Vorlesung 08.11.2013

Postulat V:

Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion $\Psi(q,t)$ ist gegeben

$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi}$ zeitabhängige Schrödingergleichung

→ keine Eigenwertgleichung

→ Quantendynamik: Operatoren $t, \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
 -"- 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: $\Psi(q,t) = \Psi(q) \cdot f(t)$

$$i\hbar \Psi(q) \frac{df(t)}{dt} = f(t)\hat{H}\Psi(q) \qquad \Big| : f(t)\Psi(q)$$

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

1. $\frac{\hat{H}\Psi(q)}{\Psi(q)} = \text{konst.} \longrightarrow \hat{H}\Psi(q) = \text{konst.}\,\Psi(q)$

$\Psi(q)$ ist Eigenfunktion zu $\hat{H}$
konst ist Eigenwert zu $\hat{H}$ } $\hat{H}\Psi(q) = E\Psi(q)$

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

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

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

Für $\hat{H}$ zeitunabhängig führt der ~~Ausdruck~~ Ansatz

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

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

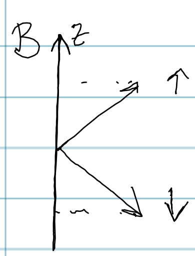
Postulat VI

Elektron besitzt

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{1) Drehimpuls: } \frac{1}{2}\hbar \\ \text{2) Magnetisches Moment: } \underbrace{\frac{e\hbar}{2m}}_{\text{Bohrsches Magneton}}\cdot g \end{array}}$$

g: Landé-Faktor $=2$ (freies e^-)

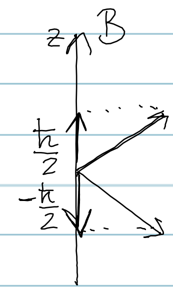
klassische Sichtweise:



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

Quantenmechani~~sche~~k:

Observable s_z, Operator $\hat{s}_z$



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

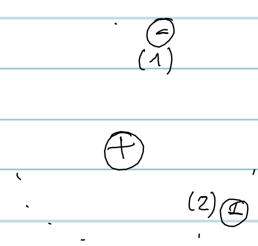
$$\hat{s}_z \alpha = \underbrace{\tfrac{1}{2}\hbar}_{s_z} \alpha \qquad s_z = m_s \hbar$$

Spinquantenzahl $m_s = +1/2, -1/2$

$$\hat{s}_z \beta = \underbrace{-\tfrac{1}{2}\hbar}_{s_z} \beta$$

Fermionen: Spin 1/2 z.B. e^-, Protonen
Bosonen: ganzzahliger Spin z.B. Photonen, ^4He

Pauli-Prinzip: 1925



2 identische Teilchen
z.B. $2e^-$ in He-Atom

$$\psi = \psi_1(1)\,\psi_2(2)$$

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
$$\psi_- = c[\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)]$$

Postulat VII: „Pauli-Prinzip"

Für Fermionen muss die Wellenfunktion antisymmetrisch sein bezüglich der Vertauschung der Koordinaten 2 beliebiger Teilchen. Entsprechend muß für Bosonen die Wellenfunktion symmetrisch sein.

$$\mathcal{X} \quad c\left[\psi_1(2)\psi_2(1) + \psi_1(1)+\psi_2(2)\right] = \psi_+$$

$$c\left[\psi_1(2)\psi_2(1) - \psi_1(1)\psi_2(2)\right] = -\psi_-$$

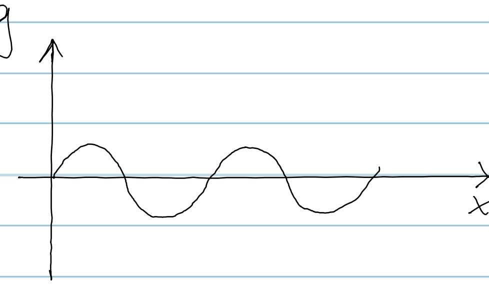
Bsp: 2 e^- in demselben Spinzustand

$$\psi = c\left[\psi_1(1)\psi_1(2) - \psi_1(1)\psi_1(2)\right] = 0$$

2.4 Beispiele

a) DGL einer schwingenden Saite

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}} \quad \text{Wellengleichung}$$



x = Ausbreitungskoordinate
v = — " — geschwindigkeit
ψ = Auslenkung

Lösungsansatz $\psi = \psi_0 \cdot e^{i\omega t}$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2} \cdot e^{i\omega t} = \frac{1}{v^2}\psi_0(i^2\omega^2) \qquad v = \nu\cdot\lambda$$

$$v = \frac{\omega}{2\pi}\cdot\lambda$$

$$\frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2}\cancel{e^{i\omega t}} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi_0\cancel{e^{i\omega t}}$$

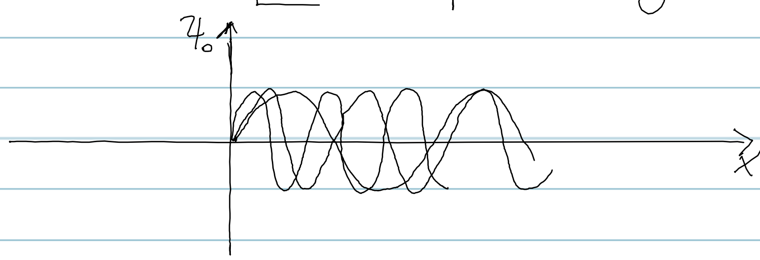
$$\boxed{\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi_0}$$ Eigenwertgleichung!

Lösung: $\Psi_0 = A \cdot \sin kx$

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

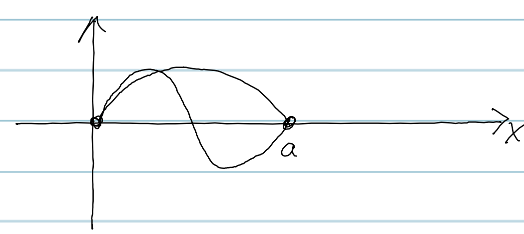
$$k^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$$

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



Randbedingungen $\Psi_0(0) = 0$

$\Psi_0(a) = 0$



$\Psi_0(0) = A \cdot \sin k \cdot 0 = 0$

$\Psi_0(a) = A \cdot \sin k \cdot a = 0$

$$k \cdot a = n \cdot \pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

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

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi_0$$

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

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

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 \cancel{m} 2 \cdot m(E-V)}{h^2}\Psi_0$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} = (E-V)\Psi_0$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + V\Psi_0 = E\Psi_0}$$