Es sei \hat{A} ein Operator zu einer Observablen A und es gebe einen identischen Satz von Systemen im Zustand ψ_s . ψ_s sei eine Eigenfunktion von \hat{A} .

$$\boxed{\hat{A} \psi_s = a_s \cdot \psi_s} \quad (a_s = \text{Zahl})$$

Exp: Messung der \hat{A} zugehörigen Eigenschaft
 \rightarrow Ergebnis immer a_s

Bsp. Energiemessung

Hamiltonoperator

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

$$\text{mit } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi}$$

zeitunabhängige Sg.
für Teilchen der
Masse m

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (V - E) \psi = 0}$$

z. B. H-Atom

Zu jedem Energiezustand E_n existiert eine
Eigenfunktion ψ_n

$$\boxed{\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n}$$

1s-Zustand (Details später...)

$$\psi(1s) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \cdot e^{-r/a_0} \quad (\text{normiert})$$

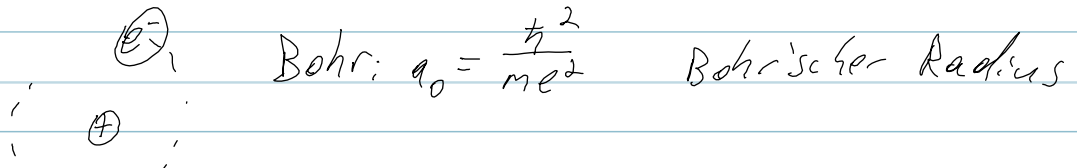
$$E(1s) = -R_H = -13,6 \text{ eV}$$

Postulat III: Es sei \hat{Q} ein Operator u. es
gebe einen Satz von identischen Systemen
im Zustand ψ . ψ sei keine Eigenfunktion des Operators

Messung: ergibt nicht immer gleiches Ergebnis,
sondern eine statistische Verteilung um einen
Mittel- oder Erwartungswert

$$\bar{Q} = \frac{\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int \psi^* \hat{Q} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}$$

z.B. H-Atom: Abstand e^- zum Kern



Q.M. $\vec{r} = \frac{\langle \psi | \vec{r} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$

ψ sei normiert
 $\psi(r) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$

$\hookrightarrow \vec{r} = \int \psi^* \vec{r} \psi d\tau$

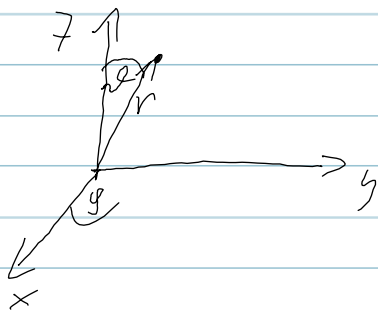
$\vec{r} = r$

Volumenelement $d\tau \rightarrow$ Polarkoord.

Koordinatentransformation Kartes. zu Polar k.

$$J = \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, \vartheta, \varphi)} = \begin{vmatrix} \partial x / \partial r & \partial x / \partial \vartheta & \partial x / \partial \varphi \\ \partial y / \partial r & \partial y / \partial \vartheta & \partial y / \partial \varphi \\ \partial z / \partial r & \partial z / \partial \vartheta & \partial z / \partial \varphi \end{vmatrix} = r^2 \sin(\vartheta)$$

$$d\tau = J \cdot dr d\vartheta d\varphi = r^2 \sin(\vartheta) dr d\vartheta d\varphi$$



$$\begin{aligned} x &= r \cdot \cos(\varphi) \cdot \sin(\vartheta) \\ y &= r \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\vartheta) \\ z &= r \cdot \cos(\vartheta) \end{aligned}$$

\Rightarrow In Polarkoordinaten $d\tau = \sin(\vartheta) r^2 dr d\vartheta d\varphi$

$$0 \leq r \leq \infty$$

$$0 \leq \vartheta \leq \pi$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \int \psi^* \vec{r} \psi d\tau = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr \int_0^\pi \sin(\vartheta) d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 2^3 a_0 \end{aligned}$$