# Quanten Mechanik I

| | |
|---|---|
| Woche 1 | Kap. I Warum ist QM nötig ? → Experimenten<br><br>Kap. 2 Schrödinger'sche QM. → Wellenfunktion, Shrödinger Gleichung.<br><br>Kap. 3 Allgemeine Formulierung der QM.→ „Mathe" |
| Woche 2 | Kap. 4 QM in einer räumlichen Dimension → „Harmonische Oszillator,<br>Tunnel Effekt, Band Struktur.<br><br>Kap. 5 Zentral potential und Drehimpuls. → Wasserstoff Atom.<br><br>Kap. 6 Symmetrien und Erhaltungsätze. |
| Woche 3 | Kap. 7 Der Spin. → Spin-Bahn Kopplung, Dynamik von Spin Systeme (NMR).<br><br>Kap. 8 Addition von Drehimpuls. → Feinstruktur Aufspaltung.<br><br>Kap. 9 Störungstheorie. → Zeitunabhängige Störungstheorie<br>und Fermi Goldene Regel. |

## Bücher.

1) A. Messiah   Quantenmechanik  I&II
2) Sakurai, Modern Quantum mechanics.
3) C. Cohen-Tannoudji.   Méchanique Quantique
4) Feynman. The Feynman Lecture Notes
5) F. Schwabl  Quantenmechanik.
6) ……

Klausur:   Samstag 13. Oktober

Übungen.   T. Ohl   Jeder Tag  Hörsaal P  15.-17. Uhr

Vorlesung.

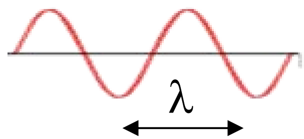
| | | |
|---|---|---|
| 8:15 | - | 9:00 |
| 9:05 | - | 9:50 |
| 10:15 | - | 11:00 |
| 11.05 | - | 11:50 |

3. Oktober.  Bitte frei halten !

# Teilchen-Welle Dualität

Photoelektrische Effekt, Compton Streuung.

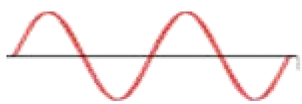
Einstein 1905 Licht hat Teilchen Charakter.




$\longleftrightarrow$ $E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (\omega = c|\mathbf{k}|)$

De Broglie 1923 Teilchen haben Wellen Charakter.

$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$



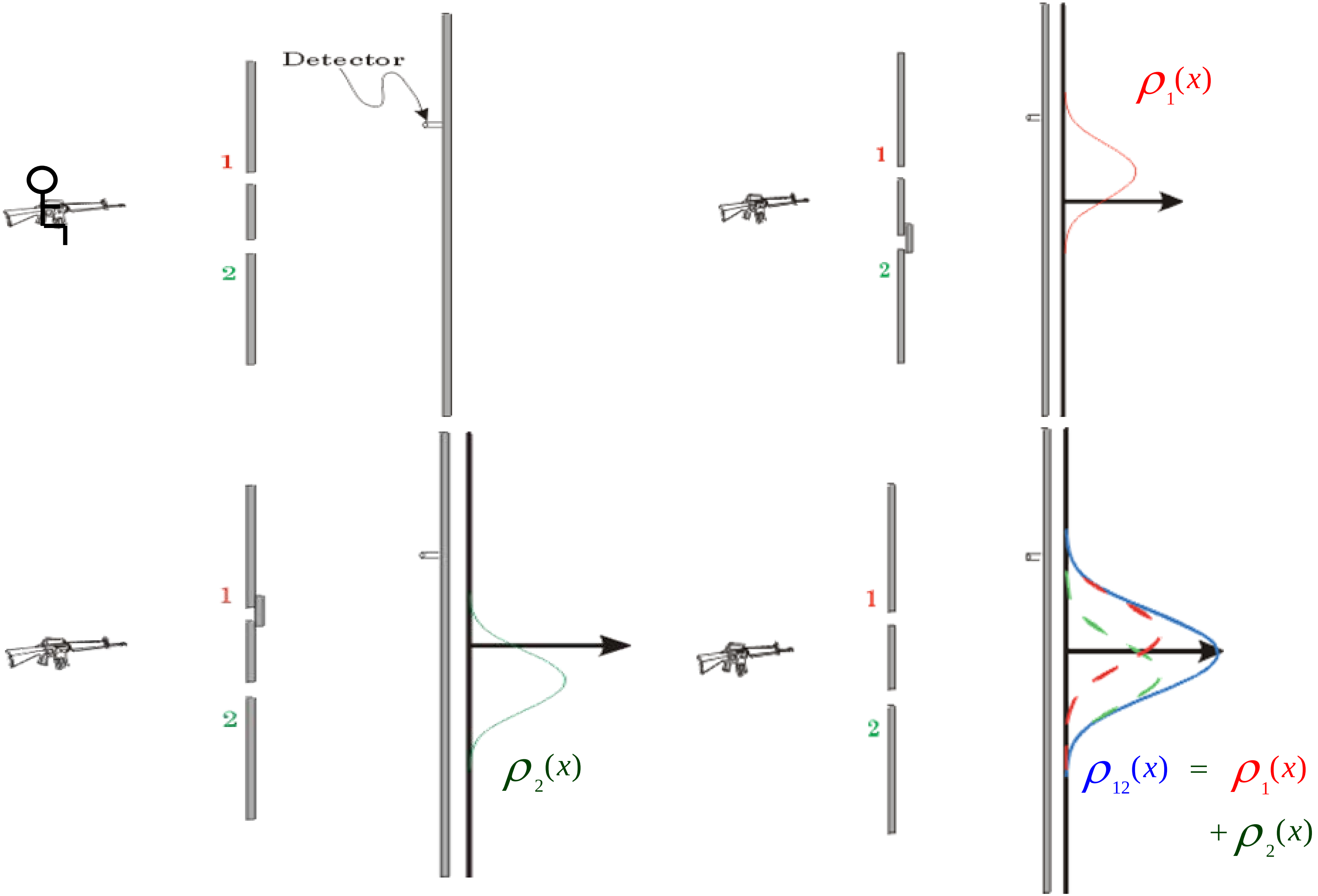
$\longleftrightarrow$ m, v

Davisson-Germer experiment (1927)

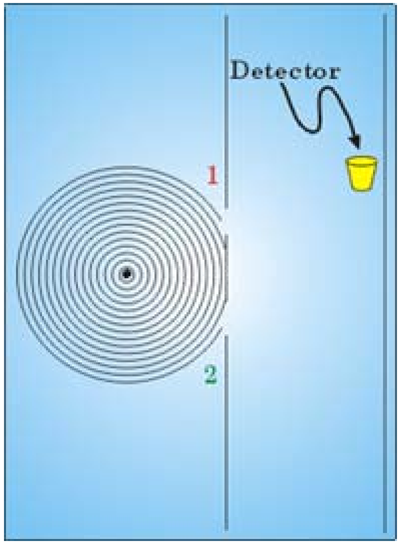
Atomspektren. Bohrs Quantenhypothese (1913) $L = n\hbar$

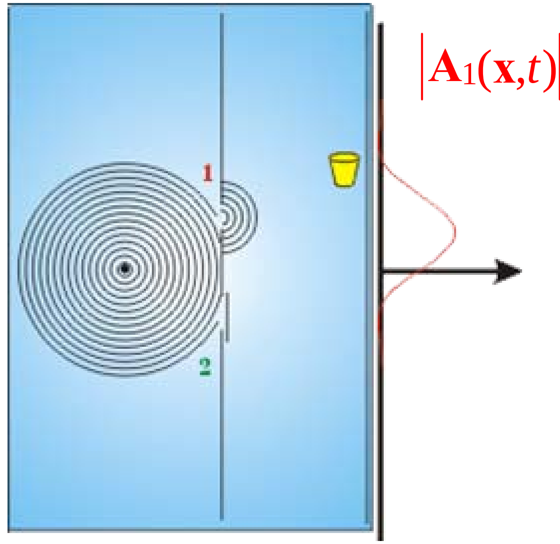
QM: 1923-1927: Dynamik von einem Teilchen ist durch eine **Welle** beschrieben.
Bei einer Messung beobachtet man ein **Teilchen.**

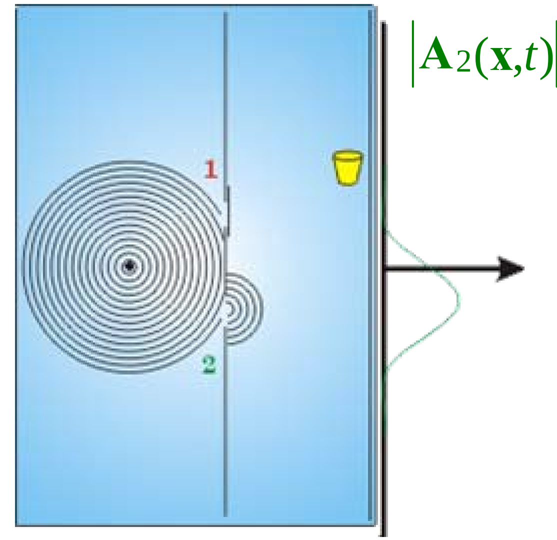
# Feynman Doppel-Spalt-Experiment. Teilchen, Wellen und Materie-Wellen.

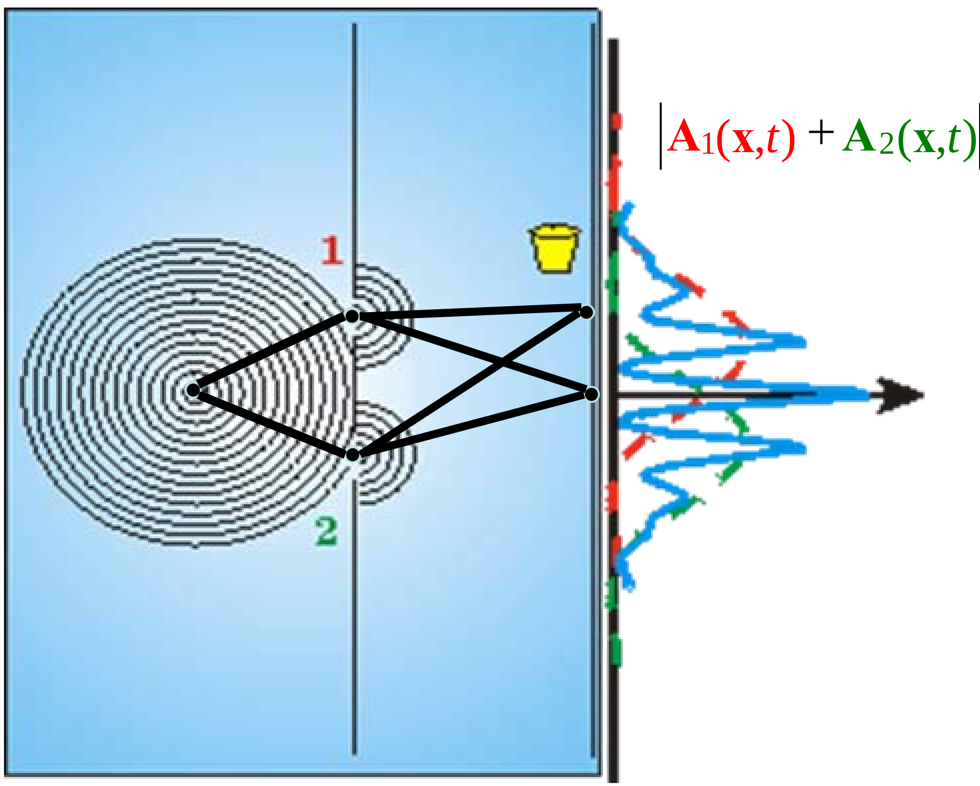


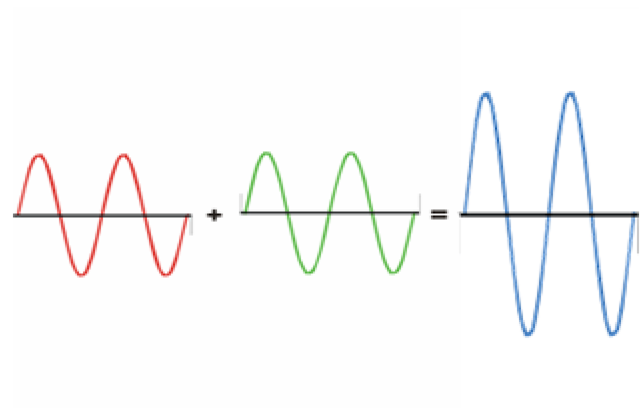
# Wellen

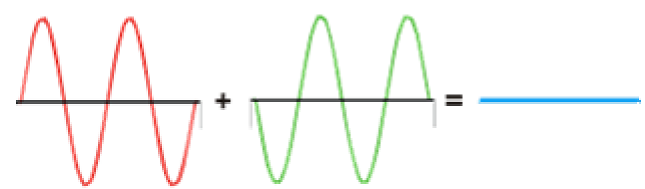


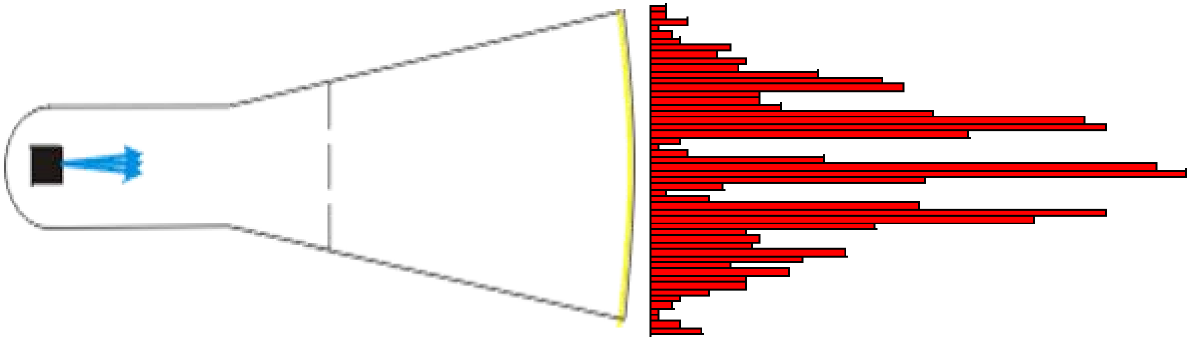



## Was passiert bei Elektronen?



Elektron treffen den Bildschirm wie Teilchen.

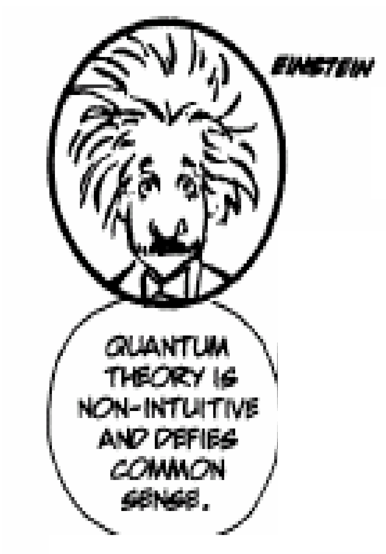
Verteilung zeigt Interferenz-Muster wie bei Wellen.

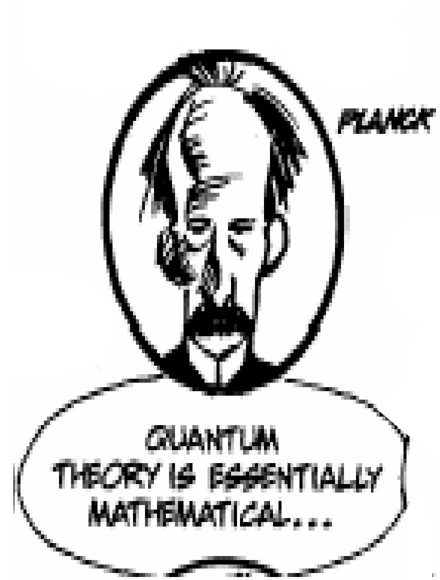
## Planck 1923.

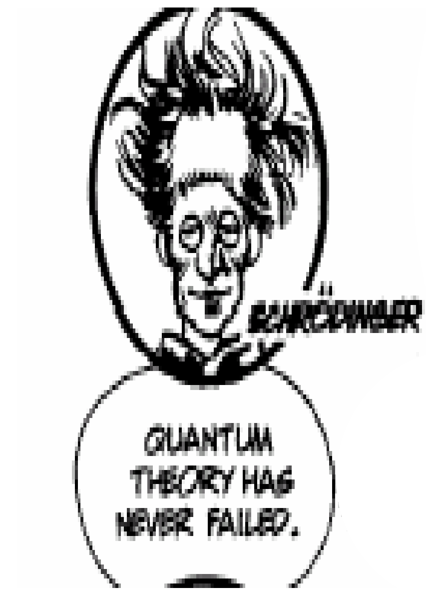
Elektron ist durch eine Welle beschrieben. Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x},t)$

Bei eine Messung beobachtet man eine Teilchen. $|\Psi(x,t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron am Ort x zu finden.

Die Aussagen des QM sind von statistischer Natur.


EINSTEIN
QUANTUM THEORY IS NON-INTUITIVE AND DEFIES COMMON SENSE.


PLANCK
QUANTUM THEORY IS ESSENTIALLY MATHEMATICAL...


SCHRÖDINGER
QUANTUM THEORY HAS NEVER FAILED.

# Kap.1 Zusammenfassung.

Teilchen ist durch eine Welle beschrieben. Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x},t)$

Bei eine Messung beobachtet man eine Teilchen. $|\Psi(x,t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Elektron am Ort x zu finden.

Die Aussagen des QM sind von statistischer Natur !

De Boglie: Wellenfunktion für freies Teilchen mit Impuls **p** und Energie $E = \mathbf{p}^2/2m$

$$\boxed{\Psi(\mathbf{x},t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{p}\,\mathbf{x} - E\,t\right]\right) \quad \text{da} \quad \mathbf{p} = \hbar\,\mathbf{k} \quad \text{und} \quad E = \hbar\,\omega}$$

# Schrödingergleichung. Dynamik von Wellenfunktion.

## Forderungen:

1) Dgl 1. Ordnung in Zeit. => $\Psi(\mathbf{x},t)$ ist eindeutig bestimmt durch $\Psi(\mathbf{x},t=0)$

2) Linear. => Interferenz Effekten wie im Elektrodynamik.

3) Erhaltung von Wahrscheinlichkeitsdichte. (Homogen).

4) $\Psi(\mathbf{x},t) = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p}\,\mathbf{x} - E\,t]\right)$ ist Lösung für Teilchen mit Energie E und Impuls **p**

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\,\Psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x},t)}$$

# Allgemeine Lösung für Freies Teilchen.

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\ \tilde{\Psi}(\mathbf{p},t=0)\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{p}\,\mathbf{x} - E_{\mathbf{p}}\,t\right]\right) =$$

$$= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\ \tilde{\Psi}(\mathbf{p},t)\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\,\mathbf{x}\right)$$

$$\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\left|\tilde{\Psi}(\mathbf{p},t)\right|^2$$

Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt t innerhalb des Impulsraum Volumenelement $d^3\mathbf{p}$ um den Impuls **p** zu finden.

## Observablen / Korrespondenzprinzip in Ortsraum.

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int d^3\mathbf{x} \;\; |\Psi(\mathbf{x},t)|^2 \;\; \mathbf{x} \qquad = \int d^3\mathbf{x} \;\; \Psi(\mathbf{x},t)^* \, \hat{\mathbf{X}} \, \Psi(\mathbf{x},t) \qquad\qquad \hat{\mathbf{X}} = \mathbf{x}$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, |\Psi(\mathbf{p},t)|^2 \, \mathbf{p} \;\; = \int d^3\mathbf{x} \;\; \Psi(\mathbf{x},t)^* \, \hat{\mathbf{P}} \; \Psi(\mathbf{x},t) \qquad\qquad \hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{x}}$$

$$\langle E \rangle = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, |\Psi(\mathbf{p},t)|^2 \, \mathbf{p}^2 / 2m \;\; = \int d^3\mathbf{x} \;\; \Psi(\mathbf{x},t)^* \, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x},t)$$

## Allgemeine Form der Schrödinger Gleichung.

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x},t) \;\; = \; H(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}, t) \, \Psi(\mathbf{x},t)}$$

wo H(**p**,**x**,t) die Klassische Hamiltonsche Funktion entspricht.

# Gauss Wellenpaket.

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} e^{-x^2/4D}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi D)^{1/4}} \left(\frac{D}{D(t)}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - E(p_0)t)} e^{-(x-v_0 t)^2/4D(t)}}$$

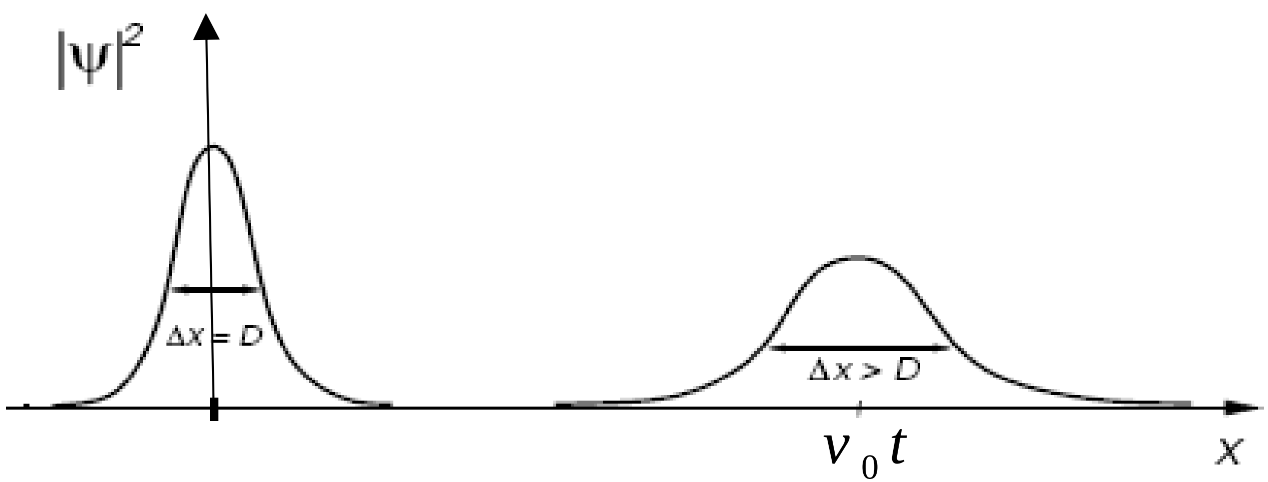
$$v_0 = p_0/m$$

$$D(t) = D + it\hbar/2m$$

$$\langle p \rangle = p_0, \qquad \langle x \rangle = v_0 t$$

Wie beim klassisches Teilchen. Beispiel von Ehrenfest Theorem (siehe Kap. III.)

$$(\Delta p)^2 \equiv \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4D}, \qquad (\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = D\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 D^2}\right)$$



Aus Rechnung: $$\Delta p \, \Delta x = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \left(\hbar t / 2 m D\right)^2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Beispiel von Heisenberg Unschärfe-Relation. Allgemein gilt:

$$\boxed{\Delta p \, \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

(siehe Kap. 3) Unmöglich p und x Gleichzeitig exakt zu bestimmen!

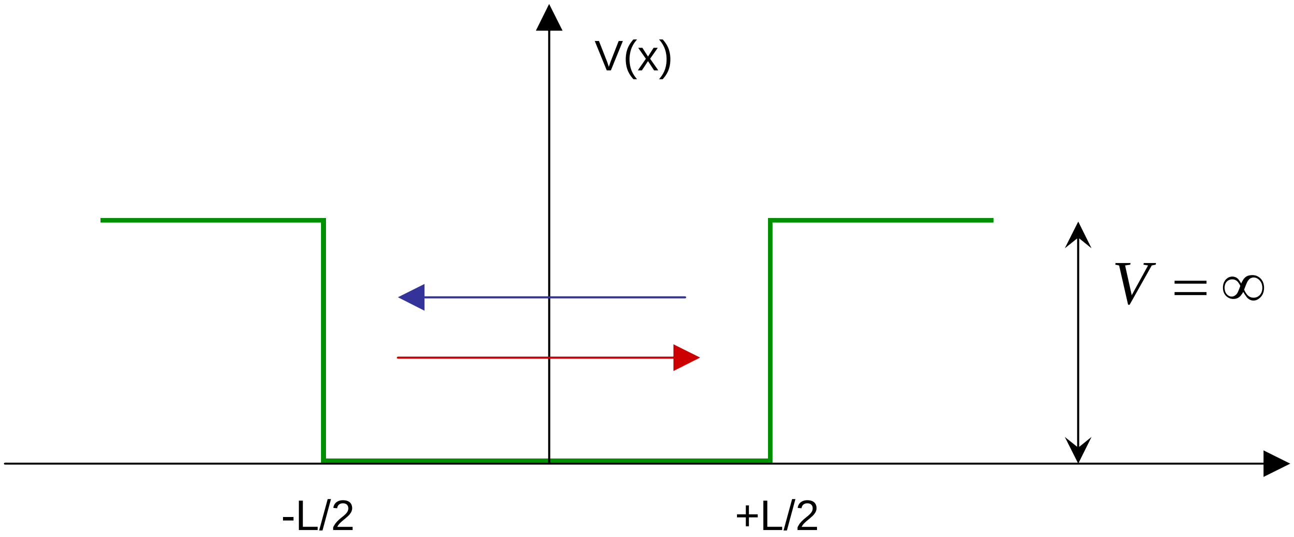
<u>Konsequenz.</u> Nullpunkt Bewegung, Nullpunktenergie.

<u>Beispiel: Harmonische Oszillator</u>

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2$$

$$\text{Sogar wenn } \langle p \rangle = \langle x \rangle = 0 \quad \text{gilt} \quad \langle E \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

# Teilchen im unendlich Potentialtopf.




Stationäre Schrödinger Gl.

$$\left[ \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X}) \right] \psi(x) = E\,\psi(x)$$

Randbedingung:

$$\psi(x) = 0 \ \text{für} \ |\mathrm{x}| > L/2$$

$$\psi(x) \ \text{stetig} \ \rightarrow \ \text{für} \ \psi(x = \pm L/2) = 0$$

Lösungs-Ansatz ( |x|<L/2 )

$$\psi(x) = a\,e^{ipx/\hbar} + b\,e^{-ipx/\hbar}$$

Stationäre Schr. Gl. →

$$E = p^2 / 2m$$

Rand Bedingung →

$$k = p/\hbar = 2n\,\pi / L\,, \qquad k = p/\hbar = (2n+1)\,\pi / L$$

## Ungerade Pariät.

$$k_n^{(u)} = 2n\ \pi / L\,, \quad n = 1, 2, 3..$$

$$\psi_n^{(u)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\ \sin(\ k_n x)$$

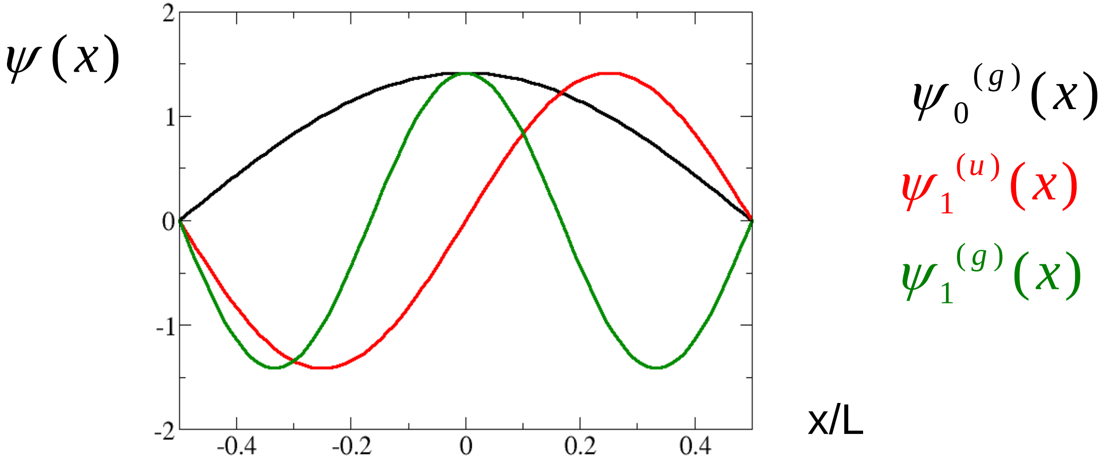
$$E_n^{(u)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(u)2}}{2m}$$

## Gerade Pariät.

$$k_n^{(g)} = (2n+1)\ \pi / L\,, \quad n = 0, 1, 2, 3..$$

$$\psi_n^{(g)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\ \cos(\ k_n x)$$

$$E_n^{(g)} = \frac{\hbar^2 k_n^{(g)2}}{2m}$$



Comments.

1) Quantization of energy stems from boundary condition!

2) Ground state does not have vanishing energy. (Zero point motion! Uncertainty principle.)

3) The energy Eigenstates build a complete basis (VONS) of $L^2([-L/2, L/2])$

$$\forall\ \psi(x,t=0), \quad \psi(x,t=0) \;=\; a_0^{(g)}\,\psi_0^{(g)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(g)}\,\psi_n^{(g)}(x) + a_n^{(u)}\,\psi_n^{(u)}(x)$$

and

$$\psi(x,t) \;=\; a_0^{(g)}\, e^{-itE_0^{(g)}/\hbar}\psi_0^{(g)}(x) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{(g)}\, e^{-itE_n^{(g)}/\hbar}\psi_n^{(g)}(x) + a_n^{(u)}\, e^{-itE_n^{(u)}/\hbar}\,\psi_n^{(u)}(x)$$

is a solution of the time dependent Schrödinger equation with appropriate intial conditions!