

Quantenmechanik, ein paar Fragen und Antworten

Matthias Pospiech

Inhaltsverzeichnis

1	Quantenmechanik allgemein	3
2	Mathe	6
3	Gaußpakete	7
4	Operatoren	8
5	Potentiale (eindimensionale)	11
6	Unschärferelation	13
7	Harmonischer Oszillator	14
8	Dichtematrix	17
9	Entropie	21
10	Ideale Quanten Gase	23
11	Planck	27
12	Drehimpuls	28
13	Spin 1/2 - Teilchen	34
14	Stern-Gerlach-Versuch	36
15	Wasserstoffatom	39
16	Fermiteilchen, Pauliverbot	44
17	Störungstheorie	45
18	Zerfall	46
19	Bellsche Ungleichungen	48
20	Festkörper	50

1 Quantenmechanik allgemein

<p>Diskretes Spektrum</p> <p>Zustand (Spektralzerlegung) - nicht-entartet: ($c_n = \langle u_n \psi \rangle$)</p> $ \psi\rangle = \sum_n u_n\rangle \langle u_n \psi \rangle$ $= \sum_n u_n\rangle c_n$ <p>- Entartet: ($c_n^i = \langle u_n^i \psi \rangle$)</p> $ \psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} u_n^i\rangle \langle u_n^i \psi \rangle$ $= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} u_n^i\rangle c_n^i$	<p>Skalarprodukt</p> $\langle \phi \psi \rangle = \sum_n b_n^* c_n$ <p>Wahrscheinlichkeit a_n zu messen - Nicht Entartet</p> $\mathcal{P}(a_n) = c_n ^2 = \langle u_n \psi \rangle ^2$ <p>- Entartet</p> $\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i ^2 = \sum_{i=1}^{g_n} \langle u_n^i \psi \rangle ^2$
---	--

1.1 Zustände und Operatoren

1. Wie beschreibt man einen Zustand (System) in der QM ?

Durch Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{x}, t)$

2. Was misst man ?

Messen kann man die Erhaltungsgrößen:

$$E, \mathbf{p}, \mathbf{x}, \mathbf{L}$$

3. Wie misst man ?

Quantenmechanische Beschreibung der Messung durch hermitesche Operatoren.

$$|\psi\rangle = \sum_n |a\rangle \langle a | \psi \rangle$$

mit $\langle a | \psi \rangle$: Wahrscheinlichkeitsamplitude für Messung a_n
 $A|a\rangle = a_n|a\rangle$: Eigenwertgleichung.

4. Müssen die $|\psi_i\rangle$ orthogonal und normiert sein ?

Die Eigenfunktionen von Hermiteschen Operatoren sind immer orthogonal, jedoch nicht notwendigerweise normiert.

5. Wie sieht ein allgemeiner Operator aus ?

umgekehrte Matrixschreibweise (Operator ist die Summe der Matrixelemente)

$$A = \sum_{ij} a_{ij} |\psi_j\rangle\langle\psi_i| \quad \text{mit} \quad A|\psi_i\rangle = a_i |\psi_i\rangle \quad \text{aus} \quad A_{ij} = \langle\psi_i|A|\psi_j\rangle$$

1.2 Wahrscheinlichkeiten

6. Wahrscheinlichkeit für Messung von a_n ?

a_n ist Eigenwert von $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$

$$\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle$$

Wahrscheinlichkeit das System im Zustand u_n zu finden, wenn System Zustand ψ hat.

7. Wahrscheinlichkeit a_n zu messen, wenn System in Zustand u_i ?

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n|u_i\rangle|^2 = \delta_{ij}$$

8. Wie sehen Wahrscheinlichkeiten im kontinuierlichen Fall aus ?

$$\mathcal{P}(\Delta) = \int_{\Delta} d\alpha |\langle\psi_\alpha|\psi\rangle|^2$$

da $|\langle\psi_\alpha|\psi\rangle|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte

9. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit einen Messwert a_i zu messen, wenn er entartet ist ?

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$$

10. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das ein Zustand einen gewissen Impuls hat ?

$$\mathcal{P}(\Delta_p) = \int_{\Delta_p} d^3p |\langle\psi_p|\psi\rangle|^2$$

die $|\psi_p\rangle$ sind die Eigenzustände des Impulsoperators

11. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für einen diskreten Messwert bei einem Gemisch ?

über die Dichtematrix ausgedrückt:

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle u_n | \rho | u_n \rangle = \text{Sp}\{ \rho \hat{P}_n \}$$

12. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen in einem Volumen Δ ein Spin-up hat ?

Wahrscheinlichkeit für Spin-Up Teilchen im Volumen:

$$\mathcal{P}(\uparrow) = \int_{\Delta} dx |\langle x, \uparrow | \psi \rangle|^2$$

Wahrscheinlichkeit aller Spins im Volumen:

$$\mathcal{P} = \sum_i \int_{\Delta} dx |\langle x, i | \psi \rangle|^2$$

Wahrscheinlichkeit dass ein Teilchen sowohl im Volumen ist, als auch Spin-Up hat = Wahrscheinlichkeit dass ein Spin-Up Teilchen im Volumen ist geteilt durch die Wahrscheinlichkeit der Restlichen Teilchen im Volumen zu sein:

$$\mathcal{P}(\uparrow, \Delta) = \frac{\int_{\Delta} dx |\langle x, \uparrow | \psi \rangle|^2}{\sum_i \int_{\Delta} dx |\langle x, i | \psi \rangle|^2}$$

1.3 sonstiges

13. Wie sieht die Impulseigenfunktion aus

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x} |p_0\rangle = p_0 |p_0\rangle \quad \Rightarrow \quad |p_0\rangle \sim e^{-i/\hbar x p}$$

2 Mathe

14. Wie rechnet man mit Matrizen im Exponenten (z.B. Paulimatrizen)?

Eulerformel:

$$e^{i/2\sigma\psi} = \cos \frac{\psi}{2} \mathbb{1} + i \sin \frac{\psi}{2} \left(\frac{\sigma\psi}{|\psi|} \right) \quad \sigma = \dots$$

15. Wie sieht e^{σ_z} aus, mit σ_z : Paulimatrix ?

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow e^{\sigma_z} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}$$

16. Wann darf man die geometrische Reihe benutzen ?

$$\sum_n q^n = \frac{1}{1-q} \quad |q| < 1$$

3 Gaußpakete

17. Welcher EM-Gleichung genügt eine ebene Welle?

Der Wellengleichung

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2} \frac{d^2\psi}{dt^2} = 0$$

18. Wie sieht eine Überlagerung ebener Wellen aus ?

Wellenpaket, Fouriertransformation

$$\psi(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}r - \omega(\mathbf{k})t)} d^3k$$

19. Warum läuft das Gaußpaket auseinander ?

Das Gaußpaket besteht aus ebenen Wellen unterschiedlicher k -Komponenten (Impulsen). Aufgrund der Dispersion in Materiewellen $\omega = \omega(\mathbf{k})$ laufen die einzelnen Wellen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit $v_P = \omega(k)/k$ und das ganze Gaußpaket damit auseinander.

20. Wie verhalten sich die Halbwertsbreiten der Gaußkurve im Orts- und Impulsraum zueinander

Das Produkt ist konstant: $\Delta x \Delta k = \text{const}$

21. Der Grundzustand vom harmonischen Oszillator ist ein Gaußpaket. Gaußpakete zerfließen mit der Zeit. Warum wird das Unschärfeprodukt dennoch nicht größer ?

Beim harmonischen Oszillator gibt es immer rücktreibende Kräfte. Diese verhindern das zerfließen des Gaußpaketes.

22. Gibt es auch den Fall, dass ein Gaußpaket nicht zerfließt, obwohl kein Potential vorhanden ist ?

Elektromagnetische Wellen haben keine Dispersion ($\omega = kc$) und laufen immer mit Lichtgeschwindigkeit:

$$v_P = \omega(k)/k = c$$

4 Operatoren

Adjungiert:	Hermiteisch
Definition	$A^\dagger = A$
$\langle \psi A \psi \rangle \equiv \langle A^\dagger \psi \psi \rangle$ bzw. $ \psi'\rangle = A \psi\rangle \Leftrightarrow \langle \psi' = \langle \psi A^\dagger$	Eigenschaften $\langle \psi A \psi \rangle = \langle \psi A^* \psi \rangle \dots$ $\langle A \psi \phi \rangle = \langle \psi A \phi \rangle$
Schreibweise	Eigenzustände sind orthogonal $\langle a_i a_j \rangle = 0$
$ A\psi\rangle = A \psi\rangle$ $\langle A\psi = \langle \psi A^\dagger$	
Eigenschaften	Unitär
$\langle \psi A^\dagger \psi \rangle = \langle \psi A \psi \rangle^*$ $(A^\dagger)^\dagger = A$ $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$ $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$	Definition $U^\dagger U = U U^\dagger = 1, \quad U^{-1} = U^\dagger$

23. Definition von adjungiertem Operator ?

$$\langle \psi | A \psi \rangle \equiv \langle A^\dagger \psi | \psi \rangle$$

Es gilt:

$$\langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle A \psi | \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \psi \rangle^*$$

24. Definition von hermiteschem Operator ?

$$A = A^\dagger$$

25. Wann ist ein Operator eine Observable ?

Eine Observable ist ein hermitescher Operator, mit beobachtbaren Messwerten.

26. Beispiele für hermitesche Operatoren

Dichtematrix ρ , Hamilton \mathcal{H} , Drehimpuls: $L^2, L_z, \mathbf{p}, \mathbf{x}$, Paulimatrizen, ...

27. Warum sind die Eigenwerte eines hermiteschen Operators reell ?

Mit $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ gilt:

$$(a^* - a)\langle\psi|\psi\rangle = \langle a\psi|\psi\rangle - \langle\psi|a\psi\rangle = \langle A\psi|\psi\rangle - \langle\psi|A\psi\rangle = 0$$

28. Was gilt für kommutierende Operatoren ?

Kommutierend: $[A, B] = 0$

Die Operatoren haben gleiche Eigenfunktionen

29. Definition von unitären Transformationen ?

Ein Operator heißt unitär, wenn sein inverses gleich seinem adjungiertem ist:

$$U^\dagger U = U U^\dagger = 1, \quad U^{-1} = U^\dagger$$

30. Welcher Eigenwerte haben unitäre Transformationen ?

Eigenwertgleichung: $U|\psi\rangle = u|\psi\rangle$

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi|u^* u|\psi\rangle \Rightarrow u^* = \frac{1}{u}$$

Wird erfüllt durch $u = e^{ikx}$

31. Wie Transformieren ein Operator und ein Zustand ?

Operator:

$$A' = U A U^\dagger$$

Zustand

$$|\psi\rangle' = U|\psi\rangle$$

Die Eigenwerte bleiben dagegen erhalten

$$A'|\psi\rangle' = U A U^\dagger U|\psi\rangle = U(A|\psi\rangle) = U(a|\psi\rangle) = (aU|\psi\rangle) = a|\psi\rangle'$$

32. Was bedeuten unitäre Transformationen für die Physik ?

Die Physik bleibt gleich, ist invariant unter unitären Transformationen. Dies sieht man dadurch, dass das Skalarprodukt invariant ist unter unitären Transformationen

$$\langle \psi' | \phi' \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$$

33. Was vermittelt die Translation oder Drehung ?

Unitäre Transformationen

34. Welcher Operator erzeugt eine Translation ?

Translationen werden durch den Impulsoperator erzeugt:

$$\hat{U}(\lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P} \lambda}$$

Eigenschaften

$$|q\rangle = \hat{U}(q) |0\rangle$$

$$\hat{U}(\lambda) |q\rangle = |q + \lambda\rangle$$

$$\langle q | \hat{U}^\dagger(\lambda) = \langle q + \lambda |$$

$$\langle q | \hat{U}(\lambda) = \langle q - \lambda | \quad \Rightarrow \quad \langle q | \hat{U}(\lambda) | \psi \rangle = \langle q - \lambda | \psi \rangle = \psi(q - \lambda)$$

35. Welcher Operator erzeugt eine Drehung ?

Drehungen werden durch den Drehimpulsoperator L erzeugt:

$$\hat{U}(\mathbf{e}, \alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}}$$

Mit Winkel α , Drehachse \mathbf{e} und Drehimpulsvektor \mathbf{L} .

36. Wie sieht die Zeitentwicklung von Operatoren aus ?

Operatoren sind nur im Heisenbergbild zeitabhängig. Daher:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [A_H, \mathcal{H}_H] + \left\{ \frac{\partial A_S}{\partial t} \right\}_H$$

5 Potentiale (eindimensionale)

37. Wie gehen Sie an Potentialprobleme heran ?

Lösen der eindimensionalen zeitunabhängigen Schrödingergleichung:

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

mit

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} \quad \text{für } E > V(x)$$

$$\psi(x) = \alpha' e^{\kappa x} + \beta' e^{-\kappa x} \quad \text{für } E < V(x)$$

für die Wellenfunktionen gilt: stetig und stetig diffbar.

38. Beispiel für diskrete Eigenwerte

- Potentialtöpfe
- harmonischer Oszillator
- Wasserstoff-Atom

39. Bedingungen an die Wellenfunktion ?

- Überall endlich, da $|\phi(x)|^2$: Wahrscheinlichkeitsdichte
- $\phi(x)$ und $\phi(x)'$ überall stetig. Allerdings gilt Stetigkeit von $\phi(x)'$ nicht bei δ -Sprüngen.

40. Warum muss die Wellenfunktion stetig sein ?

siehe Cohen Tannoudji Seite 58

41. Wann bekommt man diskrete Eigenwerte

Die Quantisierung der Energie folgt aus der Bedingung, dass die Wellenfunktion $\phi(x)$ überall beschränkt ist.

Zustände kommt dies, wenn zwei Umkehrpunkte existieren (Potentialtopf). Dann müssen die Wellenfunktionen stetig an die exponentiell abklingende Funktion anschließen.

42. Warum gibt es gerade bzw. ungerade Zustände bei dem endlich hohen Potentialtopf ?

Der Paritätsoperator Π vertauscht mit dem Hamilton Operator:

$$[\mathcal{H}, \Pi] = 0$$

Damit haben beide Operatoren einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen. Da die Eigenfunktionen des Paritätsoperators nur gerade und ungerade Parität haben, kann man die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators so wählen, dass sie eine definierte Parität besitzen.

43. Wie sind gerade/ungerade Zustände definiert?

$$\psi_g(x) = \psi(-x) \quad \psi_u(x) = -\psi(-x)$$

5.1 Stoßprozesse, Streuung

44. Wie muss man einen Zustand präparieren um Informationen über die Streuung zu erhalten ?

Mit festem Impuls und vollständig polarisiert. Wellenfunktion (eindimensional):

$$\psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$$

45. Wie kann man die Koeffizienten r, t experimentell bestimmen ?

Über die Wahrscheinlichkeitsstromdichte j

$$r = \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{ein}}}, \quad t = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}}$$

46. Welche Beziehung erfüllen die r, t noch ?

Es gilt die Teilchenzahlerhaltung, d.h.

$$j_{\text{ein}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{trans}} \\ |r|^2 + |t|^2 = 1$$

6 Unschärferelation

47. Wie sieht die allgemeine Unschärferelation aus ?

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

48. Unschärferelation für x und p ? (09)

$$\Delta \hat{x}_i \Delta \hat{p}_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}$$

49. Was ist der Grund für die Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$?

Der Kommutator zwischen \hat{x} und \hat{p} : $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| = \frac{\hbar}{2}$$

50. Wie sieht die Unschärferelation beim harmonischen Oszillator aus

$$\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

51. Warum ist $\langle [A, B] \rangle$ imaginär ?

Wäre $[A, B]$ reell müsste gelten: $[A, B]^\dagger = [A, B]$. Es gilt jedoch, mit $A^\dagger = A$ und $B^\dagger = B$

$$[A, B]^\dagger = -[A, B]$$

d. h. der Kommutator hermitescher Operatoren ist immer imaginär.

52. In welchem Experiment sieht man die Heisenbergsche Unschärferelation ?

Einspaltbeugung von Teilchen

53. Was haben wir, wenn die x, y und p_z Komponente scharf bestimmt sind ?

Teilchenstrahl

7 Harmonischer Oszillator

Hamilton Operator	
$\mathcal{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$ $= \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{x}^2 + \hat{p}^2)$	$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$ $\Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$
mit:	Eigenzustände
$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ $\hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p})$ $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$	$\hat{a}^\dagger \phi_n\rangle = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}\rangle$ $\hat{a} \phi_n\rangle = \sqrt{n} \phi_{n-1}\rangle$
	Wellenfunktion
	$\phi_n \sim H_n(x)$
Eigenwerte	3D:
$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ Besetzungszahloperator	$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$

54. Harmonischer Oszillator: Hamilton Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

55. Harmonischer Oszillator: Algebra

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

$$[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger$$

56. Harmonischer Oszillator: Eigenschaften

- Leiteroperatoren: \hat{a}, \hat{a}^\dagger
- diskretes Spektrum: $n = 0, 1, 2, \dots$
- Abstand äquidistant: $\hbar\omega$
- Spektrum nach oben offen, nach unten nicht: $\hat{a}|0\rangle = 0$

57. Für einen Operator $a = \alpha x + \beta p$ soll die Vertauschungsrelation $[a, a^\dagger]$ gelten. Welche

Bedingungen müssen dann die Koeffizienten α, β erfüllen ?

$$\begin{aligned} [a, \hat{a}^\dagger] &= [\alpha x, \beta^* p] + [\beta p, \alpha^* x] \\ &= i\hbar(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = 1 \end{aligned}$$

58. Welche Dimension hat a ?

Die Faktoren $\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, $\hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p$ sind so gewählt, dass sich die Einheiten wegkürzen. D. h. die Dimension von a ist 1.

59. Berechnen Sie $a^\dagger a$

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} &= \frac{1}{2}(\hat{x} - i\hat{p})(\hat{x} + i\hat{p}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 + i(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1) \end{aligned}$$

60. Wie sieht das Spektrum von \mathcal{H} aus ?

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

61. Welche Form hat die Wellenfunktion des Grundzustands ?

Der Grundzustand ist eine Gaußkurve. Wegen $\hat{a}|0\rangle = 0$ gilt:

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(x + \frac{d}{dx}\right)\phi_0(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_0(x) = c e^{-x^2/2x_0}$$

62. Wie wirkt a^\dagger auf die Eigenzustände ?

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \end{aligned}$$

63. Welche Eigenschaften hat der Besetzungszahloperator ?

Positive, ganzzahlige Eigenwerte, nach oben unbeschränkt

64. Kann man n auch bei 1 beginnen ?

Ja, die Grundzustandsenergie ist frei wählbar.

65. Wie sieht ein Zustand zur Zeit $t = 0$ aus, der aus den drei energetisch tiefsten Zuständen gebildet ist ? (80)

$$|\psi(0)\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle + \gamma|2\rangle$$

65.1. Wie sieht er zu einem späteren Zeitpunkt aus ?

Anwendung vom Entwicklungsoperator: $U = e^{-i/\hbar\mathcal{H}t}$. Mit $\mathcal{H}|0\rangle = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega\frac{1}{2}t}|0\rangle + \beta e^{-i\omega\frac{3}{2}t}|1\rangle + \gamma e^{-i\omega\frac{5}{2}t}|2\rangle$$

66. Wie sieht die Unschärferelation beim harmonischen Oszillator aus ?

Darstellung von \hat{x} und \hat{p} durch \hat{a} und \hat{a}^\dagger :

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{p} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\sqrt{\hbar\omega m}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

Die Berechnung von $(\Delta\hat{x})^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - \langle n|\hat{x}|n\rangle^2$ und $(\Delta\hat{p})^2$ analog ergibt dann:

$$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$$

66.1. Ändert sich die Unschärferelation mit der Zeit ?

Nein, sie bleibt immer gleich

67. Harmonischer Oszillator in 3D ?

Es gilt $H = H_x + H_y + H_z$, sowie $|\psi\rangle = |\psi_x\rangle|\psi_y\rangle|\psi_z\rangle$

$$H|\psi\rangle = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega|\psi\rangle$$

8 Dichtematrix

<p>Reiner Fall:</p> <p>Vereinfachung der Schreibweise von Erwartungswerten:</p> $\langle A \rangle = \langle \psi A \psi \rangle$ $= \sum_{n,p} \langle u_p \psi \rangle \langle \psi u_n \rangle A_{np}$ <p>Dichteoperator:</p> $\rho(t) \equiv \psi\rangle\langle\psi $ <p>Wahrscheinlichkeit für Messung:</p> $\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi \hat{P}_n \psi \rangle = \text{Sp}\{ \rho \hat{P}_n \}$ <p>Statistisches Gemisch:</p> <p>Zustände $1, \dots, k$ haben Wahrscheinlichkeiten p_i. Dichteoperator:</p> $\rho(t) \equiv \sum_k p_k \rho_k$	<p>Wahrscheinlichkeit für Messung:</p> $\mathcal{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n) = \text{Sp}\{ \rho \hat{P}_n \}$ <p>Eigenschaften</p> $\text{Sp}\{ \rho \} = 1, \quad \rho = \rho^\dagger$ $\langle A \rangle = \text{Sp}\{ \rho A \}$ <p>Eigenwerte von ρ</p> $\rho \psi_j \rangle = \sum_k \hat{p}_k \psi_k \rangle \langle \psi_k \psi_j \rangle = p_j \psi_j \rangle$ <p>von-Neumann Gleichung:</p> $\frac{d}{dt} \rho = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho]$
---	--

68. Definition von Dichtematrix?

$$\rho(t) \equiv \sum_k p_k \rho_k = \sum_k p_k | \psi_k \rangle \langle \psi_k |$$

mit $\text{Sp}\{ \rho \} = 1, \text{Sp}\{ \rho^2 \} \leq 1, \rho = \rho^\dagger$

69. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung den Wert a_n zu finden ?

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(a_n) &= \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n) = \sum_k p_k \langle \psi_k | P_n | \psi_k \rangle \\ &= \sum_k p_k \langle \psi_k | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi_k \rangle = \sum_k p_k \langle \psi_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \psi_n \rangle \\ &= \langle \psi_n | \sum_k p_k \rho_k | \psi_n \rangle \\ &= \langle \psi_n | \rho | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

70. Wie unterscheiden sich gemischter und reiner Zustand ?

Bei einem reinen Zustand ist jeder präparierte Zustand identisch, bei einem gemischten System liegen die einzelnen Zustände mit verschiedenen Wahrscheinlichkeiten vor.

In der Spur:

$$\text{Sp}\{\rho^2\} = 1 \Rightarrow \text{reiner Zustand}$$

$$\text{Sp}\{\rho^2\} < 1 \Rightarrow \text{gemischter Zustand}$$

71. Beispiele für gemischten und reinen Zustand ?

Reiner Zustand: $|\uparrow\rangle$, Spin-0 Zustand, Superpositionen allgemein

Gemischter Zustand: verschiedene Wahrscheinlichkeiten $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$ zu messen.

72. Gibt es Einschränkungen für die p_k ?

$$0 \leq p_k \leq 1, \quad \sum_k p_k = 1$$

73. Wie sieht der Dichteoperator für ein kontinuierliches Spektrum aus ?

$$\rho \equiv \int p(x) |x\rangle \langle x| dx$$

74. Wie sehen die Einschränkungen für die $p(x)$ im kontinuierlichen Fall aus ?

$$p(x) \geq 0, \quad \int p(x) dx = 1, \quad \int_{\epsilon} p(x) dx \leq 1$$

75. Was unterscheidet den Dichteoperator von den anderen Operatoren ?

Die Einschränkungen für die Eigenwerte p_i .

76. Wie berechnen sich die Erwartungswerte eines Operators A mit Hilfe von ρ ?

$$\text{Sp}\{\rho A\} = \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad \text{für reinen Zustand}$$

$$\text{Sp}\{\rho A\} = \langle A \rangle = \sum_i a_i \langle \lambda_i | \rho | \lambda_i \rangle \quad \text{für gemischten Zustand}$$

77. Wieviel Parameter hat allgemeine die Dichtematrix ?

An die Dichtematrix werden folgende Einschränkungen gestellt: $\rho = \rho^\dagger = \rho^{*T}$ und $\text{Sp}\{\rho\} = 1$. Die erste Bedingung reduziert die komplexen Nichtdiagonalelemente (je zwei Parameter pro Komplexer Zahl) um die Hälfte. Die letztere Bedingung begrenzt verringert die freien Komponenten um eine. Die Anzahl der Komponenten ist daher

$$N^2 - 1$$

78. Wieviele Parameter hat eine reine Dichtematrix ?

$$2N - 2$$

79. Ist jede hermitesche Matrix mit Spur 1 eine Dichtematrix ?

Nein. $\text{Sp}\{\rho\} = 1$ ist nur eine Bedingung an die Eigenwerte. Diese ist equivalent zu:

$$\text{Sp}\{\rho\} = \sum_n \langle u_n | \rho | u_n \rangle = \sum_n \sum_k p_k \langle u_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | u_n \rangle = \sum_k p_k \sum_n |c_n|^2 = \sum_k p_k = 1$$

Zusätzliche Bedingungen an die p_k ist aber $p_k \geq 0$. Woraus wiederum folgt $0 \leq p_k \leq 1$

80. Zeitliche Änderung von ρ

Wird beschrieben durch die Neumann Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho]$$

81. v. Neumann Gleichung - woher folgt diese ?

Diese Gleichung erhält man durch differenzieren von ρ und Einsetzen der Schrödingergleichung:

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left\{ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right\} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left\{ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right\}$$

mit $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} \langle \psi(t) |$ (Schrödingergleichung) folgt dann die v. Neumann Gleichung

82. Wie ist die Zeitabhängigkeit der Dichtematrix im Heisenbergbild ?

Sie ist konstant, da die Dichtematrix aus Zuständen besteht ($\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$) und diese zeitunabhängig sind.

83. Was ist wenn sich ρ mit der Zeit nicht verändert ?

Dann ist das System im thermischen Gleichgewicht (Boltzmannverteilung). Für die von Neumann-Gleichung gilt dann:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = 0 = [\mathcal{H}, \rho]$$

Das heißt der \mathcal{H} und ρ kommutieren.

84. Wie kann man sehen, wie sehr ein Zustand von einem reinen Zustand abweicht ?

An der Dichtematrix nicht. Da diese nicht vorliegt. Daher experimentell. Zum Beispiel durch Drehung der Apparatur im Stern Gerlach Versuch.

85. Wie ändert sich der Erwartungswert der Energie beim Mischen ?

Hängt linear von λ ab:

$$\langle E \rangle = \text{Sp}\{\rho E\} = \text{Sp}\{(\lambda\hat{\rho} + (1-\lambda)\tilde{\rho})E\} = \lambda\text{Sp}\{\hat{\rho}E\} + (1-\lambda)\text{Sp}\{\tilde{\rho}E\}$$

9 Entropie

Entropie	Zusammengesetzte Systeme
$S = - \sum_i p_i \ln p_i = -\text{Sp}\{\rho \ln \rho\}$	$\rho = \hat{\rho} \cdot \tilde{\rho}, \quad S = \hat{S} + \tilde{S}$
Maximal Entropie	Gemischte Systeme
$p_i = \frac{1}{N} \Rightarrow S = \ln N$	
Zeitliche Änderung	
$\frac{dp_i}{dt} = 0 \quad \text{im Schrödinger Bild}$	$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}$ $S(\rho) > \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda) S(\tilde{\rho})$

86. Was ist ein gutes Maß für die Reinheit eines Gemischen ?

Die Entropie

87. Allgemeine Definition von Entropie ?

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i = -\text{Sp}\{\rho \ln \rho\} \quad p_i : \text{Eigenwerte der Dichtematrix}$$

88. Wie sehen die Eigenwerte ρ_i des Dichteoperators aus, wenn die Entropie maximal wird ?

Alle Eigenwerte ρ_i sind gleich, $\rho_i = \frac{1}{N}$.

$$S = - \sum_i^N \frac{1}{N} \ln \frac{1}{N} = + \frac{1}{N} \cdot N \ln \frac{1}{N} = \ln N$$

89. Wie groß kann die Entropie maximal werden ?

Die Entropie wird maximal, wenn alle p_i gleich groß sind, $p_i = 1/N$.

$$S = \ln(N)$$

90. Wann ist $S = 0$?

Wenn der Zustand ein reiner Zustand ist. Dann ist $p_i = 1$ und damit $\ln p_i = 0$

91. Wie ändert sich die Entropie mit der Zeit ?

Ändern sich die Zustände nach der Schrödingergleichung, ändert sich die Entropie in erster Ordnung gar nicht. Die Dichtematrix ändert sich mit der Zeit, die p_i bleiben jedoch konstant.

92. Warum ändert sich die Entropie in erster Ordnung zeitlich nicht ?

Die erste Ordnung Störungsrechnung: $\rho(t) = \rho(0) + t \frac{d\rho(0)}{dt}$ liefert:

$$\begin{aligned} \frac{dp_i}{dt} &= \langle \psi_i | \frac{d\rho}{dt} | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_i | [\mathcal{H}, \rho] | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_i | \mathcal{H}\rho - \rho\mathcal{H} | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_i | \mathcal{H}p_i - p_i\mathcal{H} | \psi_i \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

93. Was passiert wenn zwei Systeme gemischt werden ?

Mischungsentropie:

$$\begin{aligned} \rho(\lambda) &= \lambda\hat{\rho} + (1 - \lambda)\tilde{\rho} \\ S(\rho) &> \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda)S(\tilde{\rho}) \end{aligned}$$

94. Was passiert, wenn ich zwei Systeme zusammensetze ?

Dann passiert keine Mischung und es gilt:

$$\rho = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho}, \quad S = \hat{S} + \tilde{S}$$

95. Mischungsentropie: Warum $\frac{\partial^2 S}{\partial \lambda^2} \leq 0$?

Dies gibt das Verhalten der Entropie beim Mischen wieder. $\frac{\partial^2 S}{\partial \lambda^2} \leq 0$ besagt daher, dass die Entropie als Funktion des Mischungsoperators eine konkave Funktion ist.

10 Ideale Quanten Gase

Erwartungswert: $\langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln Z \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$	Harmonischer Oszillator (Bosonen) Energie: $E_n = n \cdot \hbar \omega$
Boltzmann Verteilung Im thermischen Gleichgewicht $\frac{d\rho}{dt} = 0$ gilt $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$	Zustandssumme $Z^B = \frac{1}{1 - e^{-\beta \mathcal{E}}}$
Dichtematrix $\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}}$	Energie $\langle E \rangle^B = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta \mathcal{E}} - 1}$
Zustandssumme $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$	Zweiniveausystem (Fermionen) Zustandssumme $Z^F = 1 + e^{-\beta \mathcal{E}}$
Zusammengesetzte Systeme $Z = Z_1 \cdot Z_2$ $\langle E \rangle = \langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle$	Energie $\langle E \rangle^F = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta \mathcal{E}} + 1}$

96. Wie sehen die p_i aus, wenn das System im Gleichgewicht mit dem Wärmebad ist ?

Aus maximaler Entropie und Variationsrechnung folgt:

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

d.h. Boltzmann verteilt.

10.1 Zustandssumme

Bosonen

97. Zustandssumme bei Bosonen

$$Z^B = \frac{1}{1 - e^{-\beta \mathcal{E}}}$$

98. Zustandssumme des harmonischen Oszillators ?

Unendlich viele Zustände, $E_n = n \cdot \mathcal{E}$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \mathcal{E}}}$$

99. Ist die Reihe der Zustandssumme des harm. Osz immer konvergent ?

Eine geometrische Reihe ist konvergent dann, wenn $\sum_n x^n$ mit $|x| < 1$ gilt. Hier

$$e^{-\beta \mathcal{E}} = e^{-\beta \hbar \omega} < 1 \quad \text{da: } \beta, \hbar, \omega > 0$$

100. Wieviel Bosonen können im gleichen Zustand sein ?

Es können unendlich viele Bosonen im gleichen Zustand sein.

Fermionen

101. Einfaches System aus dem man Fermiverteilung erhält ?

Zwei Niveau System, bei dem die Zustände nur einfach zu besetzten sind.

Zugehörige Energie: $E = \sum_{n=0}^1 n \mathcal{E}$

102. Zustandssumme eines Zweiniveausystems ?

Fermiverteilung. D.h nur zwei Zustände

$$Z = \sum_{n=0,1} e^{-\beta E_n} = 1 + e^{-\beta E}$$

103. Fermi Verteilung bei Zwei Niveausystem, untere Niveau Energie Null ?

$$Z = 1 + e^{\beta E_2}, \quad E = \frac{E_2}{e^{\beta E_2} + 1}$$

104. Zustandssumme bei Fermionen

$$Z^F = 1 + e^{-\beta \mathcal{E}}$$

105. Kann man Zustandssummen messen ?

Direkt nicht, aber es gilt

$$\langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln Z, \quad c_v = -\frac{d}{d\beta} \langle E \rangle \quad \text{d.h.} \quad c_v = \frac{d^2}{d\beta^2} \ln Z$$

Man kann also Z bis auf zwei Integrationskonstanten durch die spezifische Wareme ermitteln.

10.2 Energie-Erwartungswerte

106. E mit Kenntniss von Z berechnen ?

$$\langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln Z$$

107. Was sind β und Z ?

β ist die inverse Temperatur, und Z die Zustandssumme

108. Wie den Erwartungswert von E aus den Wahrscheinlichkeiten p_i erhalten ?

$$\langle E \rangle = \sum_i p_i E_i$$

109. mittlere Energie von harm. osz. ?

Bosonen

$$\langle E \rangle = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta\mathcal{E}} - 1}$$

110. Mittlere Energie vom Harmonischen Oszillator in 3D und 2D ?

Fur 2D gilt $Z = Z_1 \cdot Z_2 = (Z_1)^2$

$$Z = \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\mathcal{E}}} \right)^2$$

$$\langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln Z = \dots = \frac{2\mathcal{E}}{(e^{\beta\mathcal{E}} - 1)}$$

3D analog

111. Kann man Energien messen ?

Nein, man kann nur die Energiedifferenzen messen.

112. Berechnen sie die mittlere Energie eine 16-Niveau Systems.

System: $0 \times 0\mathcal{E}$, $4 \times 1\mathcal{E}$, $6 \times 2\mathcal{E}$, $4 \times 3\mathcal{E}$, $1 \times 4\mathcal{E}$

Es gilt: $Z = \sum_i e^{\beta E_i}$, d.h.

$$Z = 1 + 4e^{-\beta\mathcal{E}} + 6e^{-\beta 2\mathcal{E}} + 4e^{-\beta 3\mathcal{E}} + 1e^{-\beta 4\mathcal{E}} = (1 + e^{-\beta\mathcal{E}})^4$$

mittlere Energie:

$$\langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln Z = \dots = \frac{4\mathcal{E}}{e^{\beta\mathcal{E}} + 1}$$

113. Warum kann man das untere Niveau auf Energie 0 setzen ?

Es können nur Energiedifferenzen gemessen werden.

114. Was passiert, wenn ich zwei Systeme zusammensetzt ?

Für $E = E_1(a) + E_2(b)$ gilt

$$Z = \sum_{a,b} e^{-\beta(E_1(a)+E_2(b))} = \sum_a e^{-\beta E_1(a)} \sum_b e^{-\beta E_2(b)} = Z_1 \cdot Z_2$$

Und die Erwartungswerte der Energien addieren sich

$$\langle E \rangle = \langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle$$

10.3 negative Temperaturen

115. Gibt es Temperaturen kleiner Null ?

Ja, in jedem endlichen Zustandssystem (N-Zustände) gilt für die Besetzung der Zustände im Gleichgewicht die Boltzman Verteilung: (hier 2-Zustandsystem)

$$\frac{N_+}{N_-} = e^{-\hbar\omega/k_B T}$$

Für Besetzungsinversion folgen daraus negative Temperaturen

116. Gibt es negative Temperaturen bei einem harm. Oszillator ?

Nein, denn für negative Temperaturen muss der Hamilton beschränkt sein, für den harmonischen Oszillator ist er aber unbeschränkt.

117. Wie sieht die (Besetzungs-)Wahrsch. für positive und negative Temperaturen aus ?

Für positive Temperaturen eine abfallende, für negative eine ansteigende e-Funktion.

118. Welche Systeme haben negative Temperaturen ?

z.B. Laser durch die Besetzungsinversion. Also ein System bei dem die Zustände höherer Energie mehr besetzt sind.

11 Planck

119. Plancksche Formel ?

spektrale Energiedichte:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \langle E \rangle_F$$

120. wie groß ist k_B ?

$$k_B \sim 1,38 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$$

121. Temperaturabhängigkeit der Gesamtenergie ?

Stefan Boltzmann Gesetz:

$$P = \sigma T^4$$

122. Wie heißt Boltzmann mit Vornamen ?

Ludwig

12 Drehimpuls

12.1 Drehimpulsalgebra

Drehimpuls	Eigenwerte
$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	
Algebra	$\mathbf{L}^2 l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 l, m\rangle$
$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$	$L_z l, m\rangle = m\hbar l, m\rangle$
Skalare Quadrat des Drehimpulses	
$\mathbf{L}^2 = L_x + L_y + L_z$ mit $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$ Spektrum	
Auf- und Absteigeoperatoren	
$L_+ = L_x + iL_y$	$l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$ ganz oder halbzahlig
$L_- = L_x - iL_y$	$m = -l, \dots, l$
Vertauschungsrelationen	
$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$	Eigenwerte von L_+ und L_-
$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$	$L_+ l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} l, m+1\rangle$
$[\mathbf{L}^2, L_\pm] = 0$	$L_- l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} l, m-1\rangle$

123. Drehimpuls

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$$

124. Drehimpulsalgebra

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$
$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0$$

125. Welche Operatoren vertauschen mit \mathcal{H} ?

Nur \mathbf{L}^2 und L_z .

126. Welche Werte nehmen l und m an ?

ganz- oder halbzahlige Werte, siehe Schwabe Seite 112 $m: -l \leq m \leq l$ mit ganzzahligen Schritten.

127. Kann man negative l messen ?

Nein, l ist immer positiv oder Null. Das ergibt sich allerdings aus der (mathematischen) Definition.

128. Warum nicht auch Algebra mit x , p

Unter Spiegelung wird $x \rightarrow -x$, $p \rightarrow -p$, aber $L \rightarrow L$.

129. Eigenwerte von \mathbf{L}^2 und L_z

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

130. Welche Einheit hat \mathbf{L} ?

Wirkung: \hbar

131. Woher kommt das i in der Vertauschungsrelation von $[L_i, L_j] = i\hbar L_k$? (37)

Der Kommutator von zwei hermiteschen Operatoren ist antihermitisch

12.2 Bahndrehimpulse, Kugelfunktionen

Die Eigenfunktionen sind nicht abhängig von r

$$\psi(\theta, \phi) \longrightarrow Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$\mathbf{L}^2\psi(\theta, \phi) = l(l+1)\psi(\theta, \phi)$$

Radialabhängigkeit

$$L_z\psi(\theta, \phi) = m\psi(\theta, \phi)$$

$$\Psi_{l,m}(r, \theta, \phi) = R_{l,m}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Die Eigenfunktionen sind Kugelflächenfunk-

132. Wie sehen die Wellenfunktionen $|l, m\rangle$ des Bahndrehimpulses aus

Kugelflächenfunktionen

$$Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

133. Warum ist l hier ganzzahlig

Aus der Eigenwertgleichung von L_z folgt:

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = F_{l,m}(\theta) e^{im\phi}$$

$Y_{l,m}(\theta, \phi)$ sind Ortswellenfunktionen und Ortswellenfunktionen gehen bei Drehung um 2π in sich selbst über.

$$Y_{l,m}(\theta, \phi = 0) = Y_{l,m}(\theta, \phi = 2\pi) \quad \Rightarrow \quad e^{2im\pi} = 1$$

12.3 Gekoppelte Drehimpulse

<p>Einzelspinbasis (ungekoppelt)</p> $J_1^2 j_1, m_1\rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) j_1, m_1\rangle$ $J_{1z} j_1, m_1\rangle = \hbar m_1 j_1, m_1\rangle$ $J_{1\pm} j_1, m_1\rangle = \leftarrow$ $\hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} j_1, m_1 \pm 1\rangle$ <p>Gesamtdrehimpuls</p> $J = J_1 + J_2$ $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2$ <p>Vertauschungsrelationen</p> $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ $[J_1^2, J_z] = [J_2^2, J_z] = 0$ $[J_1^2, J^2] = [J_2^2, J^2] = 0$ <p>d.h. J_1^2, J_2^2, J^2, J_z vertauschen und bilden eine orthonormierte Basis</p> <p>Basiswechsel</p> <p>ungekoppelte Drehimpulse</p> $\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\} \quad j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$	<p>gekoppelte Drehimpulse</p> $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\} \quad j_1, j_2, J, M\rangle$ <p>Eigenwertgleichungen</p> $J^2 JM\rangle = \hbar^2 J(J + 1) JM\rangle$ $J_z JM\rangle = \hbar M JM\rangle$ <p>Spin 1/2</p> <p>$S = 1$:</p> $ 1, 1\rangle = +, +\rangle$ $ 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ -, +\rangle + +, -\rangle \}$ $ 1, -1\rangle = -, -\rangle$ <p>$S = 0$</p> $ 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ +, -\rangle - -, +\rangle \}$
---	---

134. Betrachten wir den Operator $\mathcal{H} = \epsilon \frac{(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2}{\hbar^2}$.
Ist $\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ wieder ein Drehimpuls?

Addition von Drehimpulsen. Es gilt auch hier

$$[S_i, S_j] = [S_{1i} + S_{2i}, S_{1j} + S_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} (S_{1k} + S_{2k})$$

135. Was für Zustände wählt man für gekoppelte Drehimpulse (Spins)?

in gekoppelter Basis:

$$|S, M\rangle \rightsquigarrow |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$$

136. Wie sehen diese Zustände in der Einteilchenbasis aus ?

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \end{aligned}$$

137. Wie erhält man den Zustand $|10\rangle$ und $|00\rangle$?

$|1, 0\rangle$ erhält man aus $|1, 1\rangle$ durch Anwendung von L_- . D.h. $L_-|11\rangle \sim |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$.
 $|0, 0\rangle$ ist orthogonal zu $|1, 1\rangle$ und $|1, -1\rangle$, muss also noch orthogonal zu $|1, 0\rangle$ sein:
 $\langle 0, 0|1, 0\rangle = 0$

138. Wie beschreibt man ein System aus zwei ortsfesten Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$?

$$|\psi\rangle = \sum_{ij=-1/2, +1/2} c_{ij} |i, j\rangle$$

$|i, j\rangle$ als orthonormale Basis

$$c_{ij} = \langle i, j | \psi \rangle$$

139. Wie sieht das Spektrum von $\mathcal{H} = \frac{\epsilon}{\hbar^2} (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ aus ?

Es gilt $\mathbf{J} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$. Die Energie berechnet sich zu

$$E_{JM} = \langle H \rangle = \frac{\mathcal{E}}{\hbar^2} \langle JM | \mathbf{J}^2 | JM \rangle$$

mit $|J| = 0, 1$ und $\mathbf{J}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle$ folgt damit

$$\begin{aligned} E &= 0 & \text{für } J &= 0 \\ E &= 2\mathcal{E} & \text{für } J &= 1 \end{aligned}$$

140. Was passiert bei Einfluss eines Magnetfeldes ?

Durch das zusätzliche Magnetfeld spalten sich die entarteten Energien für $J=1$ auf (Zeemann Effekt).

Es gilt

$$\mathcal{H}_B = -\bar{\mu}_j \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad E_m = \frac{\mu_B}{\hbar} g_J m_J B_z \quad m_j = -j, \dots, j$$

141. Was passiert, wenn sich zwei Level kreuzen ?

Schon die kleinste Störung verhindert eine tatsächliche Kreuzung. Fährt man langsam (adiabatisch) an einen solchen Punkt heran, so daß die Lücke nicht übersprungen wird, ändert sich an diesem Punkt der Zustand.

13 Spin 1/2 - Teilchen

Basisvektoren

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Operatoren

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$$

$$S^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle$$

Eigenvektoren in S_z -Basis

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle]$$

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - |-\rangle]$$

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + i|-\rangle]$$

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - i|-\rangle]$$

Operatormatrizen

$$(S_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_z$$

$$(S_x) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_x$$

$$(S_y) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \sigma_y$$

Spin in beliebiger Richtung

$$(S_u) = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x e_x + \sigma_y e_y + \sigma_z e_z)$$

$$(S_u) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) e^{-i\phi} \\ \sin(\theta) e^{i\phi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Eigenvektoren

$$|+\rangle_u = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$

$$|-\rangle_u = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$

Leiteroperatoren

$$S_+ = S_x + iS_y$$

$$S_- = S_x - iS_y$$

mit

$$S_+|+\rangle = 0 \quad S_+|-\rangle = \hbar|+\rangle$$

$$S_-|-\rangle = 0 \quad S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle$$

Spinor

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad \text{Elektron}$$

$$|\chi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad \text{Spin}$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \phi(r) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

142. Wie beschreibt man 1 Teilchen mit Spin 1/2 ?

Durch einen Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \phi(r) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

143. Wie kann man einen Spinor in Diracschreibweise ausdrücken ?

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \int dr |r\rangle \langle r | \phi\rangle \\ |\chi\rangle &= c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \\ |\psi\rangle &= |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle = \sum_{\epsilon=+,-} \int dr |r, \epsilon\rangle \langle r, \epsilon | \psi\rangle \end{aligned}$$

144. Wie sehen die Paulimatrizen aus ?

$$(\sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\sigma_x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

145. Eigenschaften der Pauli-Matrizen ?

Erfüllen die Drehimpulsalgebra, sind hermitesch, haben Spur Null $\text{Sp}\{\sigma_i\} = 0$. Es gilt $\sigma_i^2 = 1$. Und haben alle die Eigenwerte $+1, -1$.

146. Wie erhalten Sie den Spin in Y-Richtung $|+\rangle_y$?

$$\begin{aligned} \text{Eigenwertproblem: } \sigma_y \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &= 1 \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |+\rangle_y \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -i\beta \\ i\alpha \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ i\alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (\text{Normierung}) \end{aligned}$$

14 Stern-Gerlach-Versuch

<p>Allgemeiner Spinzustand</p> $ \psi\rangle = \alpha +\rangle + \beta -\rangle$ <p>in beliebiger Richtung mit Winkel ϕ, θ</p> $ \psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\phi/2} +\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi/2} -\rangle$ <p>Dichtematrix im Zweizustandssystem</p> $\rho = \frac{1}{2}\mathbb{1} + a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z$ $= \begin{pmatrix} 1/2 + c & a - ib \\ a + ib & 1/2 - c \end{pmatrix}$	<p>Wahrscheinlichkeit Spin-Up zu messen</p> $\mathcal{P}(\uparrow_{\theta,\phi}) = \langle \uparrow_{\theta,\phi} \rho_z \uparrow_{\theta,\phi} \rangle$ $= \frac{1}{2} + c \cos \theta$ <p>mit $\uparrow_{\theta,\phi}\rangle$: zu messenden Spin, ρ_z Zustand der Spins vor der Messung (in z ausgerichtet).</p>
---	---

147. Wie misst man einen Teilchenstrahl aus einem Ofen ?

Messung der Observablen..

148. Was kann ich bei einem Teilchenstrahl aus einem Ofen messen ?

Ströme, Spinorientierung

148.1. Wovon hängt das ab, was man misst ?

thermische Verteilung im Ofen \rightarrow Dichtematrix ...

149. Woher wissen wir, ob es sich um einen reinen oder einen gemischten Zustand handelt ?

Drehung der Apparatur:

- rein: manchmal nur ein Strahl
- gemischt: immer Zweistrahl

Reiner Zustand: Messung von $|+\rangle_z$ nur ein Strahl bei Messung in den Eigenzuständen von S_z , d.h. Magnetfeld in Z-Richtung.

150. Gibt es auch halbzahlige Spins ?

Ja bewiesen durch den Stern-Gerlach Versuch.

151. Wie viel Aufspaltrichtungen gibt es beim Stern Gerlach Versuch für Spin 1 ?

Drei

152. Wie messe ich $|+\rangle_y$?

Über die Dichtematrix,

$$\mathcal{P}(|+\rangle_y) = \langle +_y | \rho | +_y \rangle = (1, -i) \begin{pmatrix} 1/2 + c & 0 \\ 0 & 1/2 - c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

153. Teilchenstrahl eines Spin 1/2 Teilchens ?

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$

154. Spin-Up/Eigenvektor zu $\hbar/2$ in beliebiger Raumrichtung ?

$$|+\rangle_{\phi,\theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$

155. Was passiert, wenn ich den Strahl um beliebigen Winkel drehe?

Es gelten die folgenden Eigenzustände für einen Spin unter beliebigem Winkel:

$$|+\rangle_{\mathbf{u}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$
$$|-\rangle_{\mathbf{u}} = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$

Misst man Spin Up unter einem Winkel (hier \mathbf{u}), so erhält man:

$$\mathcal{P}(\uparrow_{\theta,\phi}) = \frac{1}{2} + c \cos(\theta)$$

Man erhält also eine Kurve, die bei 2π in sich selbst übergeht, die Abhängig ist vom Winkel θ und c .

156. Was passiert bei $\phi = 0, \theta = 0, 2\pi$?

$$\text{Es gilt: } |+\rangle_{\phi,\theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2}|-\rangle$$

$$\theta = 0 : |+\rangle_{\phi,\theta} = 1|+\rangle + 0|-\rangle = |+\rangle$$

$$\theta = 2\pi : |+\rangle_{\phi,\theta} = -1|+\rangle + 0|-\rangle = -1|+\rangle$$

Beides sind die gleichen Zustände nur mit andere Phase. Dies kann man jedoch nicht messen.

157. Stern Gerlach Zustände in Spinorschreibweise ?

$$|+\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - |-\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + i|-\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - i|-\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

158. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit in θ, ϕ Richtung Spin Up zu messen ? Was misst man, wenn der Spin vollständig in z-Richtung polarisiert ist ?

Allgemeiner Spin:

$$|+\rangle_{\phi, \theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi/2} |+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi/2} |-\rangle$$

Messung von vollständig polarisiertem Strahl in Richtung z:

$$\mathcal{P}(|+\rangle_z) = |\langle +_{\phi, \theta} | +_z \rangle|^2 = \cos^2 \theta/2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \theta$$

Dichtematrix für Spins in Z-Richtung polarisiert: $\rho_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + c & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - c \end{pmatrix}$.

Wahrscheinlichkeit für Messung von Spin-Up in beliebiger Richtung:

$$\mathcal{P}(|+\rangle_{\phi, \theta}) = \langle +_{\phi, \theta} | \rho_z | +_{\phi, \theta} \rangle = \frac{1}{2} + c \cos \theta$$

$c = \frac{1}{2}$: reiner Zustand

$c = 0$: vollständig unpolarisiert (50% Wahrscheinlichkeit je Spin)

158.1. Wie sieht das für Bosonen aus ?

Es gilt $\frac{\theta}{2} \rightarrow \theta$. Die Kurve ist in θ Richtung um den Faktor 2 gestaucht. Dies kommt daher, dass die Phase bei Bosonen schon nach π in ihr negatives übergeht.

159. Wirkung von S_x, S_y, S_z ?

Die Spinoperatoren messen den Spin in die jeweilige Richtung, d.h. ihre Eigenwerte geben den Spin an. S_x, S_y sind dabei durch S_+, S_- gegeben.

15 Wasserstoffatom

Hamilton		Hamilton
$\mathcal{H} = \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{ r_k - r_e }$		$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_S^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_{\text{rel}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$
Zweikörper Problem		Quantenzahlen
$\mathbf{R}_S = \frac{m_k \mathbf{r}_k + m_e \mathbf{r}_e}{m_k + m_e}$	Schwerpunkt	$n = 1, 2, 3, \dots$
$\mathbf{r} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e$	Relativkoordinaten	$l = 0, 1, \dots, n - 1$
$M = m_k + m_e$	Gesamtmasse	$m = -l, \dots, l$
$\mu = \frac{m_k m_e}{m_k + m_e}$	reduzierte Masse	$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
Schwerpunktsbewegung		Eigenwerte, Spektrum
$\mathbf{p}_S = M \dot{\mathbf{R}}_S$		$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$
Relativbewegung		
$\mathbf{p}_{\text{rel}} = \mu \dot{\mathbf{r}}$		

160. Wie lautet der Hamilton mit Kern und Elektron für das Wasserstoffatom ?

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e|}$$

161. Wie lautet der Hamilton für das Wasserstoffatom ?

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_S^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_{\text{rel}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

15.1 Schwerpunktsystem

162. Wie reduziert man ein 2-Körper Problem ?

Einführung von Relativkoordinaten, reduzierter Masse und Zerlegung des Hamiltonian in Schwerpunktsbewegung und Relativbewegung.

163. Zerlegung des Hamiltonian in Schwerpunkt und Relativhamiltonian ?

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_S^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_{\text{rel}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

164. Wann ist es sinnvoll ins Schwerpunktsystem zu wechseln ?

Wenn der Gesamtimpuls erhalten bleibt, $[p_k + p_e, \mathcal{H}] = 0$. Also $p_k + p_e$ mit dem Hamilton vertauscht. Dies geht weil das Potential symmetrisch ist in r_e und r_k ???

165. Welchen Impuls hat der Schwerpunkt im Schwerpunktsystem ?

Keinen, also gleich Null

15.2 Zustände

166. Warum ergeben im Wasserstoffatom die Teil-Hilberträume im Gesamtzustand keinen Produkt-Zustand ?

Hätte man Produktzustände, dann wären die Laufbereiche der Quantanzahlen unabhängig voneinander. ???

167. Wie sieht der Basiszustand zum Hamilton aus ?

$$|\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_e, m_k, m_e\rangle$$

168. Warum ist Wasserstoff kein Edelgas ?

Es gibt noch den Spin

15.3 Entartung

169. Wie sind die Eigenwerte entartet ?

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, \dots, n-1 \\ m &= -l, \dots, l \\ m_s &= -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \end{aligned}$$

170. Was für Werte nehmen l, m an ?

l ganzzahlig, m in ganzzahligen Schritten

171. Warum sind in E_n nur n 's und keine l und m drin ?

l und m Entartung.

172. Warum ist der Spin entartet ?

S kommt in \mathcal{H} nicht vor, somit hat der Spin keinen Einfluss auf die Energie. Daher m_s Entartung.

173. Wodurch kommt die m -Entartung ?

Der \mathcal{H} ist rotationsinvariant (da ein Skalar und damit invariant unter Drehungen). Daraus folgt:

$$[\mathcal{H}, L_i] = 0$$

damit gilt auch $[\mathcal{H}, L_+] = 0$

Wir wissen: $H|lm\rangle = E|lm\rangle$. Wegen $[\mathcal{H}, L_+] = 0$ können wir dann schreiben:

$$HL_+|lm\rangle = L_+H|lm\rangle = EL_+|lm\rangle$$

Wendet man L_+ auf $|lm\rangle$ an, so gilt $L_+|lm\rangle \sim |lm+1\rangle$. Der Proportionalitätsfaktor kürzt sich aber bei beiden Seiten heraus, so das gilt:

$$H|lm+1\rangle = E|lm+1\rangle$$

Daraus folgt, dass die Zustände für m und $m+1$ die gleiche Eigenwerte (Energien) E_n haben. Die Energien sind damit bezüglich m entartet.

174. Warum sind die Zustände für verschiedene l entartet ?

Für das Coulomb Potential ($\frac{1}{r}$) ist der Lenz-Vektor eine Erhaltungsgröße ...

175. Wohin zeigt der Lenz-Runge Vektor ?

Entlang der großen Hauptachse der elliptischen Teilchenbahn.

176. Wie sieht l beim Wasserstoff aus ?

$$l = 0, 1, \dots, n - 1$$

177. Wie kann man am Potential sehen, dass l nur bis $n - 1$ läuft ?

Man sieht dies anhand des Graphen für das effektive Potential. Gibt man durch die Wahl des n eine feste Energie E vor, so kann l nicht beliebig groß werden.

Bei der vorgegebenen Energie müssen gebundene Werte innerhalb des Potentials möglich sein. Da der minimale Punkt des Potentials aber mit steigendem l größer wird, gibt es ein l bei dem das effektive Potential für alle Abstände r größer als E wird, und somit keine stationären Zustände mehr vorliegen können.

178. Woraus folgt die Ganzzahligkeit für Bahndrehimpulse ?

1. Folgt aus der Eindeutigkeitsforderung für die Lösung der DGL im Ortsraum.
2. In Kugelkoordinaten ist die Abhängigkeit von ϕ : $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$. Diese Ortswellenfunktion muss bei Drehung um 2π wieder in sich übergehen. Daher ist m ganzzahlig, und damit auch l .

15.4 Spektrum, Energien

179. Wie sieht das Spektrum aus ?

Schwerpunkt

- freies Teilchen, kontinuierliches Spektrum

Relativhamiltionian

- gebundene Zustände: diskretes Spektrum
- ungebundene Zustände: kontinuierliches Spektrum

180. Formel für Energien der gebundenen Zustände (Diskrete Eigenwerte)

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$$

181. Wie heißen die ungebundenen Zustände

Streuzustände

182. Woher erkenne sie welche Übergänge sie messen ?

Auswahlregeln, Magnetfeld ergibt Multiplett Aufspaltung

183. Was gibt das für Übergangswellenlängen ?

Lyman, Balmer, Paschen, Bracket, Pfund.

Sichtbare gehen von $n > 2$ auf $n = 2$.

Übergänge zum $n = 1$ liegen im UV, solche zu $N = 3$ im IR.

15.5 Natrium

184. Warum sagt man, dass Natrium ein Wasserstoffspektrum habe ?

Die Alkaliatome haben alle abgeschlossenen kugelsymmetrische Elektronenschalen und ein zusätzliche s-Elektron auch Leichtelektron genannt. Die Inneren Elektronen schirmen den Kern ab, so dass das Leichtelektron ähnlich dem Wasserstoffatom nur ein Proton im Kern sieht.

185. Wie sieht das Potential im Vergleich zum Wasserstoff aus ?

Das Potential ist abhängig von der Entfernung zum Kern. Außerhalb wie ein Wasserstoff $-\frac{1}{r}$ -Potential und innerhalb wie ein $-\frac{Z}{r}$ Potential. Das heißt, je näher man an den Kern kommt, desto mehr positive Ladungen sieht das Elektron.

186. Wie errechnet man das Potential ?

Maxwellgleichung: $\Delta E = e\pi\rho$

$$e\pi \int \rho dV = \int_r \Delta E dV = \oint E(r) e_r dA = e\pi r^2 E(r) e_r$$

$$\text{Also } E(r) = e_r \frac{\int \rho dV}{r^2} \quad \Rightarrow \quad V = \frac{\int \rho dV}{r}$$

187. Wie sieht das Spektrum von Na aus ?

Höhere Drehimpulse haben höhere Energien, da sie weniger vom Kern sehen. (Und sind damit ähnlicher zum Wasserstoff). Umgekehrt weichen Zustände mit geringen Drehimpulsen umso mehr vom Wasserstoffspektrum ab, das sie den Kern mehr spüren.

188. Warum sind die Zustände beim Natrium nicht entartet ?

Je größer das l ist, desto geringer ist die positive Ladung, die das Elektron sieht. Die Effektive Kernladung wird in Kernnähe größer.

Damit folgt auch, dass das effektive Potential nicht mehr proportional zu r^{-1} ist, und damit die l Entartung aufgehoben ist.

189. Welche Atome sind noch Wasserstoffähnlich ?

Alle weiteren Alkaliatome. Z.B. Li (Lithium)

16 Fermiteilchen, Pauliverbot

190. Was ist das Pauliprinzip?

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen ist immer antisymmetrisch gegen Vertauschung von zwei Elektronen.

Oder: Ein Zustand $|n, l, m_l, m_s\rangle$ kann nur von einem Elektron besetzt werden.

191. Wie ist die mathematische Formulierung?, Wellenfunktion von zwei identischen Teilchen ?
Was passiert, wenn man die vertauscht?

Ein Zustand von Fermionen muss vollständig antisymmetrisch gegenüber Vertauschung sein.

$$|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, m_1, m_2\rangle = \pm |\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, m_2, m_1\rangle$$

mit + für Bosonen, – für Fermionen

D.h. für zwei Gleiche Zustände gilt $\psi \equiv 0$.

192. Wie sieht die Wellenfunktion eines Grundzustands im Helium aus ?

Für ein Elektron im Helium gilt

$$\psi_{ij}(r_1, r_2) = \epsilon_{ij} \chi(r_1) \chi(r_2)$$

d.h. die Ortswellenfunktion ist dieselbe, jedoch die Gesamtwellenfunktion aufgrund der Spinquantenzahl antisymmetrisch.

193. Was sind Fermionen ?

Teilchen mit halbzahligen Spin. Für sie gilt das Pauli-Verbot

17 Störungstheorie

Wir betrachten einen nach λ differenzierbaren gestörten Hamilton H . Die Störung kann z.B. die folgende Form haben:

$$H = H_0 + \lambda V$$

Eigenwerte und Zustände

$$H|\psi\rangle = E_n|\psi\rangle$$

$$H_0|\phi_n\rangle = E_n^0|\phi_n\rangle$$

Entwicklung

$$E_n(\lambda) = \mathcal{E}_0 + \lambda\mathcal{E}_1 + \lambda^2\mathcal{E}_2 + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \dots$$

mit $\mathcal{E}_1 = \left. \frac{dE_n}{d\lambda} \right|_{\lambda=0}$

Es gilt:

$$\mathcal{E}_0 = E_n^0$$

$$|0\rangle = |\phi_n\rangle$$

d.h. in null-ter Ordnung (ohne Störung) sind Energie und Zustand die des ungestörten Hamilton.

Korrekturen

Energie

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle\phi_n|\frac{dH}{d\lambda}|\phi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{|\langle\phi_p|\frac{dH}{d\lambda}|\phi_n\rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + \dots$$

Zustand

$$|\psi(\lambda)\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\langle\phi_p|\frac{dH}{d\lambda}|\phi_n\rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\phi_p\rangle + \dots$$

194. Energiekorrektur erster Ordnung ?

$$\frac{dE_n}{d\lambda} = \langle\phi_n|\frac{dH}{d\lambda}|\phi_n\rangle \quad \phi_n: \text{ungestörter Hamilton}$$

195. Energiekorrektur zweiter Ordnung ?

$$\frac{d^2E_n}{d\lambda^2} = -2 \sum_{p \neq n} \frac{|\langle\phi_p|\frac{dE_n}{d\lambda}|\phi_n\rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

$$\frac{d|\phi_n\rangle}{d\lambda} = - \sum_{p \neq n} \frac{|\langle\phi_p|\frac{dE_n}{d\lambda}|\phi_n\rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} |\phi_p\rangle$$

196. Wann darf man die zeitunabhängige Störungsrechnung anwenden ?

Bei kleiner Störung und wenn man Zustände und Energien nach Potenzen von λ entwickeln kann.

197. Bedingung an λ ?

Für $\lambda \rightarrow 0$ muss gelten $E_n \rightarrow E_n^0$ und $|\phi_n\rangle \rightarrow |0\rangle$

18 Zerfall

Lorentzresonanz

Ein Zustand zerfällt exponentiell, wenn es sich bei dem Zustand um eine Lorentzresonanz handelt.

Die Wahrscheinlichkeit eine Lorentzresonanz noch vorzufinden nimmt exponentiell ab

$$w(t) = e^{-t/\tau}$$

Die Lebensdauer ist die inverse Breite der Resonanzkurve (Γ)

$$\tau = \hbar/\Gamma$$

Die Breite Γ entspricht dabei der Zerfallsrate

$$\Gamma = -\hbar \frac{1}{w(t)} \frac{d}{dt} w(t)$$

Abweichung vom Exponentiellen Zerfall

In der Realität gibt es keine Lorentzresonanzen, weil

- jeder Hamilton ein nach unten beschränktes Spektrum hat

- Der Erwartungswert des Hamilton endlich sein muss
- es keinen exponentiellen Zerfall gibt

Goldene Regel

Aus der Übergangsamplitude vom diskreten Zustand in kontinuumsnormierte Zustände durch eine Störung H_{int}

$$\langle \Lambda_{Ep} | \gamma(t) \rangle = \langle \Lambda_{Ep} | e^{\frac{i}{\hbar} H t} \gamma(0) \rangle$$

erhält man durch Entwicklung der Exponentialfunktion und nähern für große Zeiten

$$\frac{w(\delta, t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE dp |\langle \Lambda_{Ep} | H_{\text{int}} \gamma \rangle|^2 \delta(E - E_0)$$

Daraus folgt die Zerfallsrate für kleine Zeiten

$$\Gamma = 2\pi \int dE dp |\langle \Lambda_{Ep} | H_{\text{int}} \gamma \rangle|^2 \delta(E - E_0)$$

Das Problem dieser Herleitung ist offensichtlich, dass man für mittlere Zeiten nähert!

198. Was wissen Sie über zerfallende Teilchen

Fermi's goldene Regel: Zerfallsrate

$$\Gamma(E) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle E, \beta | V | \psi \rangle|^2 \rho_f(E)$$

mit $\langle E, \beta | V | \psi \rangle = \langle f | V | i \rangle$

Wahrscheinlichkeit zur Zeit t einen Zustand im Bereich Δ zu finden:

$$\frac{w(\Delta, t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\Delta} dE' d\beta |\langle E', \beta | H_{\text{int}} | \psi \rangle|^2 \delta(E' - E)$$

Zerfallsrate

$$\Gamma(E) = ? 2\pi \int dE' d\beta |\langle E', \beta | H_{\text{int}} | \psi \rangle|^2 \delta(E' - E)$$

199. Unter welchen Voraussetzungen ist ein Zerfall streng lösbar und wann gilt die Goldene Regel ?

- Man muss den Hamilton zerlegen können $H = H_0 + H_{\text{int}}$
- Der Zielzustand muss kontinuiersnormiert sein.

19 Bellsche Ungleichungen

In der Physik gab es die Frage ob in der QM die Größen *lokal sind* und *unabhängig voneinander* handeln. Diese Annahmen werden in den Bellschen Ungleichungen wiedergespiegelt.

Deren Verletzung, besagt, dass die QM nicht-lokal ist, und das es keine verborgenen Parameter gibt die die Messung vorherbestimmen.

Paradoxon

Angenommen man misst zwei Spins. Durch die Messung des ersten Teilchens ist der Zustand des zweiten Teilchens festgelegt. Woher jedoch sollen die Teilchen wissen welches zuerst gemessen wird? Dies ließe sich durch verborgene Parameter festlegen.

Experiment

Ein Teilchen im Singulett Zustands (Spin-0) zerfällt in zwei Teilchen mit Spin 1/2.

$$\psi = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Diese Teilchen fliegen in entgegengesetzte Richtungen. Der Spin wird in der einer Richtung unter den zwei Winkeln b und c gemessen, und in die andere Richtung unter dem Winkel a und ebenfalls b . Die Möglichen Messergebnisse sind Spin-up und Spin-down.

Unter der Vorgabe verborgener Parameter müssen die Teilchen für jede der drei Richtung fest gespeichert haben wie sie sich bei Messung der Spins zu verhalten haben.

Bellsche Ungleichungen

Es gibt nicht eine, sondern beliebig viele Bellsche Ungleichungen. In diesem Fall sind dies Schranken an Erwartungswerte, die sich aus der Annahme ergeben, dass die Messwerte durch Parameter festgelegt wären, die sich

nur lokal auswirken. (Prinzipiell haben Bellsche Ungleichung nichts mit Physik zu tun. Ein prominentes Beispiel ist der Vergleich von Menschen mit (Geschlecht, Auto, Sprache))

Stellen wir zu unserem Experiment eine Bellsche Ungleichung auf. Wir notieren Spin-Up oder Spin-Down in den Variablen a, b, c für die drei Richtungen mit je ± 1 je nach Spin-Richtung. Dann gilt $b_2 = \pm c_2$, $b_1 = -b_2$. Damit lässt sich folgende Ungleichung formulieren:

$$a_1 b_2 - a_1 c_2 - b_1 c_2 \leq 1$$

und durch Bildung der Erwartungswerte $\langle a_1 b_2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i a_{1i} b_{2i}$ die Bellsche Ungleichung zu unserem Problem:

$$\langle a_1 b_2 \rangle - \langle a_1 c_2 \rangle - \langle b_1 c_2 \rangle \leq 1$$

Quantenmechanik

Was sagt die QM dazu?

Die Wahrscheinlichkeit bei Teilchen 1 in Richtung a Spin-Up und bei Teilchen 2 in Richtung b ebenfalls Spin-Up zu messen ist quantenmechanisch:

$$W(\uparrow_a \uparrow_b) = |\langle \uparrow_a \uparrow_b | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right)$$

sowie für alle weiteren Kombinationen

$$W(\uparrow_a \downarrow_b) = \frac{1}{2} \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right)$$

$$W(\downarrow_a \uparrow_b) = \frac{1}{2} \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right)$$

$$W(\downarrow_a \downarrow_b) = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right)$$

Die Bellsche Ungleichung verlangt die Messung der Richtungen b, c sowie a, b für ein Spin Teilchen gleichzeitig. Die zweifache Messung eines Spins ist jedoch nicht möglich. Den Erwartungswert für $\langle a_1 b_2 \rangle$ berechnet man dann über die Gesamtanzahl von gleichen und Ungleichen Spins (N_+, N_-). Dann gilt

$$\langle a_1 b_2 \rangle = \frac{N_+ - N_-}{N}$$

Für große N wird damit die Wahrscheinlichkeit gleiche Spins zu messen zu: $W(N_+) = N_+/N$.

Mit unseren bisherigen Ergebnissen folgt

$$W(N_+) = W(\uparrow_a \uparrow_b) + W(\downarrow_a \downarrow_b) = \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

$$W(N_-) = W(\downarrow_a \uparrow_b) + W(\uparrow_a \downarrow_b) = \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

und damit

$$\langle a_1 b_2 \rangle = \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = -\cos(\beta)$$

Verletzung der Bellschen Ungleichung

Mit den Winkeln $\beta = \angle(a, b)$, $\gamma = \angle(a, c)$ und $\beta - \gamma = \angle(b, c)$ folgt die Bellsche Ungleichung:

$$\begin{aligned} \langle a_1 b_2 \rangle - \langle a_1 c_2 \rangle - \langle b_1 c_2 \rangle \\ = -\cos(\beta) + \cos(\gamma) + \cos(\beta - \gamma) \end{aligned}$$

Für die Winkel $\beta = 2\pi/3 = 120^\circ$ und $\gamma = \pi/3 = 60^\circ$ folgt:

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \leq 1$$

Damit ist die Bellsche Ungleichung widerlegt! Dies bedeutet, dass die verborgenen Parameter nicht mit der Quantenmechanik vereinbar sind. Die QM wird zusätzlich durch Experimente die die Erwartungswerte bestätigen gestützt.

200. Was sind die Bellschen Ungleichungen?

Diese Ungleichungen drücken Schranken für die Erwartungswerte aus, die bei verborgenen Parametern zu erwarten wären.

201. Woher kommen die Ungewissheiten mit der man in der Quantenmechanik zu tun hat ?

Die Unsicherheiten haben nichts mit unbekanntem Größen in der Theorie der Quantenmechanik zu tun, wie das im EPR-Paradoxon mit den *hidden variables* formuliert war.

1976 wurde in einem Experiment die Verletzung der Bellschen Ungleichungen bewiesen.

202. Wie sieht die Bellsche Ungleichung aus ?

Es gibt beliebig viele davon. Für ein gegebenes Experiment lassen sich diese unter der Annahme aufschreiben, die möglichen Ergebnisse einer Messung wären schon vorher bekannt (verborgene Parameter, hidden variables).

Eine Möglichkeit ist die der Spin Messung eines Spin-0 Zustands.

$$\begin{aligned} a_1 b_2 - a_1 c_2 - b_1 c_2 &\leq 1 \\ \langle a_1 b_2 \rangle - \langle a_1 c_2 \rangle - \langle b_1 c_2 \rangle &\leq 1 \end{aligned}$$

20 Festkörper

Modell des Festkörpers als periodisches Potential

$$V(x+l) = V(x)$$

Bloch'sches Theorem

Da Hamilton und Translationsoperator mit Verschiebung l vertauschen $[H, U_l]$ gilt

$$\psi(x+l) = e^{ikl} \psi(x)$$

d. h. die Wellenfunktion ist bis auf eine Phase periodisch mit Länge l .

Die Wellenfunktion lässt sich auch umschreiben als

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikx} u(x) \quad \text{mit} \quad u(x+l) = u(x)$$

Die Wellenfunktion $\psi_k(x)$ ist kontinuierlich normiert

$$\langle \psi_k | \psi'_k \rangle = \langle u_k | u'_k \rangle \delta(k' - k)$$

Bestimmung der Dispersionsrelation

Wir definieren $u = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}$. Wegen der Linearität der Schrödingergleichung gilt:

$$u(l) = Au(0)$$

Die Matrix A bestimmt damit das ganze System. Ihre Elemente sind differenzierbare Funktionen der Energie.

Aus der Ortsunabhängigkeit der Stromdichte erhalten wir $\det(A) = 1$.

Betrachtet man nun die Eigenwerte von A so findet man, dass nur komplexe Eigenwerte λ möglich sind und damit auch $|\text{Sp}\{A\}| < 2$. Damit erhält man Energiebänder und Eigenwerte auf dem komplexen Einheitskreis.

Bandkanten

An einer Bandkante muss gelten: $|\text{Sp}\{A\}| = 2$, sowie $\frac{d}{dE} \text{Sp}\{A\} \neq 0$.

Für die untere Bandkante erhält man

$$E = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \quad \text{mit} \quad M = \frac{\hbar^2}{2l^2} \left| \frac{d}{dE} \text{Sp}\{A\} \right|$$

Die Obere Bandkante erreicht man bei $k = \pm \frac{\pi}{l}$. Dort gilt, dass die Energie ein Maximum und eine Krümmung hat.

Eigenschaften der Dispersionsrelation

Die Energie $E(k)$ ist strikt monoton innerhalb des Bandes. Und sie ist eine gerade Funktion $E(-k) = E(k)$.

Gruppengeschwindigkeit

Es gilt

$$v_G = \frac{1}{m} (\hbar k + \langle u_k | \hat{p} | u_k \rangle)$$

203. Was passiert bei einem einzelnen Potentialtopf ?

Je nach Größe der Energie ergeben sich Wellenfunktionen

$$E > V : \quad \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$E < V : \quad \psi = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$$

204. Wie lässt sich die Periodizität ausdrücken ?

Beschreibung einer diskreten Periodizität über

$$U_l \psi(x) = \psi(x - l)$$

mit unitärem Operator U_l .

205. Was macht der Operator U_l ?

U_l ist ein unitärer Operator, der Translationen erzeugt.

206. Was ist das Bloch-Theorem ?

Aus den Eigenwerten unitärer Operatoren folgt: $\lambda^* \lambda = 1 \Rightarrow \lambda = e^{i\delta}$.

Mit $U_{-l} \psi(x) = \psi(x + l)$ und den Eigenwerten folgt

$$\psi(x + l) = e^{iKl} \psi(x)$$

207. Wie löse ich ein periodisches Potentialproblem ?

- Die Schrödingergleichung ist eine lineare, reelle Differentialgleichung 2. Ordnung. Deshalb hängen ψ und ψ' an der Stelle l linear von ψ und ψ' an der Stelle 0 ab:

$$u(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} \quad u(l) = Au(0)$$

- Die Wiederkehrabbildung A hat die Determinante 1, da der Strom divergenzfrei ist.

$$\det A = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 = \frac{1}{\lambda_2}$$

- Reelle Eigenwerte sind nicht möglich, da dann die Lösungen für $x \rightarrow \pm\infty$ anwachsen
- für komplexe Eigenwerte gilt jedoch, dass diese vom Betrag her 1 sein müssen: $|\lambda_{1,2}| = 1$. Daher liegen die Eigenwerte auf dem komplexen Einheitskreis.
- Als Lösung erhält man Energie-Bänder

208. Sind alle physikalischen Zustände periodisch ?

Nein, jedoch sind alle Zustände aus periodischen Wellenfunktionen zusammengesetzt. (z.B. freies Teilchen)

209. Wie lautet die Wellenfunktion zu einem regelmäßiges Kastenpotential ?

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikl} u(x) \quad u(x) = u(x + l)$$

210. Wie sehen die Energiewerte zu einem regelmäßiges Kastenpotential aus ?

Es ergeben sich Bänder mit erlaubten und unerlaubten Zonen

211. Wie sind die Energieniveaus besetzt ?

Nach dem Pauliprinzip, bis zur Fermi-Energie

212. Was hat die Fermi Energie für eine Bedeutung ?

Sie bestimmt die Energie bis zu der alle Energieniveaus mit Elektronen besetzt sind.

Liegt diese zwischen Energiebändern handelt es sich um einen Nichtleiter, ist der Abstand sehr gering (bis zu 3-5eV) dann ist es ein Halbleiter und liegt sie in einem Band dann ist der Festkörper ein Metall.

213. Wie sehen die Energiebänder für unterschiedliche Materialien aus ?

Es gibt verschiedene Materialien die durch ihre Energiebänder ausgezeichnet sind: Isolator, Halbleiter, Metall.

214. Wenn das Material aufgrund von Störstellen nicht ganz periodisch ist, was ist dann ?

Man erhält zusätzliche Energieniveaus, wie bei dotierten Halbleitern.

215. Woran sehe ich bei einem Metall welche Energiebänder welche Eigenschaften haben ?

An der Leitfähigkeit. Nur in Bändern mit freien Elektronen ist Leitfähigkeit vorhanden.

216. Was passiert, wenn man das erste Band bis zur Hälfte auffüllt und dann die Elektronen anregt, so dass auch die Niveaus knapp über der Fermikante besetzt sind?

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit hängt nicht mehr vom Impuls ab (durch die Dispersionsrelation). Die Energie hängt also nicht mehr vom Impuls ab.

217. Sind k und E unabhängig ?

Nein, k ist eine monotone Funktion von E . Es gilt die Dispersionsrelation $E = \frac{\hbar k}{2m}$

218. Wo liegt die Fermi Energie ?

Je nach Festkörper in der Mitte oder zwischen den Energiebändern.

219. Kann man dem Festkörper ansehen, wo seine Fermi-Energie liegt ?

Ein Metall hat durch seine freien Ladungsträger eine hohe Reflexion. Die einfachste Erklärung liefert das Drude Modell (Oszillationen freier Elektronen). Bis zu einer Plasma Frequenz (im UV) ist die Reflektivität nahezu 100%, danach fällt sie ab.

Wenn der Festkörper also eine hohe Reflektivität im sichtbaren Bereich hat, so gibt es freie Elektronen und die Fermi Energie liegt in einem Band.

220. Warum ist Glas durchsichtig ?

Es existieren keine Energieübergänge für diesen Spektralbereich.