

E Integrale der Bewegung

$$\frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

$$[A, H] = 0$$

Beispiele:

a Homogenität des Raumes

Eigenschaften eines Systems sei bei Parallelverschiebung
ungeändert

\Leftrightarrow H bei Verschiebung ⁴ungeändert,

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = \vec{x} + \delta \vec{a} \quad (\text{z.B. } H = \frac{p^2}{2m})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{R}_{\text{verschieb}}: \Psi(\vec{x}) &= \Psi(\vec{x} - \delta \vec{a}) = 1 - \delta \vec{a} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}) \\ &= \left(1 - \left(\frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \right) \cdot \vec{p} \right) \Psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Invarianz von H bedeutet:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \underbrace{\Psi | R_S^\dagger}_{\text{Transform. Zustand}} H \underbrace{R_S | \Psi \rangle}_{\text{Transf. Zust.}} \rangle \quad \text{gilt für alle } \Psi$$

Transform. Zustand Transf. Zust.

Inf. Transformant.

$$R_{\delta \vec{a}} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \cdot \vec{p} \right)$$

$$[H, -\frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \cdot \vec{p}] = 0 \quad \forall \delta \vec{a}$$

$$\Rightarrow [H, \vec{p}] = 0$$

Bleibt der Erwartungswert bei
Transformation ⁴ungeändert,
kommutiert H mit dem Generator
der Transformation.

b Isotropie des Raumes (Drehung)

$$\text{Falls } \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | R^\dagger H R | \psi \rangle \quad (\forall \psi)$$

$$\text{und infinit. } R_{D\vec{r}} = 1 - \frac{\vec{r}}{r} \delta \vec{\varphi} \cdot \vec{L}$$

$$\Rightarrow [H, \vec{L}] = 0$$

c Homogenität der Zeit falls $\frac{dH}{dt} = 0$

$$\frac{d}{dt} H = \frac{1}{i\hbar} [H, H] + \frac{\partial}{\partial t} H = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \psi | H | \psi \rangle = 0 \quad \text{Energieerhaltung}$$

d Allg. Unitärer Operator $U_\alpha = e^{-i \frac{\alpha}{\hbar} A}$

Wenn für alle $|\psi\rangle$ gilt:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger H U | \psi \rangle$$

$$\text{also } H = U^\dagger H U \Rightarrow [H, A] = 0$$

$$\text{und ferner } \frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

$\Rightarrow U$ bewirkt symmetrietransformation,

A wird Generator der Symmetrietransfo.

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = 0$$

G Geladene Teilchen im konstanten Magnetfeld


Landau-Niveaus ausgelassen

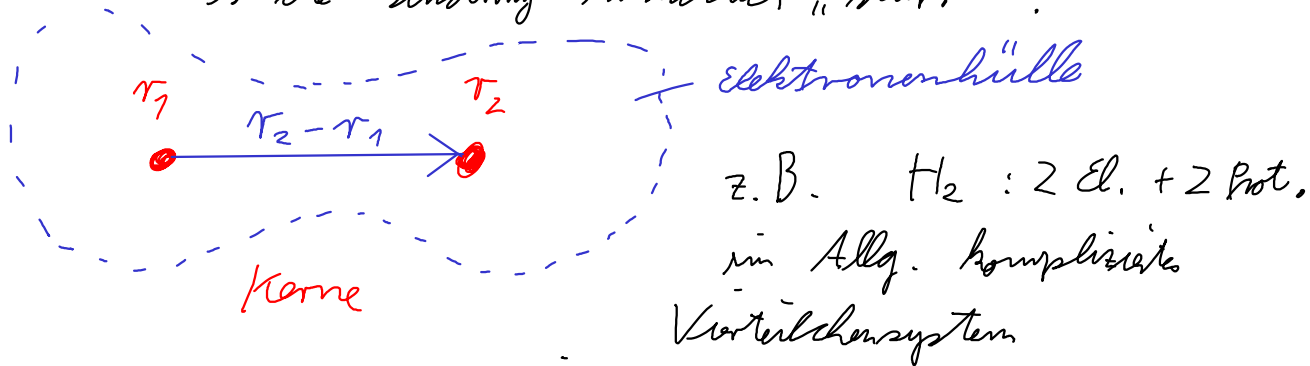
Klass.: da Teilchen bewegt sind auf Kreisbahnen
⇒ Drehimpuls

QM: diese Drehimpuls ist quantisiert

⇒ Energiequantisierung
≙ Landau-Niveaus

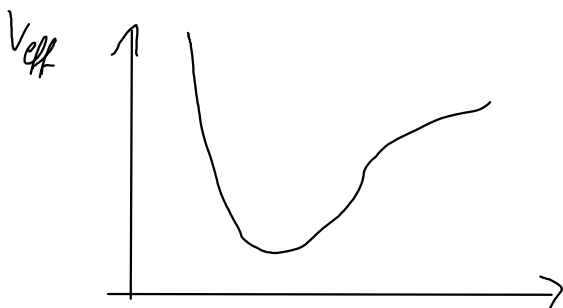
F Rotation eines 2-Atomigen Moleküls

- „Hantelmodell“  ist das sinnvoll?
ist die Bindung tatsächlich „starr“?



die „Rettung“: Adiabatische Näherung
Elektronen bewegen sich sehr schnell im Vergleich zu den Kernen.

Oszillation der Kerne



Potential Kern 1
zu Kern 2

$|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$

Für kleine Änderungen des Kernabstands wird die Auswertung durch ein Potential beschrieben, das durch einen HO gemahert wird.

D.h. Anregungen $E \sim (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$

Drehungen \Rightarrow Rot. Anregungen

Elektronische Anregungen (reorganisation der Elektronen)

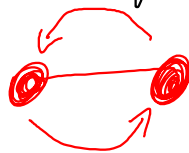
Char. Energien:

	H ₂	N ₂	O ₂	
-U _e	4,7	7,5	5,2	el. Anregungen
k _v	0,54	0,29	0,2	Verschwingungen
k _B	7,6 E ⁻³	0,25 E ⁻³	0,18 E ⁻³	Rotationsanregungen

Das Molekül elektronisch Anzuregen benötigt wesentlich mehr Energie, als ein Rotationsanregung oder Schwingungsanregung.

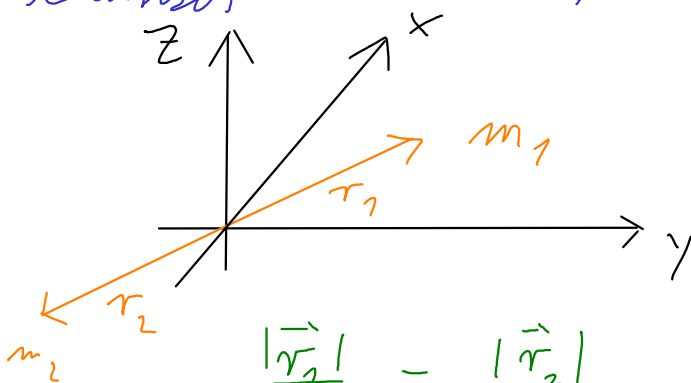
Unter "normalen" Bedingungen ist die Näherung durch eine "starke Hartel" also gerechtfertigt.

2 Der starke Rotator



klassisch

im Schwerpunktsystem



$$\frac{|\vec{r}_1|}{m_1} = \frac{|\vec{r}_2|}{m_2} = \frac{r_1 + r_2}{m_1 + m_2}$$

Reduz. Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Abstand $r = r_1 + r_2$

Trägheitsmoment: $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r^2$

Drehung um feste Achse \vec{L} mit Winkelgeschwindigkeit ω_{rot}

$$|\vec{L}| = I \omega_{\text{rot}}, \text{ Energie } H = \frac{1}{2} I \omega_{\text{rot}}^2 = \frac{L^2}{2I}$$

QM Quantisierung

Variallg. Koordinaten $\theta, \varphi \hat{=} \text{Richtung von } \vec{r}$
Wellenfkt. $\Psi(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \Psi \rangle$

$$\int |\Psi|^2 d\Omega = 1$$

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I} \text{ in Ortsdarst.}$$

$$\langle \theta, \varphi | H | \Psi \rangle =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi(\theta, \varphi)$$

Eigenfkt

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle$$

$$H | \ell, m \rangle = \frac{\ell(\ell+1)}{2I} \hbar^2 | \ell, m \rangle$$

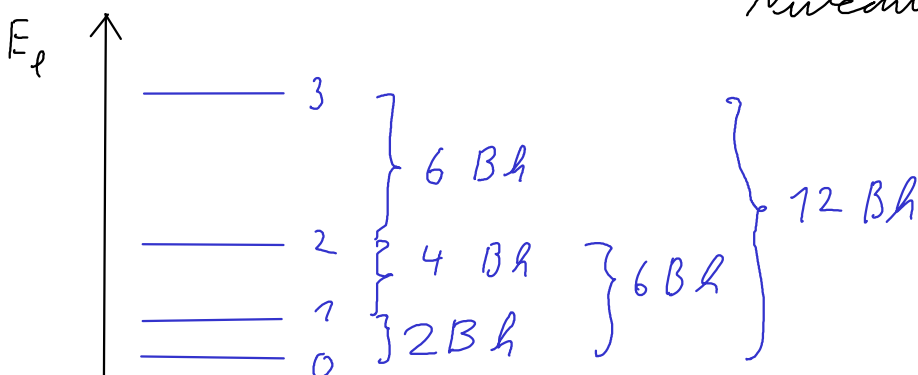
Konvention

$$B = \frac{\hbar^2}{4\pi I} \left(= \frac{\hbar^2}{4\pi \mu r^2} \right) \text{ Rotationskonst. Einheit } \left[\frac{1}{s} \right]$$

$$E_{\ell} = B \hbar \ell(\ell+1) \quad (2\ell+1) \text{ fach entartet}$$

$$E_{\ell} - E_{\ell-1} = B \hbar 2\ell$$

Abstand zw benachbarten Nucleus wächst linear



3) Auswirkungen

Kugel asymmetrisch \Rightarrow Dipol \Rightarrow Strahlung

für el mag. Übergänge:

Übergangsamplitude = Dipolmatrixelement

$$\langle l' m' | Z | l m \rangle = \dots$$

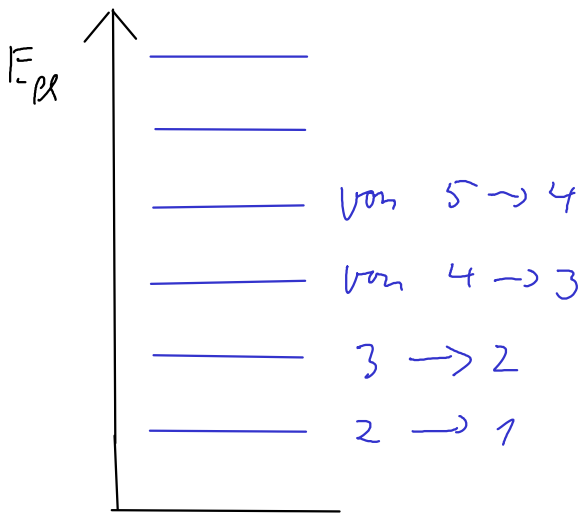
$$Z = r_e \cos \theta$$

$$= r_e \delta_{m m'} \left[\delta_{l', l-1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l', l+1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - m^2}} \right]$$

α) Übergänge nur zw. benachbarten Niveaus. \uparrow ? (1)

β) Photonen - Energie $E_l - E_{l-1} = B h 2l$

man beobachtet: (Photonenergie)



im Gegensatz zum H0:
dort nur Photonen
mit $h \omega$
da Energieniveaus äquidistant.
und Übergänge nur bei
benachbarten Niveaus

Anwendungen:

(i) $2 B h$ wird gemessen $\Rightarrow I$
 $\Rightarrow \tau$ (falls m_1, m_2 bekannt)

(ii) Isotope r_e sind gleich, aber
 μ verschieden.
(Isotopentrennung)

$$(iii) \quad E_{\mu} (\Leftrightarrow) \ell \Rightarrow E_e$$

Linienintensität im Medium \Rightarrow Besetzungszahl-
verteilung

als Fkt der Temperatur

$$P_{\ell} = \frac{1}{Z} (2\ell + 1) e^{-\frac{E_{\ell}}{kT}}$$

$$Z = \sum (2\ell + 1) \exp\left(-\frac{E_{\ell}}{kT}\right)$$

