

Vorlesung 08.11.2013

Postulat V:

Die zeitabhängigkeit der Wellenfunktion $\psi(q,t)$ ist gegeben

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi} \quad \text{zeitabhängige Schrödingergleichung}$$

→ keine Eigenwertgleichung

→ Quantendynamik: Operatoren $t, E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
-||- statik -||- $q, p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$

Satz: Ist \hat{H} zeitunabhängig, dann lässt sich zeitabhängige Schrödingergleichung in die zeitunabhängige Schrödingergleichung überführen.

Produktansatz: $\psi(q,t) = \psi(q) \cdot f(t)$

$$i\hbar \psi(q) \frac{df(t)}{dt} = f(t) \hat{H} \psi(q) \quad | : f(t) \psi(q)$$

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{\hat{H} \psi(q)}{\psi(q)} = \text{konst.}$$

1. $\frac{\hat{H} \psi(q)}{\psi(q)} = \text{konst.} \rightarrow \hat{H} \psi(q) = \text{konst.} \cdot \psi(q)$

$$\left. \begin{array}{l} \psi(q) \text{ ist Eigenfunktion zu } \hat{H} \\ \text{konst. ist Eigenwert zu } \hat{H} \end{array} \right\} \hat{H} \psi(q) = E \psi(q)$$

2. $\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \text{konst.} = E$

Lsg: $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$

Probe: $i\hbar \left(-i \frac{\partial}{\partial t}\right) e^{-iEt/\hbar} = E e^{-iEt/\hbar}$

Für \hat{H} zeitunabhängig führt der Ausdruck Ansatz

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \psi(\mathbf{q}) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

zu den bekannten Postulaten!

Spin: nichtklassischer Freiheitsgrad

Exp: Die Linien in den Spektren können durch die bisherigen Postulate nicht erklärt werden!

z.B. Na-Dublett: 589.0 nm
589.6 nm

Goudsmit und Uhlenbeck 1925

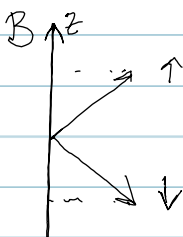
Postulat VI

Elektron besitzt

1) Drehimpuls: $\frac{1}{2}\hbar$
2) Magnetisches Moment: $\frac{eh}{2m} \cdot g$

Landé-Faktor = 2 (freies e^-)
Bohrsches Magneton

klassische Sichtweise:

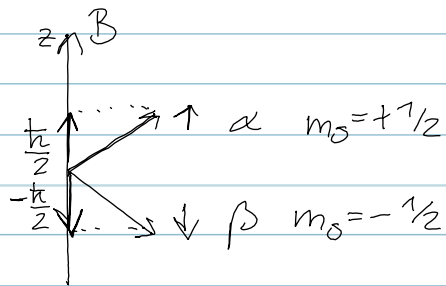


im Feld kann sich die Rotationsachse des e^- parallel oder antiparallel ausrichten

Quantenmechanik:

Observable S_z , Operator \hat{S}_z

es gibt zwei Eigenfunktionen
zu \hat{S}_z : α, β



$$\hat{S}_z \alpha = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar}_{S_z} \alpha$$

$$S_z = m_s \hbar$$

Spinquantenzahl $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

$$\hat{S}_z \beta = -\underbrace{\frac{1}{2} \hbar}_{S_z} \beta$$

Fermionen: Spin $\frac{1}{2}$ z.B. e^- , Protonen

Bosonen: ganzzahlige Spin z.B. Photonen, ${}^4\text{He}$

Pauli-Prinzip: 1925

⊖
(1) 2 identische Teilchen
z.B. $2e^-$ in He-Atom

⊕
(2) $\Psi = \Psi_1(1) \Psi_2(2)$

aber: identische Teilchen sind
ununterscheidbar

akzeptable Wellenfunktionen

symmetrische Linearkombination

$$\Psi_+ = c [\Psi_1(1) \Psi_2(2) + \Psi_1(2) \Psi_2(1)]$$

antisymmetrische Linearkombination

$$\Psi_- = c [\Psi_1(1) \Psi_2(2) - \Psi_1(2) \Psi_2(1)]$$

$$\boxed{\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \varphi_0}$$

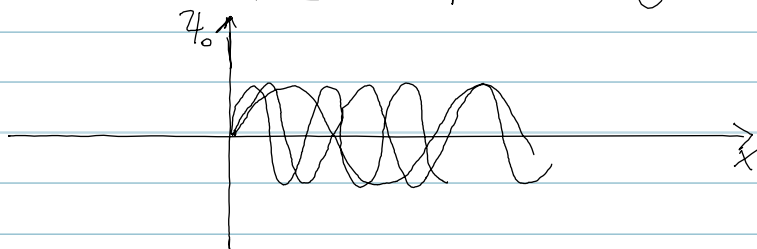
Eigenwertgleichung!

Lösung: $\varphi_0 = A \cdot \sin kx$

$$-Ak^2 \sin kx = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} A \sin kx$$

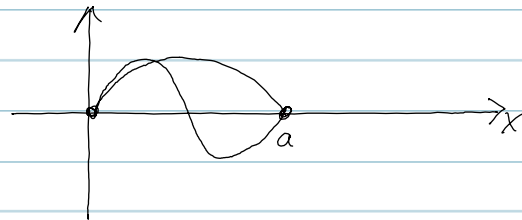
$$k^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$$

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda}} \quad \text{beliebige Werte von } k \text{ sind möglich}$$



Randbedingungen $\varphi_0(0) = 0$

$$\varphi_0(a) = 0$$



$$\varphi_0(0) = A \cdot \sin k \cdot 0 = 0$$

$$\varphi_0(a) = A \cdot \sin k \cdot a = 0$$

$$k \cdot a = n \cdot \pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\boxed{k = \frac{n \cdot \pi}{a}} \quad \text{diskrete Werte}$$

Physikalische Deutung stehende Wellen $\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}$

$$\boxed{a = n \frac{\lambda}{2}}$$

jetzt: e^- als stehende Welle

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi_0$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad T = \frac{p^2}{2m} = E - V$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{p^2} \quad p^2 = 2m(E - V)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{h^2} \cdot m(E - V) \psi_0$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial x^2} = (E - V) \psi_0$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial x^2} + V \psi_0 = E \psi_0}$$