Vorlesung PC 2 - 7.11.13

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

Übersetzungsvorschrift:
Im klass. Ausdruck ersetzt man Observable durch den entsprechenden Operator

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

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

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:

$$H(p,q) = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V \qquad \vec{p} \longrightarrow i\hbar\,\mathrm{grad} = -i\hbar\,\nabla$$

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

$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \Delta \equiv$ 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

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

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

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

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

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

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

	Observable	Operator	
Ort	x	$\hat{x}$	$\cdot x$
	$\vec{r}$	$\hat{\vec{r}}$	$\cdot \vec{r}$
Impuls	p_x	$\hat{p}_x$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
	$\vec{p}$	$\hat{\vec{p}}$	$-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\right)$
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
ges. Energie	E	$\hat{H}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\nabla^2}+V(x,y,z)$
			$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x,y,z)$
Dreh-impuls	$L_x = y p_z - z p_x$	$\hat{L}_x$	$-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$
	$L_y = z p_x - x p_z$	$\hat{L}_y$	$-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$

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 $\hat{\alpha}$ ein Operator zu einer Observablen α und es gebe einen identischen Satz von Systemen im Zustand ψ_s.
ψ_s sei eine Eigenfunktion von $\hat{\alpha}$

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

Exp: Messung der $\hat{\alpha}$ zugehörigen Eigenschaft
$\Rightarrow$ Ergebnis immer a_s

Bsp. Energiemessung

Hamiltenoperator

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

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

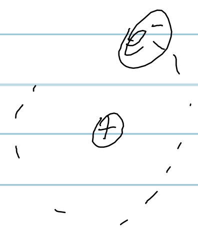
$E(1s) = -R_H = -13{,}6\ eV$

Postulat IV: Es sei $\hat{\alpha}$ ein Operator u. ~~es~~ es gebe einen Satz von identischen Systemen im Zustand ψ. ψ sei keine Eigenfunktion des Operatos

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

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

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



Bohr: $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ Bohr'scher Radius

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

ψ sei normiert

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

$\hookrightarrow \bar{r} = \int \psi^* \hat{r} \psi \, d\tau$

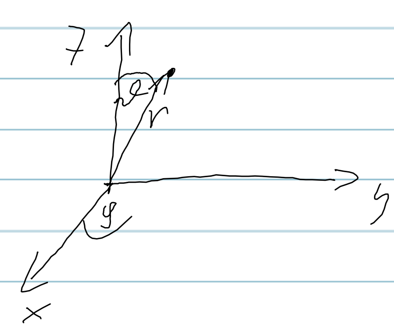
$\hat{r} = r$

Volumenelement $d\tau \Rightarrow$ Polarkoord.

Koordinatentransformation Kartes. zu Polar K.

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

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



$x = r \cdot \cos(\varphi) \cdot \sin(\vartheta)$
$y = r \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\vartheta)$
$z = r \cdot \cos(\vartheta)$

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

$0 \leq r \leq \infty$
$0 \leq \vartheta \leq \pi$
$0 \leq \varphi \leq 2\pi$

$$\bar{r} = \int \psi^* \hat{r} \psi \, d\tau = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr \int_0^\pi \sin(\vartheta)\, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi$$
$$= \frac{3}{2} a_0$$